

**KERNFORSCHUNGSZENTRUM
KARLSRUHE**

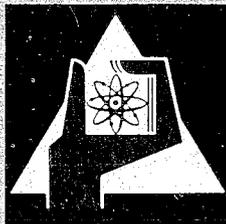
April 1968

KFK 730

Institut für Angewandte Kernphysik

Methoden zur Analyse von Gamma-Spektren

V. Haase



GESELLSCHAFT FÜR KERNFORSCHUNG M. B. H.

KARLSRUHE

Kernforschungszentrum Karlsruhe

April 1968

KFK 730

Institut für Angewandte Kernphysik

Methoden zur Analyse von Gamma-Spektren

von

Volkmar Haase

Gesellschaft für Kernforschung m.b.H., Karlsruhe

Inhalt

1. Problemstellung
2. Einzelwort-Korrekturen
3. Korrekturen am Spektrum (Unscrambling)
 - 3.1. Allgemeines
 - 3.2. Least-Squares-Verfahren
 - 3.3. Anwendung
 - 3.3.1. Vorbereitung und Bestimmung der Ausgangsparameter
 - 3.3.2. Least-Squares-Fit
 - 3.4. Praktische Durchführung
 - 3.4.1. Funktionen
 - 3.4.2. Eingabegrößen
 - 3.4.3. Gewichte der Meßwerte
 - 3.4.4. Teilprozesse der Anpassung
 - 3.5. NaJ(Tl)-Detektoren
 - 3.6. Li-gedriftete Ge-Detektoren
4. Korrekturen nach der Intensitätsberechnung
5. Schlußfolgerungen

Anhang: Beschreibung des Fortran-Programmes GSFIT

1. Problemstellung

Die folgende Arbeit beschreibt numerische Methoden, komplexe Gamma-Spektren, wie sie mit Vielkanalanalysatoren oder meßwert-erfassenden Computern aufgenommen werden, zu analysieren. Das Hauptgewicht der Analyse soll auf der Korrektur der Spektren auf Einflüsse der Meßapparatur liegen.

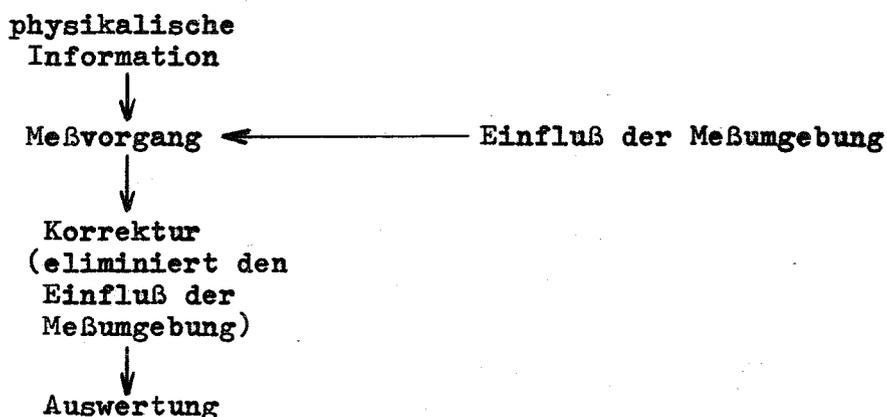


Fig. 1 : Ablauf von Messung, Korrektur und Auswertung

Bei den gemessenen Werten handelt es sich um vom Detektor angezeigte und vom Analog-Digital-Umsetzer (ADC) digitalisierte Impulshöhen. Daraus wird nach der Akkumulierung im Rechner ein Spektrum: Häufigkeit der Ereignisse je Impulshöhenkanal.

Die Korrektur hat in erster Linie folgende Aufgaben:

Umrechnen der Impulshöhen in eine Energieskala, Berücksichtigung der statistischen Schwankungen der Kanalinhalte in geeigneter Weise und Bestimmung der Intensität der Linien (Peaks), deren analytische Gestalt infolge verschiedener Wechselwirkungen in der Meßapparatur sehr unterschiedlich sein kann. Bei Mehrparametermessungen kommen Verknüpfungen zwischen den einzelnen Meßwerten in Frage.

Bei Messungen, die mit Li-gedrifteten Ge-Detektoren durchgeführt werden, können Linienbreiten in der Größenordnung von 1 keV (ohne Berücksichtigung des Rauschens im Verstärker) erreicht werden. Die gegenüber NaJ(Tl)-Szin- tillationszählern stark verbesserte Genauigkeit verlangt eine genaue Korrektur von Nichtlinearitäten und macht weiter die Analyse schwacher oder überlappter Peaks aus- sichtsreicher.

Wir sehen von Korrekturmöglichkeiten, die durch Hardware durchgeführt werden können, ab und ziehen auch die Möglichkeit einer Rückkopplung von der Auswertung in den Meßvorgang nicht in Betracht. Dann werden Korrekturen an drei Stellen durchgeführt: am einzelnen, vom ADC gelieferten Meßwert, am akkumulierten Spektrum und nach der Reduktion auf physikalisch interessante Größen (z.B. Linienintensitäten).

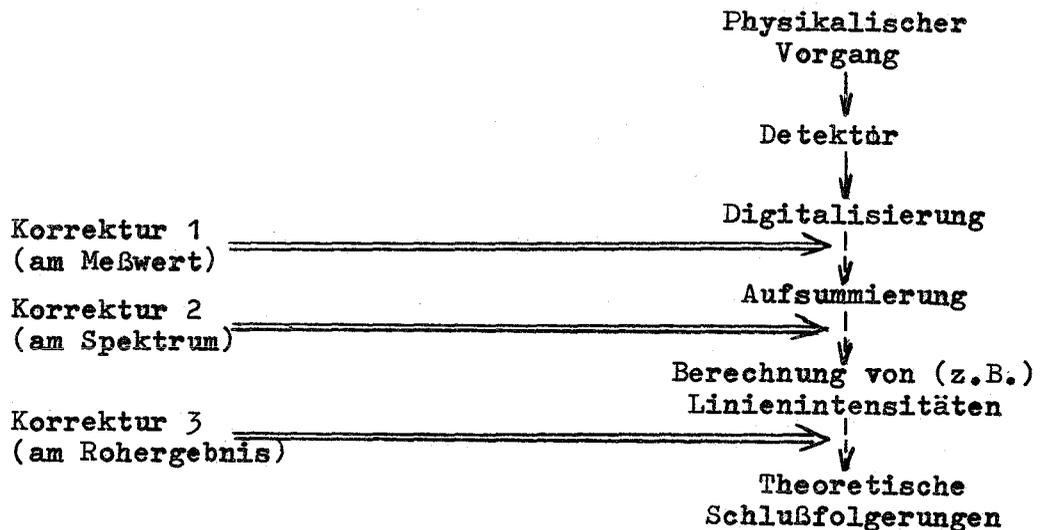


Fig. 2 : Die drei Phasen der Korrektur von Meßdaten

Die 1. Korrektur ist dann möglich und sinnvoll, wenn die Ursachen der Modifikation des Meßwertes analytisch angegeben werden können (z.B. Impulshöhe - Energie - Beziehung).

Auf Korrektur 2, die statistisch beschreibbare Prozesse erfaßt, soll hier in erster Linie eingegangen werden, da hier im allgemeinen das Verhältnis des Erfolges zum Aufwand der Rechnung am günstigsten ist. Sie umfaßt Skalentransformationen und Analysen der Spektren nach Methoden, die die Fehlerquadratsumme minimieren (Least Squares Verfahren). Wichtig ist die Wahl der Anpassungsfunktionen; diese werden näher untersucht werden [5, 11, 13, 16].

Die 3. Korrektur wird für Verfälschungen des Meßergebnisses angewendet, die durch den ganzen Rechenprozeß verfolgbar weitgereicht werden (z.B. Peak/Total-Verhältnis - Korrektur) [15].

2. Einzelwort-Korrekturen

Die vom datensammelnden Gerät aufgenommene Information (z.B. Impulshöhe) hat die Gestalt

$$(1) \quad X_{w_i} = X(\hat{E}_1, \hat{E}_2, \dots, p_1, p_2, \dots, w_i)$$

Dabei sind: \hat{E}_k die mit statistischen Fehlern behafteten Energie-
werte (aus verschiedenen Detektoren)

p_k Detektorparameter, die zu nicht statistischen Fehlern von E bzw. X führen, und

w_i detektorunabhängige Parameter (z.B. räumliche Stellung, Zeit).

An dieser Stelle kann der Einfluß der p_k beseitigt und Verknüpfungen der \hat{E}_i berechnet werden (z.B. Summen oder Differenzen).

$$(2) \quad T(p_\ell) X_{w_i}(\hat{E}_k, p_\ell) \rightarrow Y_{w_i}(\hat{E}_k)$$

$1 \leq \ell \leq n$

Die Transformation T ist eindeutig. Sie kann z.B. angewendet werden, wenn die Energie nicht linear von der Impulshöhe abhängt und das über die Energieskala aufgetragene Spektrum während der Messung auf einem Bildschirmgerät beobachtet werden soll.

z.B. :

$$(3) \quad E_i = a + bX_i + cX_i^2$$

Des öfteren treten ähnliche Probleme bei Teilchenspektren auf (die z.B. in Koinzidenz zu Gammaquanten gemessen werden).

Bei der Messung von Gamma-Strahlung bei Kernspaltung müssen z.B. aus den Energien der Spaltbruchstücke die Massen berechnet werden, um das koinzidente Gammaquant richtig zuzuordnen. - Eine andere Anwendung ist die Bestimmung der Teilchenart bei (n,x) Reaktionen auf Grund einer $\Delta E / \Delta x$ Beziehung [6,7].

Vom Standpunkt der automatischen Datenverarbeitung her gesehen sind dies typische On-Line-Rechnungen, die schritthaltend mit der Messung durchgeführt werden. Die für eine Umwandlung zur Verfügung stehende Rechenzeit ist umgekehrt proportional zur Zählrate der Messung. Bei Mehrfachkoinzidenzmessungen sind im allgemeinen die Zählraten so gering, daß diese Rechnungen auch mit kleinen Rechnern on line durchgeführt werden können. Abbildung 1 zeigt den Ablauf der Berechnung der Massenverteilung bei einem Kernspaltungs-experiment als Beispiel.

3. Korrekturen am Spektrum (Unscrambling)

3.1. Allgemeines

Linienpektren werden bei der Messung mit der Auflösungsfunktion des Detektors gefaltet. Die Auflösungsfunktion ist bestimmt durch die Art der Wechselwirkungen, die das gemessenen Quant mitmacht und durch Einflüsse der Elektronik der Meßapparatur.

Näher soll hier auf die Entfaltung von Spektren eingegangen werden, die mit

- a) NaJ(Tl) - Szintillations- und
- b) Li-gedrifteten Ge-Detektoren

gemessen werden.

Mathematisch formuliert lautet das Problem:

$$(4) \quad N(k) = \int_{-\infty}^{+\infty} Y(E) \cdot A(E, [k]) dE$$

wobei $N(k)$ die gemessenen Kanalinhalt,
 $Y(E)$ die zu berechnende "wahre" Linienintensität und
 $A(E, [k])$ die Auflösungsfunktion (response function)

ist. Sie gibt an, wie sich eine Intensität der Größe Eins bei Energie E auf die diskreten Kanäle k verteilt ($[k]$ = größtes Ganzes).

Unterteilt man auch die Energieskala in diskrete Stufen, so kommt man zur Gleichung

$$(5) \quad N_k = \sum_i Y_i \cdot A_{ik}$$

$1 \leq k \leq n$

Zur Lösung dieses Gleichungssystems ist die Kenntnis von A notwendig. Bei den genannten Detektortypen muß A für bestimmte k aus Eichmessungen mit monochromatischen Linien bestimmt werden, die fehlenden Werte sind zu interpolieren.

Die statistischen Schwankungen der Kanalinhalte können analytisch nicht beschrieben werden.

Abb. 2 zeigt eine typische response function eines NaJ(Tl)-Detektors bei 2230 keV. Die Auflösungsfunktion von Halbleiterdetektoren besteht aus schmalen Linien der in Abb. 3 (in vergrößertem Maßstab) gezeigten Form über einem ebenfalls stark strukturierten "Untergrund". Mit einer Anti-Compton-Anordnung kann er jedoch fast ganz unterdrückt werden [12]. Die Linienbreite setzt sich aus einem elektronikabhängigen und aus einem detektorabhängigen Term zusammen, dieser ist etwa der Quadratwurzel aus der Energie proportional [12].

$$(5a) \quad h = (h_{\text{elek}}^2 + c \cdot E)^{\frac{1}{2}}$$

Die Verbreiterung an der niederenergetischen Seite ist unter anderem auf sekundäre Teilchen zurückzuführen, die aus dem Detektor entweichen.

Für den Fall beliebiger Linienspektren sind dem Autor keine Entfaltungsverfahren bekannt, die Gleichung (4) nach Y(E) zu lösen. Dies liegt am unstetigen Kern der Integralgleichung und an den statistischen Schwankungen, die zu Oszillationen der Lösungsfunktion führen.

Algorithmen, die Gleichung (5) lösen, treffen auf die Schwierigkeit, sehr große (Ordnungszahl = Anzahl der Maßkanäle) und schlecht konditionierte Matrizen zu verarbeiten.

3.2. Least-Squares-Verfahren

In der Praxis greift man deshalb auf Approximationsverfahren zurück, die im Prinzip immer auf die Minimierung der Summe der Abweichungsquadrate der angenäherten Werte von den Meßwerten hinauslaufen.

Man geht folgendermaßen vor:

Aufstellen der response function für eine Linie

$$(6) \quad \text{z.B. } Y(E) = A \cdot e^{-\lambda(E-E_0)^2}$$

Probeweiser Ansatz des Spektrums als Summe von Ausdrücken (6)

$$(7) \quad Y_r(E) = \sum_{i=1}^n A_i \cdot e^{-\lambda_i(E-E_{0i})^2}$$

Variation der Parameter A_i, E_{0i}, λ_i , so daß

$$(8) \quad \chi^2 = \sum_{\forall E} g(E) \cdot (Y_{\text{mess}}(E) - Y_r(E))^2 \rightarrow \min$$

$g(E)$ sind Gewichtungsfaktoren, die der Genauigkeit der entsprechenden Meßkanäle proportional sind. Die Minimierung des Ausdrucks (8) muß iterativ erfolgen, wenn wie etwa in (6) und (7) die Funktionswerte nicht linear von den Parametern abhängen.

Der gesamte Least-Squares-Fit kann auch iterativ durchgeführt werden, indem im Spektrum zunächst signifikante Linien gefittet und abgezogen werden und das Restspektrum in ähnlicher Weise weiterbearbeitet wird. Da die Linienform bei $E > E_0$ leicht zu approximieren ist und die Ordinatenwerte zudem stark abnehmen, wird dieses Verfahren meist am hochenergetischen Ende des Spektrums beginnend durchgeführt.

3.3. Anwendung

Alle diese Verfahren, deren Ziel es ist, das Spektrum auf eine Tabelle zu reduzieren, die Energiewerte und Intensitäten der Linien enthält, sind in 2 Phasen zu unterteilen.

3.3.1. Vorbereitung und Bestimmung der Ausgangsparameter

Für das Least-Squares Verfahren werden für alle zu berechnenden Parameter Startgrößen benötigt. Je näher diese am späteren Ergebnis liegen, umso schneller konvergiert die Rechnung. Auch die Größe der Fehler kann von den Ausgangswerten abhängen. Vor allem die nicht linear eingehenden Parameter (besonders E_0 in (6)) sollten gut geschätzt werden. (für das Folgende vergleiche Abb.4 : Flußdiagramm des Karlsruher Spektrenanalyseprogrammes).

