Г.И. Дрёмин

СПЕКТРРАД
(SPECTRRAD)

Система программного обеспечения спектрометрических комплексов

Версия 16

Руководство пользователя

2025 г.

Программный пакет «СПЕКТРРАД» является развитием программного пакета «СПЕКТР». Используемый в программном пакете «СПЕКТР» формат **integer** для представления дат и времени заменён на формат **double**, что практически неограниченно расширяет диапазон используемых дат (формат **integer** позволял использовать даты в диапазоне от 1970 года до 2038 года).

Разработчики программного пакета «СПЕКТР»:

Дрёмин Геннадий Иванович	Разработка математики, алгоритмов, методик измерений и обработки спектров. Создание первой рабочей версии пакета написанной на Фортране (ANAL-11), развитие пакета на C++. Создание описания пакета и справочной системы.
Курников Евгений Николаевич	Перевод текстов с Фортрана на C++, разработка драйверов спектрометрических устройств, развитие пакета на C++ (до июня 2017 года).

Общие замечания

Пакет программ, объединенных названием «SPECTRRAD», предназначен для управления спектрометрами альфа, бета и гамма излучения с любыми типами детекторов. Пакет сконструирован достаточно гибким, для того чтобы его можно было использовать и на стационарных лабораторных спектрометрах, и в полевых спектрометрах, погружных спектрометрических системах, паспортизаторах РАО, гамма регистраторах керна и шлама, при каротаже скважин, управлении технологическими процессами в атомной промышленности и медицине.

Версия пакета для Windows работает под управлением Windows-95, 98, NT, 2000, XP, 7, 8, 10.

Обеспечивает управление спектрометрическими платами и автономными спектрометрами фирм «Аспект» и «Парсек», спектрометрами фирм «Canberra», «GBS ELEKTRONIK», «GreenStar», «ORTEC», «Амплитуда», «Доза», «Радэк», «КБ РАДАР», «Экспертцентр».

При вводе спектрометра, работающего под управлением пакета «SPECTRRAD», в эксплуатацию должна быть проведена его калибровка и первичная поверка (метрологическая аттестация).

Поскольку программа, как правило, поставляется уже установленной и настроенной для конкретного спектрометрического комплекса, описание пакета построено так, что для рутинной работы с пакетом достаточно ознакомиться с разделом «Работа с пакетом», помещенным в начало описания. Тем пользователям, кто хочет самостоятельно формировать необходимые им спектрометрические комплексы и процедуры обработки, потребуется дочитать описание пакета до конца.

Описание не включает общих для всех программ работающих под управлением Windows процедур операций с файлами: «Создать», «Открыть», «Сохранить», «Сохранить как…» и т.д., и данными: «Вырезать», «Копировать», «Вставить» и т.п.

Краткая характеристика

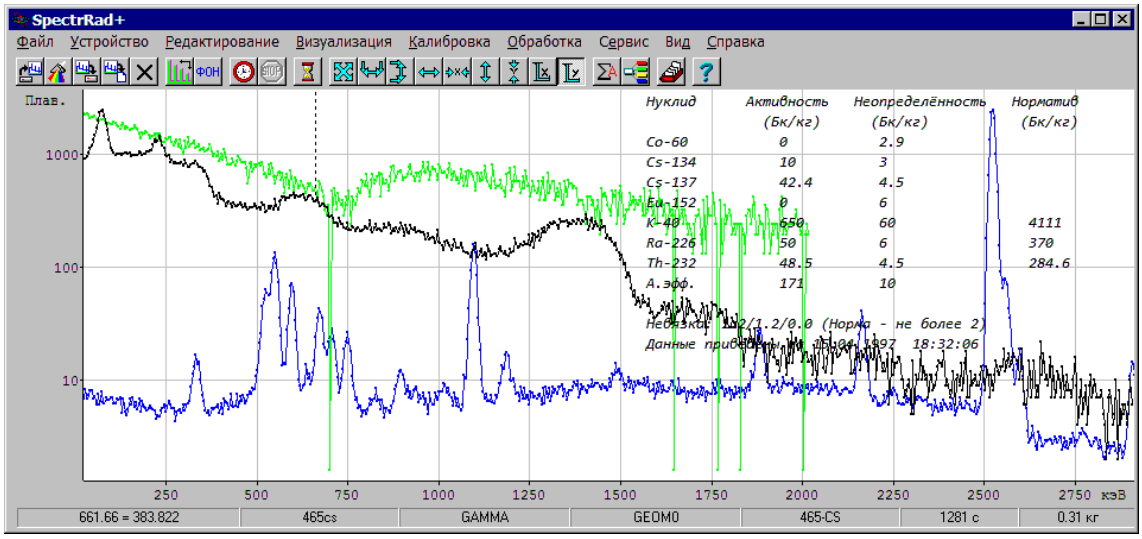
- Полная автоматизация процесса измерений и обработки результатов.
- Открытость программного обеспечения предоставляет пользователю возможность самостоятельно подключать новые детекторы, формировать геометрии измерений и библиотеки нуклидов - создавать спектрометрические системы, отвечающие своим требованиям.
- Обработка альфа, бета и гамма спектров измеренных на любых типах детекторов, совместная обработка спектров позволяет формировать наиболее эффективные спектрометрические системы, работающие под управлением пакета «SPECTRRAD».
- Наиболее современные методы обработки данных (помехоустойчивое оценивание, использование полной функции отклика спектрометра, учёт истинных совпадений и линий утечки), специальные методы для плохо разрешенных спектров, позволяют получать максимально эффективные оценки и определять до 100 радионуклидов при одном измерении пробы, детектировать присутствие в пробе не учтённых при обработке нуклидов.
- Уникальный алгоритм учёта деформаций спектров связанных с энергетическим дрейфом (коррекция коэффициента усиления, нуля шкалы и нелинейных искажений энергетической калибровки, коррекция разрешения спектрометра) при обработке спектров.
- Учёт поглощения излучения в веществе пробы и материалах детектора в соответствии с химическим составом пробы, автоматическое определение эффективного заряда ядер вещества пробы при обработке спектров.

- Учёт изменения формы пиков, элементарных спектров, эффективности регистрации от физических (плотность счётного образца, эффективный атомный номер и эффективная атомная масса элементов вещества пробы) и геометрических параметров счётного образца и геометрии измерений, загрузки спектрометра обеспечивает высокую точность оценок активности нуклидов.
- Режим циклических измерений и групповая обработка спектров реализуют методику амплитудно–временного анализа, наиболее эффективную при обработке спектров проб, содержащих короткоживущие нуклиды.
- Совместная обработка бета и гамма спектров обеспечивает надежное и эффективное определение чистых бета излучателей (Sr-90, Y-90) в пробах, загрязненных другими радионуклидами.
- Автоматическая коррекция дрейфа спектрометров во время измерений позволяет проводить многочасовые и многодневные измерения и, в итоге, значительно снизить нижние пределы определения активностей.
- Автоматическая энергетическая калибровка спектрометрических трактов по результатам обработки исследуемых проб освобождают потребителя от процедур калибровок спектрометров, значительно повышает точность анализа проб.
- Удобная программа формирования и редактирования таблиц нуклидов, позволяющая формировать необходимые равновесные цепочки нуклидов всего лишь двумя щелчками мышки. Базовая библиотека нуклидов включает более 500 наиболее распространённых радионуклидов (природные радионуклиды и продукты деления и активации). Данные библиотеки на настоящий момент соответствуют ENSDF 2019 года и включают все сведения о структуре каскадных переходов.
- Программируемый калькулятор позволяет потребителю рассчитывать по результатам обработки спектров необходимые дополнительные параметры (например, распад нуклидов во время протяжки через фильтр при анализе воздуха, расчёт активности на объём прокачанного воздуха и т.п.), управлять процессом измерений и внешними процессами, создавать собственные формы отчета.
- Встроенная база данных автоматизирует создание архива измерений, обеспечивает удобный доступ к архиву, позволяет проводить статистическую обработку произвольной выборки результатов измерений, формировать графики изменения параметров спектрометра от времени (контрольные карты Шухарта).
- Таблицы нормативов СанПиН, НРБ позволяют автоматически формировать заключения о результатах исследований проб.
- Гибкая схема формирования отчёта о результатах измерений позволяет формировать отчёты любой требуемой формы.
- Многоуровневая схема контроля за изменением параметров спектрометра обеспечивает надёжный контроль качества измерений. Пакет обеспечивает возможность автоматического отслеживания и сохранения в архиве параметров энергетического дрейфа спектрометра во времени (дрейфа разрешения, коэффициента усиления и нуля шкалы), формы пиков, эффективности регистрации и изменения фона. Система контроля качества измерений запрещает проведение рабочих измерений при выходе критически важных параметров спектрометрических трактов за заданные пределы.
- Два режима доступа к процедурам настройки и управления программой: ограниченный и полный (защищённый паролем) обеспечивает эффективную схему защиты от несанкционированного или малоквалифицированного доступа к управлению программой. Пользователь, имеющий право полного доступа, имеет возможность настройки системы ограниченного доступа.

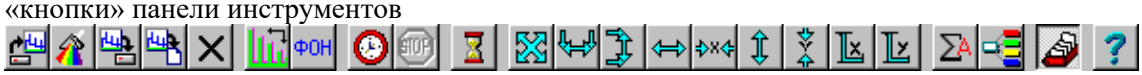
Работа с пакетом

Запуск. Главное окно

Для запуска пакета из операционной оболочки Windows необходимо, щелкнув по клавише «Пуск» панели задач «рабочего стола» Windows, найти в группе «Программы», ярлык программы «SPECTRRAD» и щелкнуть по нему левой кнопкой мышки. Или, если ярлык программы вынесен на «рабочий стол» Windows, дважды щелкнуть левой кнопкой мышки по пиктограмме пакета. После запуска на экране появится главное окно программы «SPECTRRAD» (исполняемый файл SpectrRad.exe).



В верхней части окна - строчка меню («Файл», «Устройство» «Редактирование»,...), «кнопки» панели инструментов



, обеспечивающие более удобный доступ к основным пунктам меню (см. «Главное меню»).

Слева - шкала ординат (Y) для просматриваемого спектра. Размерность зависит от вида визуализируемого объекта. Для обычного спектра - число зарегистрированных импульсов. «**Плав./Фикс.**» - указатель: «плавающий/ фиксированный» масштаб шкалы.

Внизу - шкала абсцисс (X). Размерность также определяется видом спектра или таблицы функции. Для обычного спектра - каналы спектрометра, если отсутствует или отключена энергетическая калибровка спектрометра, или энергия частиц в величинах, которые были использованы при калибровке спектрометра (как правило, в килоэлектронвольтах), если калибровка включена.

Ниже - строчка информации о спектре:

- Информация о положении «маркера» - подвижного указателя, перемещаемого по спектру:
  - положение маркера на шкале энергий / каналов (661.66),
  - количество зарегистрированных импульсов в соответствующем канале спектрометра (384).
- Наименование файла спектра (465cs).
- Название спектрометра (GAMMA).
- Геометрия измерений (GEOM0).
- Шифр пробы (465-CS).
- Время измерения пробы в секундах (1281 с).
- Масса счётного образца (0.31 кг).

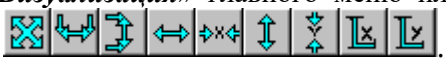
Основные параметры главного окна можно изменять, пользуясь группой пунктов меню «***Вид***» (см. «Главное меню»).

Программа допускает одновременную визуализацию до 12-ти спектров. Максимальное число визуализируемых спектров и цвета спектров, маркеров, сетки, фона окна и т.п. устанавливаются по вызову пункта меню «***Вид / Число и цвет спектров...***».

В программе существует три основных видов масштабирования спектров по оси ординат:

Масштаб	**Обозначение**	**Описание**
Обычный		Единый масштаб для всех визуализируемых спектров. Параметры масштаба определяются диапазоном изменения значений выбранного (рабочего) спектра в области визуализации.
Плавающий	***Плав.***	Индивидуальный масштаб для каждого визуализируемого спектра. Параметры масштабов определяются диапазоном изменения значений каждого спектра в области визуализации. Сетка оси ординат изменяется при переключении со спектра на спектр.
Фиксированный	***Фикс.***	Единый масштаб для всех визуализируемых спектров. Параметры масштаба задаются оператором.

Оператор может переключаться с одного вида масштабирования на другой с помощью двойного щелчка мышкой в области оси ординат главного окна программы. Двойной щелчок в области оси абсцисс переключает ось абсцисс со шкалы каналов на шкалу энергий и обратно.

Оператор может изменять вид визуализации спектров, параметры и тип масштаба, пользуясь группой «***Визуализация***» главного меню или соответствующими кнопками панели инструментов  .

Перемещение мышки в области шкалы X или Y при нажатой левой кнопке изменяет масштаб соответствующей шкалы.

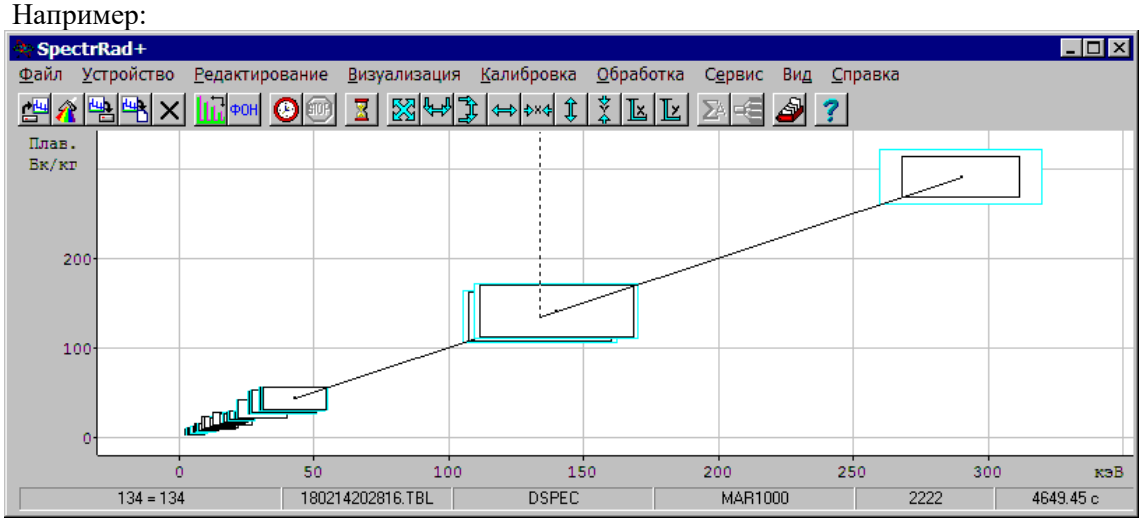
Перемещение мышки по направлению направо и вниз в области спектра выделяет прямоугольник, щелчок внутри которого левой кнопкой мышки растягивает его на всё окно, соответственно меняя масштабирование спектра по оси абсцисс и ординат.

Щелчок правой кнопки мышки в области шкалы абсцисс или ординат вызывает всплывающее меню дублирующее часть пунктов главного меню относящихся к управлению масштабированием оси абсцисс или ординат.

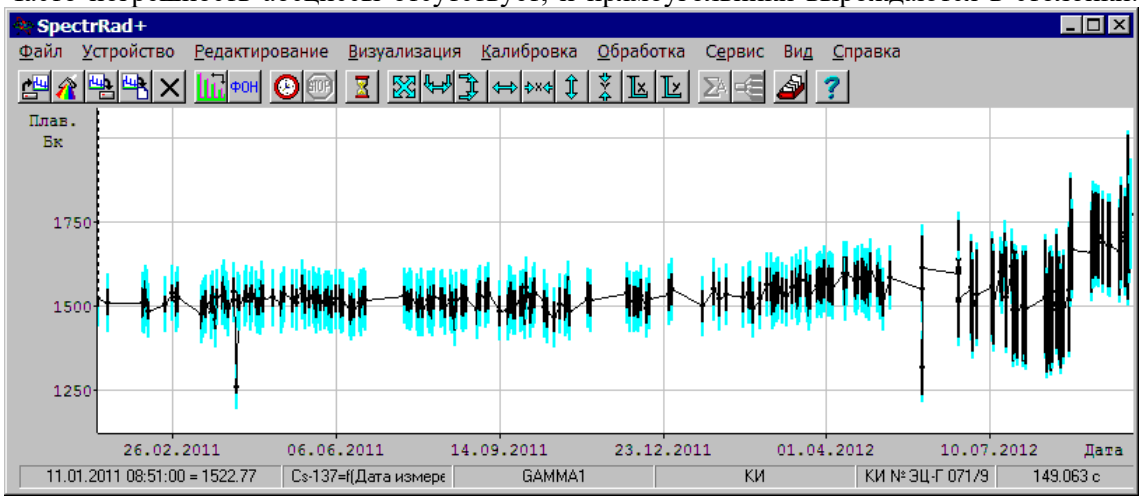
В пакете «SPECTRRAD» есть два вида объектов, которые могут визуализироваться в главном окне головной программы: спектры и таблицы функций. **Спектр** – таблица чисел отображающая функцию заданную с равномерным шагом по оси абсцисс. Поэтому ось абсцисс в спектре не приводится, приводятся только значения ординаты, а значения абсциссы рассчитываются по калибровке шкалы абсцисс. Значение неопределённости ординаты в спектре также отсутствует и рассчитывается при необходимости исходя из предполагаемого характера спектра. В зависимости от выбранного вида визуализации спектр в главном окне отображается либо точками соответствующими значениям ординаты (режим «точки»), либо вертикальными линиями (режим «гистограмма»), либо линиями соединяющими точки (режим «контур»). **Таблица чисел** - таблица чисел отображающая функцию заданную с произвольным шагом по оси абсцисс. Поэтому точка таблицы чисел не одно число, а четыре: абсцисса, ордината, неопределённость абсциссы и неопределённость ординаты. Значения абсциссы и ординаты отображаются в том же режиме, что и в спектре, а значения неопределённостей отображаются

прямоугольником {x-Δx, y-Δy, x+Δx, y+Δy}. А поскольку неопределённости бывают полными и статистическими, а статистическая неопределённость являются частью полной неопределённости, в случае если в таблице чисел указана дополнительная погрешность, для каждой точки таблицы рисуется два квадрата: полной и статистической неопределённости.

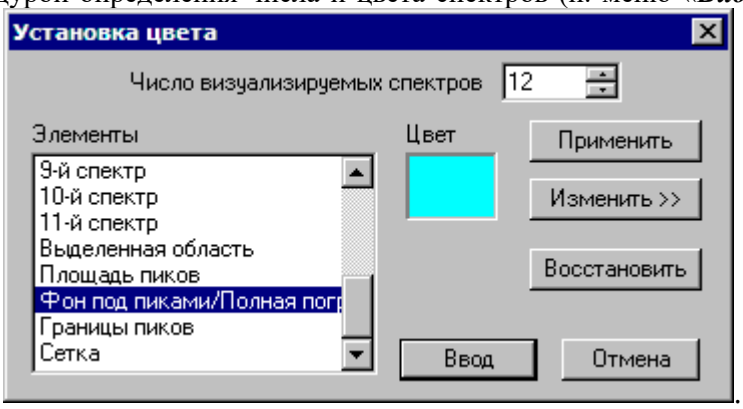
Например:



Часто погрешность абсциссы отсутствует, и прямоугольники вырождаются в столбики:



Статистическая неопределённость рисуется тем же цветом, что и спектр, а полная неопределённость другим цветом (в примерах голубым). Цвет полной неопределённости задаётся процедурой определения числа и цвета спектров (п. меню «***Вид\Число и цвет спектров…***»):



Главное меню

Управление работой Windows программы осуществляется посредством меню, предоставляющего пользователю удобный доступ ко всем командам или параметрам программы. Строчка меню располагается в верхней части окна программы под строкой заголовка программы. Для работы с меню нужно щелкнуть левой кнопкой мышки нужный пункт в меню или нажать клавишу «Alt», и с помощью клавиш перемещения курсора, выбрав нужный пункт меню, нажать клавишу «Enter». Можно также, удерживая клавишу «Alt» нажатой, нажать на клавиатуре на подчеркнутую букву в названии пункта меню. В результате под пунктом меню откроется прямоугольник с группой подчиненных ему пунктов меню. Щелкнув мышью нужный пункт (или выбрав его с помощью клавиш перемещения курсора), мы либо откроем новую группу подчиненных пунктов меню, либо выполним действие, связанное с данным пунктом меню.

Пункт меню		***Действие***
Файл:		
Открыть:		
Файл…	***F3***	Открыть (считать из файла) спектр для визуализации и обработки. Рядом с названием пункта меню (***Файл***) может быть указана, закрепленная за данным пунктом меню кнопка панели инструментов и «горячая» клавиша (***F3***), нажатие на которые активирует данный пункт меню.
Спектрометр…	***Ctrl+F3***	Выбрать спектрометр, считать спектр из спектрометра. Отредактировать, при необходимости, сведения о спектре.
Сохранить	**F2**	Сохранить спектр в том же файле.
Сохранить как…		Сохранить спектр в новом файле.
Закрыть	**Ctrl+C**	Удалить ранее открытый спектр из окна программы.
Печать…		Сформировать документ для печати спектра.
Выход	**Alt+F4**	Выход из программы.

В последнем разделе меню «**Файл**» выводятся названия всех открытых файлов спектров. Выбранный (рабочий) файл спектра отмечен «галочкой». Оператор может переключиться на любой другой спектр, сделав его рабочим, с помощью левой кнопки мышки. Нажатие на клавишу «TAB» переключает выбранный спектр на следующий, «Shift+TAB» переключает выбранный спектр на предыдущий.

Устройство:

Спектрометр:[1]

Установить…	Подключение сформированного спектрометра (спектрометра с определенными параметрами тракта и библиотеками элементарных спектров и нуклидов) к конкретному входу АЦП или установка нового. Редактирование параметров спектрометра.
Сохранить как…	Сохранение всех настроек и калибровок выбранного спектрометра под новым названием.
Удалить…	Удаление всех настроек и калибровок выбранного спектрометра.

Геометрия:

Установить…	Изменение параметров геометрии, установка новой геометрии измерений.
Сохранить как…	Сохранение всех настроек и калибровок выбранной геометрии измерений под новым названием.
Удалить…	Удаление всех настроек и калибровок выбранной геометрии измерений.

Настройка:

Общих параметров …	Создание общей группы спектрометров, установка общих для всех спектрометров, геометрий и шаблонов обработки параметров, используемых при формировании отчётов обработки спектров.
Циклических измерений…	Установка параметров циклических измерений.
Контроля загрузки…	Установка параметров процедуры контроля за интенсивностью регистрируемого спектрометром излучения.
Режима наблюдения… ***Ctrl+W***	Включение/выключение режима наблюдения за набором спектра, установка периода наблюдения за набором.

Измерение:

Пуск… ***F5***	Запуск измерений.
Стоп… ***Ctrl+F5***	Остановка измерений.
Очистка… ***F4***	Очистка памяти спектрометра.

[1] Некоторые функции установки и калибровки спектрометра доступны только в режиме "полного доступа" (см. пункт меню "Режим доступа").

Состояние F8

Включение/выключение режима вывода дополнительного окна «**Спектрометры**», содержащего сведения о параметрах текущих измерений.

Редактирование:

Фильтрация… Ctrl+F

Сглаживание спектра усреднением по заданному числу каналов или с заданной весовой функцией, фильтрация обратная сглаживанию (улучшение разрешения), коррекция выбросов.

Аппроксимация…

Аппроксимация спектра или таблицы сплайном.

Обнуление… Ctrl+Z

Обнуление заданного участка спектра.

Нормализация шкалы X… Ctrl+N

Приведение энергетической шкалы спектра к заданному виду.

Сложение Ctrl+A

Поканальное сложение двух спектров или спектра с константой, объединение двух таблиц.

Умножение Ctrl+M

Поканальное умножение или деление двух спектров или умножение (деление) спектра на константу.

Свёртка…

Свёртка выбранного участка текущего спектра со спектром или таблицей функции, выбранной из списка открытых спектров и таблиц функций. Свёртка расширяет возможности фильтрации спектров.

Поставить маркер Ins

Отметка, выбранного с помощью подвижного маркера, канала спектра.

Удалить маркер Del

Удаление, наиболее близко расположенной к подвижному маркеру, метки спектра.

Отметить все точки Ctrl+Ins

Отметка всех точек спектра.

Удалить все маркеры Ctrl+Del

Удаление всех меток спектра.

Редактирование данных…

Редактирование данных спектра или таблицы в числовом представлении.

Визуализация:

Логарифмическая шкала Y Ctrl+L

Переключение шкалы ординат (Y) с линейной на логарифмическую и обратно.

Логарифмическая шкала X Alt+L

Переключение шкалы абсцисс (X) с линейной на логарифмическую и обратно.

Выбрать сектор X Ctrl+X

Установить левую и правую границы шкалы абсцисс по отмеченным маркером каналам спектра. В качестве границ выбираются ближайшие слева и справа от

подвижного маркера помеченные каналы, а если они отсутствуют, то границы спектра.

Установить шкалу Y по спектру

Ctrl+Y

Установка шкалы Y в соответствии с диапазоном значений визуализируемой части спектра.

Растянуть по X

Shift+Right

Установить более подробный масштаб шкалы абсцисс. При этом у шкалы X появится линейка прокрутки, с помощью которой можно просматривать различные участки спектра.

Сжать по X

Shift+Left

Установить более мелкий масштаб шкалы абсцисс.

Растянуть по Y

Shift+Up

Установить более подробный масштаб шкалы ординат. У шкалы Y также появится линейка прокрутки.

Сжать по Y

Shift+Down

Установить более мелкий масштаб шкалы ординат.

Установка шкалы:

По спектрам \спектру

Home

Установка масштабов шкалы X и Y. Первый вызов процедуры устанавливает шкалы в соответствии с длиной и диапазоном значений всех визуализируемых спектров. Повторный вызов устанавливает шкалы в соответствии с длиной и диапазоном значений выбранного спектра.

Фиксированная шкала Y Ctrl+R

Фиксация текущего значения шкалы Y. При этом шкала Y не будет изменяться при переключении со спектра на спектр.

Плавающая шкала Y Ctrl+Q

Все открытые спектры визуализируются в масштабе шкалы Y «по спектру».

Произвольная Ctrl+S

Установка шкал X и Y оператором.

Размерность шкалы X:

Энергия – эВ

Шкала X в электронвольтах.

Энергия – кэВ Ctrl+E

Шкала X в килоэлектронвольтах.

Энергия –МэВ

Шкала X - в мегаэлектронвольтах.

Дата Ctrl+E

Шкала X – дата.

Время –сек.

Пункт меню доступный в том случае, если шкала X – дата. При выборе **Размерность шкалы X / Время – сек.**– ось абсцисс будет отклонением текущей даты от даты начала измерений в секундах.

Время –мин

Шкала X – время от начала измерений в минутах, часах,

Время –час.		днях или годах.
Время –дней		
Время –лет.		
Точки	**Ctrl-D**	Визуализация спектра точками.
Контур		Визуализация спектра линиями, соединяющими точки спектра.
Гистограмма	**Ctrl+H**	Визуализация спектра в виде гистограммы.
Визуализация пиков		Визуализация спектров, имеющих линейчатую структуру, в режиме прорисовки, найденных процедурой поиска, пиков спектра.
Визуализация результатов обработки		Вывод в правом верхнем углу головной формы программы результатов обработки спектра, если они существуют.
Сетка:		
Ординат	***Ctrl+G***	Вывод масштабной сетки шкалы ординат.
Абсцисс	***Alt+G***	Вывод масштабной сетки шкалы абсцисс.
Линия…	**Ctrl+B**	Вывод до 5-ти линий требуемого стиля и цвета заданных значений шкалы ординат. Процедура полезна при создании контрольных карт Шухарта.
Калибровка:		
Шкалы X (Энергетическая):		
Ввод…	***Ctrl+K***	Калибровка шкалы каналов спектрометра. Оператор должен предварительно пометить маркерами точки спектра с известными энергиями (значениями абсциссы) и ввести значения энергий (абсцисс) в соответствующие помеченным каналам поля таблички.
По моделям пиков…		Энергетическая калибровка спектрометра по рассчитанным моделям пиков для линейчатых спектров.
Визуализация	***Ctrl+V***	Вывод графика функции энергетической калибровки.
Ширины пиков:		
Ввод…		Калибровка ширины пиков как функции энергии гамма или альфа линий. Оператор должен предварительно пометить маркерами точки спектра соответствующие половине высоты пиков слева и справа от вершин одиночных пиков.
По моделям пиков…		Калибровка ширины пиков по рассчитанным моделям пиков для линейчатых спектров.
Визуализация		Вывод графика функции калибровки ширины пиков. При установке режима визуализации «Энергетическая» ширина

пиков выводится в значениях энергий, в противном случае - в каналах.

Эффективности регистрации — Расчёт таблиц эффективности регистрации квантов для спектров имеющих линейчатую структуру.

В фотопиках... — Расчёт таблицы эффективности регистрации квантов в пиках полного поглощения и таблицы полной эффективности регистрации квантов в детекторе.

В пиках одиночной утечки... — Расчёт таблицы эффективности регистрации квантов в пиках одиночной утечки.

В пиках двойной утечки... — Расчёт таблицы эффективности регистрации квантов в пиках двойной утечки.

Автокалибровка:

Пуск автокалибровки… — Автоматическая энергетическая калибровка и поверка спектрометра по контрольному источнику.

F6

Настройка… — Установка параметров для процедуры автокалибровки.

Установка… — Установка спектра контрольного источника для процедур автокалибровки.

Сброс… — Установка в начальные (нулевые) значения параметров дрейфа спектрометра.

Фон:

Контроль фона F7 — Контроль и установка спектра фона в программу обработки.

Настройка… — Установка параметров для процедуры контроля фона спектрометра.

Элементарный спектр:

Расчет по спектрам эталонов… — Расчет элементарного спектра нуклида (отклик спектрометра на излучение 1 Бк нуклида) по спектрам эталонов (образцовых мер активности).

Генерация по таблице линий

По моделям линий… — Расчет полных элементарных спектров нуклидов по библиотеке нуклидов и спектрам откликов спектрометра на квант излучения заданной энергии (моделям линий).

По моделям пиков… — Расчет элементарных спектров пиков (без спектра непрерывного рассеяния) гамма излучения нуклидов по библиотеке нуклидов, таблицам эффективности регистрации и моделям пиков заданной энергии.

Расчет моделей линий… — Расчет отклика спектрометра на квант излучения заданной энергии.

Расчет моделей пиков…	Расчет моделей пиков для различных типов линий гамма и рентгеновского излучения. Модель пика определяет форму пика, площадь модели пика устанавливается равной единице.
Список элем. спектров…	Просмотр и редактирование списка рассчитанных элементарных спектров.
Список моделей линий…	Просмотр и редактирование списка рассчитанных моделей линий.
Список моделей пиков…	Просмотр и редактирование списка рассчитанных моделей пиков.
Список таблиц эффективности…	Просмотр и редактирование списка рассчитанных таблиц эффективности регистрации.

Обработка:

Интеграл:

Площадь спектра… ***Ctrl+I***	Вычисление суммы каналов отмеченного маркерами участка спектра - «полная площадь». Вычисляется также и площадь трапеции, сформированной левым, правым маркером и соединяющей их прямой, - «фоновая площадь» и разность между общей и фоновой - «чистая площадь».
Энергия спектра… ***Alt+I***	Вычисление зарегистрированной энергии и мощности спектра в заданных маркерами границах.

Радиометрия:

Пуск ***Ctrl+J***	Определение интегральных характеристик излучения пробы: мощности излучения, «суммарной активности», «суммарной эффективной активности»[2].
Настройка…	Установка параметров процедуры вычисления «суммарной активности» пробы.
Декомпозиция… **Ctrl+P**	Разложение спектра на компоненты элементарных спектров нуклидов, расчет активности нуклидов.

Поиск пиков:

Поиск ***Alt+P***	Поиск и определение параметров пиков в линейчатом спектре, расчет спектра непрерывного рассеяния (комптоновское рассеяние гамма квантов и тормозное рентгеновское бета частиц).
Настройка…	Установка параметров процедуры поиска и определения параметров пиков.
Добавить пики… ***Alt+Ins***	Три последних пункта меню в группе «Поиск пиков» служат для ручного редактирования списка найденных пиков. Пункт «Добавить пики...» добавляет в список пики выделенной маркерами области спектра. Оператор

[2] **Суммарная активность** - условная активность пробы равная интенсивности радиоактивного излучения от пробы. Суммарная гамма активность - число гамма квантов излучаемое пробой за 1 секунду, суммарная альфа и бета, соответственно, - число альфа и бета частиц в единицу времени.
Суммарная эффективная активность – условная активность пробы, принимаемая равной активности излучения заданного нуклида при равной энергетической мощности излучения. Для гамма излучения в качестве нуклида сравнения используется Ra-226 в равновесии с дочерними нуклидами.

предварительно должен пометить левую и правую границу области пиков и установить подвижный маркер внутри отмеченной области. Процедура рассчитывает для выделенной области спектр непрерывного рассеяния и выделяет области отдельных пиков, если это мультиплет. Пики выделенной области будут добавлены в список пиков в том случае, если погрешность оценки их площади не превышает 100 %.

Удалить пик Alt+Del — Удалить из списка найденных в спектре пиков указанный подвижным маркером пик.

Удалить группу пиков… Shift+Del — Удалить из списка пиков пики выделенной маркерами области спектра.

Объединить пики — Объединить два ближайших к маркеру пика в мультиплете в один пик.

Сервис:

Архив измерений… — Вызов программы управляющей архивом результатов измерений.

Библиотека нуклидов… — Вызов программы создания и редактирования библиотек нуклидов.

Нормативы и константы… — Вызов программы создания и редактирования таблиц нормативов (СанПиН, НРБ и т.п.), физических констант связанных с химическим составом вещества пробы.

Обновить структуру файлов… — Вызов процедуры приведения устаревших форматов файлов, сформированных программой «СПЕКТР» (спектры, результаты обработки) или «SPECTRRAD», к текущей версии программы «SPECTRRAD».

Открыть спектр в окне "SpectrRad-V" — Открыть текущий спектр в окне приложения «**SpectrRad-V**» для визуализации и редактирования.

Параметры спектра… — Вызов процедуры просмотра и редактирования заголовка спектра.

Отчёт о результатах обработки спектра… — Вывод отчёта о результатах обработки спектра. Если отчёт был включён в документ Word, выводятся обе формы отчёта.

Найденные пики… — Вывод результатов поиска пиков в линейчатом спектре.

Параметры выбранного пика… — Вывод параметров указанного маркером пика в линейчатом спектре.

Расчёт функции… — Расчёт таблицы функции по формуле заданной оператором. Полученную таблицу можно использовать для формирования модели линии или в качестве вэйвлета для фильтрации спектров.

Лицензия… — Просмотр текущей лицензии, загрузка новой.

Режим доступа…	Установка ограниченного или полного доступа к процедурам и данным пакета «SPECTRRAD». Ограниченный доступ не позволяет проводить некоторые виды калибровок спектрометра и изменять параметры спектрометров и шаблонов обработки. Установка полного доступа требует ввода пароля запрашиваемого при первом запуске программы.

Вид:

Панель инструментов	Включение или выключение «панели инструментов» - набора «кнопок» под строчкой меню, обеспечивающей более удобный способ доступа к некоторым пунктам меню.
Полная	Полная панель.
Короткая	Короткая панель.
Шкала Y	Включение или выключение шкалы ординат для спектра.
Число и цвет спектров…	Установка значения максимально возможного количества одновременно визуализируемых спектров в окне программы и установка цвета для визуализируемых спектров, цвета фона окна, цветов вспомогательных графических элементов (границ областей, маркеров).
Шрифт отчёта декомпозиции…	Выбор шрифта для вывода отчёта о результатах обработки спектра в режиме наблюдения в главное окно программы.
Режим подсказки	Включить, выключить режим подсказки для кнопок инструментальной линейки.

Справка:

Содержание **F1**	Описание программы.
О программе…	Краткая информация о программе.

Клавиатура и мышь

Кроме функций, стандартных для клавиатуры в Windows (переключение между окнами, запись в буфер обмена копии экрана или активного окна, переключение между пунктами меню и т.д.), клавиатура в программе «SPECTRRAD» используется для следующих функций:

- В главном окне клавиши перемещения курсора влево или вправо служат для перемещения подвижного маркера.
- Ряд сочетаний клавиш зарезервирован в качестве «горячих клавиш» для некоторых пунктов меню (указаны в описании меню).
- В главном окне одновременное нажатие на клавиши перемещения курсора и одну из клавиш переключения регистров: «Shift», «Ctrl» или «Alt» вызывает изменение масштабов визуализации спектра.
- Одновременное нажатие на клавиши «F9»-«F12» и клавишу «Alt» для главного окна вызывает сдвиг спектра в окне влево, вправо, вниз или вверх.

- Нажатие на клавишу «Esc», как правило, вызывает возврат в предыдущее состояние: если была запущена какая-либо процедура, она прерывается, если нет активной процедуры связанной с активным окном, закрывается активное окно.
- «F1» служит для вызова справки для активного окна.

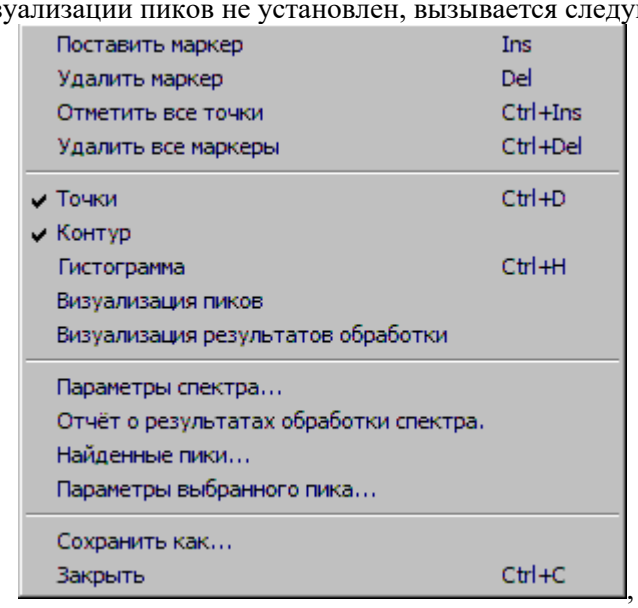
Мышь также, кроме стандартных функций (активация пункта меню, изменение размеров окна, операции с линейками прокрутки, вывод подсказок и т.д.), в программе «SPECTRRAD» может выполнять и ряд специальных операций:

- С помощью левой кнопки мыши оператор, указав на подвижный маркер, может перетащить его в требуемое место. Можно переместить маркер, дважды щелкнув левой кнопкой в нужном месте окна.
- Перемещение мышки в направлении направо и вниз с нажатой левой кнопкой в области спектра выделяет прямоугольник, щелчок внутри которого левой кнопкой мышки растягивает его на всё окно, меняя таким образом масштабирование спектра.
- Указав на какой-либо из открытых спектров и щелкнув левой кнопкой мыши, оператор переключится на выбранный спектр.
- Перемещение мышки в области шкалы X или Y при нажатой левой кнопке изменяет масштаб соответствующей шкалы.
- Двойной щелчок мышки в области шкалы X или Y изменяет тип соответствующей шкалы (плавающая или фиксированная для шкалы Y, шкала каналов или шкала энергий для шкалы X).
- Правая кнопка мышки активирует небольшое меню, содержимое которого меняется в зависимости от позиции указателя мыши и момента вызова.

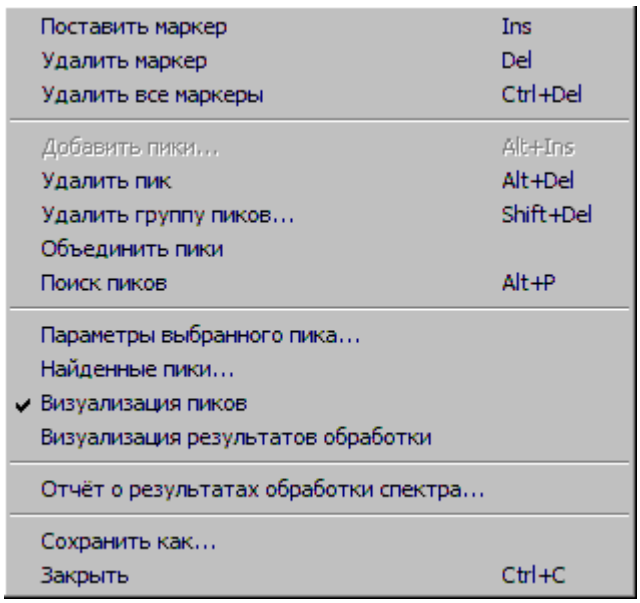
При большой растяжке спектра область прокрутки может быть меньше длины спектра. В этом случае сдвиг области прокрутки влево или вправо производится нажатием левой кнопки мышки на граничные квадратики линейки прокрутки: .

«Всплывающие» меню

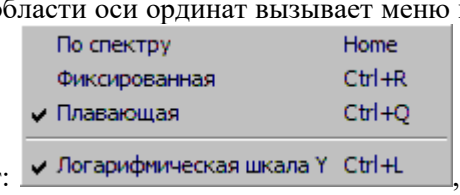
Щелчок правой кнопкой мышки вызывает появление «всплывающего» меню. Содержимое меню зависит от позиции указателя мыши в окне программы и состояния программы. Щелчок по окну визуализации спектров вызывает два варианта «всплывающего» меню в зависимости от того установлен или нет режим визуализации пиков (п. меню «***Визуализация / Визуализация пиков***»). В случае, если режим визуализации пиков не установлен, вызывается следующее меню:

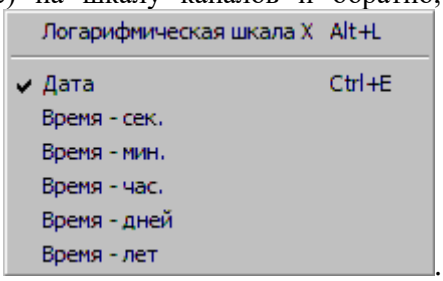


, а при установленном режиме визуализации пиков меню, позволяющее проводить редактирование списка найденных программой пиков:



Разрешение или запрет пунктов меню «**Добавить пики...**», «**Удалить пик**», «**Удалить группу пиков...**» и «**Объединить пики**» зависит от положения маркера и выделенной области спектра. Если в выделенной области нет найденных программой пиков, разрешена операция добавления пиков и, соответственно, если в выделенной области присутствуют пики, разрешены операции удаления пиков.

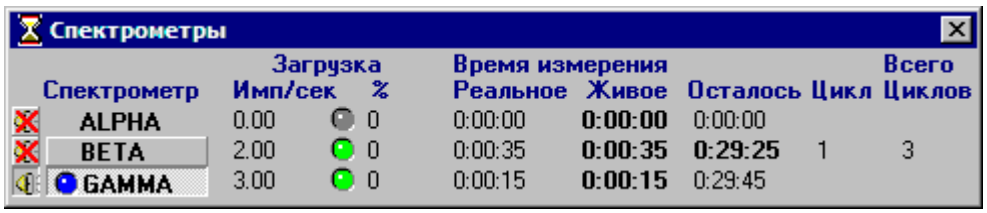
Щелчок правой кнопкой мышки в области оси ординат вызывает меню позволяющее изменить тип масштаба шкалы ординат: 

, а щелчок по оси абсцисс - меню позволяющее переключать шкалу со шкалы энергий (или другой размерности шкалы абсцисс) на шкалу каналов и обратно, с линейной шкалы на логарифмическую и обратно: 

.

Окно «Спектрометры»

Пункт меню «***Устройство / Состояние***» (кнопка панели инструментов) служит для включения и выключения дополнительного окна - **«Спектрометры»**, информирующего оператора о состоянии и времени измерений подключенных спектрометров. Окно «Спектрометры» автоматически включается и при запуске измерений в любом из подключенных трактов. В том случае, если в системе включены, например, три спектрометра: «ALPHA», «BETA» и «GAMMA», окно может иметь следующий вид:



Слева кнопки включения/выключения звуковой схемы сопровождения некоторых событий (завершение измерений, перегрузка или резкое изменение загрузки) в спектрометре - . Нажатое состояние кнопки соответствует включенной звуковой схеме.

Спектрометр, спектр которого является рабочим (информация о спектре выводится в строке состояния), отмечается нажатым состоянием клавиши с названием спектрометра и синим индикатором .

«**Загрузка**» - число импульсов регистрируемых спектрометром в единицу времени (**Имп/сек**) и отношение в процентах «мёртвого» времени спектрометра к реальному (**%**). Загрузка, как правило, связана с активностью пробы, но может говорить и о неисправности спектрометра - регистрации большого количества импульсов собственного шума спектрометра. Индикатор загрузки имеет четыре состояния:

- измерения в спектрометре остановлены,
- измерения запущены, загрузка не превышает установленной нормы,
- измерения запущены, загрузка незначительно превышает установленную норму,
- измерения запущены, загрузка значительно превышает установленную норму.

Время выводится в формате: часы:минуты:секунды. «**Живое**» время измерения меньше «**Реального**» на время, которое спектрометр затрачивает на обработку импульсов - «мёртвое» время спектрометра.

Колонка «**Осталось**» - время («реальное» или «**живое**» - в зависимости от заданного при запуске измерений выводится обычным или жирным шрифтом), которое осталось до окончания измерений при обычных измерениях и до конца текущего цикла при циклических. Если включён режим паузы или задержки начала измерений, в колонке выводится время оставшееся до начала измерений.

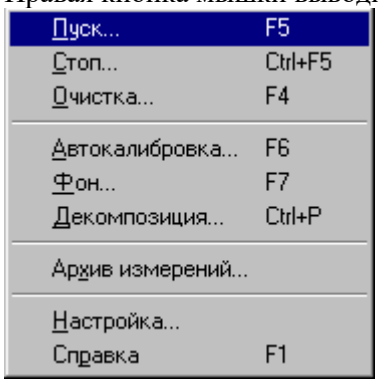
«**Цикл**» - номер текущего цикла при циклических измерениях.

«**Всего циклов**» - общее количество циклов при циклических измерениях.

Щелчок левой кнопкой мышки по названию спектрометра выводит спектр данного спектрометра в главное окно программы и делает его активным.

Двойной щелчок выводит окно запуска (если измерения не запущены) или остановки (если измерения уже проводятся) измерений.

Правая кнопка мышки выводит небольшое меню,



которое дублирует часть пунктов главного меню программы (пункт «***Настройка***» дублирует пункт главного меню «***Устройство / Настройка / Контроля загрузки…***»). Такое дублирование позволяет проводить рутинные измерения, свернув главное окно программы и освободив таким образом «Рабочий стол» «Windows».

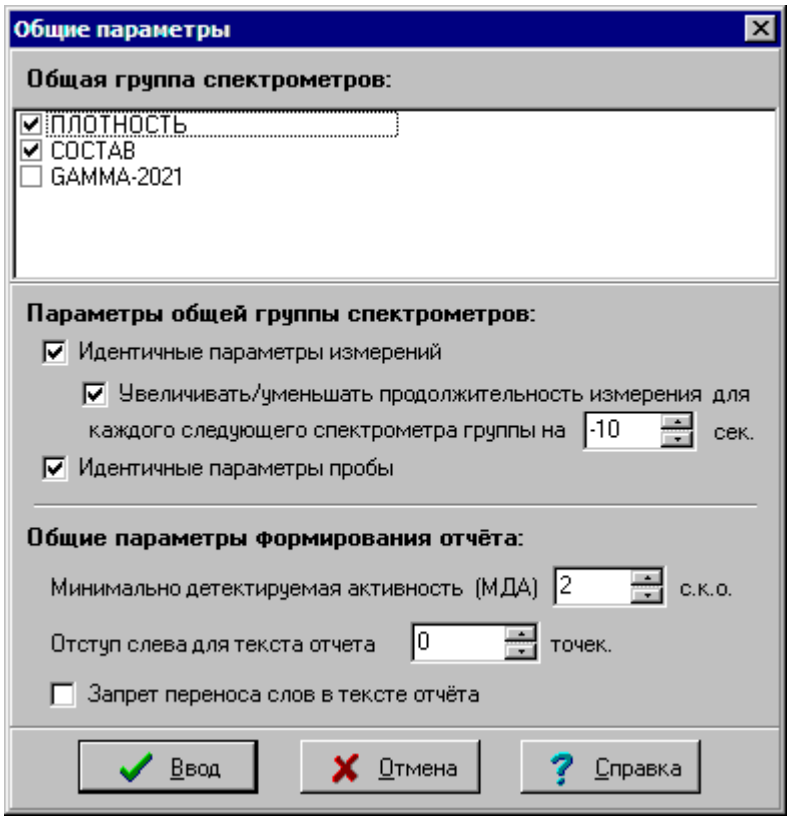
Проведение измерений

Создание общей группы спектрометров

Часто для повышения эффективности регистрации излучения спектрометром, для реализации функций совпадений, антисовпадений, 2d и 3d спектрометрии, для определения плотности пробы к спектрометру подключается несколько детекторов, которые должны работать одновременно: по одной команде оператора должны запускаться измерения во всех детекторах иногда и одновременно должны останавливаться.

В ракете «SPECTRRAD» для этих целей служит процедура создания общей группы спектрометров, которая включена в функцию настройки общих параметров (пункт главного меню «***Устройство / Настройка /Общих параметров...***»).

При этом на экране появляется окно со списком подключённых спектрометров, параметров общей группы спектрометров и рядом общих параметров используемых для формирования отчётов:



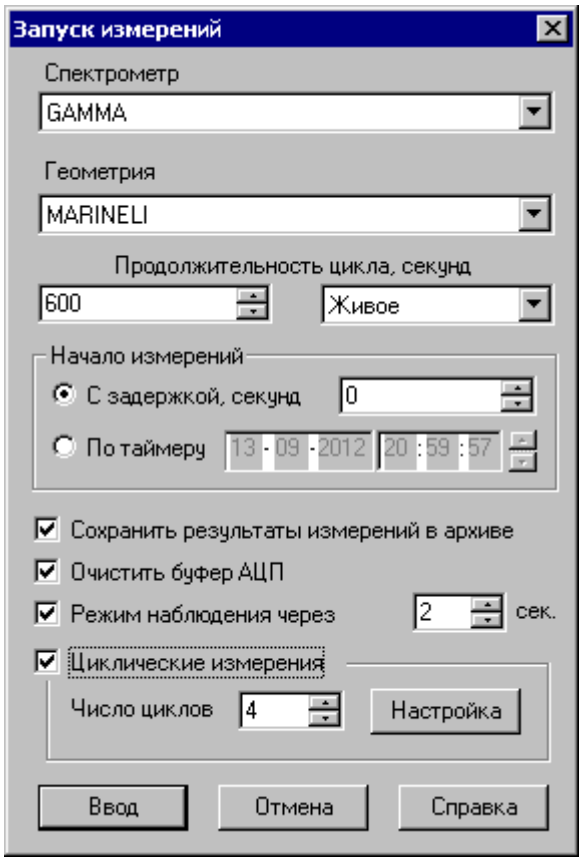
Общая группа спектрометров - группа в которой все операции связанные с запуском измерений синхронизированы – производятся одновременно. Остановка измерений оператором будет также синхронной. Завершение измерений будет одновременным, если установлен флажок «**Идентичные параметры измерений**». В этом случае все параметры измерений в группе будут идентичными. Если при этом установлен флажок «**Увеличивать/уменьшать продолжительность измерения для каждого следующего спектрометра группы на n сек.**» (**n** – заданное значение, отрицательное значение **n** уменьшает продолжительность измерений), параметры измерений в спектрометрах группы будут отличаться длительностью набора спектра. Это позволяет упорядочить обработку спектров, что бывает важно при реализации последовательной обработки спектров в группе спектрометров. Например, при Байесовском оценивании, когда результаты измерений в предыдущем спектрометре используются как априорные данные для обработки спектра в текущем спектрометре.

Если установлен флажок «**Идентичные параметры пробы**» ввод параметров пробы будет производиться только для одного спектрометра из группы. Ведённые данные будут использованы и для других спектрометров группы.

Для создания общей группы спектрометров оператор должен отметить галочками нужные спектрометры. Создание и редактирование группы доступно только в режиме полного доступа.

Запуск измерений

Пункт главного меню «***Устройство / Измерение / Пуск...***», щелчок по кнопке , или нажатие на клавишу «**F5**» вызывает программу запуска измерений. При этом на экране появляется окно следующего вида:



Оператор имеет возможность выбрать спектрометр и геометрию измерений, щелкнув мышкой по кнопке соответствующей панельки «**Спектрометр**», «**Геометрия**» и выбрав мышкой необходимую строчку в открывшемся списке.

Задать время измерения можно непосредственно, введя его значение, или модифицировать установленное предварительно, пользуясь кнопками прокрутки . Панелька справа от поля ввода времени позволяет выбрать режим нормировки: по «**живому**» или «**реальному**» времени. Нормировка по «живому» времени увеличивает время измерения относительно «реального» (астрономического) времени на время, в течение которого спектрометр был занят на обработку импульсов («мёртвое» время спектрометра). При задании нулевого значения времени будет включён режим набора без ограничения времени (при этом по истечении 4294967 секунд возникнет переполнение разрядной сетки для переменной, в которой хранится время измерения, и оно будет потеряно).

В группе «**Начало измерений**» оператор может задать либо время задержки до начала измерений (выбор пункта «**С задержкой, секунд**»), либо дату и время запуска измерений (выбор пункта «**По таймеру**»). Это может быть удобно, если требуется

задержка от момента установки пробы на детектор до начала измерений, для того чтобы закончились какие-либо переходные процессы (прогрев аппаратуры, распад короткоживущих нуклидов).

Оператор может установить, щелкнув мышкой по соответствующему квадратику, или сбросить ряд флажков определяющих режим измерений:

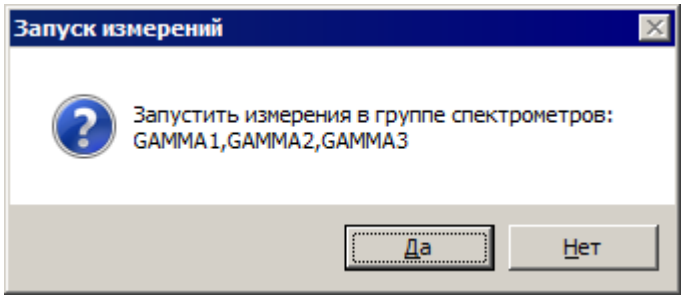
- ***Сохранить результаты измерений в архиве*** - при установке флажка измеренный спектр, по окончании измерений, будет записан в архив результатов измерений. В архиве будет сохранён и соответствующий на момент измерений спектр фона. В том случае если непосредственно после измерения будет проводиться обработка спектра, измеренный спектр можно сохранить и после обработки. В этом случае установка флажка не требуется.
- ***Очистить буфер АЦП*** - требование очистить память спектрометра перед началом измерений (старые данные уничтожены, начнутся новые измерения). Если флажок сброшен, память обнуляться не будет - измерения будут продолжены (новые измерения будут суммированы со старыми). Очевидно, что режим суммирования допустим, если продолжаются измерения той же самой пробы.
- ***Режим наблюдения через*** **n** ***сек***. - при установке флажка спектр во время измерений будет регулярно, через заданное время, считываться для визуализации.
- ***Циклические измерения*** - установка флажка задаёт режим циклических измерений, при котором измерения пробы будут повторяться заданное ***число циклов***, а результирующий (суммарный) спектр или спектры каждого цикла сохраняться в архиве измерений. При этом может проводиться автоматическая коррекция дрейфа спектрометра для каждого цикла измерений. Параметры циклических измерений можно изменить, щелкнув по кнопке Настройка (предварительная установка параметров производится вызовом пункта меню «***Устройство / Настройка / Циклических измерений...***»). Действие флажка «***Очистить буфер АЦП***» в режиме циклических измерений несколько отличается от обычного. В том случае, если флажок сброшен, накопленные данные будут записаны (добавлены) в спектр накопления, память спектрометра очищена и начнётся второй цикл измерений. В случае если он установлен, память будет обнулена, начнется первый цикл измерений и по окончании цикла накопленный спектр запишется в файл для накопления.

Необходимо учитывать некоторые особенности процедуры запуска измерений для минимизации затрат по вводу параметров измеряемой пробы. При обычном запуске измерений (из главного окна программы) программа подставляет в табличку для ввода параметров значения последней измеренной пробы для текущего спектрометра. Выбор другого спектрометра в табличке запуска измерений не изменяет этих значений, поэтому, если мы собираемся измерять пробы из одного и того же материала на разных спектрометрах, удобнее переключаться на другой спектрометр после нажатия на кнопку запуска измерений. Например: запустив измерения в бета спектрометре, для запуска измерений пробы из того же материала в гамма спектрометре, не переключаясь на гамма спектрометр, щелкните по клавише запуска измерений и только в табличке «Запуск измерений» переключитесь на гамма спектрометр - при этом вам придется скорректировать только вес пробы и геометрию измерений (остальные, подставленные программой значения, будут такими же).

Запустить измерения можно также и из окна «**Спектрометры**», вызвав пункт всплывающего меню «***Пуск...***» и из окна «**Архив измерений**» (пункт меню «***Команды / Запустить измерение...***», кнопка). Запуск измерений из архива результатов подставляет все значения выбранной пробы. Оператор может либо продолжить её измерения (установив флажок циклических измерений), либо, скорректировав данные, запустить измерения новой пробы.

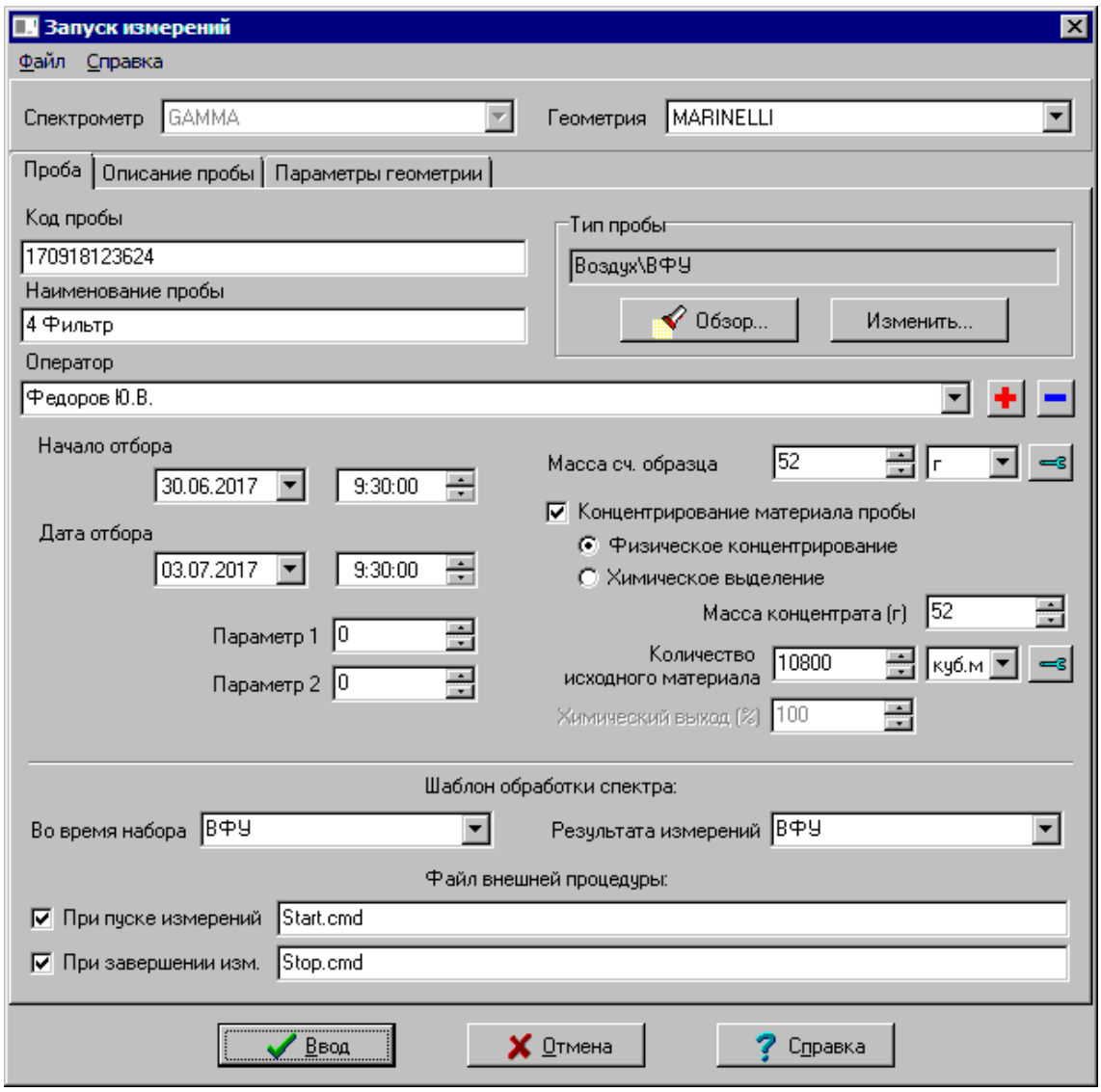
Нажатие на клавишу «**Ввод**» закрывает первое окно и выводит на экран новое.

Если определена общая группа спектрометров, появится окно для подтверждения запуска измерений в группе спектрометров. Например:



При выборе ответа «**Да**» измерения будут запущены во всех спектрометрах группы, при ответе «**Нет**» - только в выбранном спектрометре.

После этого на экране появится окно для ввода параметров пробы:



Оператор может заполнить, при необходимости, поля формы информацией о пробе, скорректировать, если необходимо, геометрию измерений.

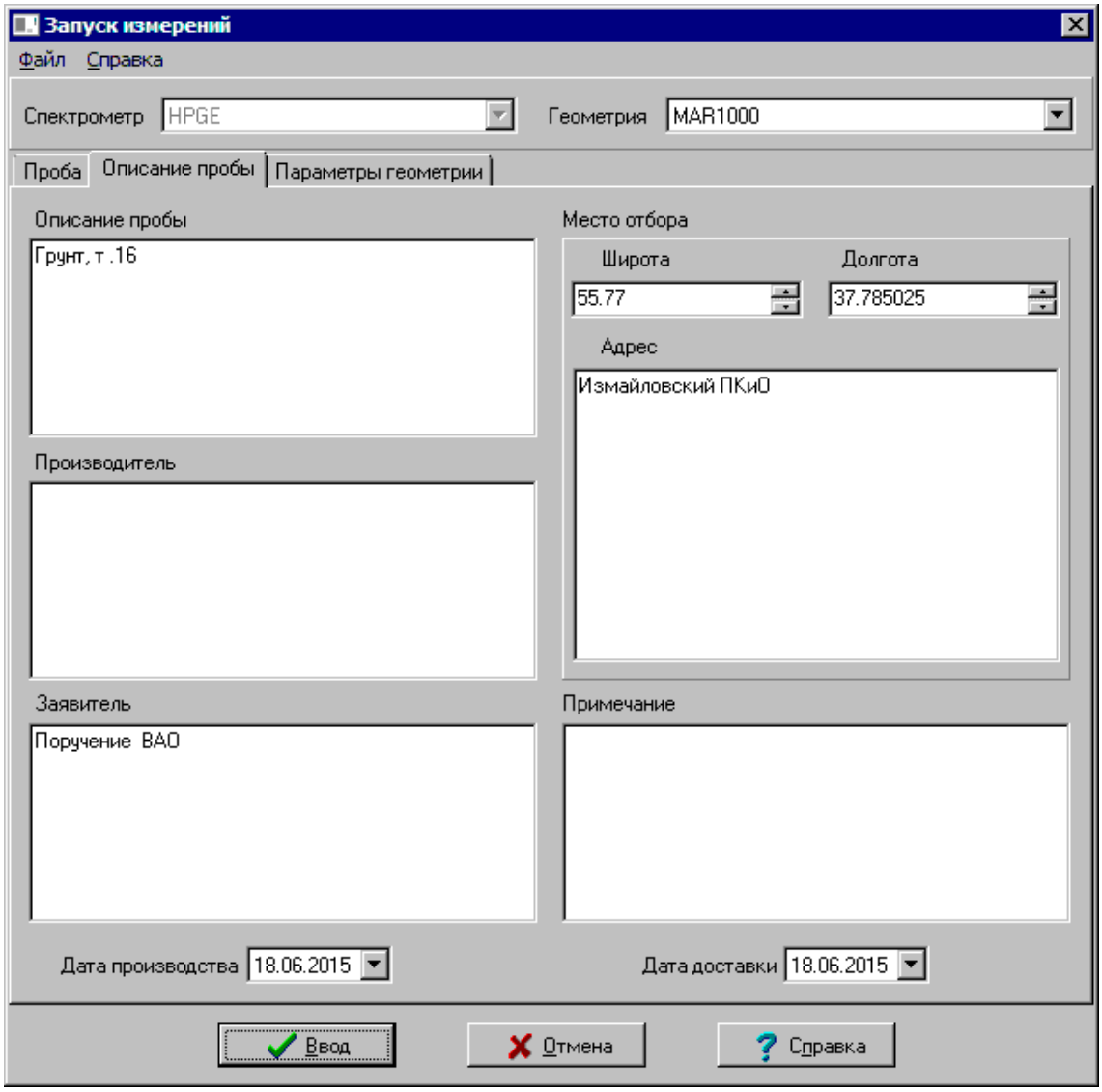
Форма содержит две страницы параметров пробы «**Проба**» и «**Описание пробы**». Первая страница содержит основные графы описания пробы, графу «**Оператор**» для

ввода данных о лаборанте, проводящем измерения, два списка с шаблонами обработки спектра и два поля для вызова внешней процедуры: при запуске измерений и по завершению измерений.

Шаблон обработки, если указан, запускает процедуру обработки по заданному в шаблоне сценарию либо во время набора, либо по окончанию измерений или цикла измерений.

Внешняя процедура может быть строкой вызова внешней программы с необходимыми параметрами. Например: «c:\My programs\program.exe par.txt 34» или командным файлом (.cmd) или файлом пакетной обработки (.bat), содержащим вызов внешней процедуры.

Вторая страница содержит графы для ввода дополнительной информации о пробе и имеет вид:



Графы «**Код пробы**», «**Наименование пробы**», «**Производитель**», «**Заявитель**», «**Описание пробы**», «**Место отбора**», «**Примечание**», «**Параметр 1**» и «**Параметр 2**» могут содержать произвольную информацию о пробе, которая будет включена в архив результатов измерений и в отчет о результатах обработки. Названия граф и само наличие их на форме задаются при настройке архива результатов измерений, назначенного для данного спектрометра и геометрии измерений (см. «Архив результатов измерений»,

«Настройка архива»). Поэтому, приведённая в примере, графа «**Параметр 1**» может быть, например, графой «**Глубина скважины (м)**» или отсутствовать на форме.

Если оператор оставил первую графу («**Код пробы**») страницы «**Проба**» пустой, программа запишет в неё дату запуска измерений в виде числа, например **170702195311**.

Графа «**Тип пробы**» связана с информацией о нормативах СанПиН, НРБ и т.п. и химическим составом вещества пробы и должна содержать полный путь к файлу соответствующего норматива, начиная с папки «**Все типы проб**» (но не включая её) и, соответственно, не должна включать символов, запрещенных в названиях файлов и иметь структуру пути к файлу. Например: **Пищевые продукты\Масло растительное (все виды)**. Прямой ввод типа пробы не разрешен. Рекомендуется использовать кнопку Обзор... для выбора типа пробы из существующих типов проб, а новые типы проб создавать, используя процедуру «**Нормативы**» (пункт меню «***Сервис / Нормативы и константы...***»). При желании можно использовать и прямой ввод типа пробы - для этого необходимо дважды щелкнуть мышкой по графе «**Тип пробы**» или нажать клавишу «**F4**». В том случае, если данный тип пробы отсутствует в папке «**Все типы проб**», программа вызовет процедуру создания норматива для нового типа проб. Программу создания и редактирования нормативов и констант можно вызвать, нажав на клавишу Изменить...

Графа «**Масса сч. образца**» должна содержать информацию о массе (кг, г или мг) счётного образца - образца, который будет измеряться на данном спектрометре, в заданной геометрии.

В том случае, если для приготовления счётного образца использовалось предварительное концентрирование или разбавление материала пробы, оператор должен отметить «галочкой» пункт «**Концентрирование материала пробы**» и ввести данные в графы «**Масса концентрата**» и «**Количество исходного материла**», которые определяют коэффициент концентрирования (разбавления) исследуемого материала. Масса концентрата вводится в тех же единицах, что и масса счётного образца, а количество исходного материала может быть как массой, так и объёмом (задаётся в куб.м, л, мл) или площадью пробы (кв.м, кв.см, кв.км). При этом рассчитанная активность будет нормирована на единицу веса, объёма или площади. Если масса счётного образца не задана или равна нулю и проба не концентрирована, нормировка выполняться не будет. Если масса счётного образца не задана и проба концентрирована, будет выполнена нормировка на количество исходного материала. В этом случае всё количество концентрата должно быть помещено в счётный образец.