Die Bestimmung der Ausgangswerte kann durch Rechnung per Hand oder durch Algorithmen geschehen. Die erste Methode ist mühsamer, liefert aber bei komplizierten Spektren (Abstand der Linien \ll Breite der Linien) und schlechter Statistik (die Peaks vertäuscht) bessere Werte als automatische Verfahren. Gerade dieser Punkt führt logisch oft auf Zeichenerkennungsprobleme, bei denen eine gewisse Fehler-rate nicht vermeidbar ist. Alle praktisch erprobten algorithmischen Verfahren sind Methoden mit 70 bis 90 % Treffsicherheit [17].

3.3.2. Least-Squares-Fit

Sind die Anpassungsfunktion und die Anfangswerte für die Parameter bestimmt, so kann mit dem Verfahren der kleinsten Fehlerquadratsumme ein (lokales) Minimum von (8) und damit ein Satz verbesserter Parameter ausgerechnet werden. Eine Entscheidung, ob das gefundene Minimum das absolute im gesamten Parameterraum ist, ist nicht mit Sicherheit möglich. Ebenso kann man den Fehler der gefitteten Werte nur unter der Voraussetzung angeben, daß die errechneten Werte für die Parameter in der Umgebung des gesuchten Minimums liegen [37].

Das Beispiel in Abb. 5 zeigt, wie ein Spektrum unter verschiedenen Voraussetzungen gefittet werden kann. Es gibt mehrere Lösungen, bei schlechter Statistik ist die "richtige" oft nicht festzustellen. Die berechneten Fehler beziehen sich auf das gefundene lokale Minimum.

3.4. Praktische Durchführung

Die folgenden vier Fragen sind vor Beginn der Rechnung zu klären. Sie betreffen beide Arten von Gamma-Detektoren.

3.4.1. Welche Funktionen werden zur Anpassung verwendet ?

Hier kommen entweder analytische Funktionen oder punktweise (aus Eichmessungen) gegebene Kurven in Frage. Für die numerische Behandlung sind beide Angaben gleichwertig, es ist nur maßgebend, daß die Werte von Parametern abhängen, deren Anzahl insgesamt kleiner ist als die Anzahl der Kanäle im Spektrum. Analytisch gegebene Funktionen gestalten die Programmierung einfacher.

Je kleiner die Anzahl der Parameter ist, desto günstiger sind Rechenzeit, Speicherbedarf und Konvergenzverhalten. Günstig ist es, Parameter wie Untergrund oder Linienbreite, die sich wenig ändern, global (für mehr als nur eine Linie geltend) anzunehmen. (Die Anzahl der Parameter ist gleich der Anzahl der globalen Größen plus Linienanzahl mal Anzahl der Parameter pro Linie.)

3.4.2. Welche Eingabegrößen müssen vorgegeben werden ?

Die Startwerte für die Parameter können entweder vorgegeben, durch besondere Algorithmen aus dem Spektrum bestimmt oder aus anderen Parametern berechnet werden (z.B. Linienbreite als Funktion der Energie).

Für praktisch vorkommende Spektren sind Algorithmen zur Bestimmung von ungefähren Peaklagen (damit auch der Anzahl der Peaks) und Halbwertsbreiten sehr umständlich und nicht sicher bei überlappten Linien oder schlechter Statistik. Ungefähre Peaklagen sollen bei den verfüg-

baren Verfahren vorgegeben werden, Halbwertsbreiten können berechnet, Amplituden per Programm geschätzt werden. Dies ist gleichbedeutend mit einer rein quantitativen Analyse des Spektrums.

3.4.3. Welche Gewichte werden den Meßwerten gegeben ?

Das Gewicht jedes Meßwertes, das angibt, wie gut der Fit an dieser Stelle sein soll, ist nach statistischer Theorie $1 / \sqrt{\text{Kanalinhalt}}$ (Poissonverteilung). Zum statistischen Fehler kommt jedoch einer hinzu, der darauf zurückzuführen ist, daß die zur Anpassung verwendeten Funktionen (vor allem was die Aussage über den Verlauf des Untergrundes betrifft) nicht voll mit den physikalischen Gegebenheiten übereinstimmen. Ein Ansatz mit konstanten Gewichten gibt gute Ergebnisse und ist bei Spektren mit starkem Untergrund vorzuziehen. Markante Peakstrukturen werden auf diese Weise besser angepaßt an Bereiche mit geringen Kanalinhalt.

Der Fehler des Ausdruckes $(Y_{\text{mess}}(E) - Y_r(E))$ aus Gleichung (8) ist

$$(8a) \quad \Delta Y_{\text{mess}} + \Delta Y_r \approx Y_{\text{mess}}^{\frac{1}{2}} + \text{const}$$

wobei über die Größe des zweiten Terms wenig gesagt werden kann, im allgemeinen ist er aber nicht kleiner als der statistische Fehler.

3.4.4. In welche Teilprozesse soll die Anpassung zerlegt werden ?

Da die Energie - Impulshöhe - Beziehung nie ganz linear ist, muß sie für Präzisionsanalysen gesondert berechnet werden. Linien bekannter Energie müssen im Spektrum vorhanden sein oder eingeblendet werden können. Im gleichen Durchlauf ("Eichphase") ist es günstig, auch die Linienbreiten und sonstige, die Linienform bestimmende Größen als Funktionen der Energie zu berechnen.

Bei der eigentlichen Fitphase sollen Möglichkeiten, das Spektrum in voneinander unabhängige Teile (in einem Teil dürfen keine Impulse liegen, die zu einer außerhalb liegenden Linie gehören) zu zerlegen, immer ausgenutzt werden. Die Anzahl der freien Parameter pro Rechengang wird so vermindert, was zu besserer Konvergenz der

Least-Squares-Fit Programme und zu Ersparnis an Rechenzeit und Kernspeicherbedarf führt. Hierzu sind zwei Methoden zu empfehlen:

- a) Abschälen des Spektrums vom Ende hoher Energie her und
- b) Zerlegen in Gruppen, die eine beschränkte Anzahl Peaks enthalten.

Das erste Verfahren ist nur für Spektren mit sehr guter Statistik geeignet, da sich der Fit immer nur über wenige Kanäle (= eine Peakflanke) erstreckt. In diesem Bereich dürfen auch keine schwachen, überlappten Linien liegen. Vor allem für Halbleiterspektren, die meist gut getrennte Linien bzw. Liniengruppen haben, ist die Zerteilung in mehrere Teilspektren günstiger (siehe Abb. 7).

3.5. NaJ(Tl)-Detektoren

Spektren, die mit NaJ(Tl)-Detektoren aufgenommen wurden, bieten infolge der großen Linienbreiten und des starken Untergrundes ein sehr komplexes Bild. Die Analyse des Spektrums als Summe von Gaußkurven ist nicht immer möglich. Genaue Ergebnisse können nur dann erreicht werden, wenn die Linien gut getrennt sind und einzeln unter Annahme eines exponentiell abfallenden Untergrundes gefittet werden können. Unter diesen Voraussetzungen und bei guter Statistik sind die Fehler in der Peakfläche unter 5 % zu halten, die in der Energieangabe unter 1 % der Linienbreite.

Müssen in einem NaJ(Tl)-Spektrum auch schwache und nahe benachbarte Linien analysiert werden, so kann auch mit gleichzeitiger Analyse mehrerer Peaks gearbeitet werden. Die sekundären Linien (Escape-Peaks etc.) werden ohne Zusammenhang mit dem Photopeak analysiert. Der Anteil der Comptonstreuung liegt im Untergrund. Im Mittel wurden hier bei einem Peak-Untergrund-Verhältnis von 1 : 1 Genauigkeiten von 5 bis 10 % der Linienbreite für die Energie und von 5 bis 20 % für die Peakfläche erreicht.

Abbildung 8 zeigt ein mit einem NaJ(Tl)-Detektor aufgenommenes Spektrum der Reaktion $\text{Fe}^{57}(\text{n}, \gamma)\text{Fe}^{58}$ und die Ergebnisse der Intensitätsanalyse.

3.6. Li-gedriftete Ge-Detektoren

Die Auflösungsfunktion von Ge(Li)-Detektoren zeigt getrennte Linien (Photopeak, Single-, Double-Escapepeak), der Untergrund läßt sich bei Verwendung einer Anti-Compton-Anordnung über weite Bereiche als Gerade darstellen. Die Linienform ist eine auf der Seite niedriger Energie etwas verbreiterte Gaußkurve (siehe Abb.3) [2,14] .

Für diese Linienform mußte eine Funktion gefunden werden, die gut an alle Linien des Meßbereiches angepaßt werden konnte und nicht zu viele freie Parameter aufweisen durfte. Eine Reihe von Funktionen wurde an monochromatischen Gammalinien im Bereich 100 bis 3000 keV erprobt; unter anderen Gaußkurven, die mit Korrekturtermen multipliziert wurden, sowie solche, die additive Terme (Polynomausdrücke bzw. Ausdrücke der Art $\alpha \cdot (1 + \tanh \beta(E - E_0))$) enthielten. Der niederenergetische Ausläufer ließ sich am besten jedoch mit einem exponentiell abfallenden additiven Term anpassen, dessen Amplitude sich mit zunehmender Energie ändert.

Der Ansatz für die Linienform eines Halbleiterpeaks lautet (siehe Abb. 6) :

$$(9) \quad Y = Y_0 \cdot \exp\left(-\frac{\ln 2}{\left(\frac{h}{2}\right)^2} \cdot (x - x_0)^2\right) + \alpha \cdot Y_0 \cdot x_m \cdot \exp(-x_m)$$

- x_0 Lage des Maximums
- Y_0 Amplitude des Maximums
- h Halbwertsbreite
- $x_m = \frac{(x_0 - h) - x}{h}$
 - > 0 für $x_m < 0$
 - $= 0$ für $x_m \geq 0$

Die Linienverbreiterung hat die Gestalt $z \cdot \exp(-z)$, wobei z in Einheiten der Halbwertsbreite gemessen wird. Alpha liegt im allgemeinen zwischen 0,06 (bei 100 keV) und 0,30 (bei 3 MeV) und ist eine monoton steigende Funktion der Energie. Andere Modifikationen werden nicht vorgenommen. Arbeitet man auf diese

Weise, sind für jede Linie 4 Parameter zu bestimmen: Energie, Amplitude, Linienbreite und "Unsymmetrie" (α).

Erprobt wurde ein Programm für den IBM 7074 Computer (10 k Wörter Kernspeicher). Die Energieskala wird auf Grund von bekannten Eichlinien als Polynom 4. Grades in den Impulshöhen bestimmt. Linienbreiten (nach Gleichung 5a) und Unsymmetriefaktoren (als Polynom 2. Grades in der Energie) werden ebenfalls als Funktionen der Energie berechnet, so daß beim Least-Squares-Fit nur noch Energien und Amplituden der Peakmaxima und die Höhe des Untergrundes an zwei Punkten im Spektrum (zwischen denen linear interpoliert wird) als freie Parameter auftreten.

Der Fit selbst kann in einem Rechengang bis zu 6 Linien anpassen. Eine wesentlich größere Anzahl würde die Rechenzeit stark erhöhen und die Genauigkeit ungünstig beeinflussen. Die Gewichte werden für alle Meßkanäle gleich eins gesetzt. Berechnet werden Energie und Fläche jedes angegebenen Peaks mit ihren mittleren Fehlern. Ist die Ansprechwahrscheinlichkeit des Detektors als Funktion der Energie bekannt, kann sie automatisch berücksichtigt werden.

Der Gesamtfehler der Energieangabe setzt sich aus dem Fehler in der Eichung und dem Fehler des Fits zusammen. Zum Eichfehler tragen bei die Unsicherheit in der Energieangabe der Eichlinien und die Differenz zwischen der angegebenen Energie für die Eichlinien und der aus der Energie-Impulshöhenbeziehung errechneten. Für den Fit muß der angegebene statistische Fehler mit der sogenannten

$$\text{"Güteziffer"} = \frac{\text{Fehlerquadratsumme des Fits}}{\text{Summe der statistischen Schwankungsquadrate}}$$

multipliziert werden, die im großen und ganzen angibt, ob die angepaßten Kanalinhalt innerhalb der statistischen Schwankung der Meßwerte liegen. Güteziffern, die sehr viel größer als 1 sind, deuten auf Fehler in der Annahme über die Anzahl der Linien in diesem Spektrenabschnitt hin.

Erprobt wurde das Verfahren an den Gamma-Spektren von $\text{Yb}^{168}(n, \gamma) \text{Yb}^{169}$, $\text{Er}^{166}(n, \gamma) \text{Er}^{167}$ und $\text{Fe}^{57}(n, \gamma) \text{Fe}^{58}$. Die erreichte Genauigkeit war besser als 100 eV im Energiebereich unter 1 MeV und besser als 1 keV im Bereich bis 10 MeV [4,10] (siehe Abb.7 - Gesamtspektrum, Abb.10 - Ergebnisse der Anpassung von zwei Liniengruppen aus dem Spektrum und Abb.9 - Plot der gefitteten Werte der ersten Gruppe) .

Wichtig für die Bestimmung der Energie-Impulshöhen-Beziehung und die der Linienparameter (Halbwertsbreite, Unsymmetrie) ist es, isolierte Eichlinien zur Verfügung zu haben, da Fehler, die auf falsch geeichte globale Spektrenparameter zurückgehen, später nicht mehr korrigiert werden können.

Bei stark überlappten Linien liefert das Programm Ergebnisse, die von der Wahl der Startwerte abhängen. Zudem ist das Minimum von χ^2 oft nicht mehr dem physikalisch sinnvollen Parametersatz zuzuordnen. In solchen Fällen muß man die Liniengruppe mehrmals mit verschiedenen Anfangswerten rechnen oder von der Möglichkeit Gebrauch machen, die Größe des Spielraumes für die Variation der Parameter einzuschränken.

Insgesamt ist das Verfahren der kleinsten Fehlerquadrate zuverlässig und einfach zu handhaben, wenn es unter genauer Kontrolle der Zwischenergebnisse - dies geschieht hier teilweise algorithmisch, indem die Einhaltung von Plausibilitätsgrenzen überwacht wird, und teilweise durch den Benutzer - durchgeführt wird.

4. Korrekturen nach der Intensitätsberechnung

Wenn interessierende Größen nur aus der Messung mehrerer Spektren unter verschiedenen Bedingungen (räumlich, zeitlich, Probe/Untergrund) errechnet werden können, sind Korrekturen zu diesem Zeitpunkt durchzuführen. Man muß hierzu den Einfluß von Meßparametern (z.B. Detektorgröße, Kollimierung) auf die Intensität der Linien

berechnen können, was vielfach weniger mühsam ist als die Korrektur der Spektren, da die Daten bereits komprimiert sind. Allerdings bereitet die Verfolgung der Fehlereinflüsse durch den gesamten Auswerteprozess oft große Schwierigkeiten.

Beispiel: Winkelkorrelationsanalysen - für jeden untersuchten Übergang liegen Intensitätswerte (die mit Least-Squares Verfahren berechnet wurden) in Abhängigkeit vom Winkel, den die Detektoren einschließen, vor. Diese Werte werden durch Kugelfunktionen angenähert:

$$(10) \quad I_k = I_0 + \alpha_2 \cdot P_2(\cos \vartheta_k) + \alpha_4 \cdot P_4(\cos \vartheta_k)$$

$1 \leq k \leq \text{Anzahl d. Winkel}$

Da Detektoren und Probe räumlich ausgedehnt sind, müssen die mit (10) errechneten α_i korrigiert werden. Hier ist der Einfluß der Probe-Detektor Anordnung analytisch bis zu den α_i verfolgbar. Wichtig ist, daß an dieser Stelle auch alle anderen Beeinflussungen des Ergebnisses, wie Untergrundschwankungen, Zentrierungsfehler (die den Öffnungswinkel des Detektors beeinflussen) und Absorption der Strahlung in Probe und Detektor berücksichtigt werden (siehe Abb.11) [9].