Вид концентрирования «**Физическое концентрирование**» (т.е высушивание, выпаривание, озоление и т.п.) и «**Химическое выделение**» определяет элементный состав счётного образца заданный в файле нормативов и констант связанных с данным типом пробы и требуется для корректного учёта поглощения излучения в веществе пробы. При **химическом выделении** пробы оператор должен ввести **химический выход** выделяемого вещества в процентах, необходимый для корректного расчёта коэффициента концентрирования (при **физическом концентрировании** считается, что всё вещество переходит в концентрат).

Отметить пункт «**Концентрирование материала пробы**», «**Физическое концентрирование**» и ввести необходимые данные о массе концентрата и количестве исходного материла необходимо и в том случае, если концентрирования или разбавление материала не было, но требуется расчёт удельной активности не на массу, а на объём или площадь пробы, которой соответствует заданная масса счётного образца или требуется расчёт полной активности пробы частью которой является счётный образец.

Графа «**Окончание отбора**» используется для перерасчета активности на заданную дату - дату отбора. При этом программа учитывает и количество високосных лет, и ситуацию с переводом времени на летнее или зимнее. Название графы является настраиваемым (её можно назвать, например, «**Дата отбора**»), но назначение неизменно.

Назначение и название графы «**Начало отбора**» так же является настраиваемым. Значение графы, кроме отчёта, доступно в программируемом калькуляторе и её назначение определяется в программе калькулятора (См. «Калькулятор»).

Графа «**Место отбора**» может содержать и географические координаты места отбора – **широту** и **долготу,** задаваемую в градусах. Поле «**Адрес**» - адрес или описание места отбора.

Оператор может задать и программы обработки спектра в процессе наблюдения за набором и по окончании набора, выбрав необходимые шаблоны из двух списков «**Шаблон обработки спектра**: «**Во время набора**» и «**Результата измерений**». Автоматическая обработка спектров имеет ряд ограничений и особенностей:

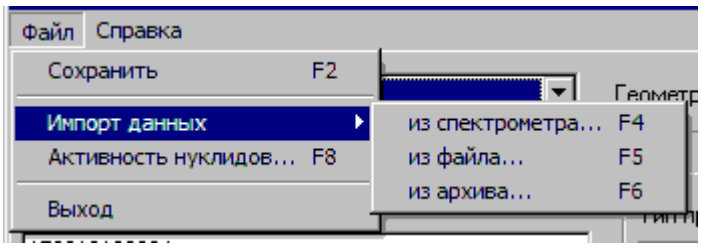
- нельзя задавать шаблоны обработки, требующие указания оператором априорных данных в архивах измерений;
- шаблоны, требующие вмешательства оператора, могут приостановить набор спектра;
- не рекомендуется корректировать энергетический дрейф спектрометра по результатам обработки спектра **во время набора**, поскольку малая статистика в начале измерений не позволяет корректно оценить энергетический дрейф;
- вывод результатов обработки в режиме "**Во время набора**" происходит в правый верхний угол главного окна программы "SPECTRRAD" независимо от установки флажка "**Вывести отчёт на экран**" шаблона декомпозиции;
- обработка **результата измерений** в режиме циклических измерений происходит после каждого цикла и результаты сохраняются в архиве без вывода на экран независимо от установки флажков "**Вывести отчёт на экран**" и "**Сохранить отчёт в архиве**" шаблона декомпозиции.

Количество вводимых символов в некоторых графах не может превышать определенного числа символов:

Графа	**Максимальное количество символов**
Код пробы	***63***
Наименование пробы	***63***
Оператор	***63***
Тип пробы	***255***
Описание пробы	***127***
Производитель	***127***
Заявитель	***127***
Место отбора	***255***
Примечание	***127***

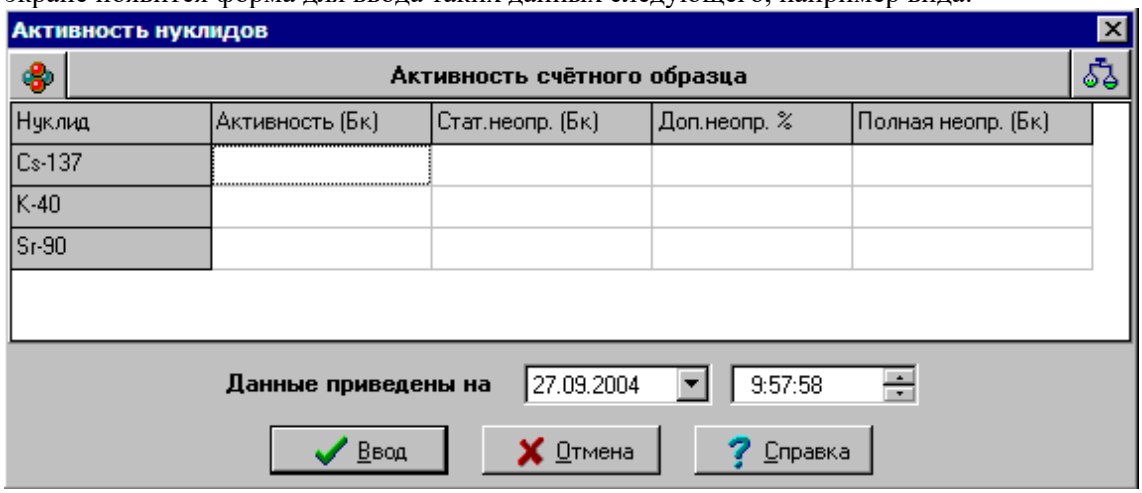
Ряд полей (граф) описания пробы может объединяться (см. «**Настройка архива**»). В этом случае объединённое поле будет иметь суммарную ёмкость. Можно объединить «**Код пробы**» и «**Наименование пробы**» - суммарная ёмкость графы «**Код пробы**» составит 127 символов. Можно объединить «**Описание пробы**» и «**Производитель**» - длина поля «**Описание пробы**» будет равна 255 символам. Можно объединить «**Описание пробы**», «**Производитель**» и «**Заявитель**» - длина поля «**Описание пробы**» будет равна 383 символам. Можно объединить «**Производитель**» и «**Заявитель**» - длина поля «**Производитель**» будет равна 255 символам. Можно объединить «**Место отбора**» и «**Примечание**» - длина поля «**Место отбора**» будет равна 383 символам.

Форма имеет небольшое меню:



Пункт меню «***Файл / Импорт данных***» позволяет импортировать данные в форму из другого спектрометра, файла спектра или из выбранной записи архива, что позволяет экономить время на заполнение полей формы.

Пункт меню «***Активность нуклидов***» позволяет ввести априорные данные по активностям нуклидов, которые будут использованы при обработке спектров по шаблону обработки результата измерений заданному в параметрах пробы, если этот шаблон требует ввода таких данных. Или эти данные будут использованы как данные сравнения при формировании протоколов поверки или построении карт Шухарта. При этом на экране появится форма для ввода таких данных следующего, например вида:



Оператор должен ввести данные об активностях нуклидов и погрешностях их определения. Погрешность (неопределённость) включает две составляющие: статистическая неопределённость и дополнительная неопределённость, определяемая в процентах к активности. Полная неопределённость не вводится оператором, а рассчитывается программой из значений статистической и дополнительной неопределённости. В качестве случайной составляющей общей неопределённости (статистической неопределённости) используется 95% доверительный интервал оценки активности. Отсутствие данных в колонках активности и статистической неопределённости означает отсутствие априорных данных об активности данного нуклида.

В качестве априорных данных при обработке спектра используются значения статистической неопределённости и значения активностей нуклидов, усреднённые за время измерения пробы. Поэтому введенные оператором значения будут пересчитаны на дату начала измерений обрабатываемой пробы и из этих значений будут рассчитаны средние за время измерения пробы активности по таблице нуклидов и параметрам обработки заданном в шаблоне обработки. Поскольку при пересчёте активностей на требуемую дату и расчёте средних за время измерения активностей учитываются процессы накопления и распада нуклидов в цепочках распада, необходимо указывать активности всех нуклидов используемых цепочек распада.

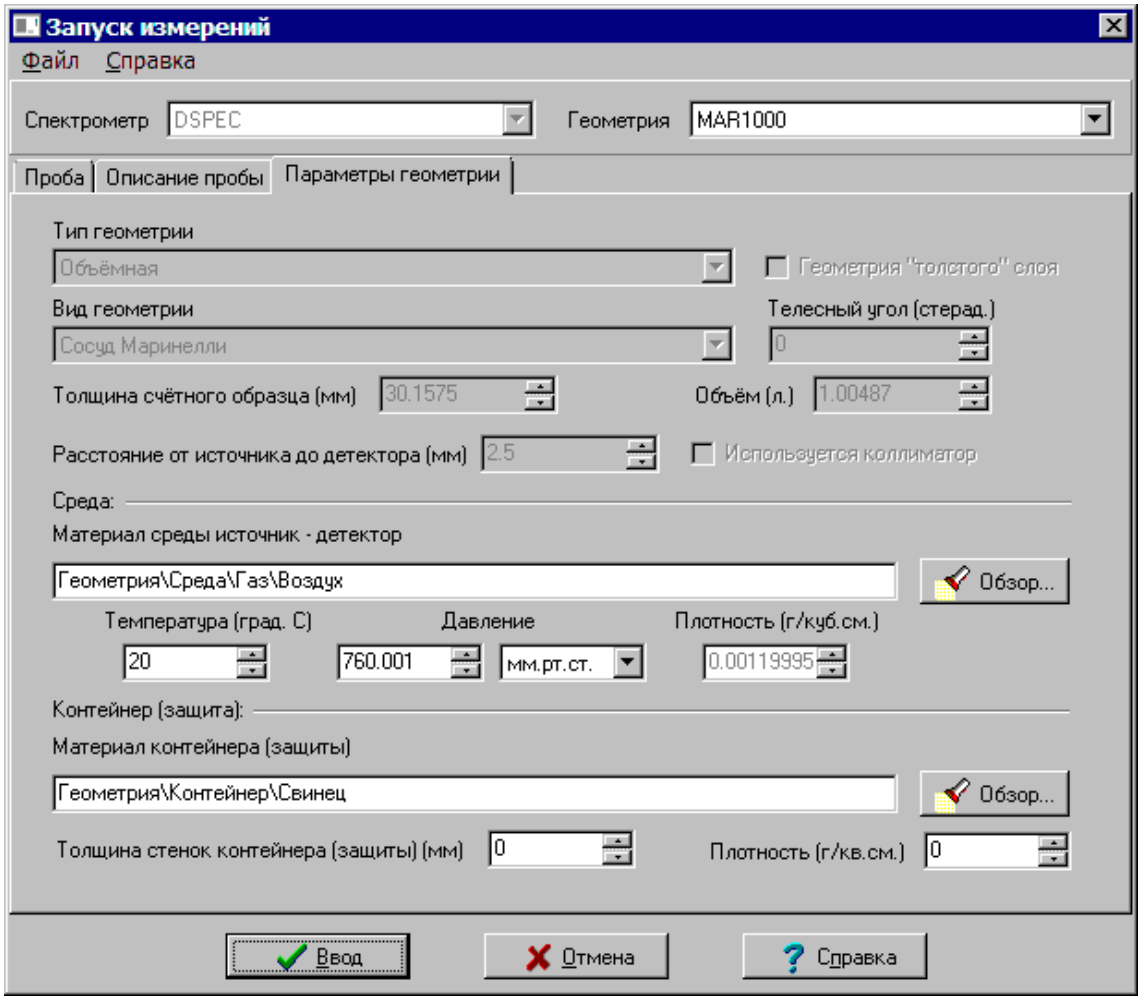
Клавиша **Активность счётного образца** в табличке ввода значений позволяет вводить данные либо об активностях нуклидов в веществе счётного образца (при отжатом состоянии клавиши), либо в исходном материале (при

нажатом состоянии клавиши **Активность исходного вещества**). При этом необходимо учитывать, что программа пересчитывает значения активностей на величину исходного материала пробы. Это позволяет использовать результаты измерений нативных проб при обработке счётных образцов из концентрированного вещества.

Клавиша позволяет вводить данные либо в значениях полной активности счётного образца или всего исходного вещества использованного для концентрирования пробы (при отжатом состоянии клавиши), либо в значениях удельной активности счётного образца или исходного материала (при нажатом состоянии клавиши).

Клавиша позволяет добавить в итоговый отчёт данные о дополнительных нуклидах или сведения о суммарной альфа, бета или гамма активности пробы, не включённые в используемый шаблон декомпозиции.

Третья страница формы «**Параметры геометрии**» позволяет редактировать изменяемые параметры геометрии измерений.



Оператор может изменить параметры среды, в которой находятся детектор и источник излучения: материал среды, температуру и давление среды, параметры контейнера (защиты) в которой находится источник. Если установлена геометрия с изменяемым расстоянием источника от детектора, оператор должен задать текущее значение расстояния от источника до детектора в мм. Расстояние включает и толщину защиты (контейнера).

По нажатию на клавишу «**Ввод**» измерения в выбранном спектрометре будут запущены. Если указанная в параметрах пробы процедура обработки спектра по завершению измерений требует ввода априорных данных оператором, а такие данные ещё не введены, программа запросит ввод таких данных и запустит измерения по завершению ввода.

В целях экономии времени можно не вводя данных по пробе нажать «**Ввод**», а все необходимые данные ввести уже при запущенных измерениях, вызвав пункт меню «***Файл / Открыть / Спектрометр...***» или нажав на кнопку .

Запущенные измерения можно остановить в любой момент, вызвав пункт меню «***Устройство / Измерение / Стоп...***» (кнопка) или начать заново, очистив память спектрометра (пункт меню «***Устройство / Измерение / Очистка...***»).

Режим циклических измерений

В случае если предполагаемое время измерения в несколько раз превышает среднее время измерения пробы, дрейф параметров спектрометра в течение времени измерения пробы может существенно исказить спектр. В этом случае рекомендуется пользоваться процедурой циклических измерений с коррекцией энергетического дрейфа (установка флажка «***Циклические измерения***» в табличке «***Запуск измерений***»).

Циклические измерения рекомендуется использовать и в том случае, если существует вероятность аварии спектрометра, так как они позволяют в случае аварии (пропало питание, безнадёжно завис компьютер и т.п.) сохранить накопленный спектр, поскольку все циклы, накопленные к моменту аварии, уже сохранены в архиве измерений и потерян будет только последний цикл. После устранения аварии (в принципе, в любое время, если и не было аварии) оператор может продолжить измерения пробы в циклическом режиме.

Режим циклических измерений необходим при проведении измерений группы проб с автоматическим сменщиком проб. Управление сменщиком проб осуществляется из процедуры обработки спектра текущего цикла.

Режим циклических измерений необходим и при организации режима контроля (мониторинга) технологических процессов.

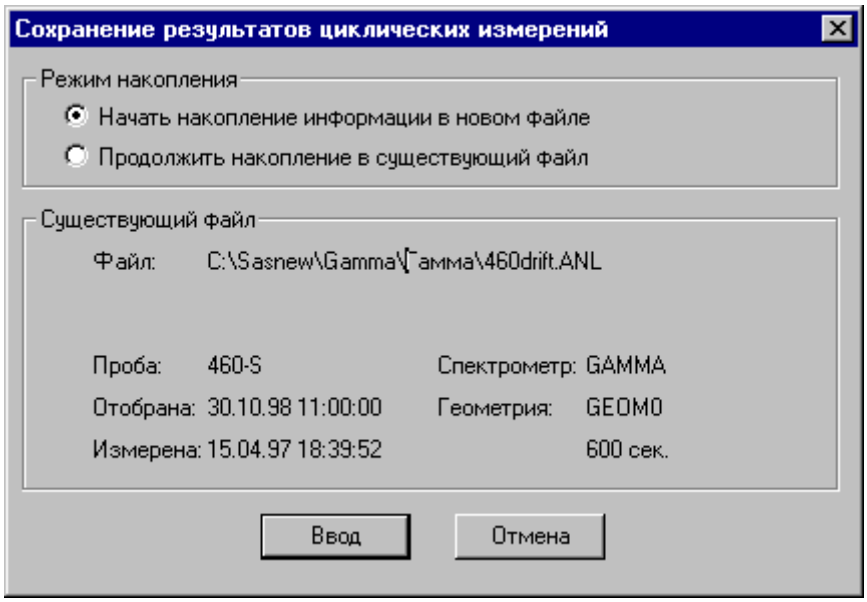
Кроме того, циклические измерения с установленным режимом сохранения всех спектров, позволяют реализовать схему амплитудно-временного анализа при измерениях проб, содержащих короткоживущие нуклиды.

Существует возможность обработки спектра после каждого цикла (при задании шаблона обработки в параметрах пробы), что может быть полезно при экспресс-анализе нуклидного состава, анализе изменения нуклидного состава, работе с автоматическим сменщиком проб или режиме мониторинга технологического процесса. В том случае, если коррекция дрейфа по процедуре сравнения накопленного спектра и спектра последнего цикла невозможна из-за изменчивости спектра, коррекцию дрейфа спектрометра при циклических измерениях можно проводить после каждого цикла по результатам обработки суммарного спектра.

Программа циклических измерений требует задания длительности цикла и числа циклов.

В случае если циклические измерения используются для коррекции дрейфа спектрометра, длительность цикла должна быть компромиссом между требованием накопления достаточной для процедуры коррекции дрейфа статистики и требованием быть покороче, чтобы минимизировать дрейф в течение цикла.

Если запуск измерений производится из окна архива измерений, оператор может продолжить накопление информации в файл спектра выбранной записи архива, что позволяет провести дополнительные измерения пробы. При этом процедура запуска измерений выводит на экран дополнительное окно:

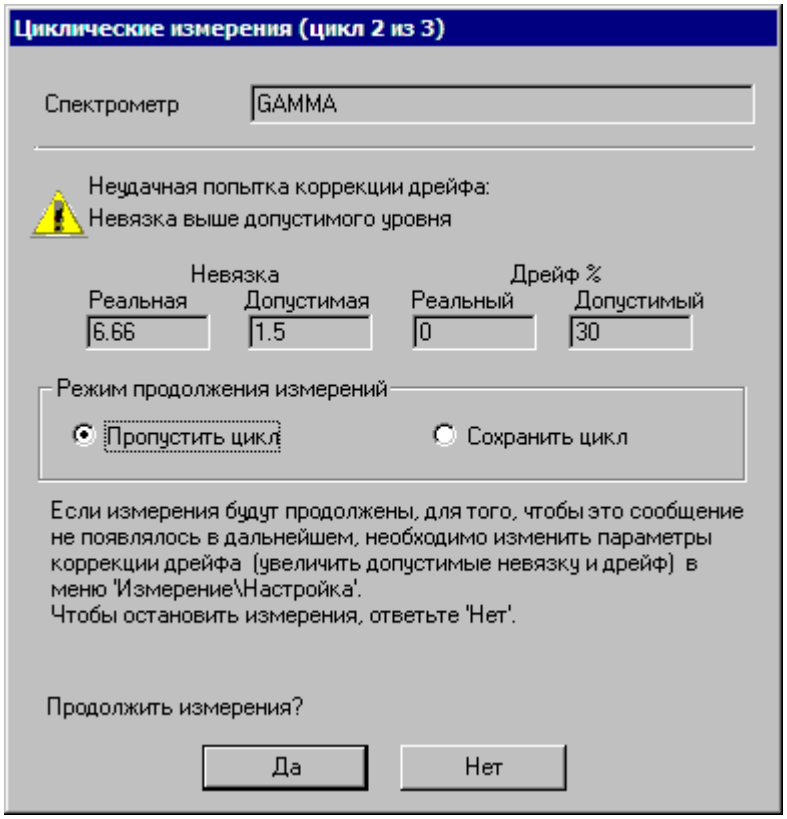


Оператор может выбрать **режим накопления:** либо **начать накопление информации в новом файле** - запустить новые измерения, либо **продолжить накопление в существующий файл** - продолжить измерения.

Параметры циклических измерений предварительно устанавливаются вызовом пункта меню «***Устройство / Измерение / Настройка...***» (см. «Настройка режима циклических измерений»).

Перед началом циклических измерений рекомендуется провести процедуру энергетической автокалибровки спектрометра.

Во время проведения циклических измерений с включённым режимом сравнения спектров (накопленного спектра и спектра последнего цикла), если сравнение не удовлетворяет заданным параметрам, измерения приостанавливаются, и на экран выводится окно следующего, например, вида:



Оператор может продолжить измерения, выбрав ответ «**Да**» и выбрав **режим продолжения измерений**. При выборе режима «**Сохранить цикл**», спектр последнего цикла будет сложен с уже накопленным спектром, несмотря на плохие результаты сравнения, и измерения будут продолжены. При выборе режима «**Пропустить цикл**», спектр цикла не будет сложен с накопленным спектром.

При отказе от продолжения измерений спектр не прошедшего сравнения цикла будет сохранён в архиве в виде отдельного файла и измерения будут остановлены.

Автокалибровка

Параметры спектрометрических трактов со временем могут изменяться (дрейфовать), поэтому они **требуют периодического контроля и калибровки** по контрольному (калибровочному) источнику по процедуре автоматической калибровки (пункт меню «***Калибровка / Автокалибровка / Пуск автокалибровки...***», кнопка). Процедура автокалибровки запускает измерение контрольного источника на заданное время и по завершению измерений проводит обработку накопленного спектра. Рекомендуется следующая периодичность проведения автокалибровки:

- Альфа радиометры требует энергетической калибровки перед каждым измерением пробы. Рекомендуемый контрольный источник - тонкий источник Pu-239 (10 - 50 Бк.).
- Бета тракт требует энергетической калибровки перед каждым измерением пробы. Рекомендуемый контрольный источник - точечный источник Sr-90 (500 - 3000 Бк.).
- Гамма тракты и сцинтилляционные (с NaI(Tl), CsI(Tl) детектором), и полупроводниковые (с HPGe или Ge(Li) детектором) требует ежедневной

энергетической калибровки после включения и прогрева аппаратуры. Рекомендуемый контрольный источник - Th-232 или Eu-152 (500 - 5000 Бк.).

Для оценки долговременной стабильности параметров тракта при поверке спектрометра рекомендуется проводить автокалибровку и в конце рабочего дня, по окончании измерений.

Все тракты, кроме периодической калибровки, требуют настройки и перекалибровки спектрометра при значительных изменениях параметров общего дрейфа и дрейфа разрешения. (Для сцинтилляционных гамма трактов - при величинах общего энергетического дрейфа более 100%). В этом случае можно скорректировать изменившийся коэффициент усиления и (или) нуль шкалы перенастройкой параметров АЦП (пункт меню «***Устройство/Спектрометр/Установить…***»), или воспользоваться предусмотренными в аппаратуре устройствами регулировки.

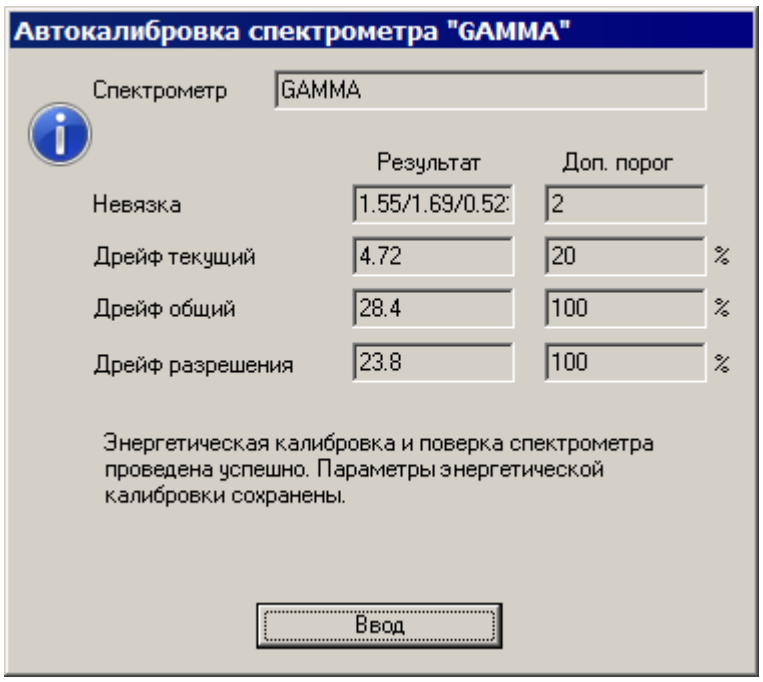
Для проведения автокалибровки требуется провести измерения контрольного источника в **фиксированной геометрии** продолжительностью достаточной для накопления в рабочем диапазоне спектра в среднем не менее 20 импульсов на канал. Время измерения калибровочного источника и параметры контроля результатов автокалибровки предварительно устанавливаются процедурой настройки - пункт меню «***Калибровка/Автокалибровка/Настройка...***» (см. «Энергетическая калибровка спектрометра»).

По результатам обработки накопленного спектра производится коррекция энергетической калибровки и калибровки разрешения спектрометра, и рассчитываются следующие параметры:

- **Дрейф текущий** – энергетический дрейф спектрометра, выраженный в процентах, за время с предыдущей процедуры калибровки / автокалибровки.
- **Дрейф общий** – энергетический дрейф спектрометра за время с начальной калибровки спектрометра.
- **Дрейф разрешения** – дрейф разрешения спектрометра за время с начальной калибровки спектрометра.

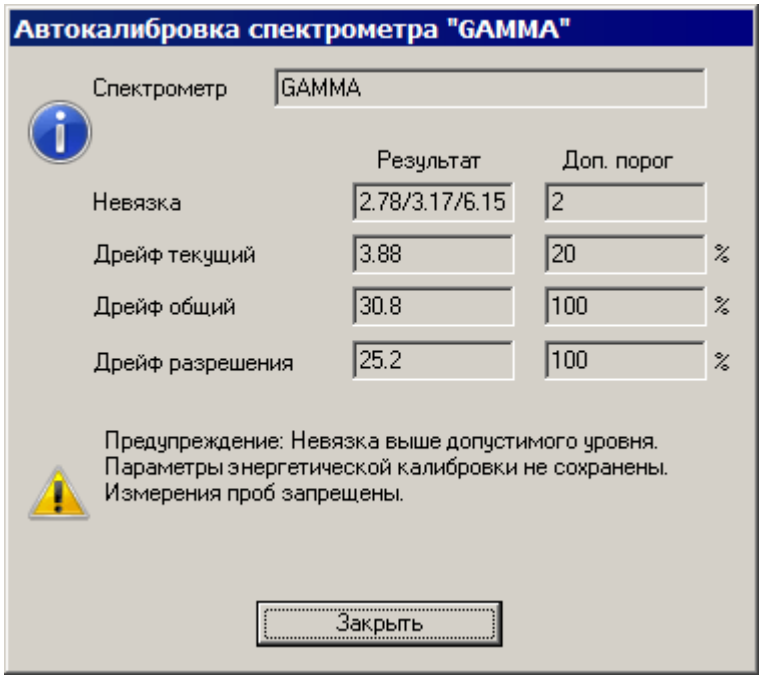
Затем, в зависимости от настройки процедуры автокалибровки, производится сравнение либо общей формы измеренного спектра и его интенсивности с формой и интенсивностью спектра контрольного источника, сохранённого при начальной калибровке спектрометра, либо формы измеренного спектра с формой спектра контрольного источника и оценённых активностей контрольного источника с паспортными данными. Процедура сравнения рассчитывает общий суммарный параметр различия измеренного и контрольного спектра – **невязку** и сравнивает его с заданной пороговой величиной. Таким образом производится подстройка и контроль параметров спектрометра.

По окончании процедуры обработки спектра на экран выводится табличка следующего вида:



Параметр «**Невязка**» включает три значения: общая невязка по спектру (отклонение спектра модели от измеренного спектра), максимальное значение из невязок для каждого нуклида и невязка по активностям (отклонение активностей контрольного источника рассчитанных по измеренному спектру от аттестованных значений). Невязка по активностям рассчитывается, если процедура автокалибровки сравнивает не только спектры, но и активности. В качестве итоговой невязки используется максимальное значение из трёх невязок.

Результаты калибровки и поверки спектрометра будут приняты, если «**Невязка**», «**Дрейф текущий**», «**Дрейф общий**» и «**Дрейф разрешения**» меньше соответствующих допустимых значений устанавливаемых при настройке процедуры автокалибровки. В противном случае окно может выглядеть следующим образом:



В случае неуспеха автокалибровки проведение измерений разрешено только в режиме полного доступа. В случае если в параметрах автокалибровки задан режим

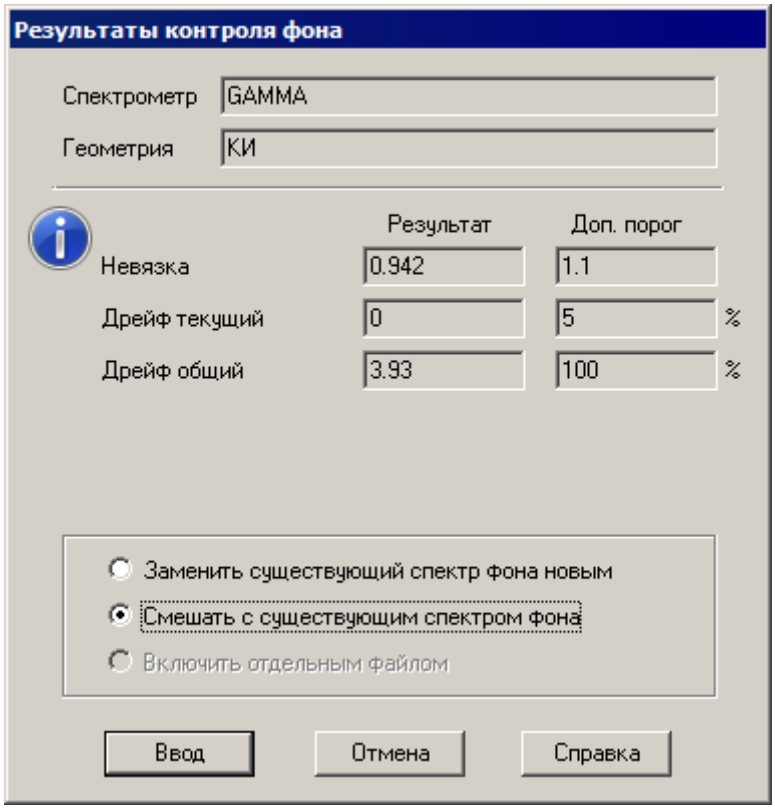
напоминания о необходимости автокалибровки через определённое время, игнорировать процедуру автокалибровки разрешено только в режиме полного доступа, либо в режиме ограниченного доступа, но с разрешённым режимом запуска измерений без предварительной автокалибровки, установленным в параметрах настройки режима ограниченного доступа.

Контроль фона

И гамма, и бета тракты требуют ежедневного контроля фона (пункт меню «***Калибровка / Фон / Контроль фона...***», кнопка ФОН).

Для контроля фона в спектрометре требуется провести измерения фоновой пробы в **аттестованной геометрии** продолжительностью не меньшей, чем среднее время измерения рабочих проб. Время измерения фоновой пробы и параметры контроля результатов измерений предварительно устанавливаются процедурой настройки - пункт меню «***Калибровка / Фон / Настройка...***» (см. «Установка спектра фона в программу обработки»). В качестве фоновой пробы можно использовать дистиллированную воду в сосуде, предназначенном для измерения проб. В случае если в параметрах процедуры контроля фона задан режим напоминания о необходимости контроля фона через определённое время, игнорировать процедуру контроля фона разрешено только в режиме полного доступа, либо в режиме ограниченного доступа, но с разрешённым режимом запуска измерений без предварительного контроля фона, установленным в параметрах настройки режима ограниченного доступа.

По окончании измерений фона запускается процедура обработки (процедура сравнения набранного спектра и установленного в программу спектра фона). Процедура запускается либо автоматически, либо оператором в зависимости от параметров настройки. По её окончании на экран выводится табличка следующего вида:



В том случае, если параметры контроля фона не превышают установленной нормы, рекомендуется **смешать измеренный спектр с существующим спектром фона**. При этом измеренный ранее спектр фона до достижения, устанавливаемого в ***параметрах контроля фона*** (пункт меню «***Калибровка / Фон / Настройка...***»), максимального

времени накопления фона, будет суммироваться с вновь измеренным, а по превышении - смешиваться в пропорции определяемой отношением времени измерения к максимальному времени накопления фона. Такой режим позволяет накапливать необходимое время измерения фона (время измерения фона должно не менее чем в два раза превышать максимальное время измерения рабочих проб) и постепенно обновлять спектр фона, отслеживая его изменения.

При превышении нормы смешивание с существующим спектром фона запрещается, так как, по каким-то причинам, произошло недопустимо резкое изменение фона в спектрометре. В этом случае рекомендуется выяснить причину изменения фона (загрязнение детектора, нарушение упаковки детектора и т.п.), при возможности устранить, и повторить процедуру контроля фона. При невозможности добиться существовавших параметров фона спектрометра, фон требуется переустановить - **заменить существующий спектр фона новым**. Операция замены спектра фона доступна только в режиме полного доступа, либо в режиме ограниченного доступа, но с разрешённым режимом замены спектра фона, установленным в параметрах настройки режима ограниченного доступа.