5. Schlußfolgerungen

Zur Korrektur und quantitativen Auswertung von Gamma-Spektren stehen eine Reihe guter numerischer Verfahren zur Verfügung. Die Entscheidung, welche Methoden einzusetzen sind, kann jedoch kaum automatisch getroffen werden. Man muß ein genaues Bild über die einzelnen Störfaktoren haben und die Größe ihres Einflusses abschätzen können (keine Fehler 2. Ordnung wegkorrigieren, wenn größere nicht berücksichtigt sind). In der Praxis bietet ein gutes Least-Squares-Fit Programm zusammen mit Routinen, die die Datenverarbeitung erleichtern (z.B. Plotten), eine in sehr vielen Fällen ausreichende Möglichkeit zur Analyse von Gamma-Spektren. Spezielle Routinen werden es in bestimmten Fällen,

besonders bei Mehrparametermessungen, ergänzen müssen.

Auf dem Gebiet der qualitativen Analyse von Spektren (Erkennen von Peaks) ist darüber hinaus noch viel Arbeit zu leisten. Allerdings erscheint mit der Entwicklung dialogfähiger Datenverarbeitungssysteme der vollautomatische Algorithmus weniger effektiv als Analysen, die unter laufender Wechselwirkung zwischen Mensch und Maschine stattfinden. Hier kann eine wirksame Arbeitsteilung durchgeführt werden, in der der Physiker qualitativ analysierende Funktionen übernimmt. Eine Erweiterung der beschriebenen Programme in dieser Richtung ist geplant.

Literaturangaben

- /1/ O. Abeln:
Vollautomatische Spektrenanalyse, unveröffentlicht.

- /2/ S.O.W. Antman et al.:
Measurements of the Fano Factor, Nuclear Instruments and Methods
40 (1966), 272

- /3/ D. Braess:
Über Dämpfung bei Minimalisierungsverfahren, Computing 1 (1967), 264

- /4/ U. Fanger:
Dissertation, Universität Karlsruhe, 1968

- /5/ R.L. Heath et al.:
The Calculation of Gamma Ray Shapes, IDO-17017 (1965)

- /6/ F. Horsch et al.:
Diskussionstagung über Neutronenphysik an Forschungsreaktoren,
Jülich (1967)

- /7/ D. Jenet:
On-line Betriebssystem für die RA CDC 3100, unveröffentlicht

- /8/ P.A.D. de Maine:
The Self-Judgment Method of Curve Fitting, Comm. ACM 8 (1965), 518

- /9/ W. Michaelis:
Die Bestimmung der wahren Verteilung bei Winkelkorrelationsexperimenten,
KFK 135 (1963)

- /10/ W. Michaelis et al.:
Koinzidenzexperimente bei Neutroneneinfangreaktionen, KFK 562 (1967)

- /11/ R.M. Parr et al.:
A Rigorous Least Squares Analysis of Complex Gamma Ray Spectra,
IEEE Trans. Nuclear Science (1964), 349
- /12/ W. van Rossbroeck:
Theory of the Yield and Fano Factor, Physical Review 139 (1965), A 1702
- /13/ L. Salmon:
Analysis of Gamma Ray Scintillation Spectra, AERE-R3640 (1961)
- /14/ H. Schmidt et al.:
Lithium drifted Germanium Diodes, IAEA-Proc., Wien (1966)
- /15/ C. Weitkamp:
Berechnung des Photobruches zylindrischer NaJ (Tl) Detektoren,
KFK 188 (1963)
- /16/ P. McWilliams:
The Solution of the General Least Squares Problem, LA-2367 (1963)
- /17/ H.Küpf er et al.:
A High Resolution Ge(Li) Anti Compton Spectrometer, Nucl.Instr.&
Meth. 56(1967),181

A n h a n g

Beschreibung des Fortran-Programmes GSFIT

(siehe Abbildung 4 und die Programmliste in Anschluß an die Beschreibung)

1. Allgemeines

GSFIT ist ein Programm, das zur Analyse von Gammaskpektren dient, die mit Natriumjodid- oder Halbleiterdetektoren gemessen wurden. Es kann jedoch auch zur Auswertung beliebiger Spektren verwendet werden, wenn die Peaks durch Gauß'sche Normalverteilungen dargestellt werden können.

2. Arbeitsweise

Das Programm ist in drei Phasen (Eingabe, Bestimmung allgemeiner Größen im Spektrum, Anpassung der Peaks) unterteilt, die beliebig miteinander kombiniert und zyklisch wiederholt werden können. Außerdem sind zwei Modi (Normal- und Spezialmodus) vorhanden, die die Auswahl ermöglichen, entweder mit geringer Eingabe auszukommen oder detailliert in den Programmablauf einzugreifen.

2.1. Steueroutine

Sie verarbeitet den Programmanweisungsindikator (IND), der die auszuführenden Phasen angibt, und steuert den Ablauf des Programms. IND ist eine Ziffernfolge, die sich zusammensetzt aus +1 für Lochkarteneingabe oder -1 für Bandedingabe, aus 2 wenn Eichung verlangt wird, aus 3 für Fit von Halbleiter- bzw. 4 von Natriumjodidspektren und aus 5, wenn eine neue Analyse angeschlossen werden soll. Null am Ende von IND ruft den Spezialmodus auf.

2.2. Phase 1 - Datenaufbereitung

Die Meßdaten (Kanalinhalte) werden von Lochkarten oder Magnetband eingelesen und auf Hintergrundspeicher abgelegt, wo sie für den weiteren Programmablauf zur Verfügung stehen. Ein so gespeichertes Spektrum kann von mehreren Programmdurchläufen verarbeitet werden.

2.3. Phase 2 - Eichung

In dieser Phase werden die Energie-Impulshöhen-Beziehung sowie die Linienform ermittelt. Dies geschieht durch Anpassung von Linien bekannter Energie (von denen Energie und ungefähre Kanallage angegeben werden müssen) oder durch Angabe von zusammengehörenden Werten von Energie, Impulshöhe, Halbwertsbreite und Unsymmetriekorrekturenfaktor. Als Ergebnis stehen Koeffizienten für die Funktionen zur Verfügung, die es gestatten, zu jeder Kanalnummer die Energie, Halbwertsbreite und Unsymmetrie zu berechnen.

2.4. Phase 3 - Fit

Linien des Spektrums, deren ungefähre Kanallage angegeben werden muß, werden angepaßt und die genaue Kanallage, Energie und Peakfläche (mit den Standardfehlern) ermittelt. Ist die Ansprechwahrscheinlichkeit in Abhängigkeit von der Energie bekannt, kann sie als Funktion eingegeben werden; es wird dann auch ein Intensitätswert berechnet. Auf einmal können Spektrenteile mit bis zu 200 Kanälen und 6 Peaks gefittet werden. Der Untergrund wird für NaJ(Tl)-Spektren nach $\exp(-\lambda x)$, für Ge(Li)-Spektren linear interpoliert.

3. Eingabedaten

3.1. Normalmodus (keine 0 in IND)

immer	{	IND
	{	NTEXT KMAX
wenn	{	Spektrum
1 in IND	{	
wenn	{	NBD
-1 in IND	{	NBD mal : K1 K2 K6 KSUCH
wenn	{	NE
2 in IND	{	E1 XK1 E2 XK2 (NE Paare)
wenn	{	A1 A2 A3 A4 A5
3 oder 4 ,	{	B1 B2
aber nicht	{	C1 C2 C3
2 in IND	{	
wenn	{	D1 D2 D3
3 oder 4	{	NSCH
in IND	{	NSCH mal : NANT NEND NPK NK1 NK2 (NPK mal)

wenn 5 in IND { neue Eingabefolge ab IND

Spezial- und Normalmodus können abwechselnd vorkommen. Die Eingabedaten hängen in beiden Fällen in gleicher Weise vom "Programminkater" ab.

3.2. Spezialmodus (0 am Ende von IND)

immer { IND
NTEXT KMAX

wenn 1 in IND { Spektrum

wenn -1 in IND { NBD
NBD mal : K1 K2 K6 KSUCH

wenn 2 in IND { NE
wenn NE > 0 E1 XK1 (NE Paare)
I1 I2 I3 I4 I5
wenn I1 = 1 : NBR1 NBR2 (NE mal)
wenn I1 = -1 : NBR1 NV1 NBR2 NV2 (NE Paare)
wenn I2 = 1 : IBG1₁ IBG2₁ IBG1₂ IBG2₂ .. (NE Paare)
wenn I3 = 1 : GE1 GH1 GU1 GE2 GH2 GU2
(NE Tripel)
wenn I3 = -1 : { NZ
NZ mal : JK E_i XK_i H_i UN_i
GE1 GH1 GU1 (soviele Tripel
als Eichlinien insgesamt)

wenn 3 oder 4 ,
aber nicht 2 in IND { I4 I5
A1 A2 A3 A4 A5
B1 B2
C1 C2 C3

wenn 3 oder 4
in IND { D1 D2 D3
NSCH
NSCH mal : { NANF NEND NPK NK1 NK2 (NPK mal)
wenn I4 = 1 NPX1 NPX2

wenn
5 in IND { neue Eingabefolge ab IND

3.3. Erklärung

- IND Programmanweisung, geschrieben als eine Festkommazahl, die sich aus +1 oder -1, 2, 3 oder 4, 5 und 0 zusammensetzen kann.
- NTEXT 60 Zeichen Text zur Beschriftung
- KMAX Anzahl Meßkanäle (≤ 4096)
- NBD Anzahl der Bandsätze, die auf ein Spektrum entfallen
- K_i die 6 Kennziffern eines Bandsatzes
- KSUCH +1 für Suchrichtung am Band: vorwärts, -1 für rückwärts
- NE Anzahl der Eichlinien (≤ 50)
- E_i Energie }
 XK_i Kanalnummer } der Eichlinien
- A_i 5 Koeffizienten zur Berechnung der Energie aus der Impulshöhe nach
$$E = a_1 + a_2 \cdot XK + a_3 \cdot XK^2 + a_4 \cdot XK^3 + a_5 \cdot XK^4$$
- B_i 2 Koeffizienten zur Berechnung der Halbwertsbreite aus der Impulshöhe nach
$$H = (b_1 + b_2 \cdot XK)^{\frac{1}{2}}$$
- C_i 3 Koeffizienten zur Berechnung der Unsymmetrie der Linie aus der Impulshöhe nach
$$UN = c_1 + c_2 \cdot XK + c_3 \cdot XK^2$$
- D_i 3 Koeffizienten zur Berechnung der "Efficiency" aus der Energie nach
$$EFF = (d_2 \cdot E^{d_1}) / (d_3 + E^6)$$
- NSCH Anzahl der zu fittenden Spektrenabschnitte
- NANF Anfangskanal des Spektrenabschnitts
- NEND Endkanal des Spektrenabschnitts ($NEND - NANF \leq 199$)
- NPK Anzahl der Peaks in diesem Abschnitt (≤ 6)
- NK_i Ungefähre (für $I5 = 1$ genaue) Kanallagen der Peaks
- I1 Indikator: 0, 1 oder -1, steuert Eingabe des Bereiches, über den sich der Fit der Eichlinien erstreckt
- I2 Indikator: 0 oder 1, bei 0 variabler, bei 1 fester Untergrund der Eichlinien
- I3 Indikator: 0, 1 oder -1, steuert Einlesen der Gewichte und zusätzlicher Eichangaben für die Bestimmung der A_i , B_i und C_i .

I4	Indikator: 0 oder 1, bei 0 variabler, bei 1 fester Untergrund in der Fitphase
I5	Indikator: 0 oder 1, bei 0 variable, bei 1 fest vorgegebene Kanallagen in der Fitphase
NBR _i	Anzahl der Kanäle, über die ein Eichpeak gefittet wird (Normal = 30)
NV _i	Verschiebung der Mitte des Eichbereiches zur Peakmitte (+ nach rechts, - nach links, normal = 0)
IBG1 _i	Untergrund links vom Peak
IBG2 _i	Untergrund rechts vom Peak
GE _i	Gewicht der Linie für Energieeichung
GH _i	" für Eichung der Halbwertsbreite
GU _i	" für Eichung der Unsymmetrie
NZ	Anzahl zusätzlicher Eichangaben, die zusammengehörende Werte von Impulshöhe, Energie, Breite und Unsymmetrie enthalten
JK	Nummer der Eichlinie, in aufsteigender Energie gezählt
H _i	Halbwertsbreite in Kanälen
UN _i	Unsymmetrie
NPX1	Untergrund im Kanal NANF (links von der Liniengruppe)
NPX2	Untergrund im Kanal NEND (rechts von der Liniengruppe)

```
C   GSFIT HAUPTPROGRAMM
1  CALL INPUT(I10)
   GO TO 5
2  CALL PROC(I10)
5  GO TO (1,2,2,4),I10
4  CALL EXIT
   END
```

```
C  SUBROUTINE PROC(I10)  
   PRCC CALL EXECUTION ROUTINES , CALIBRATION AND FITTING  
4  GO TO (3,1,2,3),I10  
1  CALL EICHNG(I10)  
   GO TO 4  
2  CALL FIT(I10)  
   GO TO 4  
3  RETURN  
   END
```

```

SUBROUTINE INPUT(I10)
C INPUT ROUTINE FOR GSFIT, ANALYZES PHASECARD, READS SPECTRUM
  DIMENSION NTEXT(12),KFLD(4100),ZFLD(4100)
  COMMON D(1588),IPH,NTEXT,IUG,IWDH,IBAS,IFX,IPB
  EQUIVALENCE(KFLD(1),ZFLD(1))
700 REWIND 1
  READ(8,40) IND
200 READ(8,50) NTEXT,KMAX
  WRITE(9,4)NTEXT,KMAX
  WRITE(9,6) IND
  IEXIT=0
  IPH=0
  IBAS=1
  IWDH=1
  IWK=1
  IF(IND)155,155,156
155 IWK=2
  INC=-IND
156 IF(IND-10*(IND/10))150,151,150
151 IBAS=2
  IND=IND/10
150 IF(IND-10*(IND/10)-5)154,153,154
153 IWCH=2
  IND=IND/10
154 IF(IND-10*(IND/10)-3) 81,83,84
 83 IUG=1
  GO TO 81
 84 IUG=2
  IND=IND-1
 81 IF(IND-2)1,2,91
 91 IF(IND-23)92,23,123
 92 IF(IND-12)3,12,13
  1 IEXIT=1
  GO TO 123
C  IPH=0 EICHG/FIT(RECHNG), IPH=1 NUR EICHUNG, IPH=2 NUR FIT(LESEN)
  2 IPH=1
 23 IIC=2
  RETURN
  3 IPH=2
  IIC=3
  RETURN
 12 IPH=1
  GO TO 123
 13 IEXIT=-1
123 CONTINUE
  GO TO (130,140),IWK
130 WRITE(9,7)
  READ(8,60)(KFLD(I),I=1,KMAX)
  GO TO 145
140 CALL TAPE(KFLD,KMAX,IIC)
```

```
      IF(I10-4) 145,30,145
C      7074 ABFRAGE, OB GLEITKOMMA
145 IF(KFLD(KMAX)-2000000000) 301,302,302
302 DO 303 I=2,KMAX
303 KFLD(I-1)=ZFLD(I-1)*ZFLD(KMAX)
301 DO 10 L=1,17
      LA=256*L-255
      LE=256*L
10  WRITE(1)(KFLD(LL),LL=LA,LE)
32  CONTINUE
      DO 5 L=1,4096
      5  KFLD(L)=0
      IF(IEXIT)3,23,30
30  I10=4
      RETURN
      4  FORMAT(1H1,12A5//1H ,I4,8H KANAELE//)
      6  FORMAT(1H0,11HPHASENFOLGE,I7//)
      7  FORMAT(18HLOCHKARTENEINGABE//)
40  FORMAT(I6)
50  FORMAT(1X,12A5,1X,I5)
60  FORMAT(8I10)
      END
```

C SUBROUTINE TAPE
BANDEINGABEROUTINE IST MASCHINENABHAENGIG
RETURN
END

```
      SUBROUTINE EICHNG(I10)
C     FITS FOR SELECTED CALIBRATION LINES ARE MADE
      DIMENSION NBR(50),IBG1(50),IBG2(50),FLD(200),BM1(50),NV(50)
      COMMON ND,Y(200),P(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15),NB,NBG,NF,Q,PF,FV(15
      $),FFV(5),NT,PAR1(200),ALIST(50,4),ZLIST(5,3),IBF(512),NE,FL(50,4)
      COMMON IEX,NTEXT(12),IUG,IWDH,IBAS,IFX,IPB
      EQUIVALENCE(FLD(1),FL(1,1))
      EXTERNAL SUPER1
      CALL OVERFL(J)
      IF(J-1) 700,701,700
701  WRITE(9,702)
702  FORMAT(20H ACHTUNG UEBERLAUF /)
700  CONTINUE
      REWIND 1
      READ(8,1)NE
      IF(NE) 73,73,74
74  READ(8,6)(ALIST(I,1),ALIST(I,2),I=1,NE)
      DO 40 I=1,NE
      NV(I)=0
40  NBR(I)=30
73  I1=0
      I2=0
      I3=0
      I4=0
      I5=0
      GO TO (30,20),IBAS
20  IF(IEX)120,120,130
120  READ(8,1)I1,I2,I3,IFX,IPB
      WRITE(9,44)I1,I2,I3,IFX,IPB
      GO TO 140
130  READ(8,1)I1,I2,I3
      WRITE(9,45)I1,I2,I3
140  IF(I1)22,21,2100
2100  READ(8,1)(NBR(I),I=1,NE)
      GO TO 21
22  READ(8,1)(NBR(I),NV(I),I=1,NE)
21  IF(I2)23,23,24
24  READ(8,1)(IBG1(I),IBG2(I),I=1,NE)
30  CONTINUE
23  IF(NE)70,70,71
70  IF(I3)72,99,99
71  WRITE(9,4)NE
      DO 10 J=1,NE
      JJ=J
      REWIND 1
      NVI=NV(I)
      ND=NBR(J)
      NSF=(ALIST(J,2)-FLOAT(ND/2-NVI))/256.
      IF(NSP)99,11,12
12  DO 13 K=1,NSP
```



```
302 CONTINUE
    ALIST(J,2)=X(3)
    ALIST(J,3)=X(2)
10  ALIST(J,4)=X(4)
72  IF(I3)27,25,26
C   ZUSAETZLICHE FIXE EICHLINIEN
27  READ(8,1)NZ
    DO 28 J=1,NZ
      READ(8,5)JK,(ALIST(JK,JL)),JL=1,4)
      IF(JK-NE)28,28,29
29  NE=NE+1
28  CONTINUE
C   GEWICHTE WERDEN EINGELESEN
26  READ(8,6)(FL(J,2),FL(J,3),FL(J,4),J=1,NE)
    DO115 K=1,200
      IF(FLD(K))115,115,112
112  FLC(K)=1./FLD(K)
115  CONTINUE
C
25  IF(NE-3) 250,251,251
250  WRITE(9,252)
252  FORMAT(15H KEINE EICHUNG /)
403  I10=1
    RETURN
251  CALL EICHG2
    IF(IEX)400,400,401
400  I10=3
    RETURN
401  GO TO (99,403),IWDH
99  I10=4
    RETURN
1  FORMAT(5I8)
2  FORMAT(4HOX= ,6G15.6,10H GUETEZ.= ,G15.6)
3  FORMAT(4H F= ,6G15.6/)
4  FORMAT(1H0,I4,11H EICHLINIEN,18H AMPLITUDE HWBRTE,60H KANALNUMM
   $MER UNSYMMETRIE UNTERGRUND(L) UNTERGRUND(R))
5  FORMAT(I8,(5G12.8))
6  FORMAT(8G13.8)
44  FORMAT(15HOEICHBEREICHE =,I2,20H (0=AUTOM,1=MANUELL)/15H EICHUNTRG
   $RD. =,I2/15H GEWICHTE =,I2/15H FITUNTERGRD. =,I2/15H PEAKLAGEN
   $ =,I2/)
45  FORMAT(15HOEICHBEREICHE =,I2,20H (0=AUTOM,1=MANUELL)/15H EICHUNTRG
   $RD. =,I2/15H GEWICHTE =,I2/)
    END
```

```
SUBROUTINE SUPER1(I)
COMMON ND,Y(200),P(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15)
XI=I
A(5)=FLOAT(ND-1)/FLOAT(ND-1)
A(6)=1.-A(5)
X(2)=AMAX1(X(2),.0005)
CALL EICH(XI,F,X,A)
FF=F+X(5)*A(5)+X(6)*A(6)
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE EICH(X,Y,P,A)
DIMENSION P(15),A(15)
XPP=(X-P(3))*(X-P(3))
XK=EXP(-P(2)*XPP)
XB=SQRT(.693/P(2))
XM=(X-P(3)+XB)/XB
XN=(-X+P(3)+XB)/XB
IF(XM)2,2,3
2 IF(P(4))20,20,10
3 IF(XN)4,4,20
4 IF(P(4))30,20,20
20 A(1)=XK
Y=A(1)*P(1)
A(2)=-Y*XPP
A(3)=Y*2.*P(2)*(X-P(3))
A(4)=0
RETURN
10 EXPIXM=EXP(XM)
A(1)=XK-P(4)*XM*EXPIXM
A(4)=-P(1)*XM*EXPIXM
Y=P(1)*XK+P(4)*A(4)
A(2)=-XK*P(1)*XPP -P(4)*EXPIXM *(1.+XM)*XB*(X-P(3))/1.386*
$P(1)
A(3)=XK*P(1)*2.*P(2)*(X-P(3))+P(4)*EXPIXM *(1.+XM)/XB*P(1)
RETURN
30 EXPIXN=EXP(XN)
A(1)=XK+P(4)*XN*EXPIXN
A(4)=P(1)*XN*EXPIXN
Y=P(1)*XN+P(4)*A(4)
A(2)=-XK*P(1)*XPP-P(4)*EXPIXN*(1.+XN)*(X-P(3))*XB*P(1)/1.386
A(3)=XK*P(1)*2.*P(2)*(X-P(3))+P(4)*EXPIXN*(1.+XN)/XB*P(1)
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE SQUFT4(NTEST,NREG,LIN,ANGFKT,BEDFKT,FEHFKT)
DIMENSION Y(200),P(200),X(15),A(15),FV(15),FFV(5),SN(15,15),SN1(15
1,15),VN(15),VN1(15),VN2(15),X1(15)
COMMON IMAX,Y,P,NX,NXG,X,FF,A,NB,NBG,NF,Q,PF,FV,FFV,NAUS
LEAST-SQUARES-FIT (MIT NEBENBEDINGUNGEN)
```

C
C
C

```
DO 127 K=1,NX
127 X1(K)=0
VERB=0
NX1=NX+1
NDIM=NX+NB
RUND=2.E-7*SQRT (FLOAT (NX*NDIM*IMAX))
ETA=.5
DIAG=1.000001
NUM=0
NAUS=1
NSTEU=1
Q1=1.E38
IF(LIN)68,1,68
68 DO 69 K=1,NX
69 X(K)=0.
```

C
C

```
NEUER SCHRITT
1 NUM=NUM+1
IDAMAX=20
IDA=0
```

C
C

```
NEUE PARAMETER
2 Q=0.
QOB=Q1*(1.+RUND)-VERB
QUN=Q1*(1.-RUND)-VERB
DO 3 K=1,NDIM
VN(K)=0.
DO 3 J=1,NDIM
3 SN(J,K)=0.
```

C
C

```
NEBENBEDINGUNGEN
IF(NB)10,10,6
6 DO 9 J=NX1,NDIM
CALL BEDFKT(J-NX)
IF(Q)14,7,14
7 VN(J)=FF
DO 9 K=1,NX
SN(J,K)=-A(K)
9 SN(K,J)=-A(K)
```

C
C

```
AUFRUF DER ANGLEISFUNKTIONEN
10 DO 12 I=1,IMAX
CALL ANGFKT(I,1)
```

```
FF=Y(I)-FF
Q=C+P(I)*FF**2
IF(Q-QOB)11,14,14
11 DO 76 K=1,NX
76 VN(K)=VN(K)+FF*P(I)*A(K)
78 DO 12 K=1,NX
   AP=P(I)*A(K)
   DO 12 J=1,NX
12 SN(J,K)=SN(J,K)+AP*A(J)
   IF(Q-QUN)17,13,13
```

C

C VERKLEINERUNG DER AENDERUNG

```
13 IDAMAX = MIN0 (IDAMAX,IDA+2)
14 IF (IDA-IDAMAX)15,40,40
15 IDA=IDA+1
   DO 16 K=1,NX
16 X(K)=(X(K)+1.5*X1(K))/2.5
   VERB=VERB/2.5
   GO TO 2
```

C

```
17 Q1=Q
   IF(NSTEU-5)20,18,20
18 WRITE(9,19)
19 FORMAT(68H TEST DEUTET AUF PATHOLOGISCHEN FALL ODER FEHLER IN DEN
   1 ABLEITUNGEN)
   NAUS=6
   NSTEU=1
20 IF(NAUS-2)21,71,21
21 IF(NUM-LIN)28,43,28
28 IF(NUM-20)22,29,29
29 NALS=4
   NSTEU=3
   GO TO 45
```

C

C BERECHNUNG NEUER PARAMETER

```
22 DO 23 K=1,NDIM
   VN1(K)=-X(K)
   VN2(K)=VN(K)
   DO 23 J=1,NDIM
23 SN1(J,K)=(SN(J,K)+SN(K,J))/2.
   DO 24 K=1,NX
   IF(SN(K,K))24,30,24
24 SN1(K,K)=DIAG*SN(K,K)
   IF(NTEST-2)25,25,45
25 CALL BIPLX4 (SN1,VN,VN1,NTEST)
   IF(NAUS-3)26,30,26
26 VERB=0.
   DO 27 K=1,NX
   VERB=VERB+VN1(K)*VN2(K)
   X1(K)=X(K)
27 X(K)=X(K)+VN1(K)
   VERB=AMAX1(ETA*VERB,0.)
   GO TO 1
```

C

C SONDERAUSGAENGE

```
30 WRITE(9,31)
31 FORMAT(26H NORMALMATRIX (SINGULAER) /1X)
32 DO 33 K=1,NDIM
33 WRITE(9,34)(SN(J,K),J=1,NDIM)
34 FORMAT(1H , 10E13.5)
   NAUS=3
74 NSTEU=6
   GO TO 45
38 IF(NB+NXG)83,83,51
83 NSTEU=5
   DO 39 K=1,NX
39 X(K)=X1(K)-VN1(K)
   GO TO 1
```

```
C
C   NORMALER AUSGANG
40 DO 42 K=1,NX
42 X(K)=X1(K)
43 NSTEU= MAX0 (NTEST,NSTEU)
   GO TO (51,45,45,45,51),NSTEU
```

```
C
45 WRITE(9,85)NUM,IDA,Q1
   WRITE(9,84)(X(K),K=1,NX)
   IF(NB)47,47,46
46 WRITE(9,86)(VN2(K),K=NX1,NDIM)
47 IF(NTEST-4)49,48,49
48 WRITE(9,88)(VN2(K),K=1,NX)
49 GO TO(25,51,51,38,51,99),NSTEU
85 FORMAT (1H  I6, 10H. SCHRITT I4,19H * GEDAEMPFT      Q = E14.7)
84 FORMAT(6H  X = 8E15.7/(6X,8E15.7))
86 FORMAT(6H  BED 8E15.7)
88 FORMAT(6H  ABL 8E15.7/(6X,8E15.7))
```

```
C
C   FEHLERRECHNUNG
51 Q=G1
   PF=SQRT (Q/FLOAT (IMAX+NB-NX))
   DO 52 K=1,NX
   IF(SN1(K,K))56,52,52
52 FV(K)=PF*SQRT (SN1(K,K))
   IF(NF)61,61,53
53 DO 55 I=1,NF
   CALL FEHFKT(I)
   AP=0.
   DO 54 K=1,NX
   DO 54 J=1,NX
54 AP=AP+A(J)*SN1(J,K)*A(K)
   IF(AP)56,55,55
55 FFV(I)=PF*SQRT (AP)
```

```
C
61 IF(NTEST-4)99,62,62
62 WRITE(9,65)
63 DO 64 K=1,NX
64 WRITE(9,34)(SN1(J,K),J=1,NX)
65 FORMAT(27H INVERSE DER NORMALMATRIX /1H )
99 RETURN
```

```
C
```

```
56 WRITE(9,57)
57 FORMAT(41H INVERSE DER NORMALMATRIX IST INDEFINIT /1X)
   NAUS=3
   GO TO 63
```

C

```
71 IF(NTEST-1)99,99,72
72 WRITE(9,73)
73 FORMAT(37H SQFIT WIRD AUF WUNSCH ABGEBROCHEN)
   GO TO 74
   END
```

```
SUBROUTINE BIPLX4(C,RS,X,NTEST)
DIMENSION Y(200),P(200),U(15),A(15),FV(15),FFV(5),C(15,15),RS(15),
1X(15),G(16,32),XUNT(15),XNORM(15),KZU(32),INDI(16),INDK(32)
COMMON IMAX,Y,P,NU,NUG,U,FF,A,NB,NBG,NF,Q,PF,FV,FFV,NAUS
MINIMIERUNG EINER KONVEXEN QUADRATISCHEN FUNKTION
VERFAHREN NACH WOLFE

C
C
C
NUR=NU-NUG
NBR=NB-NBG
NR=NUR+NBR
NG=NUG+NBG
NU1=NU+1
NG1=NG+1
NR1=NR+1
NDIM=NU+NB
MDIM=NDIM+1
KO=NDIM+NG
KOG=NR+NUG
KPCS=2*MDIM
KPOS1=KPOS-1

C
C
C
AUSGANGSTABLEAU

DO 12 K=1,KPOS
INDK(K)=0
KZU(K)=0
DO 12 I=1,MDIM
12 G(I,K)=0.

C
C
NORMIERUNG
DO 14 K=1,NU
I=K
XNORM(K)=SQRT (C(I,K))
IF(XNORM(K))14,114,14
114 XNCRM(K)=1.
14 CONTINUE
DO 16 K=NU1,NDIM
XNCRM(K)=0.
DO 16 I=1,NU
16 XNORM(K)=AMAX1(XNORM(K),ABS (C(I,K))/XNORM(I))

C
C
C
EINBEU DER C(I,K)
* NUR * NBR * NUG * NBG * NUG * NBG * NR * 1 * 1 *
* NR * NU * NU * NR * 2 *
DO 28 I=1,NDIM
G(I+1,KPOS1)=RS(I)/XNORM(I)
IF(NR)122,24,122
122 DO 22 K=1,NR
KC=K
```

```
IF(K-NUR)101,101,102
102 KC=KC+NUG
101 KK=KO+K
   G(KC+1,KK)=-1.
   22 G(I+1,K)=C(I,KC)/(XNORM(I)*XNORM(KC))
   24 IF(NG)128,28,128
128 DO 26 K=1,NG
   KK=NDIM+K
   KG=NR+K
   KC=NUR+K
   IF(K-NUG)103,103,104
104 KC=KC+NBR
103 KZU(KG)=KK
   KZU(KK)=KG
   XUNT(KG)=X(KC)*XNORM(KC)
   G(KC+1,KK)=-1.
   IF(K-NUG)26,26,106
106 G(KC+1,KK)=1.
   26 G(I+1,KG)=C(I,KC)/(XNORM(I)*XNORM(KC))
   28 CONTINUE
```