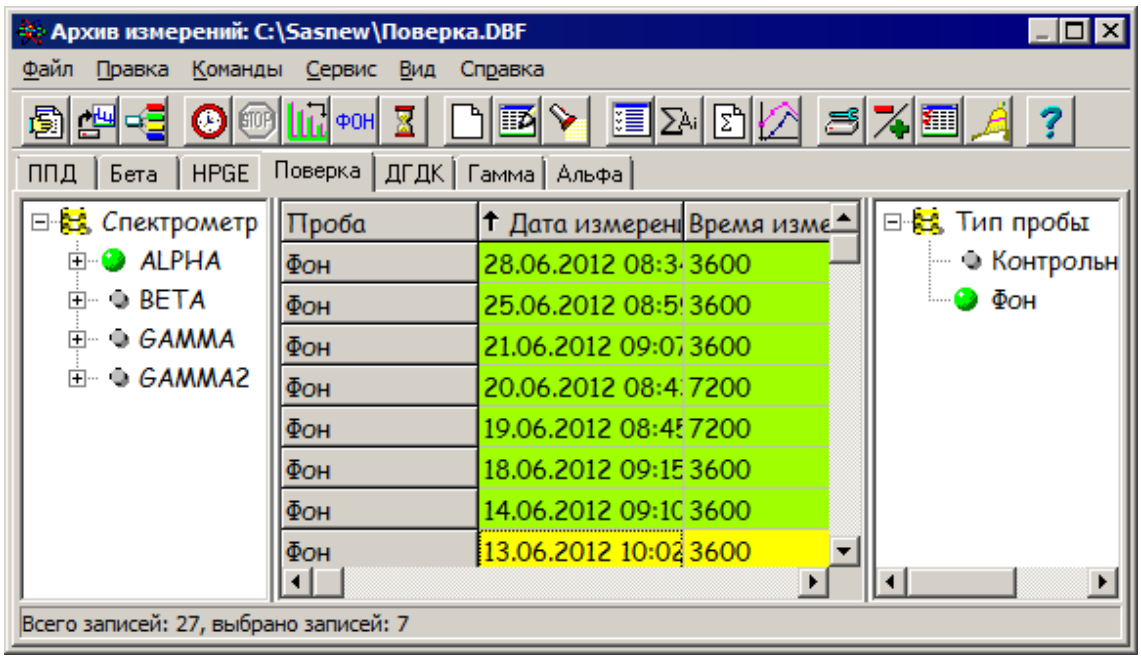
В случае если в параметрах контроля фона разрешен перерасчет на плотность фоновой пробы, оператор может выбрать режим «**Включить отдельным файлом**». При этом измеренный спектр будет включен в качестве одного из базовых файлов фона с определенной плотностью фоновой пробы для приведения фонового спектра к плотности измеренной пробы при обработке рабочих спектров.

Запуск процедуры контроля фона возможен и из архива измерений (см. «Архив измерений»). Если мы собираемся провести рутинную процедуру ежедневного контроля фона, то запуск процедуры из архива даёт только то преимущество, что мы можем заранее выбрать спектрометр и геометрию измерений. Но вызов процедуры контроля фона из архива предназначен для других целей – для целей реализации методики измерений на спектрометрах с большой изменчивостью фона.

Это, прежде всего, альфа радиометры с регистрацией альфа излучения в обычных атмосферных условиях (без откачки воздуха, без вытеснения воздуха нерадиоактивными газами), а обычный воздух содержит радиоактивные газы (естественные радон, торон и, может быть, искусственные).

В этом случае фон не стабилен и мы не можем быть уверены в том, что фон, накопленный в прошедшие дни, соответствует фону сегодняшнего дня и часа измерений. В таких условиях разумнее проводить измерения проб чередую их с измерениями фона. Причём начать надо с измерения фона (естественно, всем измерениям должна предшествовать автокалибровка) и закончить измерением фона. Затем установить в программу спектр фона являющийся суммой измеренных за это время спектров фона, рассчитать изменчивость фона, установить полученное значение в программу обработки (п. меню «***Калибровка / Фон / Настройка...***») и только потом обработать спектры проб. В этом случае мы можем быть уверены, что значения активностей и погрешностей измерений будут рассчитаны корректно.

Запуск процедуры контроля фона из архива измерений и предназначен, прежде всего, для реализации данной методики. Оператор должен выделить в журнале измерений записи относящихся к измерениям фона для требуемой группы записей измерений проб и фона. Например:



Затем нажать на клавишу , запустив, таким образом, процедуру контроля и установки спектра фона. Процедура контроля фона будет проведена для всех выделенных записей журнала измерений, начиная с самой ранней. Для каждой записи на экран будет выводиться форма результатов контроля фона. Оператор должен выбрать: смешивать фон со спектром фона текущей записи, заменить спектр фона или пропустить запись. Для первой записи рекомендуется заменить фон, а для последующих - смешать.

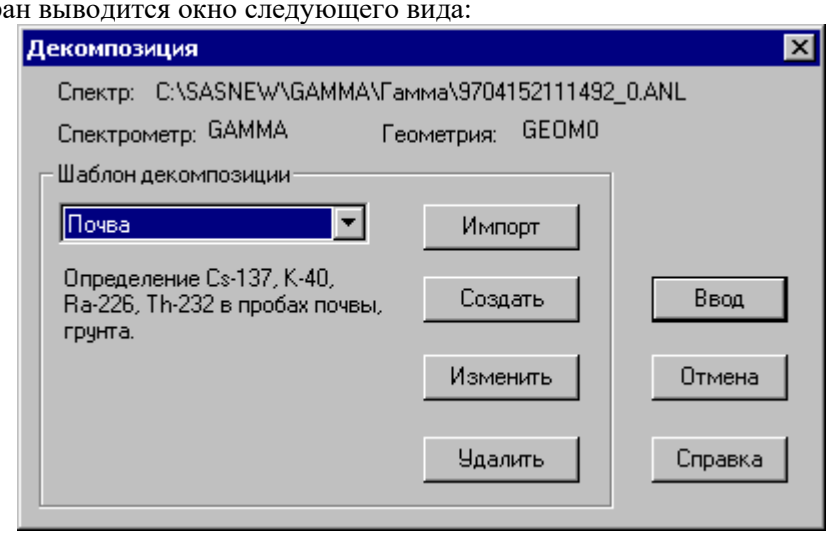
Запуск процедуры контроля фона из архива измерений можно использовать для восстановления испорченного по каким-либо причинам текущего спектра фона. Оператор должен выделить в журнале измерений несколько (2, 3,…,10 или больше) последних неиспорченных записей измерений фона для требуемого спектрометра и геометрии и запустить процедуру контроля и установки спектра фона. Для первой записи заменить фон, а для последующих - смешать.

Обработка спектров. Декомпозиция

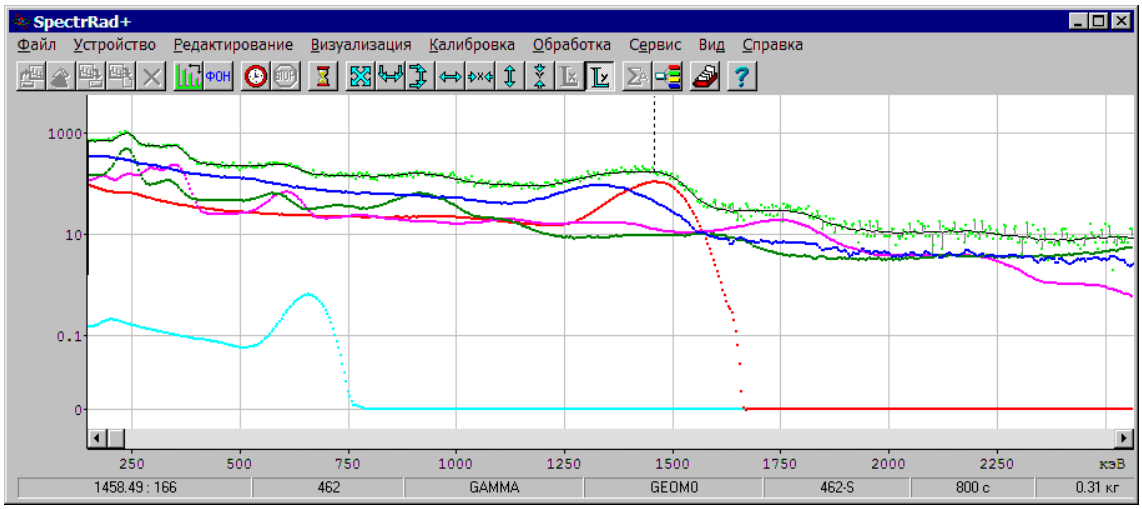
Декомпозиция - разложение спектра на компоненты с оценкой вклада компонентов в спектр. В качестве компонентов обычно используются элементарные спектры[3]. При этом оценками вкладов являются активности нуклидов.

[3] Элементарный спектр - нормированный на число распадов отклик спектрометра на излучение нуклида или цепочки нуклидов находящихся в состоянии радиоактивного равновесия (плотность распределения вероятности регистрации импульсов по каналам спектрометра при одном распаде нуклида).

При щелчке по кнопке (выбору пункта меню «***Обработка / Декомпозиция***») на экран выводится окно следующего вида:



Оператор может выбрать один из существующих **шаблонов декомпозиции** или создать необходимый шаблон самостоятельно[4] (см. «Создание шаблона декомпозиции») и, щелкнув по клавише «**Ввод**», запустить программу обработки. При этом главное окно программы преобразуется в окно декомпозиции, которое может выглядеть следующим, например, образом:

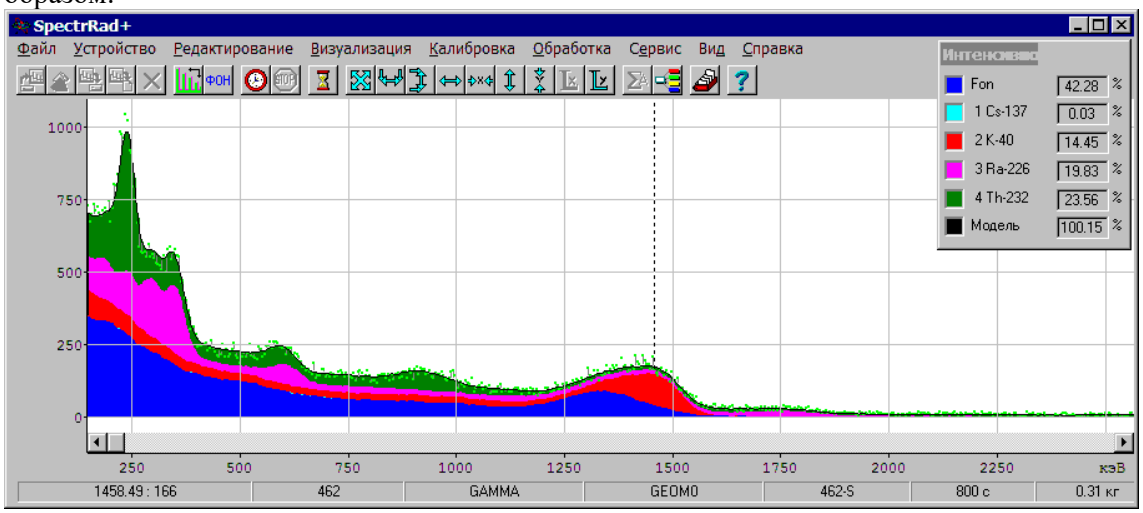


В окне выводится процедура разложения спектра на компоненты. Установка цвета для обрабатываемого спектра, спектров компонентов, фона окна и т.п. производится по пункту меню «***Вид / Число и цвет спектров...***». На строке состояния выводятся те же данные, что и в главном окне.

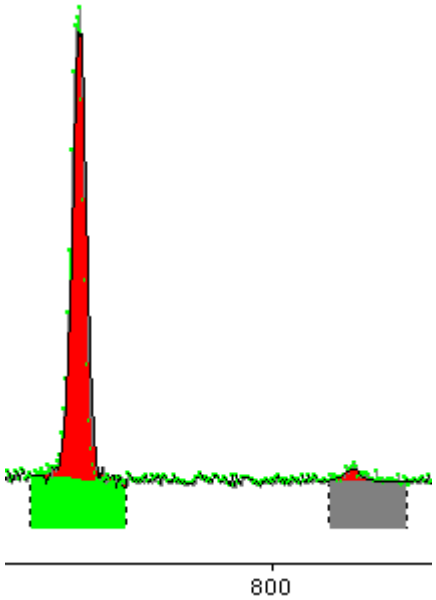
Тип визуализации спектров задаётся выбором пункта меню «***Визуализация / Гистограмма***». При визуализации в виде гистограмм окно может выглядеть следующим

[4] Кнопки "**Создать**", "**Изменить**" и "**Удалить**" доступны только в режиме полного доступа.

образом:

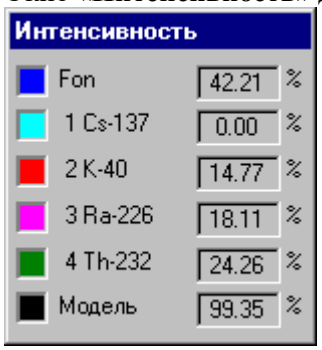


При «оконном» методе обработки плохо разрешённых спектров используются энергетические окна заданные при настройке процедуры обработки, а при обработке линейчатых спектров с поиском пиков используются энергетические окна соответствующие найденным в спектре пикам и окнам линий определяемых нуклидов. При установленном режиме визуализации энергетических окон (п. всплывающего меню «***Энергетические окна/Границы пиков***») на экран выводится положение окон, например, так как на рисунке:



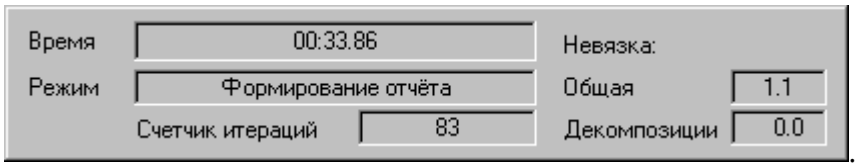
Окна разделяются на два типа: «**значимые**» - окна используемые для оценки активности нуклидов (окна соответствующие «значимым» линиям нуклидов) и «**не значимые**» - не используемые для расчёта активности нуклидов, но участвующие в общей оценке успеха процедуры декомпозиции. «**Значимые**» окна рисуются цветом заданным при настройке процедуры декомпозиции (в примере - зелёным), «**не значимые**» - цветом совпадающим с цветом спектра невязки (в примере - серым),

Дополнительно формируются ещё два окна:
Окно «**Интенсивность**» для вывода вклада компонентов (в %) в спектр пробы.



(**Модель** - сумма вклада всех компонентов.)

И окно «**Состояние**»



В окне выводится:

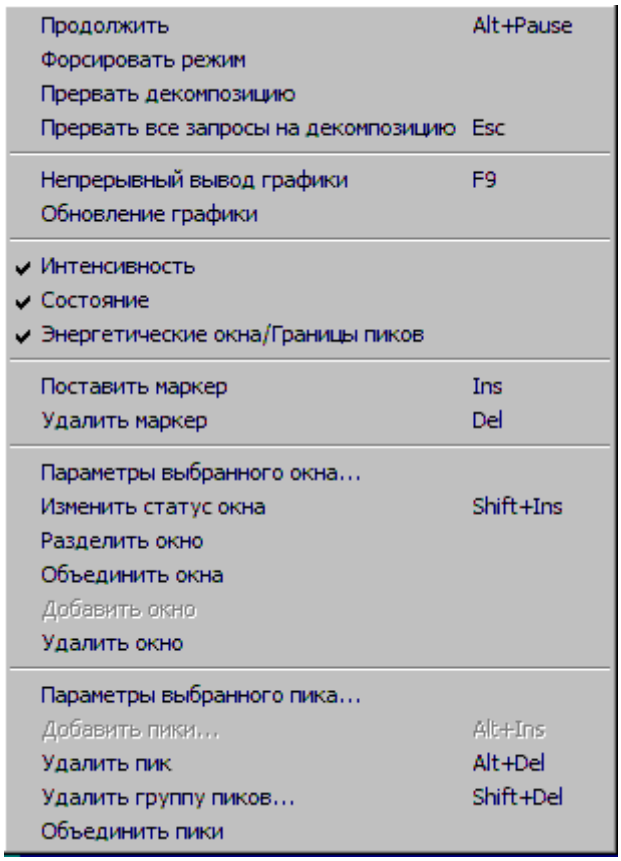
- **Время** – время прошедшее с начала обработки спектра в формате мин:сек.
- **Режим декомпозиции** – краткое обозначение режима обработки спектра:

Режим	Описание
Лин. оценка активностей	Линейная оценка вкладов компонентов.
Построение сплайна	Оценка неизвестных компонентов. Модель дополняется сплайном.
Вар.пар.дрейфа: Ax; Bx; W	Глобальный поиск наилучших значений параметров энергетического дрейфа спектра (Ax – коэффициент усиления, Bx – нуль шкалы каналов, W - разрешение спектрометра) варьированием значений параметров в заданном диапазоне с заданным шагом.
Оценка дрейфа: Ax; Bx; Cx; W	Коррекция энергетического дрейфа спектра методом Гаусса-Ньютона. Ax – коэффициент усиления, Bx – нуль шкалы каналов, Cx – коэффициент нелинейных искажений, W – разрешение (ширина пиков).
Оценка дрейфа: Axi; Bxi; Cxi;	Коррекция энергетического дрейфа компонентов методом Гаусса-Ньютона.
Варьирование поглощения	Поиск наилучшего значения усреднённого атомного номера вещества счётного образца (Z эффективное) и/или толщины счётного образца.
Удаление нулевых компонентов	Удаление из процедуры обработки незначащих компонентов.
Формирование отчёта	Завершение обработки, формирование отчёта.

- **Счетчик итераций** - число циклов уточнения оценок.
- **Невязка (общая и декомпозиции)** - расстояние рассчитанной модели от измеренного спектра в стандартных отклонениях нормированное на число степеней свободы $G = \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / G_i^2)/(n-m)}$. **Общая невязка** – невязка по всему спектру в пределах границ обработки. **Невязка декомпозиции** - невязка решения системы уравнений. При оконном методе обработки невязка декомпозиции может быть равной нулю, общая невязка нулевой быть не может.

Меню

Главное меню окна декомпозиции дублирует меню главного окна программы, но доступными остаются только часть пунктов. Щелчок по правой кнопке мышки в окне декомпозиции активизирует всплывающее меню следующего вида:



Часть пунктов всплывающего меню также дублирует содержание основного меню, но имеет и дополнительные пункты, относящиеся непосредственно к декомпозиции:

Пауза (Продолжить) Alt+Pause — Остановить (или продолжить, если остановлен) процесс декомпозиции.

Форсировать режим — Процесс декомпозиции имеет многоуровневый и итерационный характер. Форсирование режима прерывает итерации в текущем уровне и вызывает переход к следующему.

Прервать декомпозицию — Завершить декомпозицию на текущей итерации.

Прервать все запросы на декомпозицию — Если есть очередь запросов на обработку (декомпозиция при наблюдении за набором спектра, обработку группы спектров из архива), выполнение данного пункта меню отменяет все запросы на декомпозицию, текущая обработка не прерывается.

Непрерывный вывод графики — Пункт меню с фиксацией состояния. При непрерывном выводе графики процесс декомпозиции постоянно отображается на экране. Это может замедлить обработку спектра. При отключенном выводе визуализируется только

	окончательное решение.
Обновление графики **F9**	Однократное обновление графики при отключенном непрерывном выводе графики.
Интенсивность	Включение / выключение окна «Интенсивность».
Состояние	Включение / выключение окна «Состояние».
Энергетические окна / Границы пиков	Включение / выключение визуализации энергетических окон или границ пиков, при «оконном» методе обработки спектра, обработке спектра с поиском пиков или разложении спектра на спектры пиков.
Поставить маркер **Ins**	Отметка, выбранного с помощью подвижного маркера, канала спектра.
Удалить маркер **Del**	Удаление, наиболее близко расположенной к подвижному маркеру, метки спектра.
Параметры выбранного окна…	Вывод параметров указанного маркером окна.
Включить окно (Исключить окно) **Shift+Ins**	Изменить статус окна декомпозиции: «значимое»-> «исключённое»-> «не значимое»-> «значимое»-> …. Исключённые окна никак не используются в процедуре декомпозиции. «Значимые» и «не значимые» окна используются в соответствии с режимом, заданным в шаблоне декомпозиции (см. «Настройка» / «Создание шаблонов декомпозиции» / «Параметры декомпозиции» / «Параметры окон»).
Разделить окно	Процедура делит выбранное окно декомпозиции на два в соответствии с позицией подвижного маркера.
Объединить окна	Два окна (выбранное окно и ближайшее к подвижному маркеру) объединяются в одно.
Добавить окно	Окно, ограниченное предварительно установленными метками (п. меню «Поставить маркер»), или границами соседних окон добавляется в процедуру декомпозиции.
Удалить окно	Выбранное с помощью подвижного маркера окно декомпозиции исключается из процедуры обработки спектра.
Параметры выбранного пика…	Вывод параметров указанного маркером пика при обработке линейчатых спектров в режиме с поиском пиков.
Добавить пики **Alt+Ins**	Процедура добавляет в список найденных пиков спектра, пик пропущенный процедурой поиска, границы которого оператор предварительно указал, отметив их с помощью маркера (п. меню «Поставить маркер»).
Удалить пик	Пик, указанный подвижным маркером, удаляется из списка

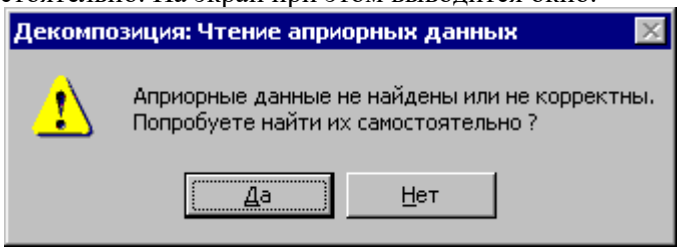
Alt+Del	найденных пиков спектра.
Удалить группу пиков Shift+Del	Все пики, находящиеся в выбранной области спектра, удаляются из списка найденных пиков.
Объединить пики	Пик, указанный подвижным маркером, объединяется с ближайшим к маркеру пиком в мультиплете в один пик.

Группа пунктов меню, связанная с окнами, доступна только при обработке спектров с использованием энергетических окон, а группа пунктов, связанная с пиками, доступна только при обработке спектров в режиме с поиском пиков. Часть пунктов меню может отсутствовать в зависимости от режима обработки.

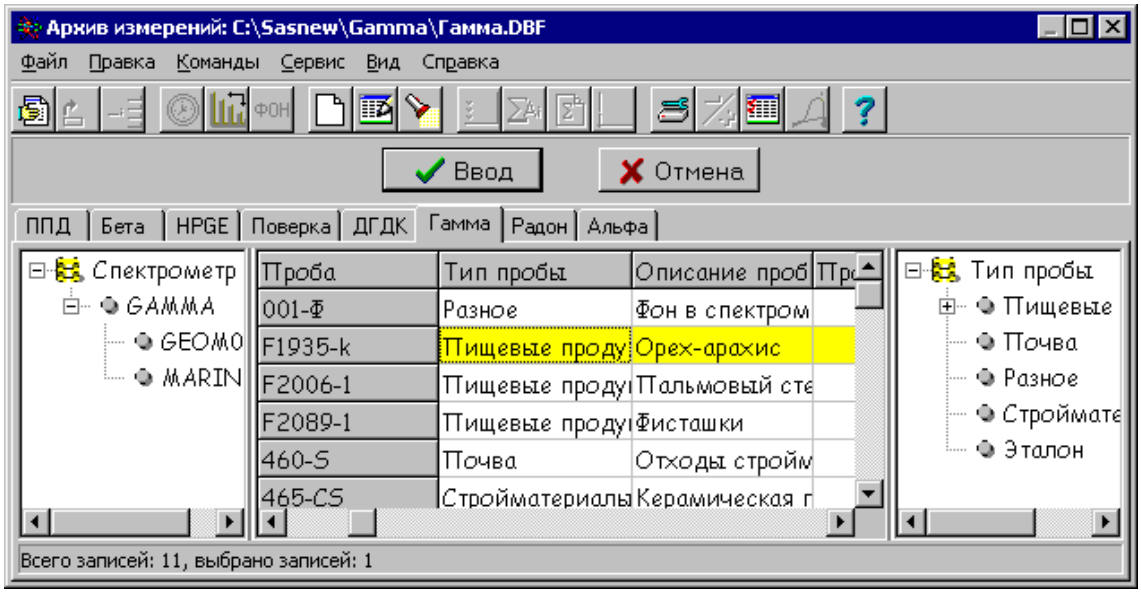
Ввод априорных данных

При необходимости учета результатов обработки спектра данной пробы (пробы из того же материала), измеренной ранее или на другом детекторе (например, результаты обработки гамма спектра пробы при обработке бета спектра), в зависимости от установленного в шаблоне обработки режима поиска априорных данных, программа может либо самостоятельно искать необходимые данные, либо предложит оператору выбрать из базы данных результатов измерений необходимую запись.

В случае если в процедуре обработки был задан режим поиска априорных данных и программа не нашла требуемых данных, оператору будет предложена найти их самостоятельно. На экран при этом выводится окно:



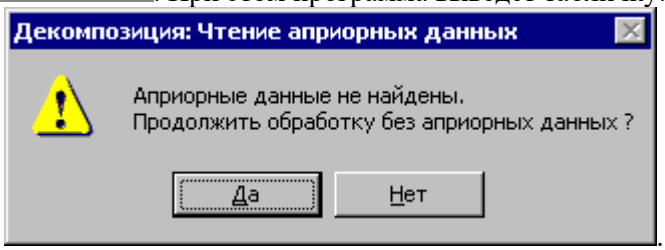
Ответ «**Нет**» означает отказ от обработки. При ответе «**Да**» на экран дисплея выводится окно архива результатов измерений следующего, например, вида:



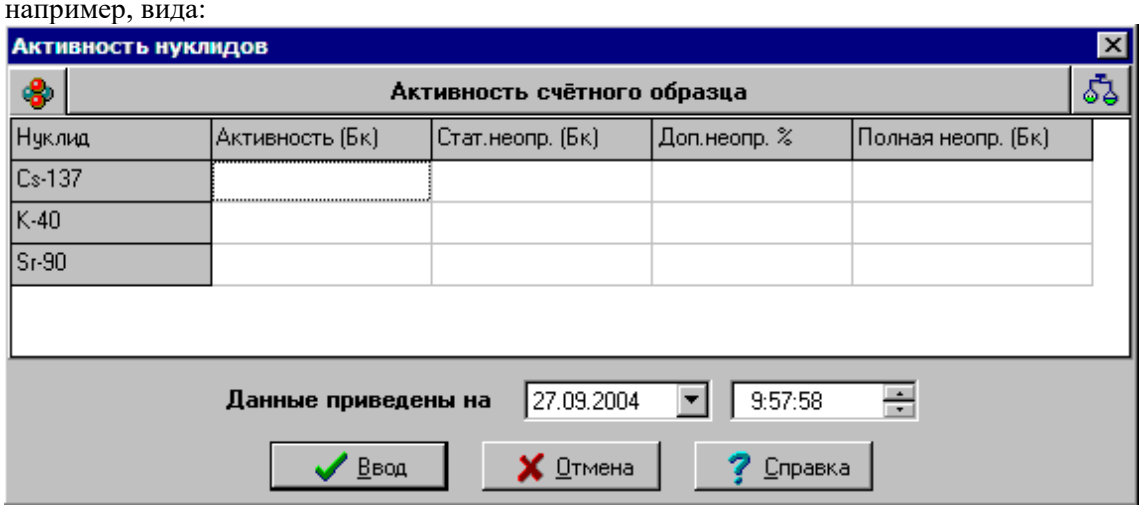
Оператору необходимо открыть архив измерений, содержащий необходимую запись (или выбрать нужный из уже открытых), выбрать необходимую запись в архиве в качестве рабочей (выделяется желтым цветом при выборе из обычных записей или синим - при выборе из групповой выборки), щелкнув по ней левой кнопкой мышки, и нажать на

клавишу «**Ввод**». Предварительно можно удостовериться, что мы выбрали именно необходимую нам запись, щёлкнув по «кнопке» или выбрав пункт меню «***Команды / Отчёт***».

В том случае, если априорные данные отсутствуют в архиве измерений, оператор может отказаться от выбора априорных данных в архиве, нажав на кнопку Отмена. При этом программа выведет табличку:



. При ответе «**Да**» программа проведёт обработку спектра без априорных данных. При ответе «**Нет**» на экран выводится табличка, в зависимости от списка определяемых нуклидов, следующего, например, вида:



Оператор должен ввести данные об активностях нуклидов и погрешностях их определения. Погрешность (неопределённость) включает две составляющие: статистическая неопределённость и дополнительная неопределённость, определяемая в процентах к активности. Полная неопределённость не вводится оператором, а рассчитывается программой из значений статистической и дополнительной неопределённости. В качестве случайной составляющей общей неопределённости (статистической неопределённости) используется 95% доверительный интервал оценки активности. Отсутствие данных в колонках активности и статистической неопределённости означает отсутствие априорных данных об активности данного нуклида.

Клавиша **Активность счётного образца** в табличке ввода значений позволяет вводить данные либо об активностях нуклидов в веществе счётного образца (при отжатом состоянии клавиши), либо в исходном материале (при нажатом состоянии клавиши **Активность исходного вещества**). **При этом необходимо учитывать**, что программа пересчитывает значения активностей на величину исходного материала пробы. Это позволяет использовать результаты измерений нативных проб при обработке счётных образцов из концентрированного вещества, но может служить источником ошибок, в том случае, если оператор забыл указать, что какая то из проб является концентрированной или в результате концентрирования изменился нуклидный состав пробы.

Клавиша позволяет вводить данные либо в значениях полной активности счётного образца или всего исходного вещества использованного для концентрирования пробы (при отжатом состоянии клавиши), либо в значениях удельной активности счётного образца или исходного материала (при нажатом состоянии клавиши).

В качестве корректных априорных данных для обработки необходимо использовать результаты обработки проб того же исходного материала, измеренные на другом спектрометре или в другое время. Допускается использовать результаты обработки концентрированных или разбавленных проб при обработке нативных проб (и обратный вариант) в том случае, если мы уверены, что при концентрировании вещества не произошло потерь каких - либо нуклидов, являющихся компонентами разложения спектра.

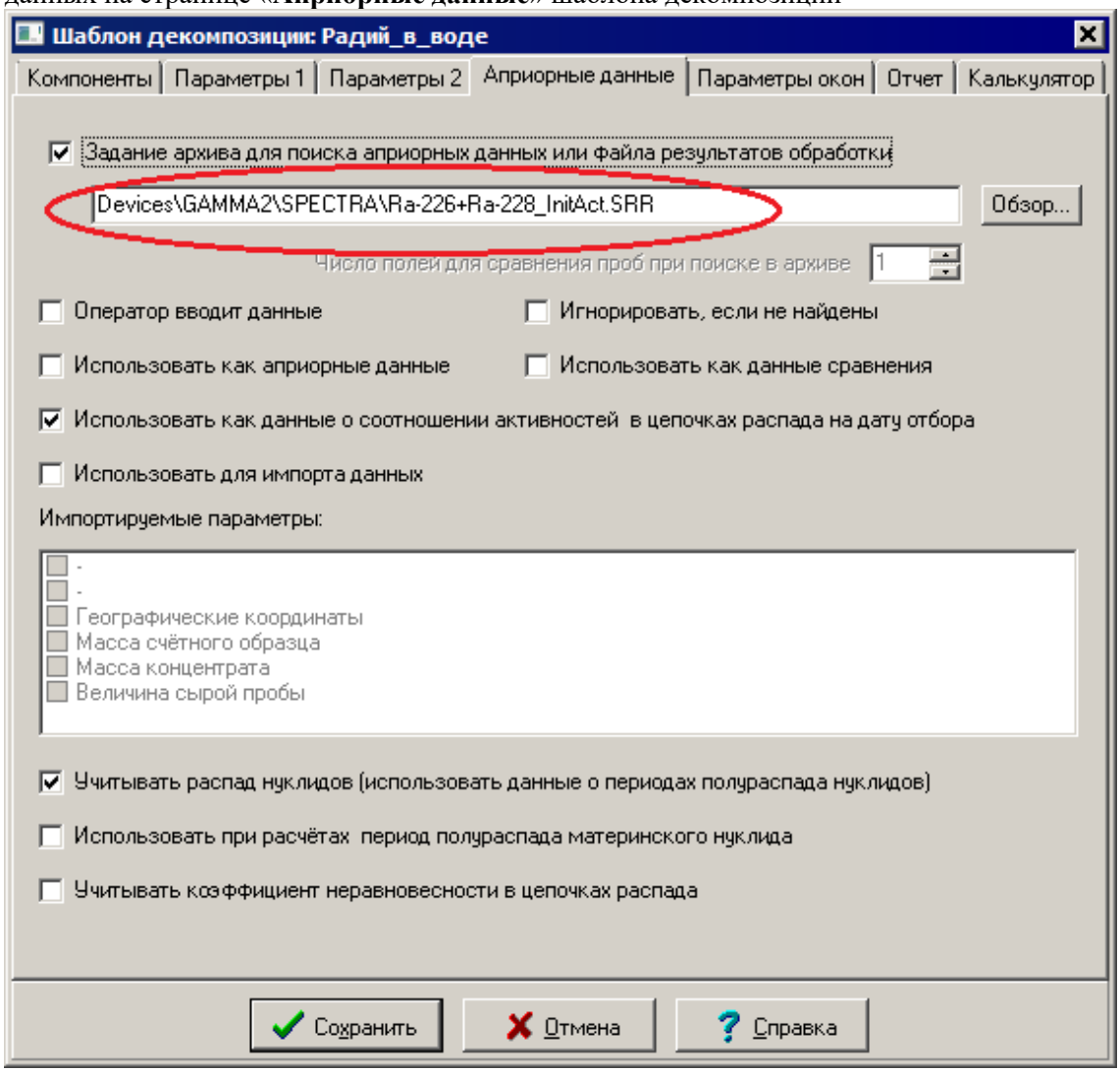
В качестве априорных данных при обработке спектра используются значения статистической неопределённости и значения активностей нуклидов усреднённые за время измерения пробы. Поэтому введенные оператором значения будут пересчитаны на дату начала измерений обрабатываемой пробы и из этих значений будут рассчитаны средние за время измерения пробы активности по таблице нуклидов и параметрам обработки заданном в шаблоне обработки. Поскольку при пересчёте активностей на требуемую дату и расчёте средних за время измерения активностей учитываются процессы накопления и распада нуклидов в цепочках распада, необходимо указывать активности всех нуклидов используемых цепочек распада.

Клавиша позволяет добавить в итоговый отчёт данные о дополнительных нуклидах или сведения о суммарной альфа, бета или гамма активности пробы, не включённые в используемый шаблон декомпозиции.