C
C
C

ELIMINATION DER UNBESCHRAENKTEN VARIABLEN

```
ITRAU=2
ITRAO=MDIM
KU=1
ASSIGN 32 TO KONTRA
NN=MDIM
GMIN=1.E-15
   32 IF(NN-NG1)40,40,132
132 GMAX=GMIN
   DO 36 K=1,NR
   IF(INDK(K))134,134,36
134 DO 34 I=2,NN
   IF(ABS (G(I,K))-GMAX)34,34,136
136 IP=I
   KP=K
   GMAX=ABS (G(I,K))
   34 CONTINUE
   36 CONTINUE
   IF(GMAX-GMIN)93,93,137
137 DO 38 K=1,KPOS1
   ZW=G(IP,K)
   G(IP,K)=G(NN,K)
   38 G(NN,K)=ZW
   IP=NN
   NN=NN-1
   GO TO 70
```

C
C
C

SIMPLEX

```
40 NART=0
   IF(NG)140,64,140
140 ITRAU=1
   ITRAO=NG1
```

KU=NR1
ASSIGN 50 TO KONTRA

C
C

ZIELFUNKTION
DO 44 I=2,NG1
INDI(I)=KPOS
IF (NUG)143,43,143
143 G(I,KPOS)=G(I,KPOS1)
DO 42 K=KU,KOG
42 G(I,KPOS)=G(I,KPOS)-XUNT(K)*G(I,K)
43 DO 44 K=KU,KPOS
IF(G(I,KPOS))144,145,44
145 NART=1
144 G(I,K)=-G(I,K)
44 G(1,K)=G(1,K)+G(I,K)

C
C

NEUE BASISLOESUNG
50 ZV=0.
DO 59 MODSCH=1,2
DO 58 K=KU,KO
IF(G(1,K))58,58,158
158 INDEX=KZU(K)
INDEX=INDK(INDEX)
GO TO(52,53),MODSCH
52 IF(INDEX)58,54,58
53 IF(INDEX)54,58,54
54 XMIN=ZV/G(1,K)
XX=1.E38
II=0
DO 56 I=2,NG1
IF(G(I,K)-GMIN)56,56,156
156 XNEU=G(I,KPOS)/G(I,K)
IF(XNEU-XMIN)58,58,105
105 IF(XNEU-XX)107,56,56
107 XX=XNEU
II=I
56 CONTINUE
IF(II) 170,58,170
170 IF(MODSCH-2)180,171,180
171 IF(II-INDEX)58,180,58
180 IP=II
KP=K
ZV=XX*G(1,K)
58 CONTINUE
IF(ZV)159,59,159
159 INDEX=INDI(IP)
INDK(INDEX)=
INDI(IP)=KP
GO TO 70
59 CONTINUE

C
C
C

ELIMINATION DER POSITIVEN VARIABLEN
60 ITRAU=NG+2
ITRAO=MDIM

```
    ASSIGN 62 TO KONTRA
    IP=ITRAU
    62 IP=IP-1
        IF(IP-1)162,64,162
    162 KP=INDI(IP)
        IF(KP-KPOS)187,90,187
    187 IF(NR)70,62,70
C
C    EINSETZEN DER ERGEBNISSE
C
    64 DO 68 I=1,NU
        DO 66 K=1,NU
    66 C(I,K)=0.
        KG=I
        IF(I-NUR)108,108,109
    109 KG=KG+NBR
    108 INDEX=INDK(KG)
        IF(INDEX)168,68,168
    168 IF(NUG)169,65,169
    169 DO 63 K=KU,KOG
        IF(INDK(K))63,163,63
    163 G(INDEX,KPOS1)=G(INDEX,KPOS1)-G(INDEX,K)*XUNT(K)
    63 CONTINUE
    65 XX=G(INDEX,KPOS1)/XNORM(I)
        IF(I-NUR)110,110,111
    111 XX=AMAX1(XX,X(I))
    110 X(I)=XX
        DO 67 K=1,NU
            KG=KO+K
            IF(K-NUR)112,112,113
    113 KG=K+NDIM-NUR
    112 C(I,K)=-G(INDEX,KG)/(XNORM(I)*XNORM(K))
    67 CONTINUE
    68 CONTINUE
C
C    SYMMETRISIERUNG DER NULLEN (RUNDUNGSFEHLER)
C
    DO 69 I=1,NU
        DO 69 K=1,NU
            IF(C(I,K))69,165,69
    165 C(K,I)=0.
    69 CONTINUE
    RETURN
C
C    TRANSFORMATION
C
    70 INDK(KP)=IP
        ZW=G(IP,KP)
        DO 73 K=KU,KPOS
            IF(K-KP)173,73,173
    173 G(IP,K)=G(IP,K)/ZW
        DO 72 I=ITRAU,ITRAO
            IF(I-IP)172,72,172
    172 G(I,K)=G(I,K)-G(I,KP)*G(IP,K)
    72 CONTINUE
    73 CONTINUE
```

```
DO 74 I=ITRAU,ITRAD
74 G(I,KP)=0.
   G(IP,KP)=1.
   GO TO KONTRA,(32,50,62)
```

C
C
C

FEHLERAUSGAENGE

```
90 IF(NART)91,92,91
91 WRITE(9,81)
92 WRITE(9,82)
93 WRITE(9,83)
   NAUS=3
   IF(NTEST-1)94,99,94
94 WRITE(9,84)(INDK(K),KZU(K),K=1,KO)
   DO 95 I=1,MDIM
95 WRITE(9,85)INDI(I),(G(I,K),K=1,KPOS)
99 RETURN
```

C

```
81 FORMAT(17H   ENTARTUNG ODER)
82 FORMAT(40H   UNVERTRAEGLICHE NEBENBEDINGUNGEN ODER)
83 FORMAT(25H   NORMALMATRIX SINGULAER)
84 FORMAT(1H   11(I8,I3)/1X,11(I8,I3))
85 FORMAT(1H   I2,11E11.3/3X,11E11.3)
   END
```

C SUBROUTINE PLOTA
 PLCTROUTINE IST MASCHINENABHAENGIG
 RETURN
 END

```
      SUBROUTINE EICHG2
C     BERECHNET POLYNOME FUER E(KAN),HWBR(E) UND UNSYMM(E)
      DIMENSION KTEXT(12),YS(50),YT(50)
      COMMON ND,Y(200),P(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15),NB,NBG,NF,Q,PF,FV(15
$),FFV(5),NT,PAR1(200),ALIST(50,4),Z  (5,3),IBF(512),NE,FL(50,4)
      COMMON IEX,NTEXT(12),IUG,IWDH
      EXTERNAL PASS
      EXTERNAL PAST
      CALL OVERFL(J)
      IF(J-1) 700,701,700
701  WRITE(9,702)
702  FORMAT(20H ACHTUNG UEBERLAUF /)
700  CONTINUE
C     7074 PLOT-PROGRAMM BRAUCHT AN DIESER STELLE ZEICHENKETTE KTEXT
      DO 201 I=1,6
201  KTEXT(I)=NTEXT(I)
      KTEXT(7)=5H
      KTEXT(8)=5HEICKH
      KTEXT(9)=5HURVE
      KTEXT(10)=5H ABW
      KTEXT(11)=5HG V G
      KTEXT(12)=5HERADE
      YMAX=-999.
      YMIN=999.
      ND=NE
      DO 40 I=1,NE
      IF(FL(I,2))40,40,41
40  CONTINUE
41  CONTINUE
      DIV=FL (I,2)
      DO 10 I=1,NE
      Y(I)=ALIST(I,1)
      PAR1(I)=ALIST(I,2)
      IF(FL(I,2)) 8,8,9
      8  P(I)=0
      GO TO 10
      9  P(I)=DIV/FL(I,2)
10  CONTINUE
      DO 699 I=1,5
699  X(I)=0
      NX=MIN0(NE-1,5)
      NXG=0
      CALL SQUFT4(1,0,4,PASS)
      DO 12 I=1,5
12  Z(I,1)=X(I)
      WRITE(9,100)(PAR1(I),I=1,NE)
      WRITE(9,101)(Y(I),I=1,NE)
      WRITE(9,110)(P(I),I=1,NE)
      WRITE(9,102)(X(I),I=1,NX)
      PA=PAR1(1)
```

```
IF (FL(I,4))44,44,45
44 CONTINUE
45 CONTINUE
DIV =FL (I,4)
DC 30 I=1,NE
IF (ALIST(I,4))507,508,508
507 Y(I)=0
GO TO 509
508 Y(I)=ALIST(I,4)
509 IF (FL(I,4))28,28,29
28 P(I)=0
GO TO 30
29 P(I)=DIV/FL(I,4)
30 CONTINUE
DO 697 I=1,5
697 X(I)=0
NX=MINO(NE-1,3)
NXG=0
CALL SQUFT4(1,0,2,PASS)
DO 32 I=1,NE
32 Z(I,3)=X(I)
WRITE(9,107)(Y(I),I=1,NE)
WRITE(9,110)(P(I),I=1,NE)
WRITE(9,108)(X(I),I=1,NX)
DC 33I=1,NE
CALL PASS(I)
33 Y(I)=FF
WRITE(9,109)(Y(I),I=1,NE)
RETURN
100 FORMAT(15H KANALNUMMER= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
101 FORMAT(15H ENERGIE= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
102 FORMAT(15H *** A(I)= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
103 FORMAT(15H ENERG.(GEF)= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
104 FORMAT(15H HWBREITE= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
105 FORMAT(15H *** B(I)= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
106 FORMAT(15H HWBRT.(GEF)= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
107 FORMAT(15H UNSYMMETRIE= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
108 FORMAT(15H *** C(I)= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
109 FORMAT(15H UNSYMM.(GEF)= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
110 FORMAT(15H GEWICHTE= ,8G14.6/(15X,8G14.6/))
END
```

```
PE=PAR1(NE)
YA=Y(1)
YE=Y(NE)
DO 13 I=1,NE
YS(I)=Y(I)-YA-(YE-YA)*(PAR1(I)-PAR1(1))/(PAR1(NE)-PAR1(1))
CALL PASS(I)
Y(I)=FF
IF(YS(I)-YMAX)14,14,15
15 YMAX=YS(I)
14 IF(YS(I)-YMIN)16,13,13
16 YMIN=YS(I)
13 CONTINUE
WRITE(9,103)(Y(I),I=1,NE)
YMAX=AIN(4.*AMAX1(2.*YMAX,.5*YMAX,.25)+1.)/4.
YMIN=AIN(4.*AMIN1(2.*YMIN,.5*YMIN,-.25)-1.)/4.
XMAX=AIN(PE/250.)*250.+250.
CALLPLOT(A(PAR1,YS,NE,1,3,1,1,1,2,XMAX,0,0,YMAX,YMIN,0,KTEXT,1,0,0,
$0))
DO 17 I=1,50
PAR1(I)=XMAX/50.*FLOAT(I)
CALL PASS(I)
Y(I)=FF
17 YT(I)=Y(I)-YA-(YE-YA)*(PAR1(I)-PA)/(PE-PA)
CALL PLOT(A(PAR1,YT,50,2,0,1,2,1,0,0,0,0,0,0,0,0,1,0,0,0))
DO 42 I=1,NE
IF(FL(I,3)) 42,42,43
42 CONTINUE
43 CONTINUE
DIV=FL(I,3)
DO 20 I=1,NE
Y(I)=ALIST(I,3)
PAR1(I)=ALIST(I,2)
IF(FL(I,3))18,18,19
18 P(I)=0
GO TO 20
19 P(I)=DIV/FL(I,3)
20 CONTINUE
DO 698 I=1,5
698 X(I)=0
NX=2
NXG=2
X(1)=Y(1)-1.
X(2)=(Y(2)**2-Y(1)**2)/(PAR1(2)-PAR1(1))
X(2)=AMAX1(0.,X(2))
CALL SQUFT4(1,0,0,PAST)
DO 22 I=1,4
22 Z(I,2)=X(I)
WRITE(9,104)(Y(I),I=1,NE)
WRITE(9,110)(P(I),I=1,NE)
WRITE(9,105)(X(I),I=1,NX)
DO 23I=1,NE
CALL PAST(I)
23 Y(I)=FF
WRITE(9,106)(Y(I),I=1,NE)
DO 44 I=1,NE
```

```
SUBROUTINE PASS(I)
COMMON ND, Y(200), P(200), NX, NXG, X(15), FF, A(15), NB, NBG, NF, Q, PF, FV(15
$ ), FFV(5), NT, PAR1(200), ALIST(50,4), Z(5,3), IBF(512), NE, FL(50,4)
A(1)=1.
FF=X(1)
DC 10 L=2, NX
A(L)=A(L-1)*PAR1(I)
10 FF=FF+A(L)*X(L)
RETURN
END
```

```
SUBROUTINE PAST(I)
COMMON ND,Y(200), P(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15),NB,NBG,NF,Q,PF,FV
* (15),FFV(5),NT,PAR1(200)
F1=SQRT(X(1)+X(2)*PAR1(I))
FF=F1
A(1)=.5/F1
A(2)=.5*PAR1(I)/F1
RETURN
END
```

```

SUBROUTINE FIT(I10)
C 1.EINGANG = EINLESEN VON POLYNOMEN Z, 2.EINGANG = FIT
DIMENSION AB(4),AC(4) ,NK(10),FCH(6)
COMMON IMAX,Y(200),Q(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15),NB,NBG,NF,R,PF,FV(
$15),FFV(5),NU,PAR1(200),ALIST(50,4),Z (5,3),IBF(512),NPK,P(6,4)
COMMON PS(6),DMY(170),IEX,NTEXT(12),IUG,IWDH,IBAS,IFX,IPB
EXTERNAL SUPER2
EXTERNAL SUPER3
CALL OVERFL(J)
IF(J-1)70,71,70
71 WRITE(9,702)
70 CONTINUE
IF(IEX)40,40,80
80 IFX=0
IPB=0
GO TO (60,50),IBAS
50 READ(8,1)IFX,IPB
WRITE(9,20)IFX,IPB
60 CONTINUE
READ(8, 6)(Z(I,1),I=1,5),(Z(I,2),I=1,2),(Z(I,3),I=1,3)
WRITE(9,10)(Z(I,1),I=1,5),(Z(I,2),I=1,2),(Z(I,3),I=1,3)
40 REWIND 1
READ(8,6) POT,Z(4,3),Z(5,3)
READ(8,1) NSCH
C SCHLEIFE UEBER DIE GRUPPEN, DIE ANALYSIERT WERDEN
DO 1000 L=1,NSCH
LL=L
READ(8,1) NANF,NEND,NPK,(NK(I),I=1,NPK)
NSP=(NANF-1)/256
IF(NSP) 99,11,12
C EINLESEN VON 512 KANAELN, DIE DIE GRUPPE ENTHALTEN
12 DO 13 K=1,NSP
13 READ(1)(IBF(KK),KK=1,256)
11 READ(1)(IBF(KK),KK=1,256)
READ(1)(IBF(KK),KK=257,512)
15 IMAX=NEND-NANF+1
REWIND 1
C BERECHNUNG VON KANALINHALTEN UND ENERGIESKALA
DO 17 K=1,IMAX
KYN=NANF-256*NSP+K -1
XN=NANF+K-1
YBF=IBF(KYN)
Y(K)=YBF
Q(K)=1.
17 PAR1(K)=NANF+K-1
C PRUEFEN, OB UNTERGRUND FIX
IF(IFX)200,200,201
200 NX=2+2*NPK
X(NX-1)=Y(1)
X(NX)=Y(IMAX)

```

```
GO TO 202
201 NX=2*NPK
    READ(8,1)NPX1,NPX2
    XN=NANF
    X(NX+1)=NPX1
    XN=NEND
    X(NX+2)=NPX2
202 NXG=NX
C   STARTPARAMETER FUER LINIEN
    DO 18 K=1,NPK
    NLG=NK(K)-NANF+1
    X(2*K-1)=PAR1(NLG)
    PS(K)=X(2*K-1)
    18 X(2*K)=Y(NLG)-AMIN1(Y(1),Y(IMAX))
    WRITE(9,5)L
    YSUM=0
    FV(2*NPK+1)=0
    FV(2*NPK+2)=0
C   IUG=1 - LINEARER UG.   IUG=2 - EXPONENTIELLER UG.
    GO TO(600,601),IUG
    600 CALL SQUFT4(1,0,0,SUPER2)
    GO TO 602
    601 CALL SQUFT4(1,0,0,SUPER3)
    602 CONTINUE
C   YKR = GUETZIFFER DES FITS (CHI**2 / STAT.SCHWANKUNG)
    DO 789 I=1,IMAX
    789 YSUM=YSUM+Y(I)
    YKR=SQRT(R/YSUM)
    WRITE(9,790)YKR
    790 FORMAT(11H GUETEZ. =,F10.3/)
    WRITE(9,2)NANF,NEND,X(2*NPK+1),FV(2*NPK+1),X(2*NPK+2),FV(2*NPK+2)
    WRITE(9,3) NPK
    GO 25 K=1,NPK
    FCH(K)=X(2*K)*P(K,2)*(1.06+P(K,4)*.5)
    PD=P(K,2)
    IF(FCH(K))23,23,24
    23 FV(2*K)=0
    GO TO 26
    24 FV(2*K)=FV(2*K)*FCH(K)/X(2*K)
    26 WRITE(9,4)X(2*K-1),FV(2*K-1),FCH(K),FV(2*K),PD,P(K,4)
    P1=X(2*K-1)
    P2=Z(1,1)+Z(2,1)*P1+Z(3,1)*P1*P1+Z(4,1)*P1*P1*P1+Z(5,1)*P1**4
    P1=FV(2*K-1)
    P3=Z(2,1)+2.*Z(3,1)*P1+3.*Z(4,1)*P1*P1+4.*Z(5,1)*P1*P1*P1
    P5=P3*FV(2*K-1)
    P4=P3*PD
    P6=FCH(K)/Z(4,3)/P2** POT*(Z(5,3)+P2**6)
    P7=FV(2*K)*P6/FCH(K)
    WRITE(9,7)P2,P5,P6,P7,P4
    FV(2*K-1)=0
    25 FV(2*K)=0
    YMAX=0
    DO 610 I=1,IMAX
    IF(Y(I)-YMAX)610,610,609
    609 YMAX=Y(I)
```

```
610 CONTINUE
YMAX=AINT(YMAX/225.+1.)*250.
C PLOTEN DER URSPRUENGLICHEN DATEN, DANN FITKURVEN
SCX=AINT(1.+PD/4.)/30.
CALLPLOTA(PAR1,Y,IMAX,1,9,1,1,1, 3,PAR1(IMAX),PAR1(1),SCX,YMAX,0,
$ 0,NTEXT,LL,1,AINT(PAR1(1))+1.,80.*SCX,PAR1(IMAX),4HF9.2 ,1,-1,1,1
$,0,0)
DO 405 M1=1,NPK
DO 404 M2=1,IMAX
GO TO (401,402),IUG
401 Y(M2)=X(2*NPK+1)*(PAR1(IMAX)-PAR1(M2))/(PAR1(IMAX)-PAR1(1))+X(2*NP
$K+2)*(PAR1(M2)-PAR1(1))/(PAR1(IMAX)-PAR1(1))
GO TO 403
402 Y(M2)=X(2*NPK+1)*EXP( (PAR1(M2)-PAR1(1))/(PAR1(IMAX)-PAR1(1))*ALOG
$(X(2*NPK+2)/X(2*NPK+1)) )
403 AB(1)=P(M1,1)
AB(2)=(1.665/P(M1,2))*(1.665/P(M1,2))
AB(3)=P(M1,3)
AB(4)=P(M1,4)
CALL EICH(PAR1(M2),F,AB,AC)
404 Y(M2)=Y(M2)+F
405 CALL PLOTA(PAR1,Y,IMAX,2,9,1,2,2,0,0,0,0,0,0,0,1,LL,0,0,0)
DO 300 I=1,IMAX
GO TO(700,701),IUG
700 CALL SUPER2(I)
GO TO 300
701 CALL SUPER3(I)
300 Y(I)=FF
1000 CAEL PLOTA(PAR1,Y,IMAX,2,9,1,2,2,0,0,0,0,0,0,0,1,LL,0,0,0)
99 GO TO(110,120),IWDH
110 I10=4
RETURN
120 I10=1
RETURN
1 FORMAT(9I8)
2 FORMAT (11HOKANAELE ,I9,11X,3HBIS,I9/11H UNTERGRUND
$,F9.2,1H(,F9.2,1H),3X,F9.2,1H(,F9.2,1H)/)
3 FORMAT(I2,6H PEAKS,13X,7HENERGIE,14X,11HINTENSITAET,9X,6HBREITE,4X
$,11HUNSYMMETRIE/)
4 FORMAT(8X,F9.3,1H(,F9.3,1H),5X,F9.0,1H(,F9.0,1H),6X,F9.5,6X,F9.5)
5 FORMAT(7HGRUPPE,I4//)
6 FORMAT(6G12.8)
7 FORMAT(8X,F9.3,1H(,F9.3,1H),5X,F9.0,1H(,F9.0,1H),6X,F9.5)
10 FORMAT(15H0*** A(I)= ,5G14.6/15H *** B(I)= ,2G14.6/15H ***
$ C(I)= ,3G14.6/)
20 FORMAT(15HOFITUNTERGRD. =I2,20H (0=AUTOM,1=MANUELL)/15H PEAKLAGEN
$ =,I2/)
702 FORMAT(20H ACHTUNG UEBERLAUF /)
END
```

```
SUBROUTINE SUPER2(I)
  DIMENSION B(4)
  DIMENSION AB(4)
  COMMON IMAX,Y(200),Q(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15),NB,NBG,NF,R,PF,FV(
$15),FFV(5),NU,PAR1(200),ALIST(50,4),Z (5,3),IBF(512),NPK,P(6,4)
  COMMON PS(6),DY(187),IPB
  IF(IPB)50,50,51
50 FK=1.
  GO TO 52
51 FK=.6/P(1,2)
52 XI=PAR1(1)
  DELTA=PAR1(IMAX)-PAR1(1)
  NY=NX
  NX=2*NPK+2
  A(NX-1)=(PAR1(IMAX)-XI)/DELTA
  A(NX)=1.-A(NX-1)
  FF=X(NX-1)*A(NX-1)+X(NX)*A(NX)
  NX=NY
  DO 10 L=1,NPK
  IF(I-1) 12,13,12
13 CONTINUE
  IF(X(2*L-1)-PS(L)+P(L,2)*FK)14,15,15
15 IF(X(2*L-1)-PS(L)-P(L,2)*FK)11,11,14
14 X(2*L-1)=(AMAX1(P(L,3),PS(L)-P(L,2)*FK)+AMIN1(P(L,3),PS(L)+P(L,2)*
$ FK))/2.
11 P(L,1)=X(2*L)
  P(L,3)=X(2*L-1)
  XJ=P(L,3)
  P(L,2)=SQRT(Z(1,2)+Z(2,2)*XJ)
  P(L,4)=Z(1,3)+Z(2,3)*XJ +Z(3,3)*XJ **2
12 AB(1)=P(L,1)
  AB(2)=(1.665/P(L,2))*(1.665/P(L,2))
  AB(3)=P(L,3)
  AB(4)=P(L,4)
  CALL EICH(XI,F,AB,B)
  FF=FF+F
  A(2*L)=B(1)
  IF(B(3))100,101,100
100 A(2*L-1)=B(3)
  GO TO 10
101 A(2*L-1)=.1E-5
  10 CONTINUE
  RETURN
  END
```

```
SUBROUTINE SUPER3(I)
DIMENSION B(4)
DIMENSION AB(4)
COMMON IMAX,Y(200),Q(200),NX,NXG,X(15),FF,A(15),NB,NBG,NF,R,PF,FV(
$15),FFV(5),NU,PAR1(200),ALIST(50,4),Z (5,3),IBF(512),NPK,P(6,4)
COMMON PS(6),DY(187),IPB
IF(IPB)50,50,51
50 FK=1.
GO TO 52
51 FK=.6/P(1,2)
52 XI=PAR1(I)
DELTA=PAR1(IMAX)-PAR1(1)
NY=NX
NX=2*NPK+2
X(NX-1)=AMAX1(X(NX-1),.1)
X(NX )=AMAX1(X(NX ),.1)
FF=X(NX-1)* EXP( (XI-PAR1(1))/DELTA*A LOG(X(NX)/X(NX-1)) )
A(NX-1)= FF/X(NX-1)*(PAR1(IMAX)-XI)/DELTA
A(NX) =FF/X(NX)*(XI-PAR1(1))/DELTA
NX=NY
DO 10 L=1,NPK
IF(I-1) 12,13,12
13 IF(X(2*L-1)-PS(L)+P(L,2)*FK)14,15,15
15 IF(X(2*L-1)-PS(L)-P(L,2)*FK)11,11,14
14 X(2*L-1)=(AMAX1(P(L,3),PS(L)-P(L,2)*FK)+AMIN1(P(L,3),PS(L)+P(L,2)*
$ FK))/2.
11 P(L,1)=X(2*L)
P(L,3)=X(2*L-1)
XJ=P(L,3)
P(L,2)=SQRT(Z(1,2)+Z(2,2)*XJ)
P(L,4)=Z(1,3)+Z(2,3)*XJ +Z(3,3)*XJ **2
12 AB(1)=P(L,1)
AB(2)=(1.665/P(L,2))*(1.665/P(L,2))
AB(3)=P(L,3)
AB(4)=P(L,4)
CALL EICH(XI,F,AB,B)
FF=FF+F
A(2*L)=B(1)
IF(B(3))100,101,100
100 A(2*L-1)=B(3)
GO TO 10
101 A(2*L-1)=.1E-5
10 CONTINUE
RETURN
END
```

Berichtigungen

Anhang, S. 12, Zeile 31:

260 PAR1(K)=PAR1(K)+AINT(ALIST(J,2))-FLOAT(ND2-NVI)-1.

Zeile 42:

X(3)=AINT(ALIST(J,2))-FLOAT(ND2-NVI)+X(3)-1.

S. 32, Zeile 47 ff:

P6=FCH(K)/Z(4,3)/P2~~##~~POT~~##~~(Z(5,3)+P2~~##~~6)
IF(FCH(K))210,210,211

210 P7=0

GO TO 212

211 P7=FV(2 K)~~##~~P6/FCH(K)

212 WRITE(9,7)P2,P5,P6,P7,P4

S. 34, ZEILE 10:

51 / FK=.6/SQRT(Z(1,2)+Z(2,2)~~##~~X(1))

S. 35, Zeile 10:

51 FK=.6/SQRT(Z(1,2)+Z(2,2)~~##~~X(1))

MESSUNG

KONTROLLE DER MESSUNG

KORREKTUR DER DATEN

AUSWERTUNG

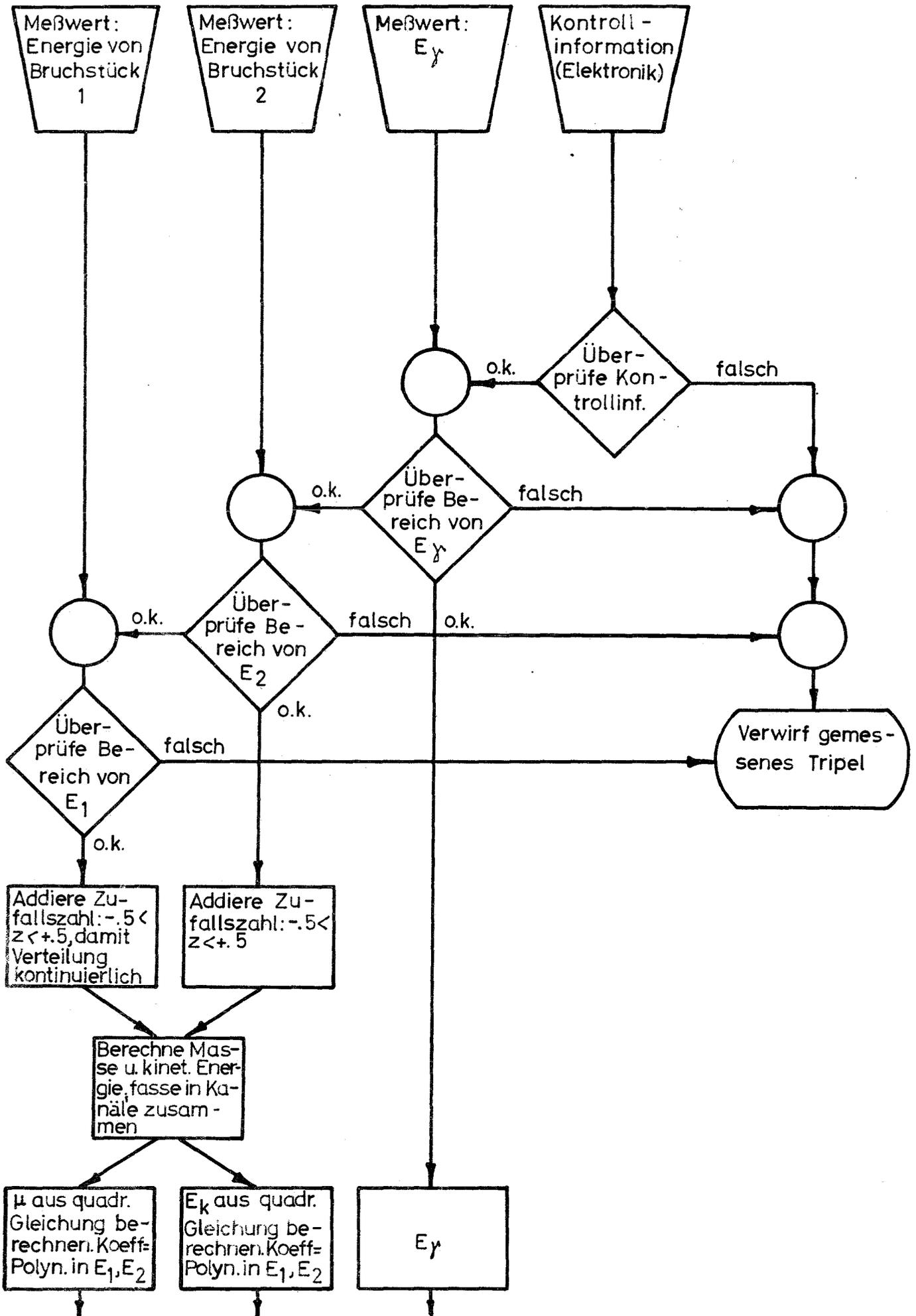


Abb.1: On-line Rechnung (Massenverteilung bei Kernspaltung)