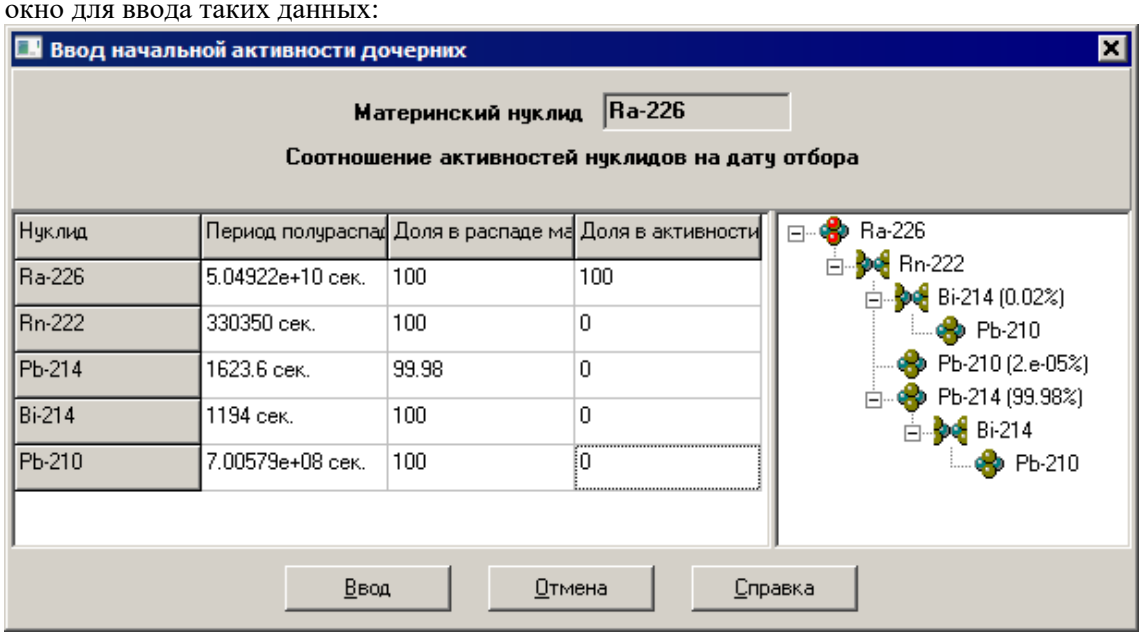
Режим ввода априорных данных оператором без поиска данных в архиве может быть задан в программе (шаблоне) обработки.

Априорными данными могут быть и данные о начальном соотношении активностей в цепочках распада нуклидов на дату отбора. Датой отбора может быть дата химического выделения элемента из пробы, дата окончания протяжки воздуха через фильтр при анализе воздуха на радиоактивные аэрозоли и т.п. В принципе, любая дата, для которой известно соотношение активностей нуклидов в цепочке распада.

Если данные о таком соотношении не приведены в указанном файле априорных данных на странице «**Априорные данные**» шаблона декомпозиции



, процедура обработки предложит ввести их оператору. При этом на экране появится окно для ввода таких данных:



Оператор должен ввести для дочерних нуклидов активность в процентах относительно материнского нуклида на дату отбора пробы. В примере датой отбора должна быть дата выделения радия. И соответственно, активность дочерних Ra-226 на эту дату будет равной нулю (в примере эти данные уже введены). При протяжке воздуха через фильтр на фильтре через некоторое время наступает равновесие между скоростью накопление нуклида на фильтре и скоростью его распада. И это соотношение пропорционально периодам полураспада нуклидов. Возможным вариантом может быть и состояние радиоактивного равновесия на дату отбора. В этом случае соотношение активностей требуется предварительно рассчитать процедурой «**Сервис / Библиотека нуклидов / Сервис / Равновесная цепочка / Сформировать**».

Эти данные необходимы для корректного расчёта процессов накопления и распада нуклидов в цепочке. Нажатие оператором на клавишу «**Отмена**» приводит к отмене процедуры декомпозиции, поскольку без такой информации корректный расчёт невозможен.

Двойной щелчок мышкой по значку нуклида в дереве распада вызывает процедуру редактирования дерева. Процедура предложит оператору либо разорвать связь с материнским нуклидом, либо разорвать все связи для все нуклидов дерева, если выбран материнский нуклид дерева распада. При разрыве связи между двумя нуклидами цепочка делится на две части, а при разрыве связей между всеми нуклидами, все нуклиды будут считаться независимыми, что соответствует отказу от использования априорной информации. Без разрыва связей все данные о линиях дочерних будут включены в таблицу линий материнского нуклида, и вместо пяти неизвестных программа будет определять активность только одного материнского нуклида, что существенно повысит эффективность (точность) оценивания. При разрыве одной связи мы получим вместо одной неизвестной активности – пару неизвестных. Что, конечно, лучше, чем пять, но хуже чем одна. Разрыв связи оправдан, если мы уверены, что активность материнского равна нулю или пренебрежимо мала.

Для того чтобы не вводить данные о соотношениях активностей в цепочках распада каждый раз при запуске процедуры декомпозиции, программа предложит сохранить введённые данные в качестве априорных данных. После сохранения оператор должен в шаблоне декомпозиции указать сохранённые сведения **для использования в качестве сведений о соотношении активностей в цепочках распада на дату отбора пробы** (см.**.«Создание шаблонов декомпозиции / Параметры декомпозиции**»).

«Выбор дополнительных компонентов

Если в параметрах шаблона обработки установлен флажок «**Дополнить список компонентов компонентами, имеющими линии вблизи маркера**» или «**Автоматический анализ состава**», но не установлен флажок «**без участия оператора**», программа выведет на экран таблицу, содержащую список «подозреваемых» дополнительных компонентов следующего, например, вида:

Выбор дополнительных компонент

Ввод | Отмена | Справка

Компонент	Тест 1 %	Тест 2 %	Тест 3 %	Тест 4 %	Период полура
La-138	18.9	100	100	53.42	1.03E11 лет
La-140	27.26	86.96	87.17	51.64	1.679 дней
Lu-177	79.55	100	100	73.93	6.647 дней
Lu-177m	56	78.89	76.91	62.71	160.4 дней
Mn-54	91.13	100	100	98.54	312.2 дней
Na-22	0.1518	90.98	90.98	87.78	2.602 лет
Nb-91m	0	100	100	57.31	60.86 дней
Nb-92	62.92	100	100	88.48	3.47E7 лет
Nb-94	45.2	100	100	75.17	2.03E4 лет

Всего компонент: 149, можно выбрать: 100, выбрано: 40

Общее количество компонентов разложения не может превышать ста, поэтому программа анализа удаляет все лишние компоненты из списка дополнительных (удалить какой-либо компонент из списка основных, можно только изменив шаблон декомпозиции). Оставшиеся включенные компоненты отмечены зеленым цветом.

Один из компонентов является выбранным (или активным) компонентом. Он выделяется жёлтым цветом для не включенных компонентов, и синим для включенных компонентов. Клавиши перемещения курсора перемещают положение выбранного компонента, щелчок левой кнопкой мышки по строчке компонента делает его активным.

Для выбора компонентов программа рассчитывает четыре тестовых величины:

- **Тест1** - коэффициент корреляции спектра компонента с анализируемым спектром в области обработки. Программа удаляет из списка включенных компонентов компоненты, имеющие значения **Тест1** менее заданного оператором уровня.
- **Тест2** - вероятность присутствия компонента в спектре рассчитанная для обычного энергетического диапазона (+/- 3 ширины пика) для всех линий нуклидов входящих в состав компонента.
- **Тест3** - вероятность присутствия компонента в спектре (в процентах) рассчитанная для расширенного энергетического диапазона (+/- 6 ширин пиков) для всех линий нуклидов входящих в состав компонента.
- **Тест4** - нормированная на двойную ширину пиков близость энергий линий компонента к положениям пиков спектра (при совпадении положений пиков с энергиями линий **Тест4** равен 100 %).

Для справки в таблице приводятся и значения периодов полураспада нуклидов формирующих компоненты.

Значения тестовых величин **Test2-Test4** рассчитываются либо для всех линий нуклидов за исключением линий с недостоверным квантовым выходом, либо только для «значимых» (см. «Таблица нуклидов» / «Структура таблиц») в зависимости от установленного режима обработки спектра: «использовать только значимые линии», либо

использовать все линии (см. «Создание шаблонов декомпозиции» / «Параметры декомпозиции». Коэффициент корреляции (**Test1**) всегда рассчитывается только для линий помеченных в используемой таблице нуклидов как «значимые» или «калибровочные».

При обработке спектров без поиска пиков (сцинтилляционные спектры) значения двух тестовых величин **Тест2** и **Тест3** почти всегда равны 100 %, поскольку в область пика включается и комптоновское рассеяние.

Оператор может самостоятельно включить или удалить какой-либо компонент. Предварительно необходимо выбрать компонент, щелкнув по нему левой кнопкой мышки, и нажать на клавишу **«Insert»** или вызвать всплывающее меню, щелкнув правой кнопкой мышки, и выбрать соответствующий пункт меню «***Выделить***» или «***Снять выделение***». Двойной щелчок левой кнопкой мышки или одиночный щелчок, при нажатой клавише **«Ctrl»** на клавиатуре компьютера, по выбранной строке переключает включение компонента.

При желании оператор может открыть спектр выбранного компонента для визуального анализа присутствия компонента в спектре, щелкнув правой кнопкой мыши и выбрав пункт всплывающего меню «***Открыть спектр***».

Список можно отсортировать по значениям любой колонки, щелкнув левой кнопкой мыши по названию колонки. Порядок сортировки указывается стрелкой перед названием колонки.

Ввод данных в программу калькулятора

В том случае, если шаблон декомпозиции содержит программу калькулятора, процедура обработки может запросить дополнительные данные. Вид окна ввода при этом зависит от программы калькулятора.

Расчёт суммарной активности

Если в параметрах шаблона обработки установлен флажок «**Вычислить суммарную активность**» (обработка с выделением пиков) или «**Вычислить суммарную активность по нуклиду**» (обработка без выделения пиков) процедура обработки рассчитает «суммарную активность»[5] пробы.

Корректный расчёт суммарной активности для плохо разрешенных спектров (обработка без выделения пиков) возможен только при знании химического и радионуклидного состава вещества счётного образца, поскольку эффективность регистрации излучения зависит от химического состава вещества счётного образца и энергии излучения. Если эти данные неизвестны, мы должны быть уверены, что эталон, использованный при калибровке эффективности регистрации излучения, аналогичен по химическому и радионуклидному составу счётному образцу.

В пакете «SPECTRRAD» химический состав проб задаётся при формировании списка «**Все типы проб**» процедурой «**Нормативы и константы**» (п. меню «**Нормативы и константы»**).

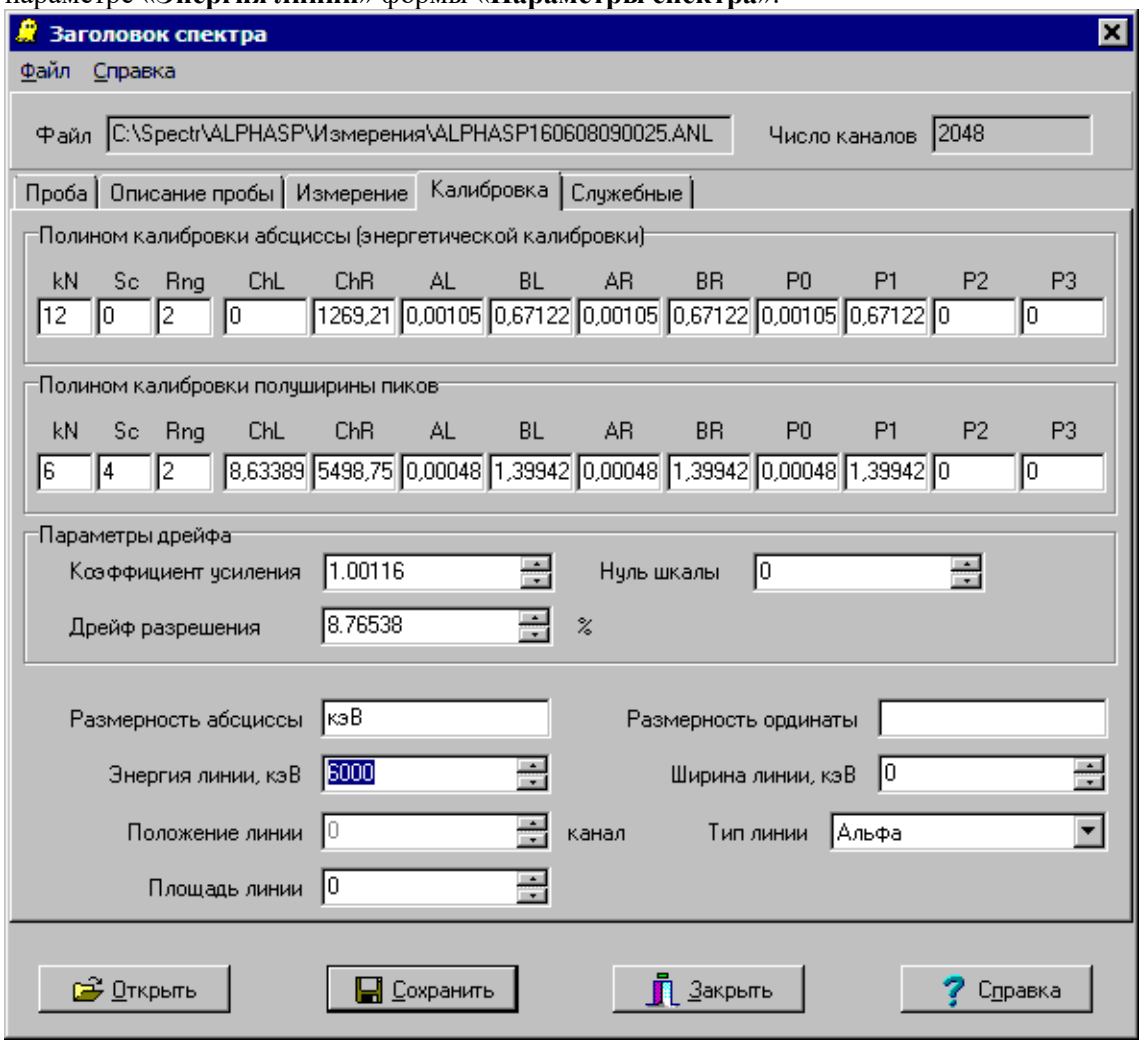
Корректный учёт поглощения квантов излучения на пути от рождения до регистрации в детекторе возможен только при знании энергетического спектра излучения. При таком знании нет никакой нужды в такой грубой оценке как «суммарная активность» - можно рассчитать конкретную активность всех нуклидов пробы. Поэтому «суммарная активность» рассчитывается по усредненной энергии излучения нуклидов эталона и пробы.

При калибровке эффективности регистрации нам известен и химический и радионуклидный состав эталона. Процедура расчёта элементарного спектра вычисляет усреднённую энергию линий (для альфа и гамма излучения) и усреднённую энергию бета частиц и электронов внутренней конверсии и сохраняет её значение в параметре «**Энергия линии**» элементарного спектра. Для спектра пробы процедура расчёта «суммарной активности» рассчитывает среднюю энергию спектра, но для альфа спектров

---

[5] **Суммарная активность** - условная активность пробы равная интенсивности радиоактивного излучения от пробы. Суммарная гамма активность - число гамма квантов излучаемое пробой за 1 секунду, суммарная альфа и бета, соответственно, - число альфа и бета частиц в единицу времени.

оператор может задать усреднённую начальную энергию альфа излучения пробы в параметре «**Энергия линии**» формы «**Параметры спектра**»:

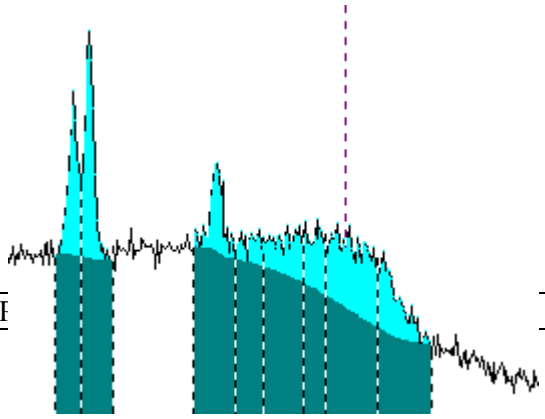


В примере усреднённая энергия спектра пробы задана равной 6000 кэВ. В том случае, если спектром является спектр спектрометра, заданное значение будет действительно для всех в дальнейшем измеренных на данном спектрометре спектрах.

Обработка спектров. Поиск пиков

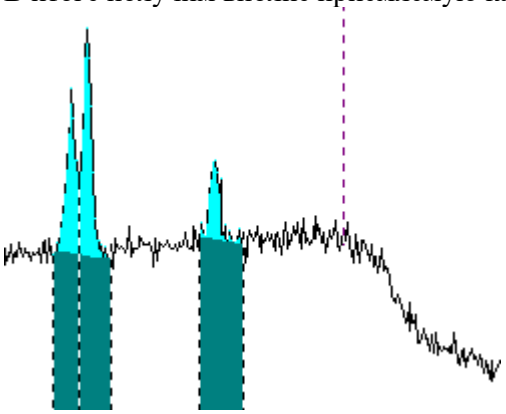
При обработке линейчатых спектров процедура декомпозиции производит поиск пиков в спектре, оценивает их параметры и рассчитывает спектр непрерывного рассеяния, а разложения спектра на компоненты производится для спектра пиков. Оператор имеет возможность поиск пиков провести заранее – перед запуском процедуры декомпозиции. В этом случае программа декомпозиции будет использовать эти результаты, а оператор имеет возможность вручную отредактировать список пиков и форму спектра непрерывного рассеяния.

Например, при не совсем корректной настройке параметров процедуры поиска пиков программа может принять за пики края комптоновского рассеяния от мощных линий:

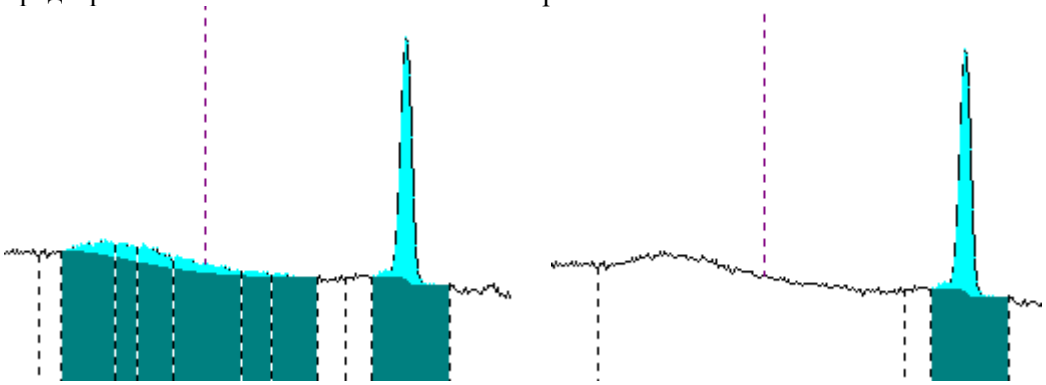


Оператор может скорректировать промах. Для этого, установив маркер на ложный пик, необходимо вызвать процедуру удаления пика (пункт главного или всплывающего меню «***Удалить пик***»).

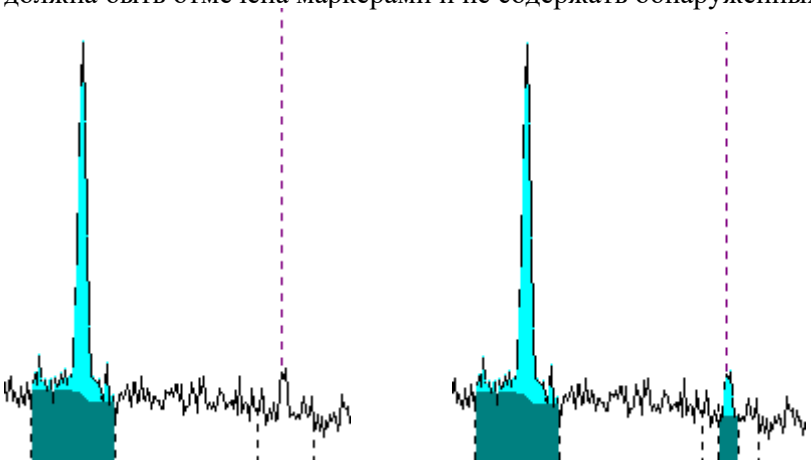
В итоге получим вполне приемлемую картинку:



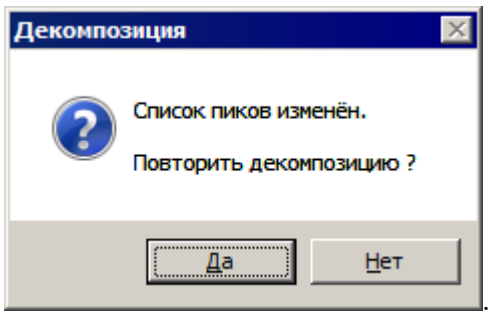
Вызвав пункт меню «***Удалить группу пиков***», оператор может удалить все пики в предварительно отмеченной области спектра.



Пики, пропущенные процедурой автоматического поиска, можно добавить в список пиков, вызвав пункт меню «***Добавить пики***». Область спектра с пропущенными пиками должна быть отмечена маркерами и не содержать обнаруженных пиков:



Ручная корректировка списка пиков и, соответственно, спектра непрерывного рассеяния может производиться и непосредственно в процедуре декомпозиции. Процедура корректировки списка пиков в этом случае доступна либо в режиме «***Пауза***», либо после завершения декомпозиции в режиме просмотра результатов декомпозиции. Если корректировка списка пиков была проведена в режиме просмотра результатов декомпозиции, при закрытии формы отчёта о результатах обработки программа выводит

сообщение 

. При ответе «**Да**» декомпозиция будет продолжена с новым списком пиков и новым спектром непрерывного рассеяния.

Обработка спектров. Радиометрия

При щелчке по кнопке (выбору пункта меню «***Обработка / Радиометрия / Пуск***») запускается процедура вычисления «суммарной активности»[6], суммарной эффективной активности[7] и мощности излучения пробы по предварительно заданным параметрам границ энергетического окна и эффективности регистрации излучения в этом окне.

При этом главное окно программы принимает тот же вид, что и при декомпозиции спектра (см. «Обработка спектров». «Декомпозиция»), но не формируются два дополнительных окна. Установка параметров процедуры радиометрии производится по пункту меню «***Обработка / Радиометрия / Настройка..***» (см. «Радиометрия». «Установка параметров»).

Отчёт о результатах обработки

В пакете «SpectrRad» оператор имеет возможность создавать любые формы отчётов результатов измерений. Принцип формирования отчёта заключается в том, что данные о результатах обработки, пробе, средстве измерений, нормативной документации и т.п. могут включаться в предварительно сформированный документ (**шаблон отчёта**). Шаблон отчёта представляет собой документ MsWord произвольной формы, в котором в текст включены специальные метки. Меткой является определённое слово из заданного набора слов, заключённое в фигурные скобки, например **{Sample}** (см. параграф «Метки шаблона отчёта»). При формировании отчёта метки замещаются данными о спектрометре, исследуемой пробе и результатах обработки. В итоге формируется отчёт требуемой формы в виде документа MsWord. Выбор нужного шаблона отчёта может производиться программой калькулятора в зависимости от группы, к которой принадлежит тип пробы (например, для группы «Продукты» одна форма шаблона, а для группы «Грунты» другая) и от результата обработки спектра (соответствие или не соответствие каким-либо нормативам) (см. «Калькулятор»).

Если нет необходимости использовать шаблон отчёта, отчёт виде документа MsWord не формируется, но в любом случае программа формирует обязательный «внутренний» отчёт в соответствии с заданными в шаблоне декомпозиции параметрами настройки формы такого отчёта.

---

[6] **Суммарная активность** - условная активность пробы равная интенсивности радиоактивного излучения от пробы. Суммарная гамма активность - число гамма квантов излучаемое пробой за 1 секунду, суммарная альфа и бета, соответственно, - число альфа и бета частиц в единицу времени.

.

[7] **Суммарная эффективная активность** – активность пробы равная активности выбранного нуклида (для гамма излучения – Ra-226) при равной энергетической мощности излучения.

Достаточно подробная форма «внутреннего» отчета декомпозиции спектра может иметь следующий вид (на примере результатов обработки реального спектра):

Результаты декомпозиции

Файл Правка Сервис Формат Справка

Закрыть

"SpectrRad" **Версия 1.0.0** **03.07.2020**

Файл: C:\Program Files\Borland\CBuilder5\Projects\Russian \SpectrRad\ППД спектрометрия\1504070938210_2.SRR

Спектрометр: Полупроводниковый гамма спектрометр N 1902-94

Свидетельство о поверке: N 48810.21952. Действительно до 24.04.2003 г.

Геометрия: Сосуд "Маринелли" 1 л.

Шаблон обработки: "Неравновесные_ЕРН"

Таблица нуклидов: "Nuclides\LongLive.ncl"

Код пробы: s0

Оператор: Казаров В.Н.

Тип пробы: Грунт

Описание пробы: Грунт 2-999

Заявитель: Чл Казаров

Место отбора: г.Королев, ул.Пионерская

Масса счётного образца: 1279 г

Дата производства: 06.04.2015

Дата доставки: 06.04.2015

Окончание отбора: 06.04.2015 9:00:00

Дата измерения: 06.04.2015 16:39:36

Время измерения: 7717.1 с

Нуклид	Интенсивность (%) \ Невязка	Активность (Бк/кг)	Неопределённость (Бк/кг)	(%)
Cs-137	0 \ 1.9	0	7	
K-40	*0.1 \ 3.8*	*130*	*120*	*95*
Ra-226	0.6 \ 2.5	260	160	62
Rn-222	11.3 \ 2.8	220	30	14
Th-228	56.1 \ 2.7	1060	100	9.9
Th-232	30.5 \ 1.9	1120	110	9.5

Нуклиды: 101%

Фон: 0%

Модель: 101% от общей интенсивности пиков 29.5 имп./сек.

Комптон: 113 имп./сек.

Невязка: 2.2 /3.8 /0.0 (Норма - не более 3)

Мощность гамма изл.: 3.107e-04 +/- 4.5e-06 мкВт/кг

Энергетический диапазон: 40 - 1800 кэВ .

Дрейф: Общий лин. 5.2e-03% (Ку=1, Нш=-0.104 кан.), Текущий 6.8e-03%, Нелин. -4.3e-03%, Разрешения 0%

Zeff: 0.0+0.0, Толщина пробы 30.2 +0.0 мм.

Активности приведены на 06.04.2015 16:39:36

Интенсивности приведены усреднённые за время измерения.

Здесь:

- **Файл -** название файла с результатами обработки.
- **Спектрометр, свидетельство о поверке** – описание спектрометра.

- **Дополнительные сведения** – дополнительные сведения о спектрометре, методике измерений или нормативной документации.
- **Геометрия** – геометрия измерений.
- **Шаблон обработки** - использованный сценарий обработки спектра.
- **Таблица нуклидов** – использованная при обработке таблица нуклидов.
- **Код пробы**[8], **наименование пробы** - шифр и краткое описание пробы.
- **Оператор –** оператор, производивший измерение.
- **Тип пробы –** наименование группы зарегистрированных в программе типов проб. Тип пробы связан с действующими нормативами НРБ, САНПиН и включает описание химического состава вещества пробы, влияющего на поглощение излучения в веществе счётного образца.
- **Описание пробы, производитель, заявитель** - текстовые поля описания пробы.
- **Интенсивность (%) \ Невязка**- вклад в спектр в исследуемом энергетическом диапазоне (в процентах) зарегистрированных импульсов от данного нуклида и невязка декомпозиции для данного нуклида - парциальная невязка. При обработке спектров без выделения пиков спектры всех нуклидов коррелированны друг с другом из-за спектра комптоновского рассеяния, поэтому все парциальные невязки равны общей невязке декомпозиции.
- **Активность (Бк/кг)** - активность нуклида в Беккерелях на килограмм.
- **Неопределённость (Бк/кг)** – неопределённость (погрешность) измерений в Беккерелях на килограмм. Неопределённость соответствует 95% доверительной вероятности.
- **Неопределённость (%)** – неопределённость в процентах к активности нуклида.
- **А.эфф.** - эффективная активность нуклидов. Суммарная активность нуклидов нормированная по мощности гамма излучения на излучение Ra-226 (гамма эквивалент радия).
- **< - знак «меньше»** показывает, что приведен верхний порог (max(МДА или Акт.+Погр.)).
- **Нуклиды** - суммарная оцененная интенсивность излучения от нуклидов в указанном энергетическом интервале.
- **Фон** - интенсивность излучения фона.
- **Модель** - сумма фонового излучения и оценки вклада нуклидов, нормированная на зарегистрированную интенсивность излучения от пробы.
- **Невязка** - нормированное на предполагаемую величину отклонение рассчитанной модели от измеренного спектра $G = \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / G_i^2)/(n-m)}$. Приводятся три значения: **общая невязка/ невязка декомпозиции/ невязка сравнения**. **Общая невязка** – отклонение спектра от модели во всём использованном при обработке энергетическом диапазоне. **Невязка декомпозиции** – максимальное значение из списка парциальных невязок (парциальная невязка – невязка для данного нуклида) и невязки решения системы уравнений. При превышении парциальной невязкой допустимого уровня, данные для данного нуклида выделяются красным цветом и курсивом. **Невязка сравнения** – отклонение полученных значений активностей от значений априорных данных (данных сравнения). Невязка сравнения отлична от нуля, если при обработке спектра использовались априорные данные. Используется при поверке спектрометра.
- **Энергетический диапазон** - левая и правая границы энергетического диапазона спектра использованные при обработке.

[8] Название терминов и параметров: "Спектрометр", "Геометрия", "Проба", "Код пробы", "Описание пробы", "Производитель", "Заявитель", "Место отбора", "Примечание", "Параметр 1", "Параметр 2" при формировании отчета копируют названия колонок архива измерений, которые могут устанавливаться оператором (см. "Архив результатов измерений". "Настройка архива").

- **Дрейф** - энергетический дрейф спектрометра, оцененный по результатам обработки.

В качестве неопределённости (погрешности) используется 95% доверительный интервал и в отчёте может быть приведена либо полная неопределённость оценок активности $\Delta_x = \sqrt{(2\sigma_x)^2 + (E_0 \cdot x)^2 + (E_i \cdot x)^2}$, либо случайная составляющая полной неопределённости $\Delta_x = 2\sigma_x$. Здесь: σ_x - значение оценки стандартного отклонения для активности нуклида *x*. E_0 – относительная погрешность задаваемая в параметрах декомпозиции и связана с нарушениями геометрии измерений, погрешностью оценки количества пробы и т.п. E_i - относительная погрешность рассчитываемая при калибровке спектрометра и связана с погрешностью аттестованных значений активности в эталонах (при использовании моноэталонов она равна погрешности аттестации эталонов). Для наглядности таблица активностей нуклидов в отчёте, в том случае если приводится случайная составляющая полной погрешности, выводится синим цветом.

Величины невязки и интенсивности модели определяют достоверность разложения (декомпозиции) спектра. Понятно, что наилучшими величинами являются: 1.0 для невязки и 100% для модели, рассчитанной на дату проведения измерений. Отклонения в геометрии измерений, не соответствие плотности пробы плотностям эталонов, перегрузка спектрометра, не компенсированный энергетический дрейф, наличие неучтенных нуклидов в пробе или нарушение радиоактивного равновесия в цепочках нуклидов, предполагаемых равновесными, приводят к увеличению невязки. **Значительное увеличение невязки, выше выбранного опытным путем и установленного уровня (обычно 2.0), говорит о недостоверности разложения и вероятном присутствии неучтенных нуклидов**.

Другие стандартные формы отчета отличаются от приведенной степенью подробности, и не требует дополнительных комментариев.

В том случае, если шаблон декомпозиции содержит программу калькулятора, отчет может содержать дополнительные данные. Содержание и форма вывода данных при этом зависят от программы калькулятора.

По завершении обработки, компьютер выводит таблицу результатов в выбранной форме на экран дисплея. Результаты можно вставить в шаблон отчета (документ Word или текст в формате RTF). При вставке результаты измерений и параметры пробы замещают специальные метки (см. «Создание шаблона декомпозиции»). Результаты можно отредактировать, пересчитать на дату отбора пробы, на величину исходного материала пробы, настроить форму отчёта, изменить используемый шрифт и напечатать, щелкнув по соответствующей «клавише» панели кнопок или открыв соответствующий пункт меню:

открыть шаблон отчета (пункт меню «***Файл \ Открыть...***»),

печать (пункт меню «***Файл \ Печать...***»),

пересчет на дату отбора (пункт меню «***Сервис \ Пересчитать на дату отбора***»),

пересчет на исходную величину пробы (пункт меню «***Сервис \ Пересчитать на сырую пробу***»).

«Кнопка» (пункт меню «***Сервис \ Округлять результаты***»), служит для включения / выключения режима округления результатов. В том случае если список определяемых нуклидов формировался процедурами автоматического определения состава, включение / выключение режима округление результатов влияют также и на список нуклидов приводимых в отчёте. При выключенном режиме округления приводится весь список нуклидов, при включённом - только те нуклиды, из добавленных процедурами автоматического определения состава, относительная погрешность

определения активности которых, меньше определённого уровня связанного с точностью округления.

«Кнопка» (пункт меню «***Сервис \ Экспорт в Word***») - передача содержимого окна отчета в «Microsoft Word».

«Кнопка» (пункт меню «***Сервис \ Экспорт в Excel***») - передача содержимого окна отчета в «Microsoft Excel».