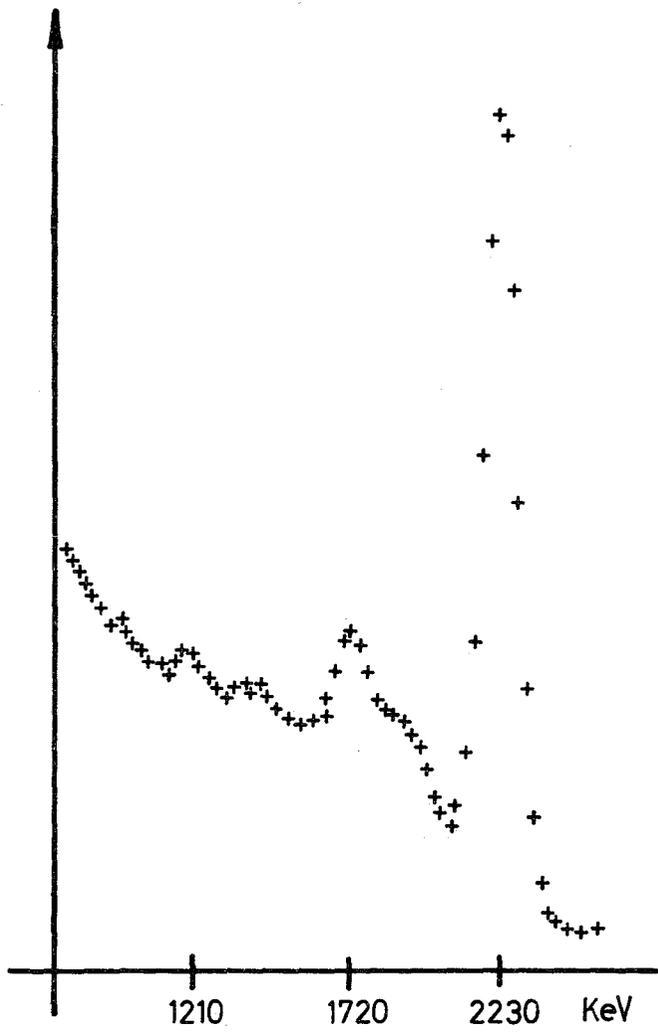


Abb.2: Auflösungsfunction eines Na-J-Detektors

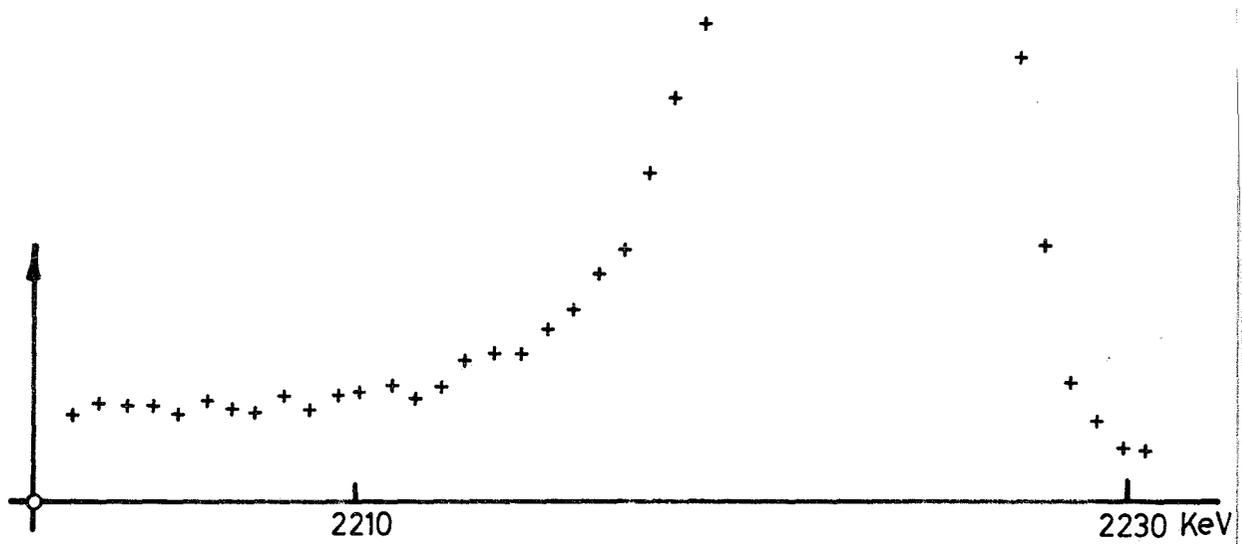


Abb.3: Linienform eines Halbleiterdetektors

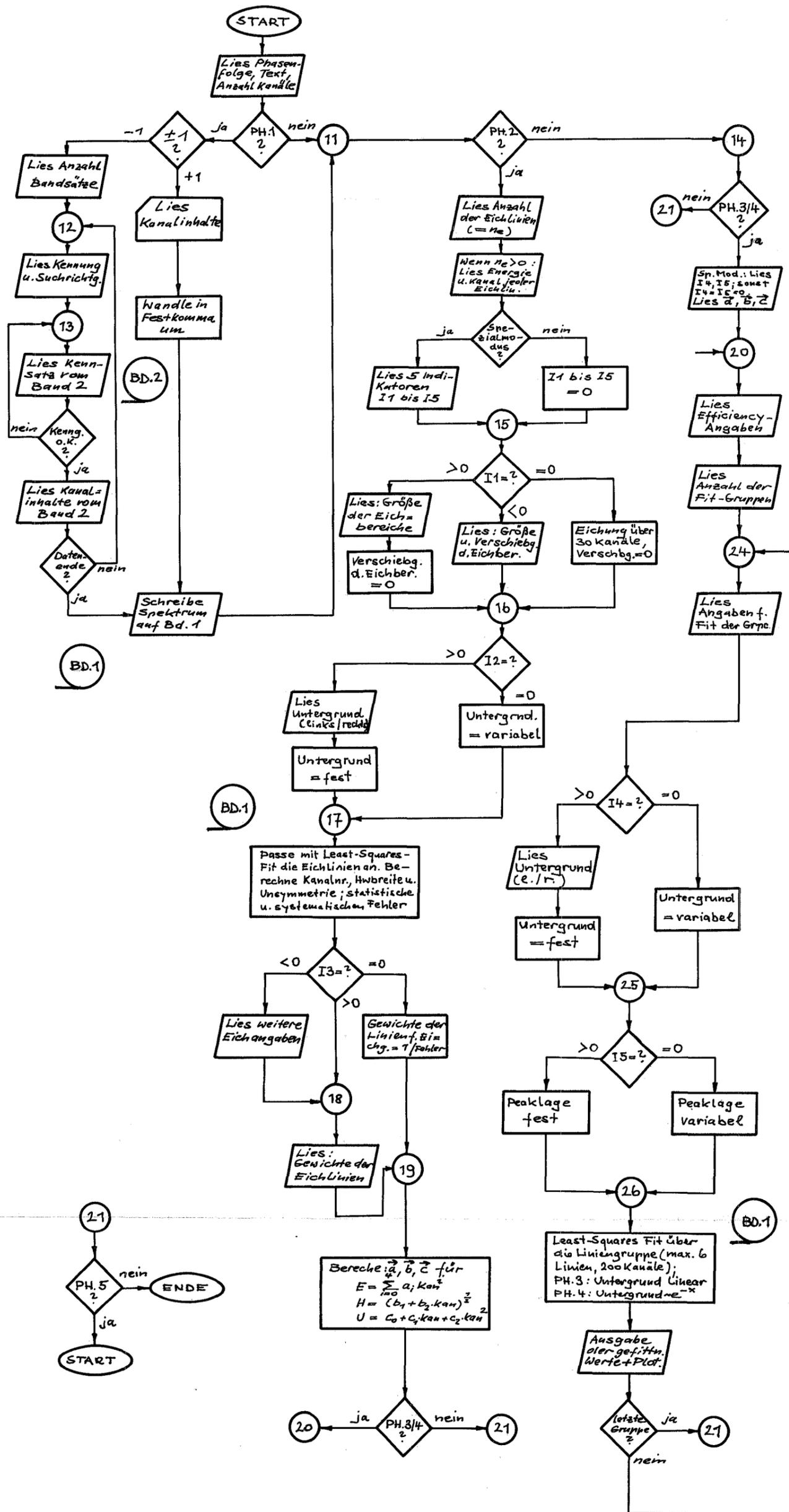


Abb. 4: Flußdiagramm Spektrenanalyse

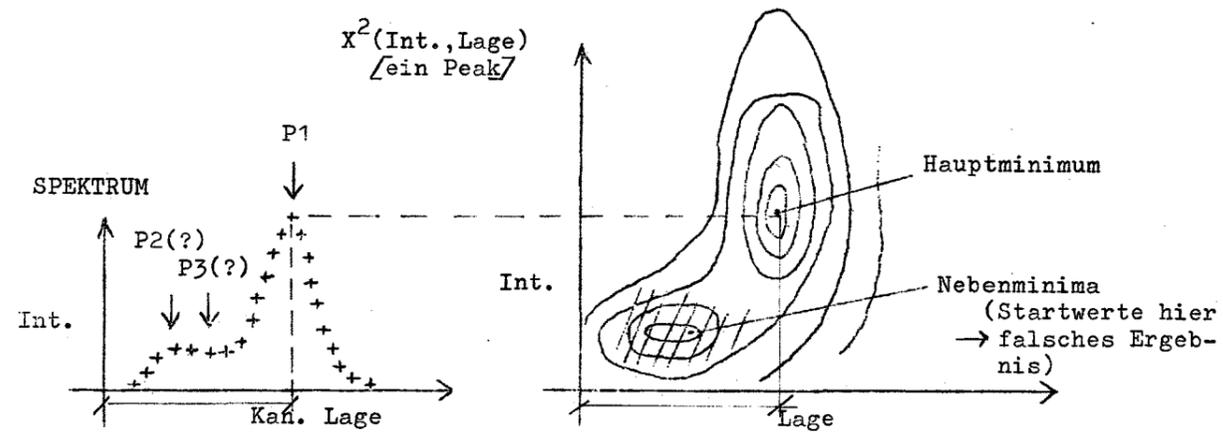


Abb. 5: Mehrdeutige Least-Squares-Analyse

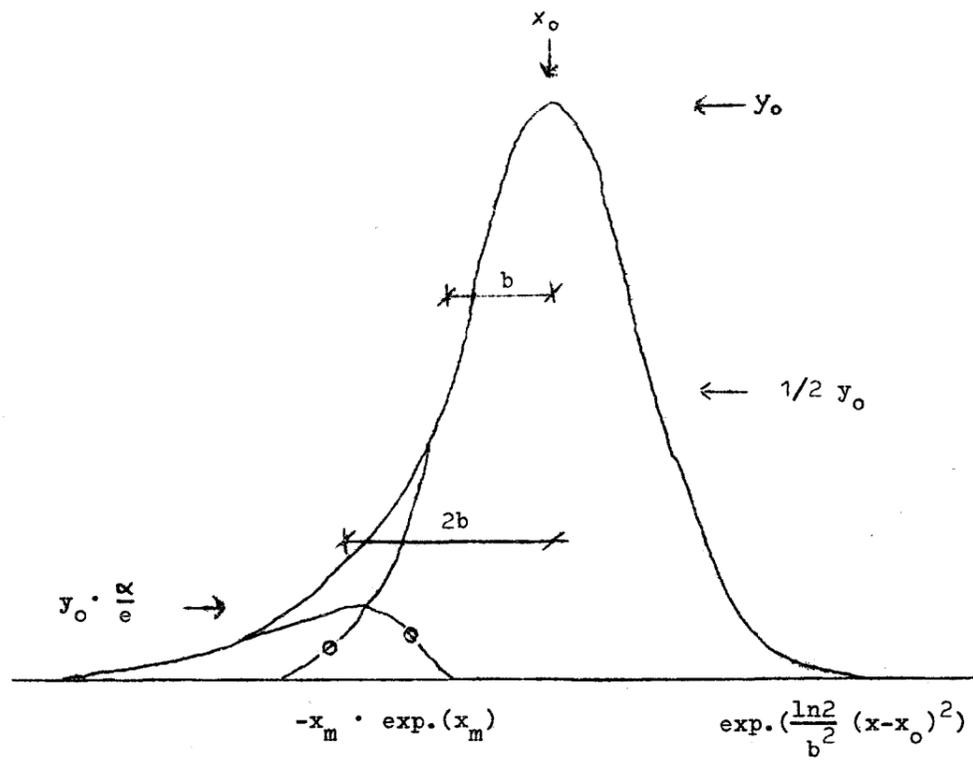


Abb. 6: Auflösungsfunction eines Halbleiterdetektors (analytisch)