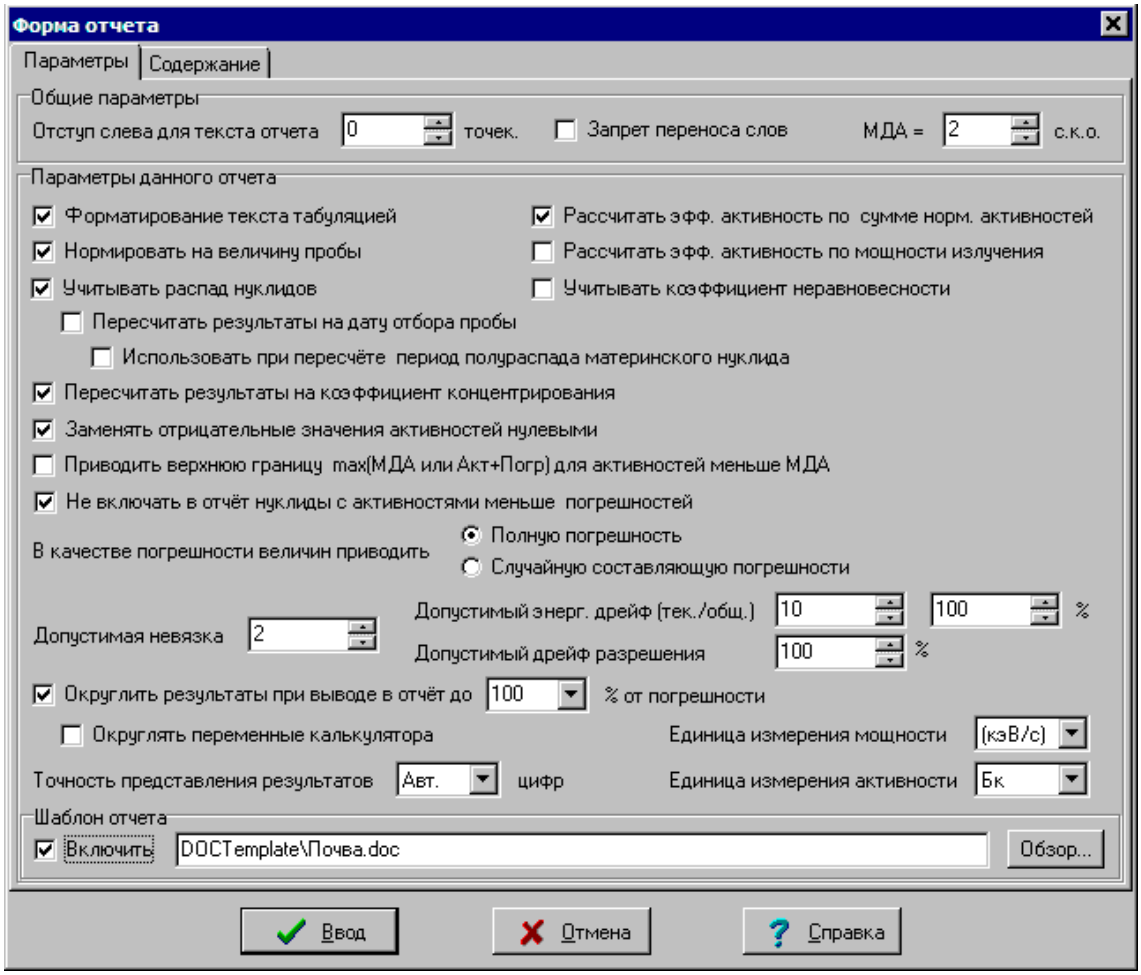
Нажатие на «кнопку» (пункт меню «***Сервис \ Вставить картинку***») вставляет картинку главного окна программы с рисунком декомпозиции спектра в текст отчёта. Позиция вставки картинки в отчёт определяется положением курсора.

«Кнопка» (пункт меню «***Формат \ Шрифт...***») - установка шрифта для выделенного текста или, если нет выделенного текста, установка шрифта для текста результатов обработки. Если шрифт устанавливается для всего отчёта, то установка атрибутов шрифта: "*курсив*" и "**жирный**" не происходит, поскольку процедура формирования отчёта самостоятельно устанавливает требуемые атрибуты. Установка атрибутов "*курсив*" и "**жирный**" производится только для выделенного текста.

Линейка форматирования текста позволяет установить левое (⇩) и правое (⇧) поля для выделенного текста или для текущей строки, если нет выделенного текста. Указатель ↑ устанавливает отступ для текста перенесенного на новую строку при автоматическом переносе слов.

Настройка формы отчёта

«Кнопка» (пункт меню «***Формат \ Форма отчета...***») - настройка содержания и формы отчета. При этом на экран выводится окно настройки формы отчёта:



Форма имеет две страницы: «**Параметры**» и «**Содержание**». На странице «**Параметры**» две группы:

Общие параметры - параметры, используемые при формировании всех отчетов:

- **Отступ слева для текста отчета** - отступ от левой границы формы до текста отчёта. Величина задается в точках. Параметр используется в том случае, если отчет не включается в шаблон отчёта (в этом случае его положение определяется положением метки **{Report}** или **{Table}**).
- **Запрет переноса слов** - установка или запрет режима автоматического переноса слов в абзаце.
- **МДА =** - установка значения минимально детектируемой активности в величинах среднеквадратичных отклонений.

Параметры данного отчёта:

- **Форматирование текста табуляцией** – при установке флажка процедура формирования отчёта перед каждым новым абзацем текста содержащего описания пробы, спектрометра, условий измерения будет включать символ табуляции для выравнивания текста по первой позиции табуляции (положения «красной» строки).
- **Нормировать на величину пробы** - вывод значений удельной или общей активности пробы. Нормировка на величину пробы означает деление оценённой активности счётного образца на массу счётного образца – то есть расчёт удельной

активности счётного образца. При одновременной установке флажков «**Нормировать на величину пробы**» и «**Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования»** в отчёт выводится оценённая удельная активность исходного материала пробы.

- **Расчитать эфф. активность по сумме норм. активностей.** При установке "галочки" в отчете будет приведена суммарная эффективная гамма активность пробы. В качестве эффективной принято считать активность нуклидов эквивалентную активности Ra-226. Данные о коэффициентах эквивалентности для нуклидов программа расчета берет из рабочей библиотеки нуклидов и, в том случае, если коэффициент гамма эквивалента Ra-226 для нуклида отличен от нуля, вклад нуклида в суммарную эффективную активность пробы будет учтён. Надо учитывать, что такой расчёт эффективной активности для стандартного набора коэффициентов (три коэффициента: 1 – для Ra-226, 1.3 – для Th-232 и 0.09 – для K-40) будет корректен только в случае, если в пробе присутствуют только K-40, Ra-226 и Th-232 находящиеся в состоянии радиоактивного равновесия с дочерними нуклидами.
- **Расчитать эфф. активность по мощности излучения** – при установленной «галочке» программа производит расчёт суммарной эффективной активности по мощности альфа, бета или гамма излучения в сравнении с мощностью выбранного вида излучения 1 Бк указанного нуклида сравнения.
- **Учитывать распад нуклидов** – при установленной «галочке» активности нуклидов будут пересчитаны на заданную дату (дату начала измерений или дату отбора), в противном случае будут приведены усреднённые за время измерения активности. По умолчанию активности пересчитываются на дату начала измерений с учётом процессов распада и накопления нуклидов в цепочках распада. Корректный пересчёт в общем случае невозможен – в цепочке нуклидов, не оформленной как равновесная цепочка, могут присутствовать нуклиды, не определяемые при данном виде спектрометрии. А корректный расчёт активностей какого либо нуклида на заданную дату с учётом процессов накопления и распада нуклидов в цепочке возможен только при знании активностей всех предшествующих в цепочке распада нуклидов. В этом случае рекомендуется не учитывать распад нуклидов, а окончательный расчёт активностей провести с помощью программы «Nuclides» после оценки активностей всех нуклидов в цепочке.
- **Пересчитать результаты на дату отбора пробы** – при установленной «галочке» активности нуклидов будут пересчитаны на дату отбора пробы, в противном случае – на дату начала измерений.
- **Использовать при пересчёте период полураспада материнского нуклида –** при установленном флажке для пересчёта активности на начало измерений или на другую дату будет использоваться период полураспада материнского нуклида, если он присутствует в списке определяемых нуклидов и период полураспада материнского нуклида больше периода полураспада пересчитываемого нуклида (предполагается радиоактивное равновесие с материнским). Кроме того, при установленном флажке при расчёте активностей будут учитываться только процессы распада нуклидов, процессы накопления в цепочках распада учитываться не будут.
- Установка флажка «**Учитывать коэффициент неравновесности**» позволяет учитывать нарушения равновесности в цепочке распада не учитываемые при расчёте равновесных цепочек (эманация, вымывание нуклидов и т.п.), в том случае если активность нуклида определяется по излучению другого нуклида равновесной цепочки. При этом активность нуклида рассчитывается с учётом коэффициента неравновесности. Коэффициент неравновесности связан с типом пробы и задаётся как «**Kneq.(Норматив 5)**» при формировании нормативов и

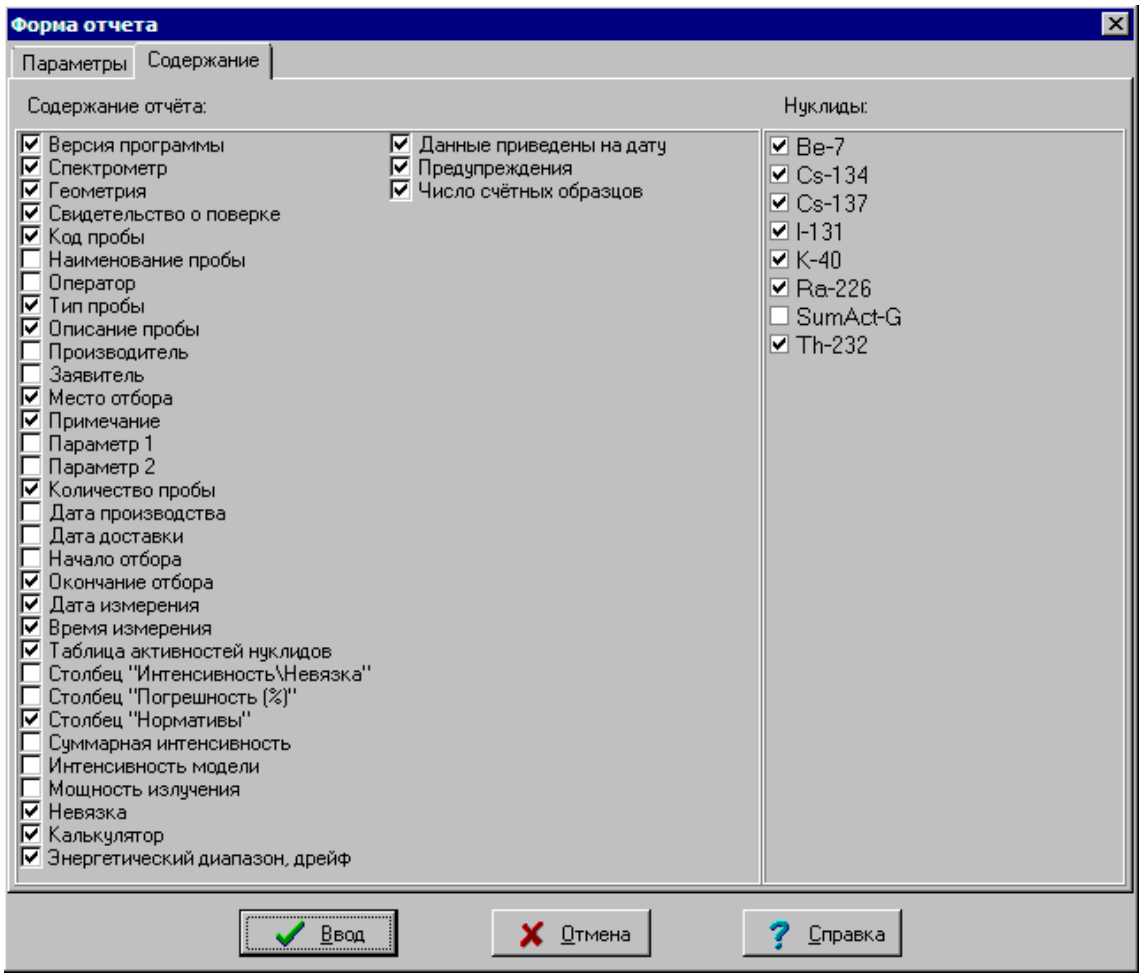
констант для выбранного типа пробы и конкретного нуклида (п. меню «***Сервис/Нормативы и константы…***»).

- **Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования –** вывод активностей нуклидов исходного материала пробы (при отмеченном пункте) или активностей нуклидов в счётном образце.
- **Заменять отрицательные значения активностей нулевыми** – в том случае, если при обработке спектра разрешены отрицательные значения активностей, при установке «галочки» отрицательные значения активностей в отчёте будут заменены нулевыми.
- **В отчёте приводить верхнюю границу max (МДА или Акт+Погр) для активностей меньше МДА**. При установке «галочки» в отчете будет приводиться верхняя граница значений для величин имеющих оценки активностей меньше минимально детектируемых в соответствии с рекомендациями ISO и IEC. Для таких величин в отчёте приводится или **МДА** или **Активность+Погрешность** со знаком “<“ или словом «менее» в зависимости от того, какая величина больше. Значение МДА в единицах средне-квадратичных отклонений задается в параметрах настройки архива.
- При установке флажка «**Не включать в отчёт нуклиды с активностями меньше погрешностей**» в отчёте будут приведены записи только для нуклидов с относительной погрешностью определения активности менее 100 %.
- **В качестве погрешности величин приводить «Полную погрешность»** или **«Случайную составляющую погрешности»** - оператору предоставляется выбор одного из двух вариантов представления погрешности в отчёте. При выборе случайной составляющей погрешности таблица активностей в отчёте будет выведена шрифтом синего цвета.
- **Допустимая невязка, допустимый дрейф**. Процедура декомпозиции спектра рассчитывает общую невязку разложения и изменение параметров энергетической калибровки и разрешения спектрометра - дрейф спектра. В том случае если рассчитанные значения превышают допустимые, в отчёте выводится соответствующее сообщение: при превышении допустимой невязки - «**Возможно присутствие значимых неучтенных компонентов**», при превышении допустимого энергетического дрейфа - «**Дрейф выше допустимого, необходимо произвести автокалибровку тракта спектрометра**», при превышении допустимого дрейфа разрешения - «**Дрейф разрешения выше допустимого, необходимо произвести калибровку тракта спектрометра**». Оператор имеет возможность изменять данные параметры процедуры декомпозиции и таким образом редактировать отчёт.
- **Округлить результаты при выводе в отчёт до nn % от погрешности** – установка режима и формы округления оценок активностей нуклидов в отчёте. При установке 100% округления, значения активностей и погрешностей в отчёте будут приведены в соответствии с требованиями МИ 2453-2000. В том случае если список определяемых нуклидов формировался процедурами автоматического определения состава, включение / выключение режима округление результатов и точность округления влияют также и на список нуклидов приводимых в отчёте. При выключенном режиме округления приводится весь список нуклидов, при включённом - только те нуклиды, из добавленных процедурами автоматического определения состава, относительная погрешность определения активности которых, меньше определённого уровня связанного с точностью округления.
- **Округлять переменные калькулятора** – при установке флажка будут округляться при выводе в отчёт и переменные программируемого калькулятора. Поскольку процедура округления в данном случае не имеет сведений о погрешности округляемой величины, значение величины будет округлено с относительной точностью 10% от заданной точности округления. Например, если

задано 100% округление и значение величины равно **353.265**, то в отчёте эта величина будет округлена до 10% точности и представлена как **350**. Для корректного округления рассчитываемых в калькуляторе величин необходимо пользоваться существующими в калькуляторе функциями округления.

- **Точность представления результатов** – выбор количества цифр для представления результатов в отчёте. Значение «**Авт.**» - соответствует автоматическому определению необходимой точности представления результатов. При этом незначащие нули не выводятся.
- **Единица измерения активности** – выбор единицы измерения (Беккерель или Кюри) в которых будет приведена активность нуклидов в отчёте.
- **Единица измерения мощности** – выбор единицы измерения рассчитываемой процедурой мощности излучения от пробы (кэВ/с, Мэв/с, мкВт или Вт) в которых будет приведена мощность в отчёте. Мощность излучения рассчитывается в пределах выбранного энергетического диапазона.
- **Шаблон отчета** - оператор, при желании, может указать файл шаблона отчёта. Файл должен содержать текст шаблона, сохранённый в формате RTF или в виде документа Word (DOC, DOCX). Пример шаблона отчёта приведен в приложении. Кнопка Обзор... - обзор существующих шаблонов отчётов.

Вторая страница содержит две таблицы:



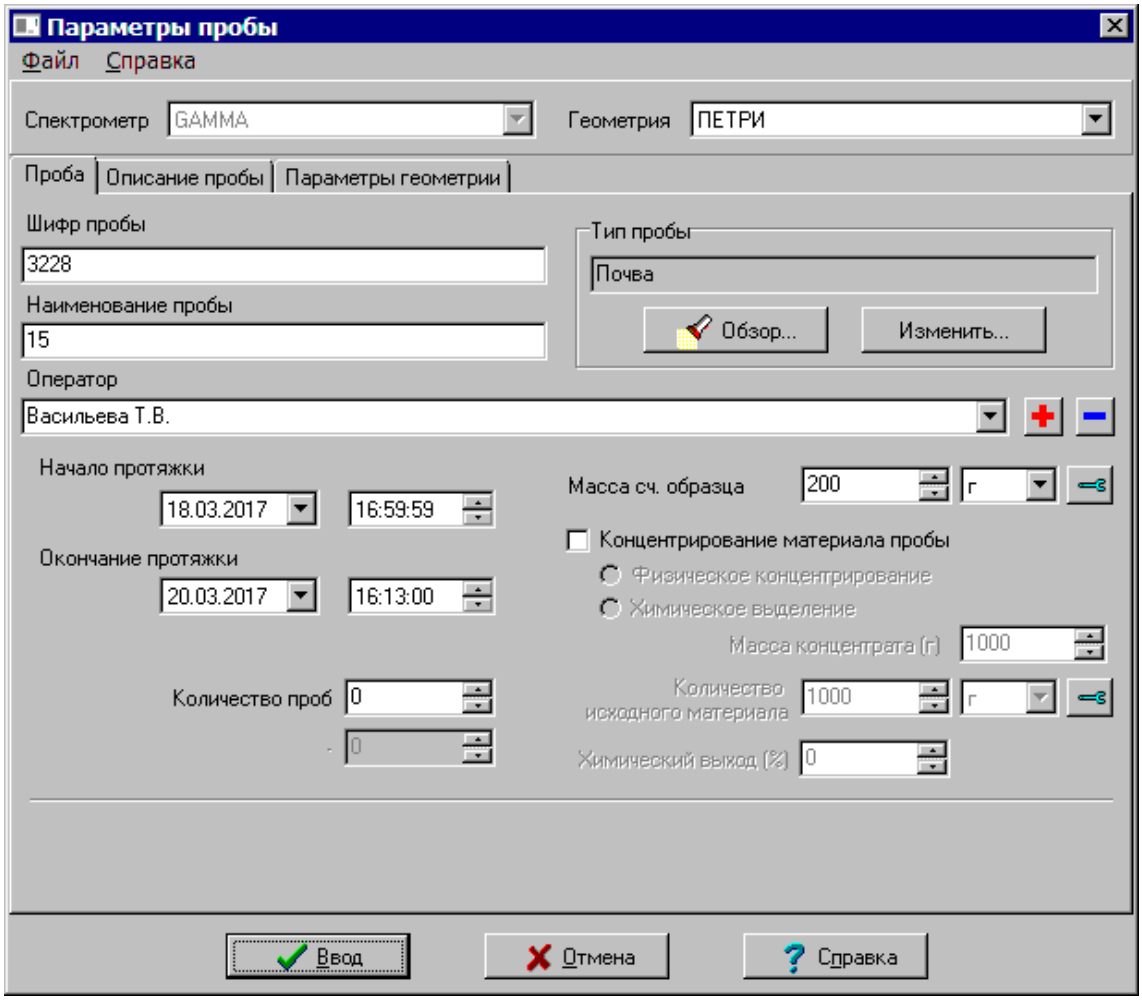
- Таблица «**Содержание отчёта**» позволяет задать строки и столбцы формы вывода результатов обработки спектров, которые будут приведены в отчете.

- Таблица «**Нуклиды**» позволяет выбрать из общего списка определенных нуклидов те нуклиды, которые будут приведены в отчете. Все определяемые нуклиды процедуры декомпозиции делятся на два сорта: нуклиды, заданные оператором, и нуклиды, включённые процедурами автоматического определения состава. Для тех нуклидов, что заданы оператором, только оператор может указать приводить их в отчёте или нет. Для нуклидов, включённых в список процедурами автоматического определения состава, решение о включении их в отчёт на этапе формирования отчёта принимает процедура обработки в зависимости от параметров округления. При выключенном округлении в отчёт включается весь список нуклидов, при включённом только те нуклиды из списка, погрешность оценок активностей которых меньше определённого уровня связанного с точностью округления. Общий список нуклидов, для учёта суммарной альфа, бета и гамма активности пробы дополняется тремя условными нуклидами: **SumAct-A**, **SumAct-B** и **SumAct-G** (в примере приведена форма настройки отчёта обработки гамма спектра и, соответственно, указан условный нуклид **SumAct-G –** суммарная гамма активность пробы).

Редактирование отчёта

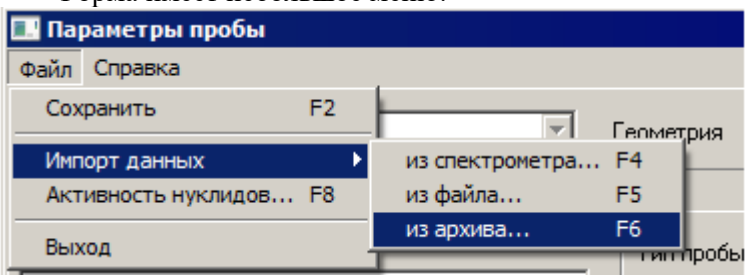
Пункт меню «***Правка***» позволяет отредактировать содержание отчёта. Весь список операций этого пункта меню (***«Вырезать», «Копировать», «Вставить»***, и т.д.) кроме последней строки списка предназначены для редактирования текста отчёта. Изменения в тексте отчёта не затронут основной двоичный файл результатов обработки и не изменят содержание строки о записи результатов обработки в журнале измерений.

Последняя строка «***Редактировать файл результатов…***» позволяет отредактировать двоичный файл результатов обработки спектра, сформированный процедурой декомпозиции. При вызове процедуры редактирования файла результатов на экране появится форма редактирования параметров пробы:



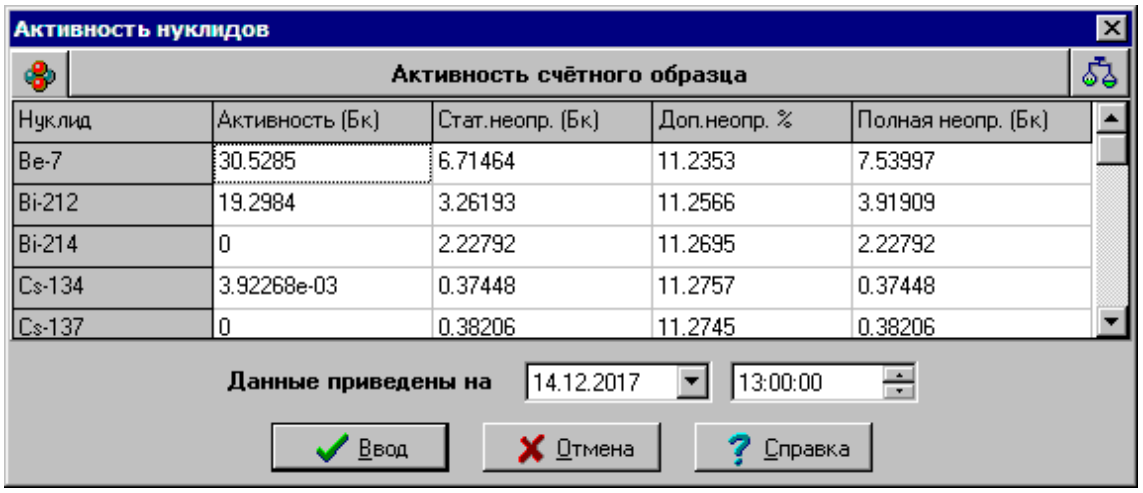
Нельзя изменять параметры пробы, которые могут повлиять на эффективность регистрации излучения в детекторе (масса счётного образца, тип пробы, параметры геометрии измерений). Для этого можно воспользоваться процедурой редактирования параметров пробы вызываемой из главного меню программы SPECTRRAD «***Сервис/Параметры спектра…***». В этом случае процедура декомпозиции будет повторена для учёта таких изменений. В том случае, если, например, изменение типа пробы меняет только нормативы и не изменяет химический состав счётного образца, а значит не меняет поглощение излучения (а в пакете SPECTRRAD база данных по нормативам и химическому составу счётных образцов объединена), можно воспользоваться процедурой редактирования файла результатов обработки, поскольку повторная декомпозиция в этом случае не требуется, а пересчёт соответствия активностей нормативам процедура редактирования выполнит.

Форма имеет небольшое меню:



Пункт меню "***Файл / Импорт данных***" позволяет импортировать параметры пробы из другого спектрометра, файла спектра или из выбранной записи архива, что позволяет экономить время на заполнение полей формы.

Пункт меню «***Файл/Активность нуклидов…***» формы «**Параметры пробы**» позволяет отредактировать список нуклидов и рассчитанных значений активностей, добавить в файл результатов обработки данные об активностях нуклидов полученные на других приборах или внести данные об аттестованных значениях активностей нуклидов. При этом на экране появится форма ввода априорных данных об активностях нуклидов:

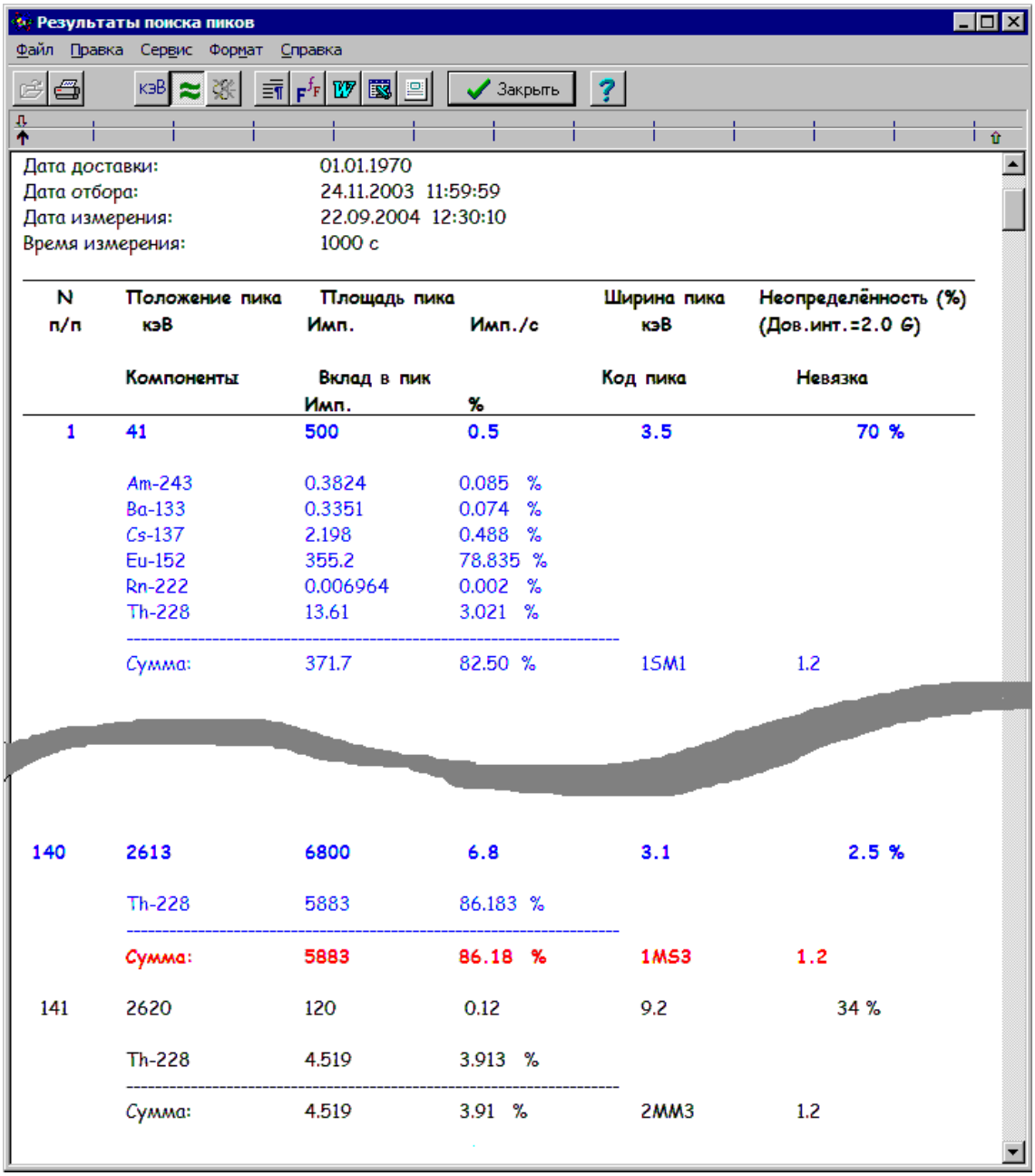


Нуклид	Активность (Бк)	Стат.неопр. (Бк)	Доп.неопр. %	Полная неопр. (Бк)
Be-7	30.5285	6.71464	11.2353	7.53997
Bi-212	19.2984	3.26193	11.2566	3.91909
Bi-214	0	2.22792	11.2695	2.22792
Cs-134	3.92268e-03	0.37448	11.2757	0.37448
Cs-137	0	0.38206	11.2745	0.38206

Оператор имеет возможность отредактировать данные об активностях и неопределённостях пробы, изменить список нуклидов (кнопка). Данные могут вводиться либо в форме общей активности пробы (счётного образца), либо в форме удельной активности. Кнопка переключает форму ввода. В качестве неопределённости должна указываться случайная составляющая общей неопределённости в абсолютных значениях и дополнительная неопределённость в процентах от активности, полную неопределённость процедура рассчитывает самостоятельно.

Список найденных пиков

При обработке линейчатых спектров с поиском пиков оператор может вывести список найденных пиков, щелкнув мышкой по пункту меню «***Сервис \ Найденные пики...***». При этом на экран выводится окно списка пиков, найденных в заданном для обработки энергетическом диапазоне спектра. Например:



Результаты поиска пиков

Файл Правка Сервис Формат Справка

Закрыть

Дата доставки: 01.01.1970
Дата отбора: 24.11.2003 11:59:59
Дата измерения: 22.09.2004 12:30:10
Время измерения: 1000 с

N п/п	Положение пика кэВ	Площадь пика Имп.	Имп./с	Ширина пика кэВ	Неопределённость (%) (Дов.инт.=2.0 G)
	Компоненты	Вклад в пик Имп.	%	Код пика	Невязка
1	41	500	0.5	3.5	70 %
	Am-243	0.3824	0.085 %		
	Ba-133	0.3351	0.074 %		
	Cs-137	2.198	0.488 %		
	Eu-152	355.2	78.835 %		
	Rn-222	0.006964	0.002 %		
	Th-228	13.61	3.021 %		
	Сумма:	371.7	82.50 %	1SM1	1.2
140	2613	6800	6.8	3.1	2.5 %
	Th-228	5883	86.183 %		
	Сумма:	5883	86.18 %	1MS3	1.2
141	2620	120	0.12	9.2	34 %
	Th-228	4.519	3.913 %		
	Сумма:	4.519	3.91 %	2MM3	1.2

Форма содержит пронумерованный список пиков с расшифровкой вклада компонентов (фона, нуклидов) формирующих спектр в каждый пик. Пики, использованные для расчёта активности нуклидов, выделяются синим цветом. В том случае если суммарный вклад компонентов не соответствует (в пределах погрешности) ста процентам, он отмечается красным цветом.

Строка «**Сумма:**», кроме вклада в пик линий компонентов формирующих пик, содержит код пика и невязку разложения пика на модели линий и спектр непрерывного рассеяния. Код пика – шифр из пяти или четырёх цифр и букв описания пика:

1-ый символ – номер пика в мультиплете.

2-ой символ – буква **W** может отсутствовать. Если буква **W** присутствует в коде пика, это значит, что параметры пика определены недостоверно.

3-й символ – буква **S** – пик определён как синглет, **M** – пик определён как мультиплет.

4-й символ – буква **S** – мультиплет раскрыт, **M** – мультиплет не раскрыт.

5-й символ число раскрытых пиков в мультиплете.

Кнопка

(пункт меню (***Сервис / Шкала энергий/Шкала каналов***») переключает шкалу энергий в шкалу каналов и обратно.

Дополнительные возможности

Нажатие на «кнопку» (пункт меню «***Сервис / Вставить картинку***») вставляет картинку главного окна программы с рисунком декомпозиции спектра в текст отчёта. Позиция вставки картинки в отчёт определяется положением курсора.

Использованную при обработке таблицу нуклидов оператор может посмотреть, вызвав пункт меню «***Сервис / Таблица нуклидов...***».

Пункт меню «***Сервис / Априорные данные***» - просмотр априорных данных (данных сравнения), использованных при обработке спектра.

Оператор может отредактировать выведенный текст и, при желании, скопировать в окно любого текстового процессора или сохранить в виде файла, пользуясь основным меню или меню, вызываемым при нажатии на правую кнопку мышки (указатель мышки при этом должен находиться в окне формы «Результаты декомпозиции»). Выделять необходимый текст можно с помощью левой кнопки мышки (перемещая мышку при нажатой кнопке) или пользуясь клавишами перемещения курсора при нажатой клавише «Shift». Перемещая мышку при нажатой левой кнопке, выделенный текст можно перетаскивать как в пределах окна документа, так и между окнами.

Возможна и обратная операция - текст в символьном или RTF формате вставить в окно отчета из окна другого документа или окна другого отчета.

Сохранение отчета

Нажатие на клавишу

(пункт меню «***Файл / Сохранить***») сохраняет результаты обработки в архиве результатов измерений. При этом в случае успешной обработки спектра (невязка и дрейф не превышают допустимых значений) и при разрешении коррекции дрейфа в параметрах обработки, будет изменена и энергетическая калибровка обрабатываемого спектра (спектрометра) - в качестве новых калибровочных данных будут записаны данные, уточненные по результатам обработки спектра. Таким образом осуществляется процесс автоматической энергетической калибровки спектрометра при обработке рабочих проб.

При необходимости сохранить отчёт или двоичный файл результатов обработки (файл SRR) не в архиве измерений а в другой папке (например, после редактирования отчёта или файла результатов обработки сохранить его отредактированную версию в отдельной папке) можно воспользоваться пунктом меню «***Файл/Сохранить как…»***.

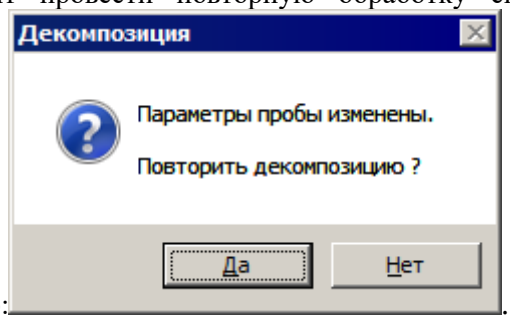
Отчет о результатах радиометрии

Отчет о результатах радиометрии имеет аналогичную форму и отличается только тем, что в таблице нуклидов присутствует только одна строчка - «**Суммарная**» активность пробы.

Редактирование параметров декомпозиции

В случае неудовлетворительных результатов обработки оператор имеет возможность изменить параметры обработки, параметры геометрии или параметры пробы и повторить декомпозицию. Для этого необходимо не закрывая отчёт изменить требуемые параметры и, в этом случае после изменения параметров, при попытке закрыть отчёт программа

предложит провести повторную обработку спектра с изменёнными параметрами, например:

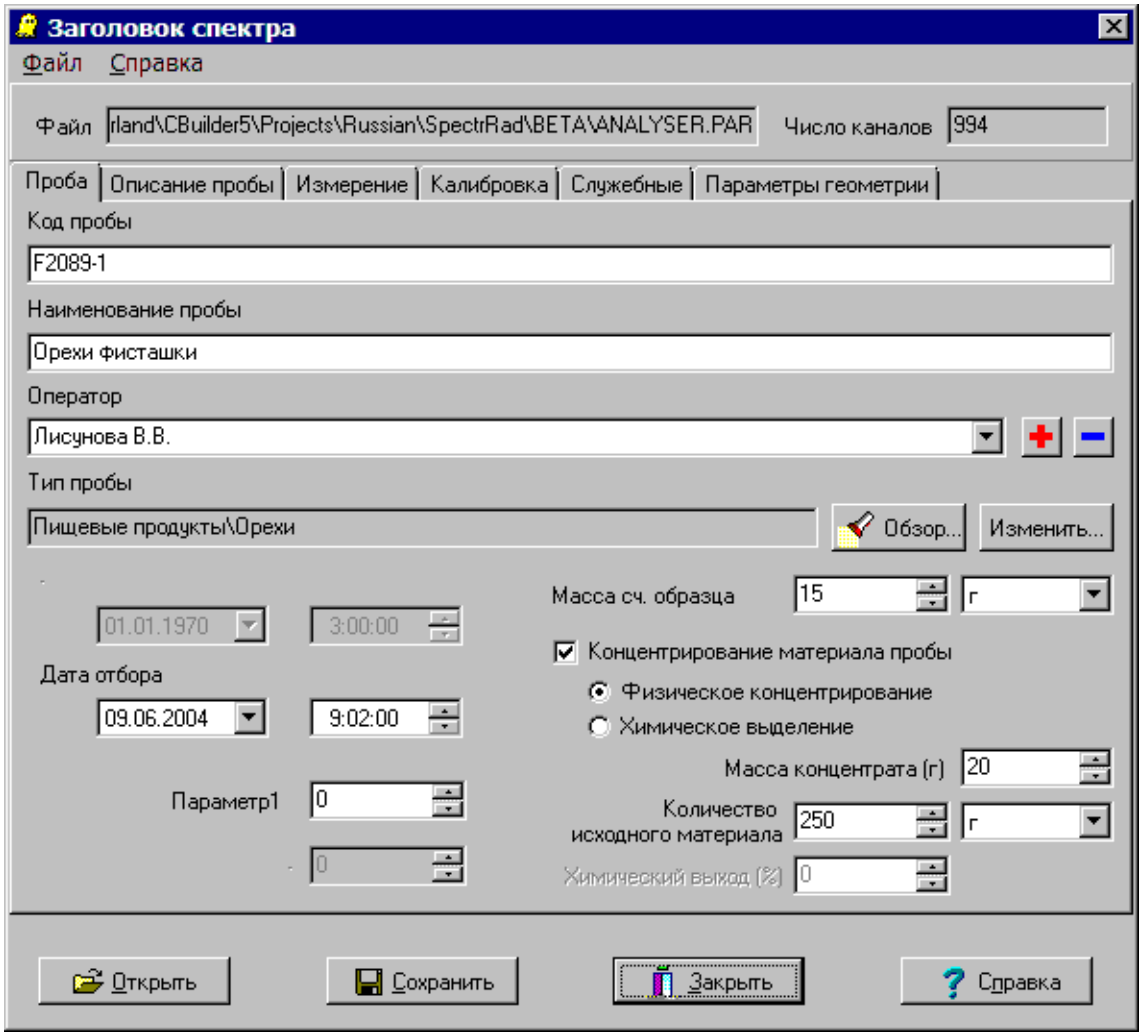


.

Параметры геометрии можно изменить, вызвав процедуру установки геометрии (п. меню «***Устройство / Геометрия / Установить...***»). Влияние на результаты обработки могут оказывать такие параметры геометрии как «**Объём геометрии**», «**Средняя толщина счётного образца**» и «**Режим интерполяции**», определяющие расчёт поглощения излучения в пробе.

Параметры декомпозиции редактируются вызовом процедуры создания редактирования шаблонов декомпозиции (п. меню «***Обработка / Декомпозиция...***», кнопка). Оператор может изменить список нуклидов, параметры обработки и программу калькулятора.

Параметры пробы можно изменить, вызвав пункт меню «***Сервис / Параметры спектра...***». При этом на экране появится форма редактирования заголовка спектра, например:



Оператор имеет возможность изменить данные на страницах «**Проба**», «**Описание пробы**» и «**Параметры геометрии**». Данные на остальных страницах в данном режиме запрещены для редактирования. На результаты декомпозиции влияют величины связанные с датами отбора и изменением эффективности регистрации излучения: геометрия измерений, масса счётного образца, расстояние от детектора и тип пробы связанный с нормативами и константами вещества счётного образца, определяющими поглощение излучения в веществе счётного образца.

Инструкция

При проведении рутинных измерений на настроенном на конкретный набор спектрометрических трактов и аттестованных геометрий спектрометре, работающем под управлением программного пакета «SPECTRRAD», вполне достаточно пунктуально следовать приведенной ниже инструкции «армейского» образца:

1. Включить питание компьютера и детекторов и прогреть аппаратуру в течение 30 минут.

2. Запустить головную программу пакета «**SPECTRRAD**», щелкнув по пиктограмме программы.

3. После запуска в окне программы визуализируются спектры, которые были открыты в прошлый сеанс работы с пакетом. Не нужные спектры можно закрыть. Для этого, выбрав мышкой спектр для закрытия, щелкните по кнопке панели инструментов (пункт меню «***Файл / Закрыть***»).

4. Для наблюдения за подключенными спектрометрами щелкнуть по кнопке (выбрать пункт меню «***Файл / Открыть / Спектрометр***» или нажать клавиши ***Ctrl+F3***), и в открывшейся табличке, выбрав необходимый спектрометр, щелкнуть по кнопке «***Ввод***». В окне появляется спектр спектрометра (после включения он может иметь произвольные значения). Можно открыть спектр спектрометра, щелкнув мышкой по названию спектрометра в окне «**Спектрометры**».

5. Провести автокалибровку тракта спектрометра. Для этого установить на детектор предназначенный для автокалибровки контрольный источник и, щелкнув по клавише (пункт меню «***Калибровка / Автокалибровка / Пуск автокалибровки…***»), запустить процесс автокалибровки включающий измерение контрольного источника в течение 100 - 300 секунд и обработку измеренного спектра с определением параметров дрейфа. В случае «плохих» результатов автокалибровки (превышение установленных значений для параметров дрейфа или невязки) необходимо выяснить причину (изменение параметров спектрометрического тракта, изменение фона, загрязнение домика и поверхности кристалла, неисправность аппаратуры) и устранить её.

6. Провести процедуру контроля фона в спектрометре: а) установить на детектор фоновую пробу (при рутинных измерениях в качестве фоновой пробы для гамма детекторов допускается использовать «голый» детектор без какой-либо пробы, для бета и альфа детекторов - пустую кювету), б) запустить процедуру контроля фона щёлкнув по клавише ФОН (пункт меню «***Фон / Контроль фона...***»). В случае «плохих» результатов контроля фона (превышение установленных значений для параметров невязки) процедура запрещает операцию смешивания измеренного фона с установленным в программе. В этом случае необходимо выяснить причину (изменение параметров спектрометрического тракта, изменение фона, загрязнение домика и поверхности кристалла, неисправность аппаратуры) и устранить её. Если причиной является изменение фона спектрометра, измеренный фон требуется установить в качестве рабочего, заменив старый.

7. Повторить процедуру автокалибровки.

8. Подготовить рабочую пробу: а) насыпать в сосуд аттестованной геометрии таким образом, чтобы вещество пробы равномерно заполняло объём сосуда, б) пробу установить на детектор соответствующего спектрометра. **Проведение измерений с использованием не аттестованных геометрий недопустимо.**

9. Запустить измерения, для чего щелкнуть по кнопке (пункт меню «***Устройство / Измерения / Пуск***»), или нажать клавишу «***F5***». В открывшейся табличке выбрать, если необходимо: ***спектрометр***, ***геометрию измерений***, ***режим набора*** (по живому или реальному времени), ***требование предварительной очистки памяти спектрометра***, ***режим измерений*** (циклический или обычный) и задать

необходимое ***время измерения*** в секундах (продолжительность измерений определяет точность измерений), нажать клавишу «***Ввод***».

10. В открывшейся дополнительной табличке заполнить графы необходимой информации о пробе.

11. После запуска измерений, в случае, если включено окно состояния спектрометров (пункт меню «***Устройство / Состояние***»), в окне состояния появляются сообщения о времени измерения, загрузке спектрометра, остаток времени до окончания измерений. В случае если загрузка больше установленного уровня, загорается желтый или красный индикатор перегрузки спектрометра. В этом случае необходимо либо использовать геометрию измерений меньшего объёма, либо разбавить рабочую пробу неактивным наполнителем и повторить измерения в соответствии с п.7-18.

12. Оператор может прервать измерения в любой момент, щелкнув по кнопке или нажав клавиши «***Ctrl+F5***» (пункт меню «***Устройство / Измерение / Стоп…***»).

13. Оператор может, при необходимости, ввести новые значения параметров пробы, щелкнув по клавише (пункт меню «***Файл / Открыть / Спектрометр…***»). Соответственно есть возможность, если время дорого, вводить данные о пробе после запуска измерений.

14. По окончании измерения на экране появится табличка «***Измерения закончены в спектрометре NAME***» (NAME - название конкретного спектрометра) и, при наличии звуковой платы, будет воспроизводиться мелодия, записанная в файле «***Измерения закончены.wav***».

15. Для обработки набранного спектра необходимо выбрать пункт меню «***Обработка / Декомпозиция…***» (кнопка , клавиши «***Ctrl+P***»).

16. В появившемся окне выбрать нужный из сформированных ***шаблонов декомпозиции*** или, если необходимо, сформировать режим обработки самостоятельно, щелкнув по клавише «***Создать***» и установив необходимые параметры обработки в выведенной форме «***Шаблон декомпозиции***».

17. При необходимости учета результатов обработки спектра данной пробы (пробы из того же материала), измеренной ранее или на другом детекторе (результаты обработки гамма спектра пробы при обработке бета спектра), в зависимости от установленного в шаблоне обработки режима поиска априорных данных, программа может либо самостоятельно искать необходимые данные, либо предложит оператору выбрать из базы данных результатов измерений необходимую запись. В том случае, если априорные данные отсутствуют в архиве измерений, программа может потребовать ввести их вручную.

18. По завершении обработки компьютер выводит таблицу результатов на экран дисплея. Результаты можно пересчитать на ***дату отбора пробы***, ***на величину сырой пробы*** и ***напечатать***, щелкнув по соответствующей «клавише» таблички. При желании можно сформировать желаемую форму отчета, щелкнув по клавише ***«Форма отчета»***, или выбрать другой вариант шаблона отчета, щелкнув по клавише «***Шаблон отчета***» .

19. Для запуска измерений новой пробы перейти к п.7 для бета спектрометра или п.8 для гамма и альфа спектрометра.

20. По завершении всех измерений и обработки спектра последней пробы провести процедуру автокалибровки спектрометра и по её завершении выйти из программы, щелкнув по кнопке в верхнем правом углу окна программы или нажав клавиши «***Alt+F4***» (пункт меню «***Файл / Выход***»).

Архив результатов измерений

Кнопка панели инструментов, пункт меню «***Сервис / Архив измерений***» или установка флажка «***Включить априорные данные***» в таблице параметров декомпозиции вызывает программу управления архивами результатов измерений. Запись результатов в архив производится автоматически по окончании измерений. При обработке записанного в архив спектра, производится обновление записи (включаются результаты обработки) и в архив записывается файл спектра фона используемого в обработке.

Программа управления архивами позволяет проводить статистическую обработку накопленных результатов, делать любые выборки по спектрометрам, геометриям, типам проб, временам отбора или измерения, активностям или погрешностям нуклидов, создавать графики, производить сортировку данных. Она дает возможность оператору повторно обработать любой спектр, сохраненный в архиве с другими параметрами обработки, отредактировать запись или сформировать новый отчет, передать данные в более мощные текстовые процессоры («Microsoft Word» или « Microsoft Excel») и т.д. и т.п.

Программа разрешает одновременный совместный доступ к архиву других пользователей, что позволяет создавать сетевые архивы, оптимизировать работу с архивами.

Структура архива

Архив результатов измерений - это папка с произвольным именем, задаваемым оператором при создании архива и два файла с тем же именем: файл оглавления (журнала измерений) с расширением **.dbf** и файл настройки с расширением **.ini**. Папка архива хранит файлы измеренных спектров и содержит две папки: папку **ISO** для хранения результатов обработки и папку **Backgr** для хранения спектров фона. Главная папка архива, файл оглавления и файл настройки должны находиться в одном каталоге. Например архив с именем «**Archive**» состоит из папки **Archive** и двух файлов **Archive.dbf** и **Archive.ini** находящихся в одном каталоге.

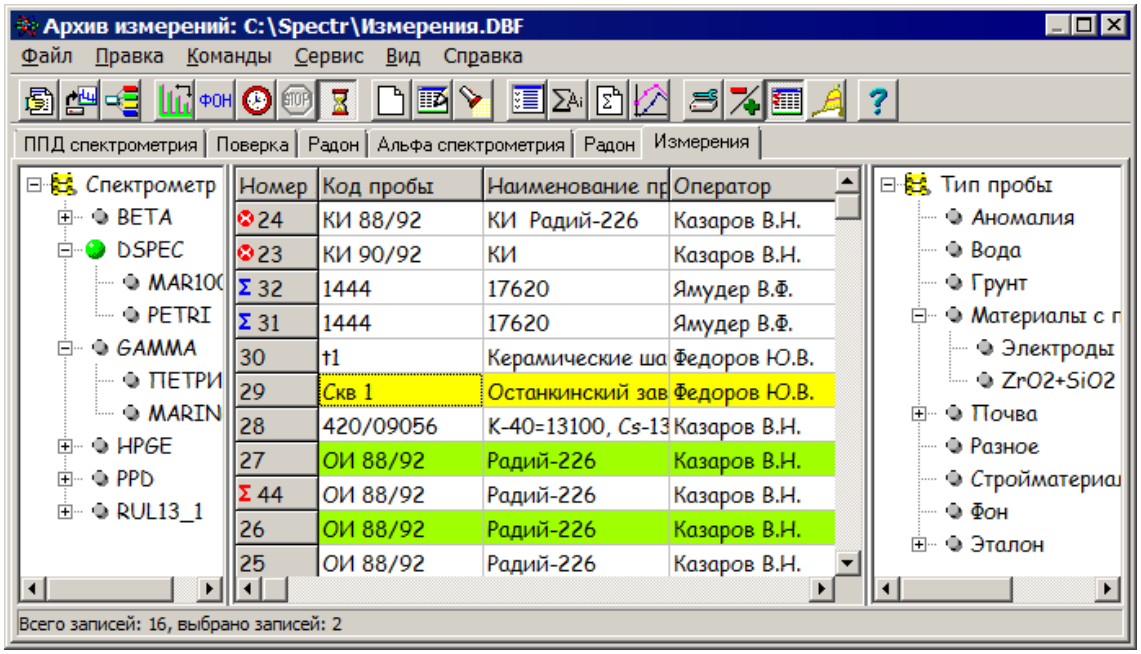
Журнал измерений – файл в формате **DBF** (давно и широко использующийся формат хранения данных) содержит информацию о сохранённых спектрах, параметрах пробы, параметрах процедуры измерений и результатах обработки спектров. Журнал измерений пополняется при сохранении результатов измерений в архиве и формируется каждый раз заново при изменении параметров архива сканированием спектров и результатов обработки.

Каждая строка журнала содержит информацию об одном проведённом измерении. Содержание колонок журнала частично фиксировано, частично настраивается оператором и приведено в главе «***Настройка архива***».

Количество, размер и расположение архивов ограничивается только возможностями компьютера. При настройке системы формируются необходимые архивы и устанавливаются связи между спектрометрическими трактами, геометриями измерений и архивами. Но поскольку для разных трактов, которые могут регистрировать различные виды излучений или иметь различные типы детекторов, списки нуклидов регистрируемых в журнале измерений (файле оглавления) будут различны, рекомендуется создавать отдельные архивы для каждого спектрометрического тракта. Система контроля качества спектрометрических измерений в программном пакете «SPECTRRAD» предусматривает для каждого спектрометрического тракта установку специальной геометрии «КИ» («Контрольный Источник») для проведения измерений контрольного источника. Для геометрии «КИ» рекомендуется создать отдельный архив и связать его с такими геометриями всех спектрометрических трактов для сохранения результатов процедур автокалибровки и контроля фона.

Главное окно

Окно программы управления архивами может выглядеть следующим, например, образом:



В верхней части окна - меню и кнопки панели инструментов. Ниже - страницы открытых архивов («ППД спектрометрия», «Поверка», …). В названии окна программы указывается визуализируемый архив («C:\Spectr\Измерения.dbf»).

В левом окне страницы архива - дерево подключенных спектрометров и установленных геометрий измерений. Оператор может просматривать либо записи для всех спектрометров, выбрав верхнюю строчку дерева - «**Спектрометры**», либо записи, относящиеся к конкретному спектрометру или конкретной геометрии измерений, выбрав нужную ветвь дерева спектрометров. Знак ⊞ перед узлом дерева указывает на то, что узел не раскрыт. Для его раскрытия щелкните мышкой по значку ⊞. Двойной щелчок по пиктограмме узла дерева либо раскрывает его, если он свёрнут, либо свертывает, если узел раскрыт.

В правом окне - дерево типов проб. Тип пробы - один из параметров спектра. С типом пробы связана информация о нормах СанПиН, НРБ и т.п. и химическим составом материала счётного образца. Оператор может просматривать либо записи для всех типов проб, выбрав верхнюю строчку дерева - «**Все типы проб**», либо записи, относящиеся к конкретному типу пробы, выбрав нужную ветвь дерева типов проб.

В основном окне страницы - таблица записей архива измерений. Текущая (или активная) запись отмечается желтым цветом (в том случае, если текущая запись является одной из группы выбранных записей, её цвет меняется на синий). Текущая запись участвует во всех операциях с одиночными записями: вывод отчета, обработка спектра, запуск измерений и т.п. Клавиши перемещения курсора вверх и вниз клавиатуры компьютера соответственно перемещают текущую запись. Нажатие на клавиши «**Home**» и «**End**» делают активной, соответственно первую или последнюю запись таблицы. Щелчок мышкой по записи делает её активной.

Первая колонка таблицы записей – номер записи в журнале измерений (файле **name.dbf**, где **name** – название архива) и символ типа записи:

- ⊗ Запись отмеченная для удаления. Записи помеченные для удаления визуализируются только при включённом режиме визуализации таких записей. При чистке архива они могут быть удалены.
- Σ Запись для спектра являющегося суммой спектров измеренных в режиме циклических измерений.

Σ Запись для результатов обработки являющейся статистической обработкой ряда результатов обработки спектров, рассчитанная процедурой «**Суммарный отчёт**»).

В зависимости от настройки архива в колонках неопределённостей для активностей нуклидов могут приводиться либо полные неопределённости, либо случайные составляющие неопределённостей. При выводе случайной составляющей ячейки неопределённостей в архиве будут окрашены в голубой цвет.

Оператор может выбрать группу записей (одна запись - частный случай группы), отмечая их мышкой при нажатой клавише «Ctrl» Можно пометить группу, щелкнув мышкой по последней записи в группе при нажатой клавише «Shift» - будет помечена группа от текущей записи до последней. Перемещение курсора вверх или вниз по таблице при нажатой клавише «Shift» или нажатие клавиши «Insert» изменяет выделение записей. Выбранные записи помечаются зеленым цветом и участвуют в групповых операциях: «Выборка», «Статистика», копирование или вырезка в буфер обмена, «Чистка архива».

Колонки таблицы могут быть фиксированными (отмечаются серым цветом) и обычными. Фиксированные колонки не участвуют в операции горизонтальной прокрутки и имеют фиксированную ширину.

Ширина обычных колонок (полей) таблицы | Тип пробы | Описание пробы | Место | может регулироваться оператором. Для этого необходимо установить указатель мышки на границу между полями, при этом указатель мыши примет вид и, удерживая левую кнопку мыши нажатой, перетащить границу в необходимое положение.

Записи таблицы можно отсортировать по значениям любой колонки таблицы - достаточно щелкнуть мышкой по кнопке с названием колонки. Направление сортировки указывается стрелкой слева от названия колонки.

В нижней части страницы строчка информации о количестве записей в таблице и количестве выбранных записей.

Правая кнопка мыши вызывает меню, содержание которого меняется в зависимости от положения указателя мышки и момента вызова. Часть пунктов меню дублирует функции главного меню.

Двойной щелчок по какой-либо записи архива выводит отчёт о результатах обработки спектра.

Меню

Пункт меню	*Действие*
Файл:	
Создать архив	Создать новый архив.
Открыть архив	Открыть один из существующих архивов.
Закрыть архив	Закрыть открытый (визуализируемый) архив.
Сохранить как	Сохранить архив под новым названием.
Копировать в архив[9]	Копировать содержимое открытого архива в указанный оператором архив. Копируются записи либо отсутствующие в архиве приёмнике, либо не

[9]Поскольку операции копирования, перемещения и удаления всего архива или его части перемещают и удаляют файлы и папки, предварительно должны быть закрыты все программы, которые могут обращаться к файлам и папкам архива, так как операционная система не позволяет перемещать или удалять файлы и папки, к которым имеют доступ другие программы, включая и программы просмотра (проводник, Norton commander, Windows commander и т.п.).

совпадающие с записями архива приёмника. По окончании операции откроется архив-приемник, содержащий сумму двух архивов.

Переместить в архив — Операция аналогичная операции «Копировать в архив», но по окончании операции архив-источник будет удален.

Переименовать архив — Переименовать архив.

Удалить архив — Удалить архив. При этой операции все файлы и папки архива удаляются в корзину. Будьте осторожны при удалении архива.

Выход — Закрыть окно «Архив измерений».

Правка:

Новая запись ***Ctrl+N*** — Создание новой записи. Оператор может ввести значения первых 9 параметров пробы используемых при запуске измерений.
Создание новых записей позволяет уменьшить суммарные затраты времени при проведении измерений, поскольку оператор может вводить данные по пробам до начала их измерений, например, во время измерения текущей пробы. Затем, используя запуск измерений из окна архива, использовать уже введенную информацию. При запуске измерений информация будет дополнена значениями величины пробы, датой начала измерений и т.п.

Редактировать запись ***Ctrl+M*** — Редактирование записи. Оператор может изменить значения параметров пробы вводимых при запуске измерений.

Импорт данных — Импорт содержимого указанных оператором колонок текущей записи в выделенные записи. Импортируемые данные замещают существующие.
Процедура позволяет производить групповое редактирование записей. Предварительно следует отредактировать текущую запись и импортировать данные выбранных колонок текущей записи в предварительно выделенную группу записей.

Перенос данных — Перенос содержимого указанных оператором колонок в другие колонки, «корзину» или из «корзины» в колонки. Очистка выбранных колонок.
Операция производится для всех выделенных записей архива.

Найти запись ***Ctrl+F*** — Поиск записей в архиве содержащих заданный оператором текст и удовлетворяющих заданным условиям.

Вырезать — Переместить выделенную часть записей архива в буфер обмена[10].

[10] Буфер обмена - временно создаваемый архив с именем "~ClipBoard". Он не может хранить более одной порции помещаемых в него данных (при каждом перемещении записей в буфер обмена, его

Копировать	Копировать выделенную часть записей архива в буфер обмена.
Вставить	Вставить записи из буфера обмена в открытый архив.
Выделить все Ctrl+A	Выделить все открытые записи.
Отменить выделение Del	Отменить выделение для всех открытых записей архива.
Инвертировать выделение Ctrl+I	Инвертировать выделение записей.
Скрыть (восстановить)	Удаление из архива выбранных записей. При этой операции записи не удаляются немедленно, а помечаются для удаления и удаление можно отменить, пометив, в режиме «Показывать скрытые записи», необходимые записи и повторно щелкнув мышкой по кнопке «Скрыть (восстановить)».

Команды:

Отчет Ctrl+R	Сформировать отчет для текущей (активной) записи архива. Операция доступна, если спектр соответствующий записи обработан.
Открыть спектр Ctrl+O	Открыть спектр текущей записи.
Обработать спектр Ctrl+P	Обработать спектры группы выделенных записей или спектр текущей записи, если нет выделенных записей. При обработке спектра из архива используется, в том случае если он существует, спектр фона также из архива соответствующий времени измерения спектра.
Запустить измерение F5	Запуск измерений. Преимущество запуска измерений из архива в том, что при этом все поля табличек, которые необходимо заполнить при пуске измерений, заполняются значениями предварительно выбранной записи и оператор имеет возможность не вводить их полностью, а только поправить. Кроме этого при запуске измерений из архива оператор имеет возможность продолжить измерения пробы в циклическом режиме.
Остановить измерение Ctrl+F5	Остановка измерений. Пункт меню и кнопка панели инстументов главного окна дублируется в панели инструментов журнала измерений для удобства - оператор может проводить измерения свернув главное окно, если в нём нет необходимости.
Пуск автокалибровки	Автоматическая энергетическая калибровка спектрометра по контрольному источнику. В режиме

содержимое переписывается), поэтому необходимо быть внимательным, применяя операцию "***Вырезать***".

F6

полного доступа доступна процедура автокалибровки (поверки) по спектру сохранённому в архиве измерений.

Контроль фона ***F7***

Контроль фона или установка спектра фона в программу обработки. Если выделена группа записей спектров фона, процедура будет повторяться для всех записей выделенной группы, начиная со спектра фона с наиболее ранней датой измерения.
Запуск процедуры контроля фона для одиночной записи из окна архива удобен тем, что оператор может заранее выбрать спектрометр и геометрию измерений.

Состояние **F8**

Включение/выключение режима вывода дополнительного окна «**Спектрометры**», содержащего сведения о параметрах текущих измерений.

Выборка

Формирование таблицы результатов измерений для заданной выборки. Форма представления результатов задается в параметрах архива.

Статистика

Расчет ряда статистических параметров для заданной выборки результатов измерений.

Суммарный отчёт

Ctrl+S

Объединение и усреднение результатов обработки для выбранных записей. Формирование суммарного отчёта.

График

Формирование графика зависимости Y=f(X) для значений выбранных записей любых числовых колонок журнала измерений. Для оси абсцисс (X) может дополнительно использоваться колонка даты измерения.

Сервис:

Настройка

Ctrl+T

Настройка параметров архива.

Импорт настроек

Импорт параметров архива из файла настройки параметров другого архива.

Чистка архива

Чистка архива. При этой операции из файла заголовка и из папки архива физически удаляются отмеченные для удаления записи и соответствующие им файлы спектров и результатов обработки.

Вид:

Показывать скрытые

Ctrl+D

Включение или выключение режима вывода записей помеченных как «скрытые». При включенном режиме «скрытые» записи выводятся со значком слева от записи.

Сетка ***Ctrl+G***

Режим вывода сетки для таблицы записей.

Панель кнопок

Включить или выключить «панель кнопок» под строчкой

меню, обеспечивающий более удобный способ доступа к некоторым пунктам меню.

Окно «Спектрометры» Включить/выключить окно «Спектрометры».

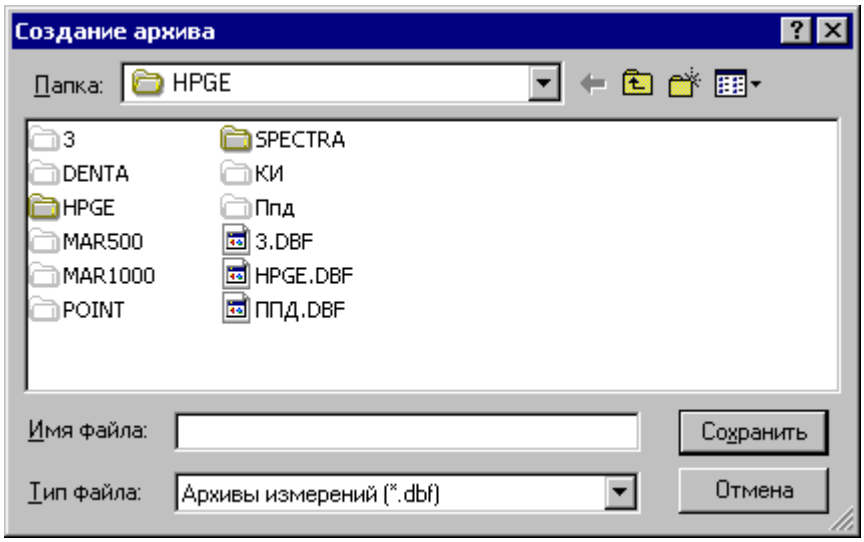
Окно «Тип пробы» Включить/выключить окно «Тип пробы».

Справка **F1** Описание программы

Создание архива

Архив может быть создан вызовом пункта меню «***Файл / Создать архив...***» либо на основе уже существующей папки с файлами спектров, либо с созданием новых папок. В первом случае процедура создания архива формирует журнал измерений (файл заголовка архива) просканировав все файлы спектров и файлы результатов обработки в указанной папке. При этом файлы результатов обработки, если они находятся в папке спектров, перемещаются в папку «**ISO**» создаваемую процедурой, если она не существовала. Во втором случае создаются все необходимые файлы и папки. Журнал измерений при этом, естественно, не будет содержать никаких записей.

Процедура создания архива формирует окно диалога следующего, например, вида:



Оператор при создании архива на основе существующей папки должен в графу «**Имя файла**» ввести название папки дополнив его расширением «.dbf» (например «**Spectra.dbf**») или, при создании нового архива, ввести произвольное название, отсутствующее в списке файлов и папок приведённых в данной форме, (например «**Archives.dbf**»).

Настройка архива

Количество визуализируемых колонок, строк, режим записи данных в архив, режим сортировки и другие параметры устанавливается при настройке архива - кнопка (пункт меню «***Сервис / Настройка...***»). При этом на экран выводится табличка:

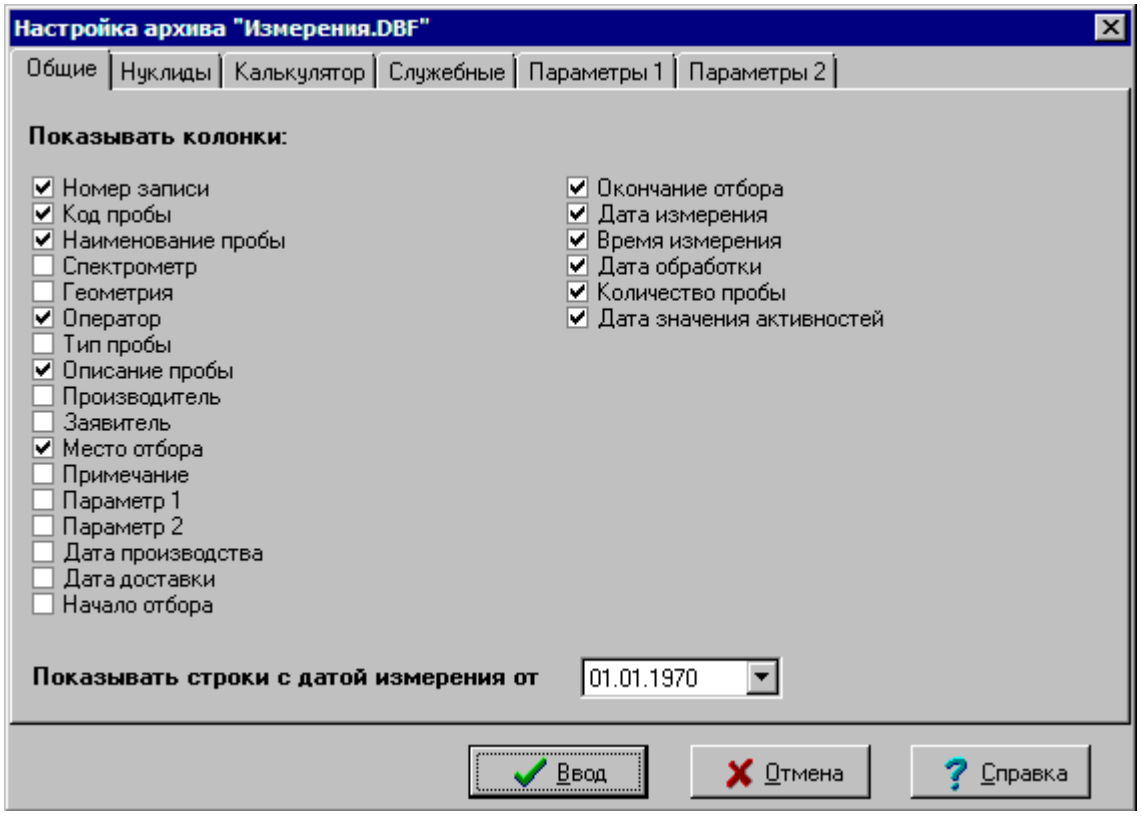


Таблица содержит шесть страниц: «**Общие**» «**Нуклиды**», «**Калькулятор**», «**Служебные**», «**Параметры 1**» и «**Параметры 2**».