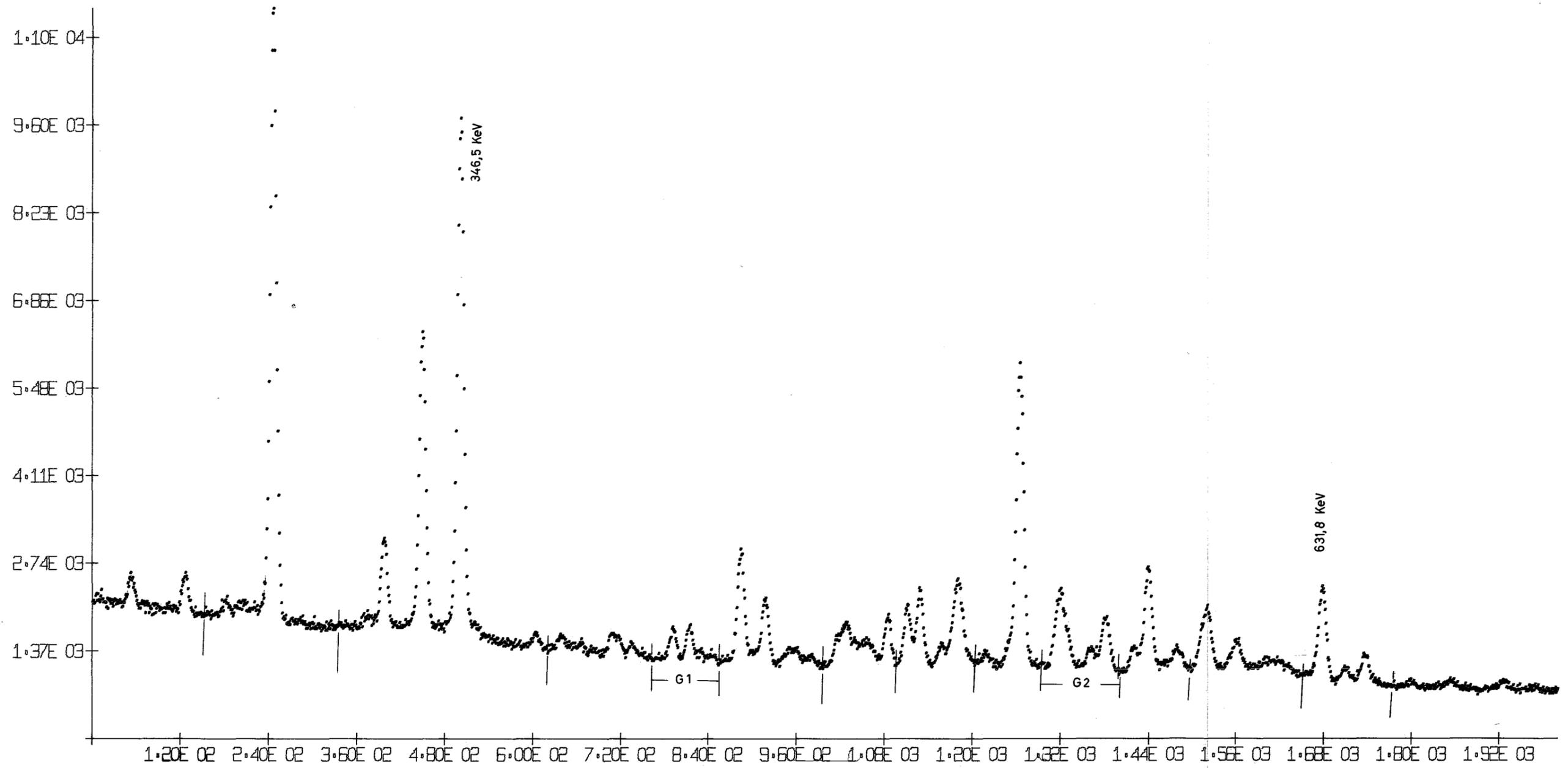
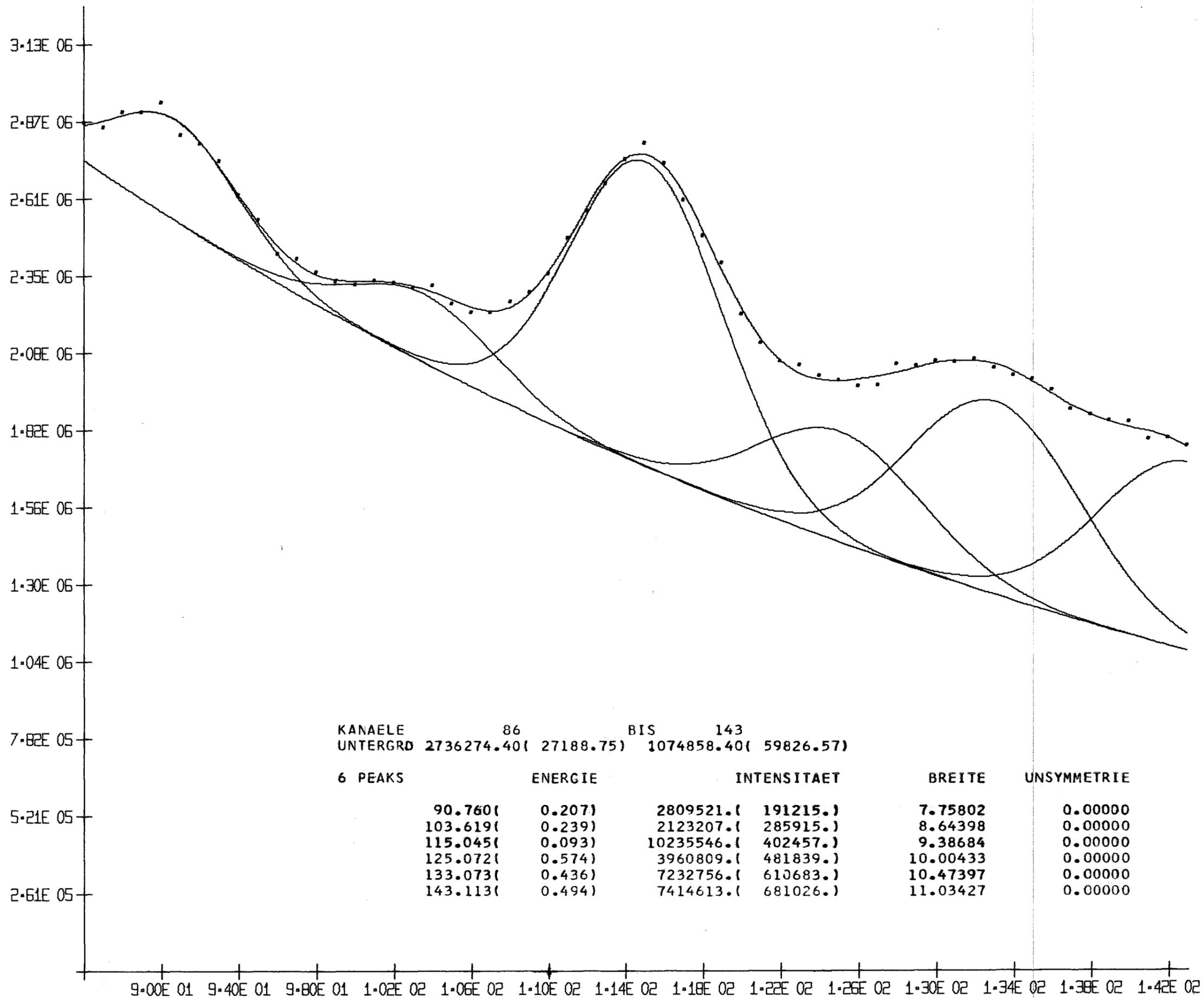


ABB. 0007 Spektrum mit Gruppeneinteilung



KANAELE 86 BIS 143
 UNTERGRD 2736274.40(27188.75) 1074858.40(59826.57)

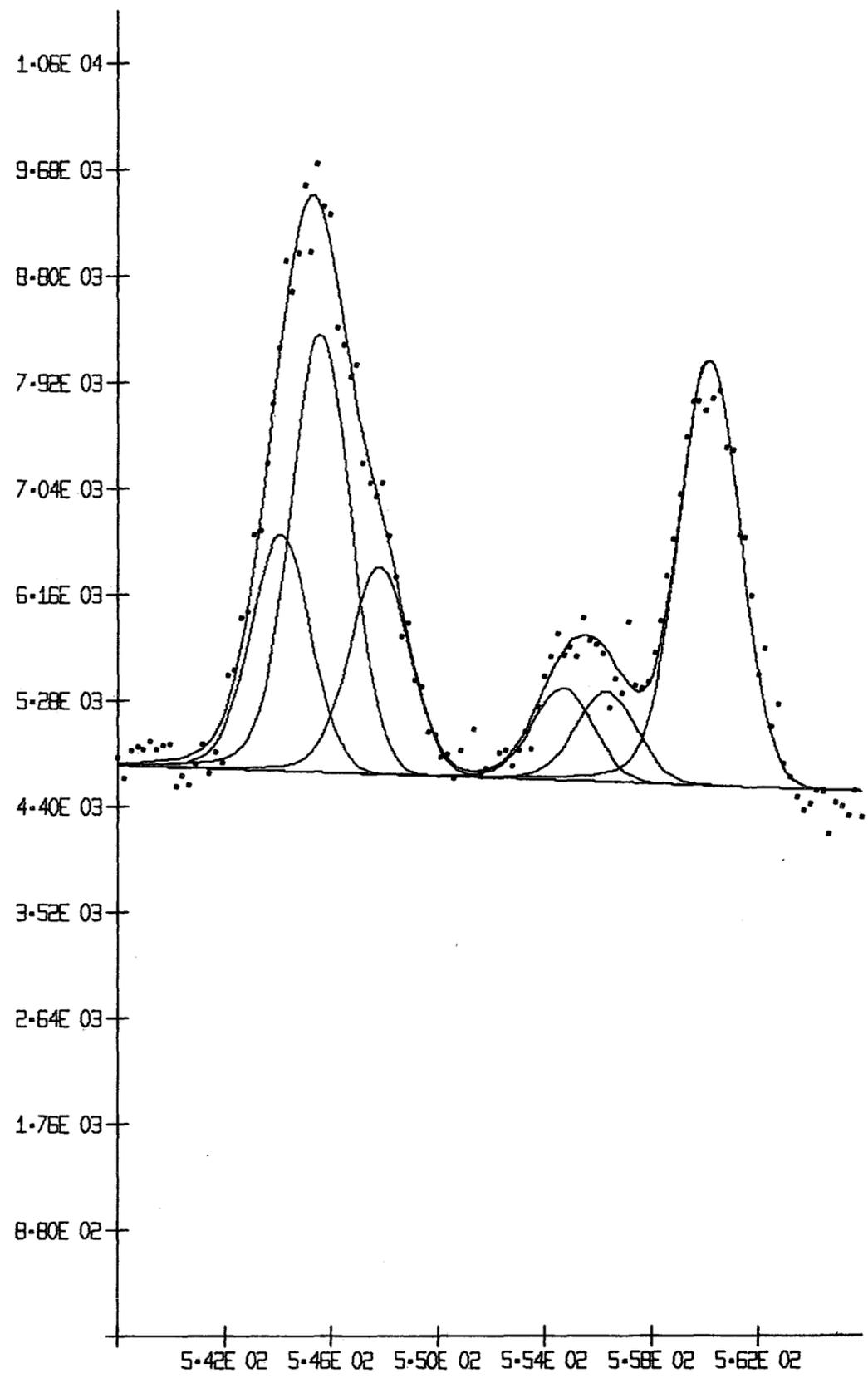


ABB. 9 ERBIUM 2, 8-11-67

ERBIUM 2, 8.11.67

4096 KANAEL

KANALNUMMER=	581.740	639.481	679.054	1251.90	2015.08	2428.26	2836.17	3188.17
ENERGIE=	184.281	198.236	207.801	346.549	531.540	631.750	730.690	815.950
*** A(I)=	45.1474	0.237173	0.440734E-05	-0.151178E-08	0.182989E-12			
ENERG.(GEF)=	184.336	198.253	207.799	346.456	531.615	631.771	730.615	816.010
HWBREITE=	2.20977	2.21218	2.23933	2.38767	2.60782	2.81909	2.87244	2.95043
*** B(I)=	1.79294	0.322253E-02	-0.658367E-05	0.641475E-08				
HWBRT.(GEF)=	2.20335	2.22301	2.23585	2.38600	2.60908	2.81856	3.13506	3.52385
UNSYMMETRIE=	0.107119	0.955364E-01	0.113947	0.827372E-01	0.680270E-01	0.169480	0.000000	0.000000
*** C(I)=	0.144121	-0.229755E-03	0.162082E-06					
UNSYM.(GEF)=	0.107286	0.104945	0.103377	0.839656E-01	0.677915E-01	0.636622E-01	0.627789E-01	0.645632E-01

GRUPPE 1

GUETEZ. = 1.795

KANAEL 1510 BIS 1609
 UNTERGRUND 5208.18(33.05) 4924.21(51.86)

4 PEAKS	ENERGIE	INTENSITAET	BREITE	UNSYMMETRIE
	416.888(0.039)	5375.(164.)	2.45692	0.07651
	422.351(0.036)	5999.(171.)	2.46286	0.07600
	426.020(0.136)	1649.(186.)	2.46689	0.07566
	429.860(0.150)	1468.(214.)	2.47116	0.07531

GRUPPE 2

GUETEZ. = 2.509

KANAEL 2040 BIS 2155
 UNTERGRUND 4738.26(54.98) 4526.19(53.98)

6 PEAKS	ENERGIE	INTENSITAET	BREITE	UNSYMMETRIE
	543.755(0.250)	5652.(1682.)	2.62992	0.06711
	545.255(0.204)	10473.(1364.)	2.63256	0.06703
	547.480(0.154)	4963.(588.)	2.63650	0.06692
	554.339(0.426)	2224.(900.)	2.64891	0.06657
	555.967(0.458)	2167.(892.)	2.65191	0.06648
	559.827(0.036)	10251.(265.)	2.65912	0.06630

Abb.10 Auswertung eines Halbleiterspektrums

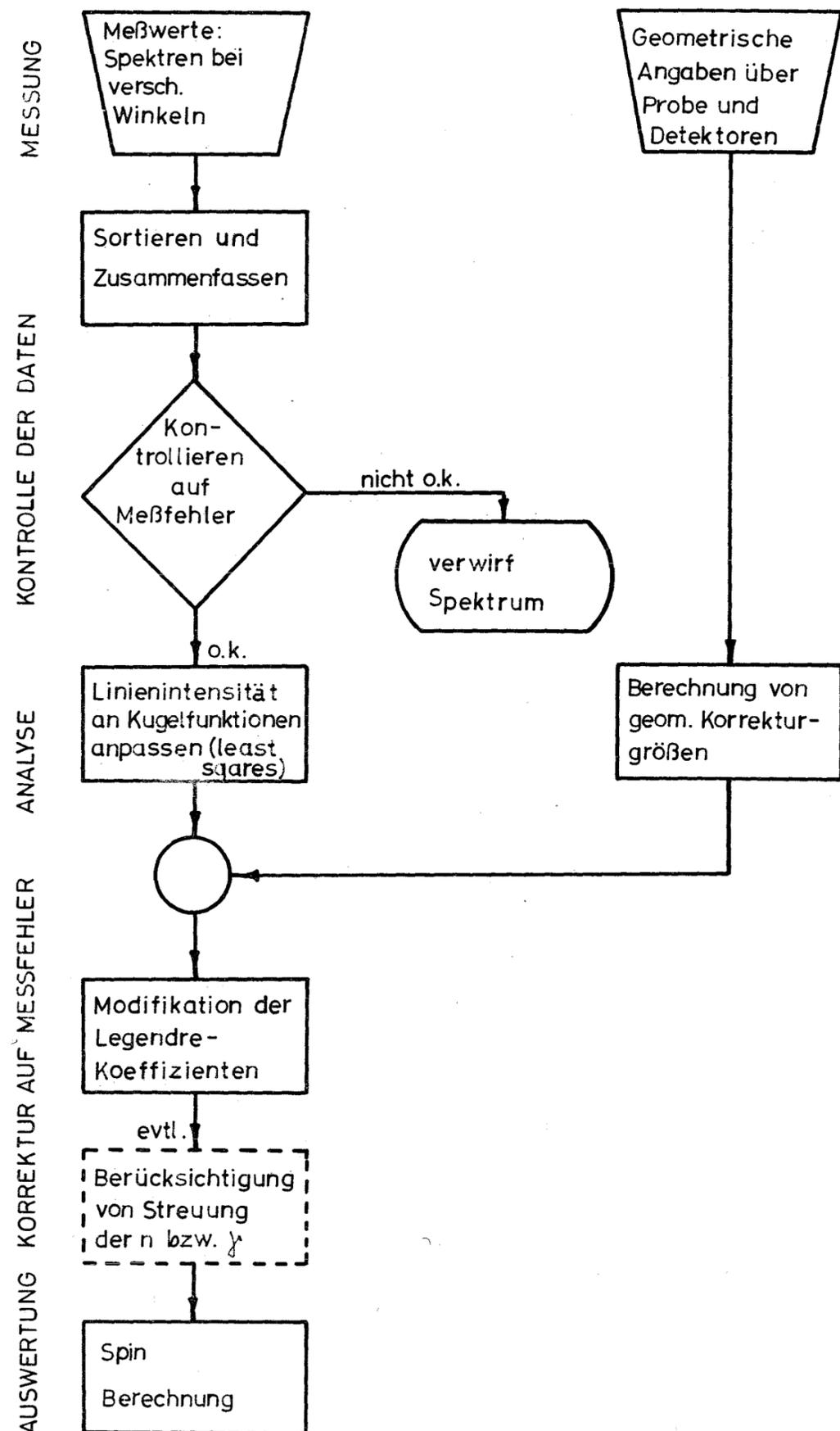


Abb.11: Flußdiagramm zur Winkelkorrelationsanalyse