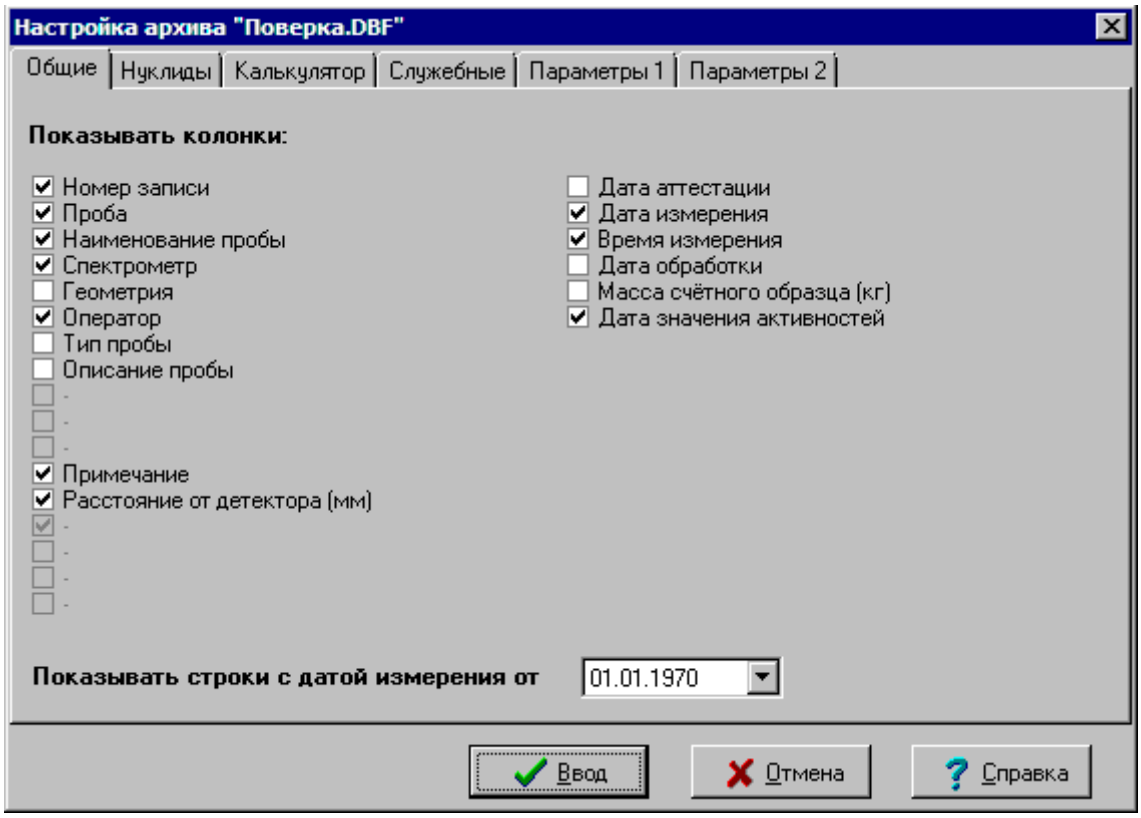
На первых четырёх страницах содержится список полей (колонок) записи архива. Оператор может пометить колонки, которые будут выводиться в журнале измерений (помечаются «галочками» в квадратном окошке перед названием колонки). Изменения производятся щелчком левой кнопки мышки по выбранному пункту или с помощью клавиш перемещения курсора (перемещение внутри раздела таблицы), табуляции (перемещение между разделами) и клавиши «пробел» (установка или удаление флажка).

На первой странице «**Общие**», список названий колонок для записи информации о пробе и параметрах измерения. Кроме списка колонок на ней находится форма для ввода даты - «**Показывать строки с датой измерения от**», позволяющая ограничить количество строк выводимых в журнале измерений. В журнале измерений будут приводиться строки (записи результатов измерений) с датой измерения не ранее указанной.

Оператор имеет возможность изменять названия первых семнадцати колонок (от колонки «Код пробы» до колонки «Окончание отбора») страницы «**Общие**» - для этого достаточно выбрать в таблице настройки нужную колонку и, нажав клавишу “Enter” (“Ввод”) или дважды щелкнув мышкой, ввести новое название колонки, завершив ввод нажатием на клавишу “Enter”. Начальные наименования колонок восстанавливаются при вводе “пустого” названия.

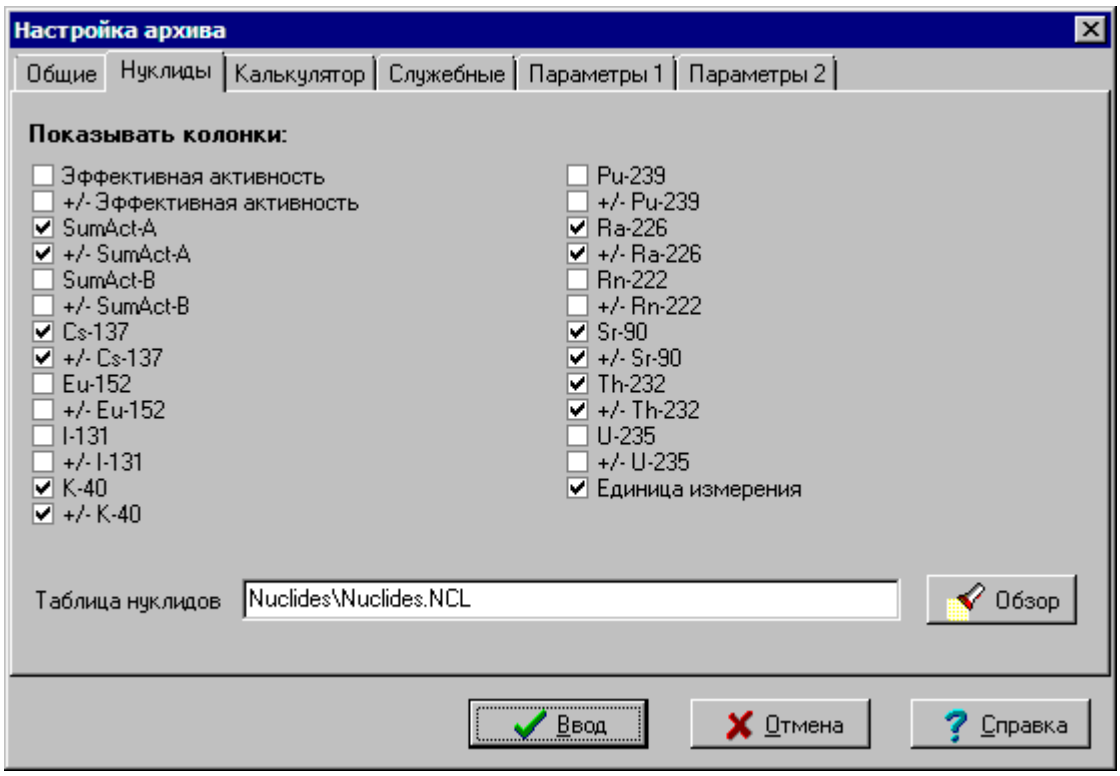
Колонка «**Количество пробы**» может менять своё название на «**Масса счётного образца (кг)**» либо удаляться из журнала в зависимости от настройки нормировки активностей на количество исходного материала или на массу счётного образца на странице «**Параметры 1**» настройки архива.

Если название колонки не будет содержать букв или цифр, программа удалит все графы с таким «бессмысленным» наименованием из всех форм (журнал измерений, формы отчётов, формы запуска измерений и сохранения спектров и т.п.) связанных с данным архивом измерений. В этом случае форма настройки журнала измерений может выглядеть следующим, например, образом.

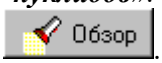


При удалении графы связанной с описанием пробы её поле в журнале измерений объединяется с полем описания пробы лежащим в записи о пробе левее. В этом случае объединённое поле будет иметь суммарную ёмкость. Таким образом можно объединять поля: «Код пробы» и «Наименование пробы», «Описание пробы» и «Производитель», «Описание пробы», «Производитель» и «Заявитель», «Производитель» и «Заявитель» и «Место отбора» и «Примечание».

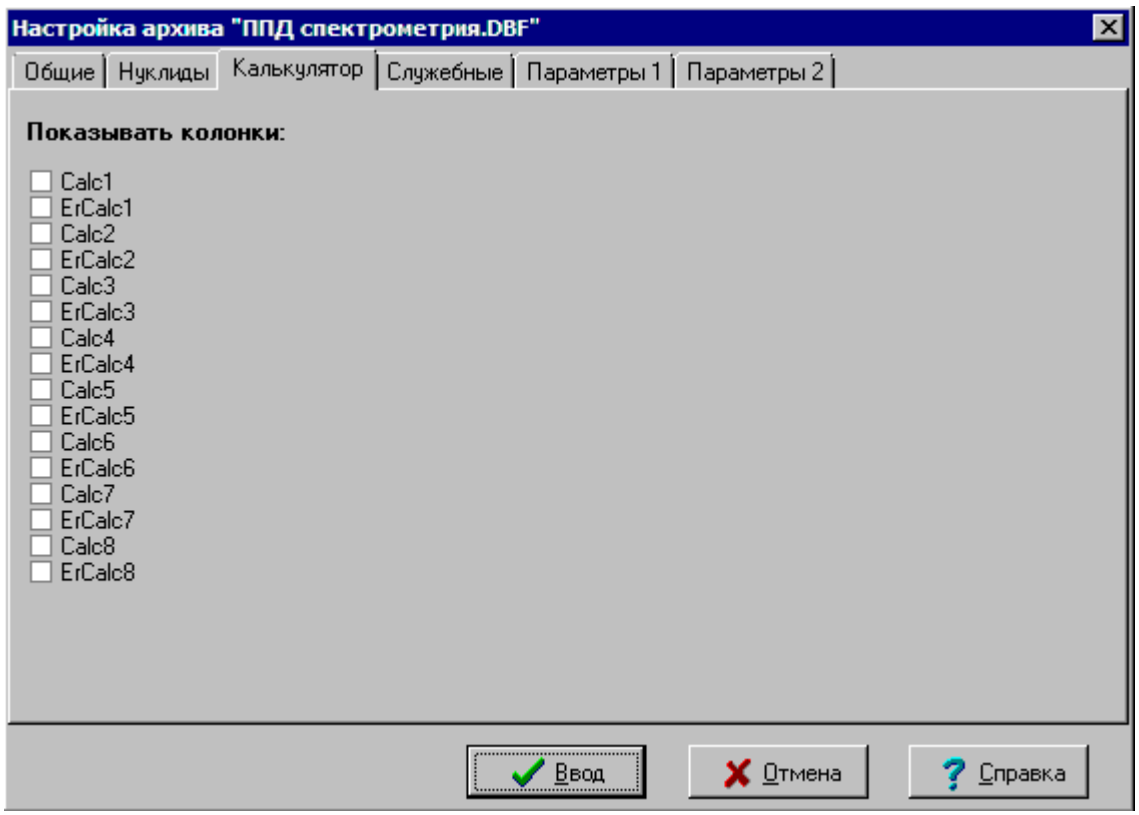
Вторая страница содержит список нуклидов, оценки активностей которых, полученные при обработке спектра пробы, будут представлены в журнале измерений:



В начале списка «***Эффективная активность***» и «+/- ***Эффективная активность***» - оценки величины и погрешности условной суммарной активности всех нуклидов определённых в пробе суммированных с коэффициентом «гамма эквивалента радия», который программа расчёта берёт из таблицы нуклидов, использованной при обработке спектра. Последняя колонка - наименование ***единицы измерения*** активностей и погрешностей.

Список содержит ограниченное количество нуклидов, но это не значит, что архив не сохраняет оценок активностей всех определённых при обработке спектра нуклидов. В архиве сохраняется всё. Для формирования требуемого списка нуклидов оператору необходимо дважды щёлкнуть мышкой по названию какого-либо нуклида (или, выбрав нужную строку списка, нажать на клавишу «Ввод») и выбрать нужный нуклид из предложенного программой списка. Список доступных нуклидов задаётся в строке «***Таблица нуклидов***». Необходимую таблицу нуклидов можно выбрать, нажав на клавишу 

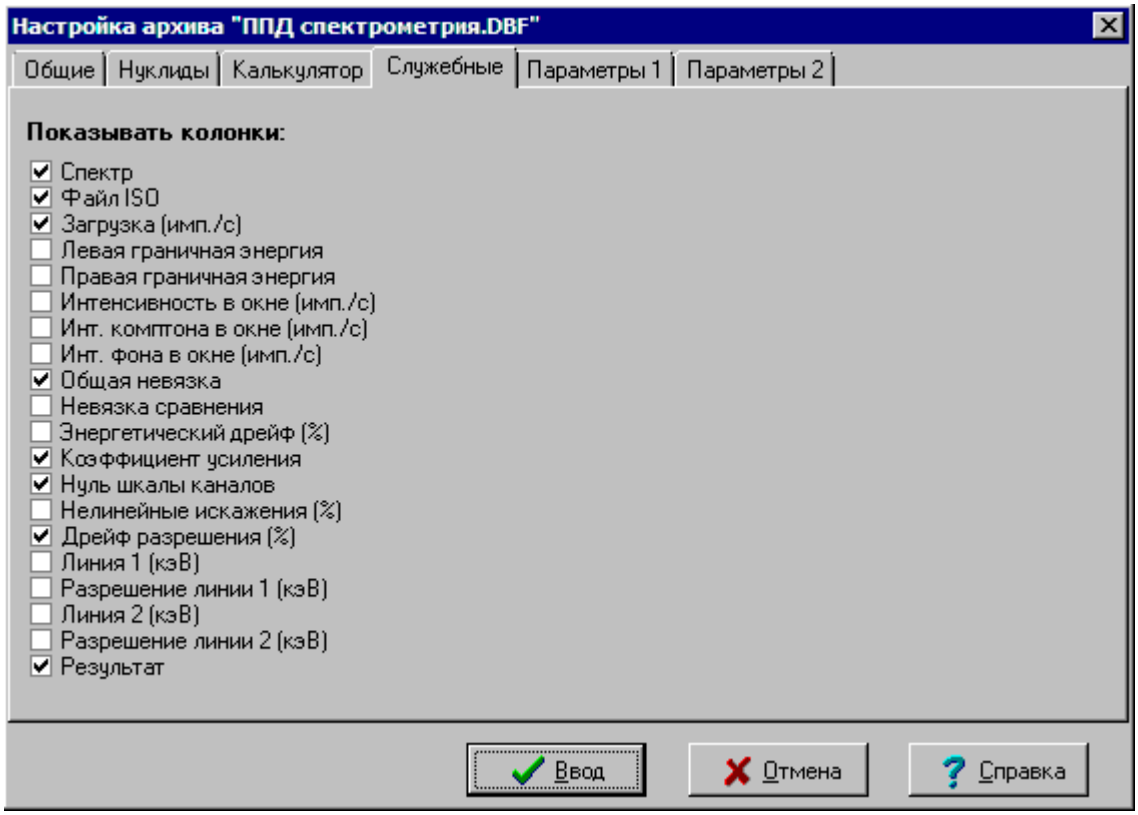
. При изменении списка нуклидов существующего архива программа переформирует журнал измерений, включив в него заданные нуклиды. При необходимости вывода в журнале измерений оценок активностей нуклидов, не включённых в данный список, их можно приводить в колонках калькулятора.



Страница «**Калькулятор**» содержит список из шестнадцати переменных «***Calc1***» - «***ErCalc8***» программируемого калькулятора, которые пользователь пакета «SPECTRRAD» может сохранять в архиве.

Оператор имеет возможность изменять названия колонок ***Calc1 - ErCalc8***, назначение которых устанавливает пользователь программы. Начальные наименования колонок восстанавливаются при вводе “пустого” названия.

Страница «**Служебные**» содержит список дополнительных параметров, рассчитываемых программой обработки спектров и необходимых для контроля параметров спектрометра и качества обработки спектра:



- Первые две строчки: «***Спектр***» и «***Файл SRR***» - название колонок, содержащих имена файлов спектра и результатов его обработки в архиве.
- «***Загрузка (имп./с)***» - общая интенсивность импульсов зарегистрированных в спектрометрическом тракте при наборе спектра.
- «***Левая граничная энергия***» и «***Правая граничная энергия***» - границы энергетического диапазона спектра использованного при обработке.
- «***Интенсивность в окне (имп./с)***» - интенсивность, зарегистрированная в энергетическом диапазоне спектра, использованном при обработке. В том случае если установлен режим вывода в качестве погрешности случайной составляющей погрешности (колонка при этом выделяется голубым цветом), в колонке приводится интенсивность импульсов зарегистрированных не в общем интегральном окне, а в используемых при оценке активности нуклидов энергетических окнах, определяемых программой обработки или заданных оператором. Такой режим записи в колонке обусловлен использованием данных, приведённых в колонке, при расчёте минимально измеряемой активности нуклидов в процедуре статистической обработки. В том случае, если для журнала установлен режим вывода полной погрешности, или если в процедуре обработки используется одно интегральное энергетическое окно (процедура контроля фона для любых спектров или стандартный режим обработки сцинтилляционных спектров), в колонку будет записываться полная интенсивность спектра в заданных энергетических границах.
- «***Инт. комптона в окне (имп./с)***» - при обработке спектров с выделением пиков - интенсивность импульсов зарегистрированных в спектре непрерывного рассеяния в окне обработки. При режиме вывода в качестве погрешности случайной составляющей погрешности (колонка при этом выделяется голубым цветом) –

интенсивность импульсов спектра непрерывного рассеяния зарегистрированных в используемых при оценке активности нуклидов энергетических окнах.

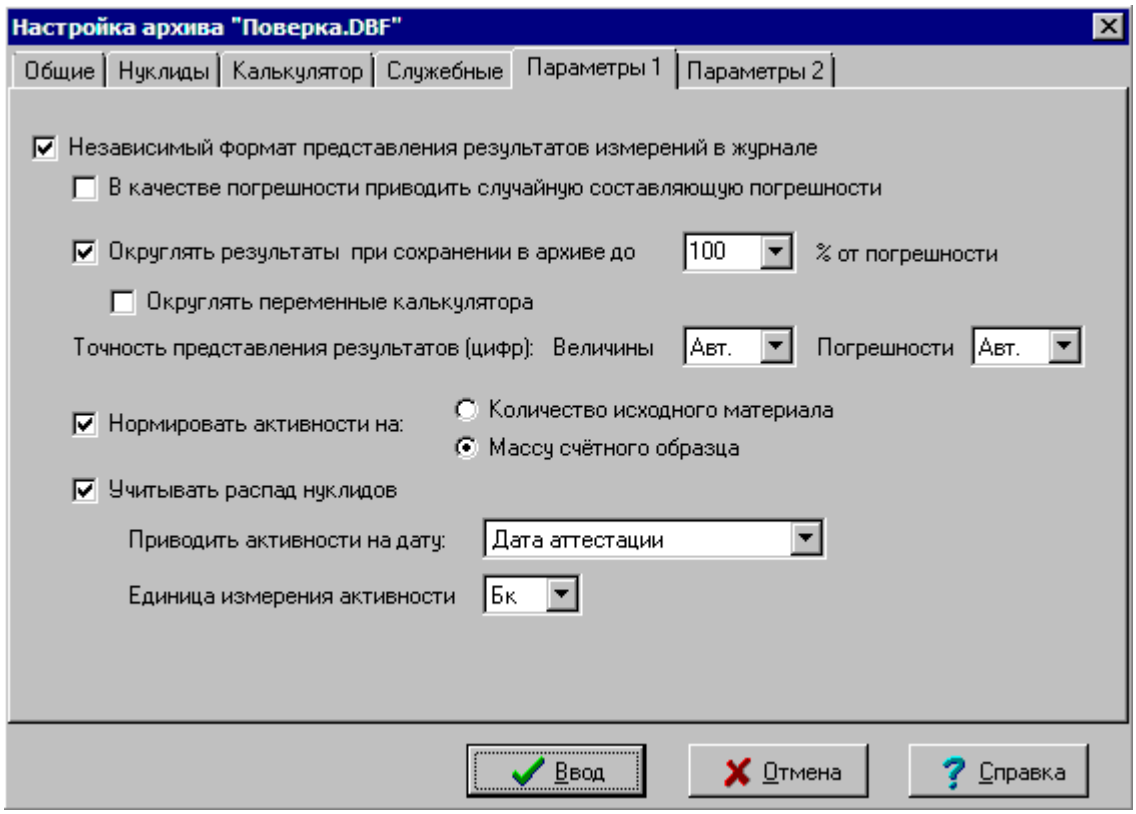
- «***Инт. фона в окне (имп./с)***» - интенсивность фонового излучения в тех же окнах.
- «***Общая невязка***»[11] - отклонение спектра модели от спектра пробы во всём диапазоне обработки спектра выраженное в стандартных отклонениях.
- «***Невязка сравнения***» – отклонение оценок активностей от априорных данных. Используется в процедурах ежедневной поверки спектрометра.
- «***Энергетический дрейф (%)»*** - суммарный дрейф коэффициента усиления и нуля шкалы спектрометрического тракта (в процентах) - оценка изменения коэффициента усиления и нуля шкалы относительно начальных значений (1 - для коэффициента усиления и 0 - для нуля шкалы) устанавливающихся при начальной энергетической калибровке спектрометра.
- «***Коэффициент усиления***» - значение условного коэффициента усиления тракта. При начальной калибровке «коэффициент усиления» равен единице, с течением времени он изменяется - дрейфует.
- «***Нуль шкалы каналов***» - значение условного нуля шкалы каналов. При начальной калибровке « нуль шкалы каналов « равен нулю. Его изменение соответствует дрейфу нуля энергетической шкалы в каналах.
- «***Нелинейные искажения (%)***» – максимальное отклонение от линейной модели дрейфа нормированное на длину спектра.
- «***Дрейф разрешения (%)***» – изменение разрешения спектрометра в процентах. Отрицательные значения соответствуют улучшению разрешения.
- «***Линия 1 (кэВ)***» - энергия левой граничной линии использованной при энергетической калибровке спектрометра.
- «***Разрешение линии 1 (кэВ)***» - разрешение спектрометра (ширина пика на полувысоте) для линии 1.
- «***Линия 2 (кэВ)***» - энергия правой граничной линии использованной при энергетической калибровке спектрометра.
- «***Разрешение линии 2 (кэВ)***» - разрешение спектрометра для линии 2.
- «***Результат***» - значение колонки «Результат» может состоять из одного знака «+» или «-», или из трёх - первый знак дополнен двумя знаками: «/+» или «/-». Первый знак - результат операции обработки спектра (декомпозиции или калибровки спектрометра). Знак «+» соответствует успешной обработке, знак «-» - неудачной. Неудачной операция обработки считается в случае превышения невязки или параметров энергетического дрейфа и дрейфа разрешения заданных порогов, или переданной «по наследству» неудачи обработки априорной информации при использовании Байесовского метода обработки спектра (например, совместная обработка бета и гамма спектров).
  Второй знак «+» или «-» - решение оператора при проведении операции автокалибровки и контроля фона: «+» - результат операции автокалибровки или контроля фона принят оператором, «-» - не принят.

«**Служебные**» колонки таблицы архива позволяют отслеживать изменение параметров спектрометра с течением времени. Рекомендуется создать отдельный архив для сохранения результатов автокалибровки спектрометра и процедуры контроля фона и установить для него визуализацию «служебных колонок».

---

[11] **Невязка** - нормированное на предполагаемые величины стандартных отклонений среднеквадратичное отклонение рассчитанной модели от объекта $G = \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / G_i^2)/(n-m)}$. Для общей невязки – объектом является измеренный спектр, моделью – сумма компонент разложения. Для невязки сравнения – объектом являются оценки активностей, моделью – данные сравнения.

Страница «**Параметры 1**» имеет вид:



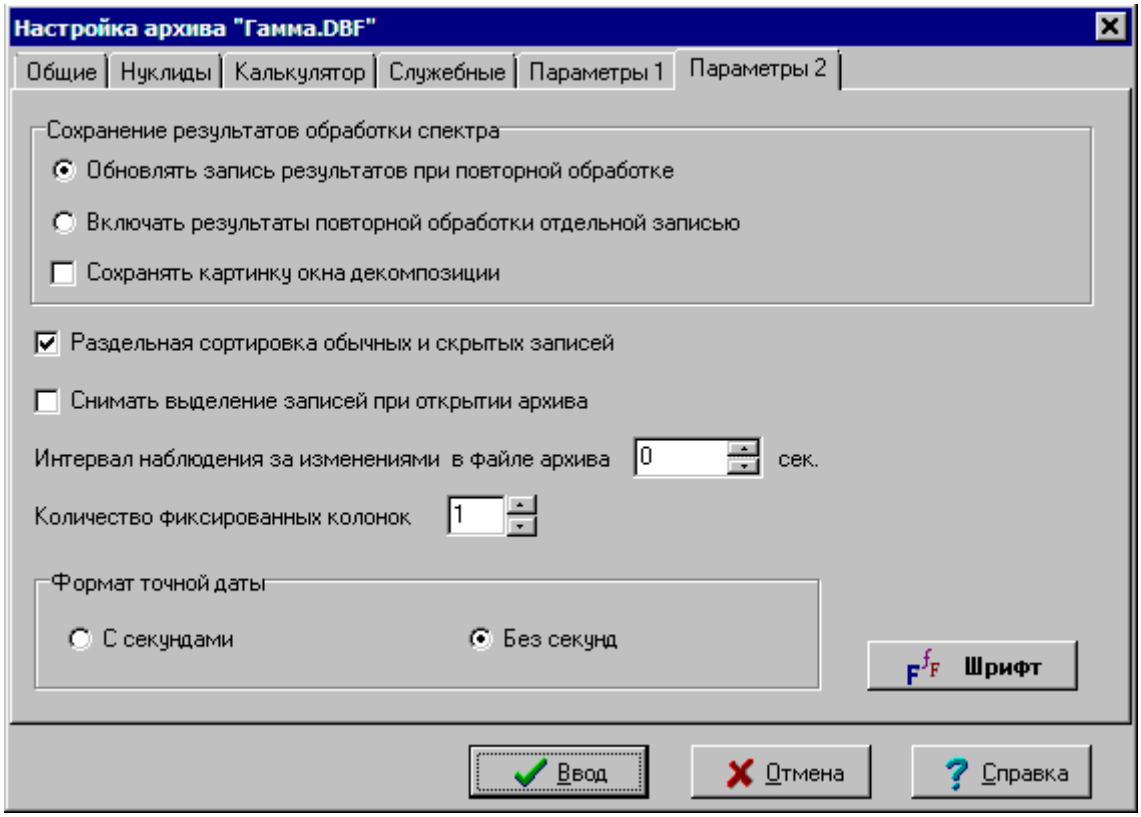
Журнал измерений используется не только для удобного доступа к измеренным спектрам и результатам обработки, но и для групповой обработки результатов измерений: отчёты по выборке, статистическая обработка выборок, создание графиков. Для корректной статистической обработки форма представления результатов (например - округление данных), рекомендуемая для отчётов отдельных измерений, не подходит. Поэтому форма отображения результатов в журнале измерений может устанавливаться независимой от формы представления результатов в отчёте по отдельному измерению. Для этого требуется установить «галочку» «**Независимый формат представления результатов измерений в журнале**» и установить параметры такого представления:

- ***В качестве погрешности приводить случайную составляющую погрешности*** – при установленной галочке в колонках погрешностей для активностей нуклидов будет представлена случайная составляющая полной погрешности. В обычном режиме приводится полная погрешность. При выводе случайной составляющей колонки погрешностей в архиве будут окрашены в голубой цвет. Случайная составляющая погрешности необходима для расчёта ряда параметров при статистической обработке результатов.
- ***Округлять результаты при сохранении в архиве до nn % от погрешности*** - режим и вид округления для значений активностей нуклидов при представлении результатов в журнале измерений и отчётах «Статистика» и «Выборка». ***Точность представления результатов*** – выбор количества цифр для представления результатов в отчёте. Значение «***Авт.***» - соответствует автоматическому определению необходимой точности представления результатов. При этом незначащие нули не выводятся.
- Значения активностей приводимых в колонках журнала измерений могут соответствовать либо удельной активности ***исходного материала,*** либо удельной активности ***счётного образца*** при установке «галочки» «***Нормировать активности на:***» и выборе соответствующего пункта нормировки, либо приведены без нормировки (общая активность счётного образца).

- ***Учитывать распад нуклидов*** – при установленной «галочке» активности нуклидов будут пересчитаны на заданную дату (дату начала измерений или дату отбора), в противном случае будут приведены усреднённые за время измерения активности.
- Оператор имеет возможность выбрать дату на которую будут приведены активности в журнале измерений из списка «***Приводить активности на дату***»: дата измерения, дата начала или окончания отбора, дата производства или доставки пробы. При выборе даты значений для активностей необходимо учитывать, что для короткоживущих нуклидов, например Rn-222, может возникнуть переполнение разрядной сетки и неверное отображение данных.
- ***Единица измерения активности*** – выбор единицы измерения активности нуклида (Беккерель или Кюри) или содержания нуклида в пробе (грамм) в которых будет приведена активность или содержание нуклидов в журнале.

При снятом флажке «**Независимый формат представления результатов измерений в журнале**» форма представления результатов измерений в журнале будет соответствовать представлению результатов измерений в отчёте по каждому конкретному измерению и, в общем случае, может иметь различный формат для каждой строки.

Страница «**Параметры 2**» имеет вид:



Отметив точкой соответствующий пункт в верхней части странице «**Параметры 2**» (раздел «***Сохранение результатов обработки спектра***»), оператор имеет возможность выбрать один из двух возможных режимов сохранения результатов обработки спектров:

- ***Обновлять запись результатов при повторной обработке*** — В этом режиме строка журнала переписывается - старые значения теряются и на их место записываются новые данные.
- ***Включать результаты повторной обработки*** — В этом случае новые результаты обработки включаются дополнительной записью.

отдельной записью

При установленной «галочке» «***Сохранять картинку окна декомпозиции»*** программа сохраняет в архиве изображение окна декомпозиции в момент окончания обработки спектра, что позволяет включать такие изображения в отчёты при их создании, в любое время после окончания процедуры декомпозиции.

Новая запись при повторной обработке создаётся в любом режиме если меняются параметры пробы. Режим сохранения результатов повторной обработки спектра отдельной записью, формирует отдельную запись даже в том случае, если никакие параметры пробы не изменены.

Установка «галочки» в перечисленных ниже пунктах включает соответствующий режим работы архива:

- ***Раздельная сортировка обычных и скрытых записей*** - позволяет выводить записи отмеченные для удаления (в том случае, если установлен режим «***Показывать скрытые записи***») не в общем списке, а отдельно в начале или конце таблицы в зависимости от порядка сортировки.
- ***Снимать выделение записей при открытии архива.*** При установленном флажке записи архива, выделенные оператором в предыдущем сеансе работы с архивом, выделяться не будут, в противном случае старые выделения сохраняются.

Установка не нулевого значения параметра «***Интервал наблюдения за изменениями в файле архива***» необходима в том случае, если доступ к архиву разрешен не одной программе (например, при сохранении результатов измерений в общем сетевом архиве для нескольких спектрометров). В этом случае программа через заданный интервал будет смотреть за датой последнего изменения файла архива и обновлять журнал измерений при необходимости. Нулевое значение времени выключает процедуру наблюдения за датой изменения файла архива.

Параметр «***Количество фиксированных колонок***» определяет число первых колонок, которые не будут участвовать в горизонтальной прокрутке содержимого окна таблицы записей. Такие колонки выделяются цветом фона.

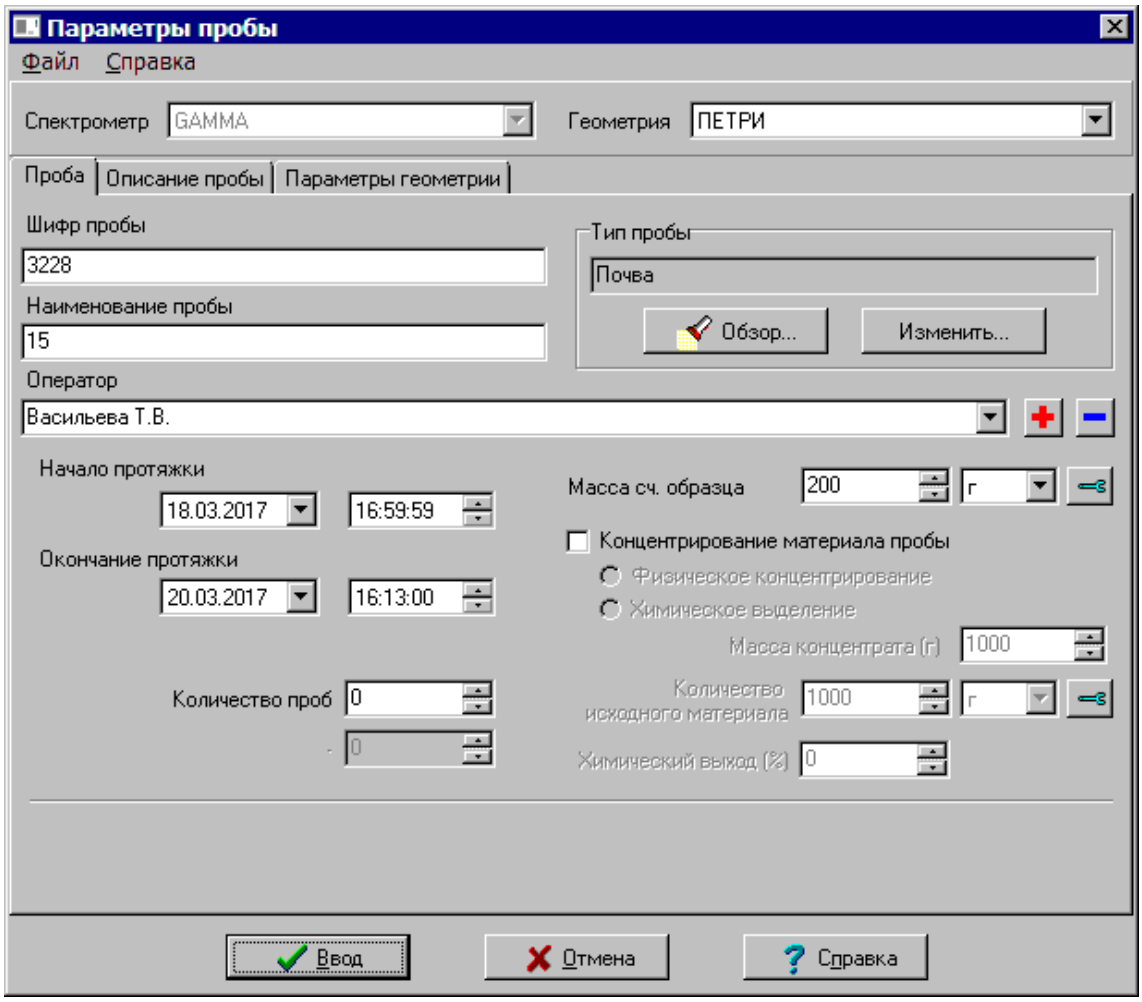
Группа «***Формат точной даты***» из двух пунктов: «***С секундами***» и «***Без секунд***» позволяет выбрать формат представления даты включающей время (дата отбора, дата измерения и т.п.).

Кнопка

позволяет задать шрифт для вывода записей в журнале измерений.

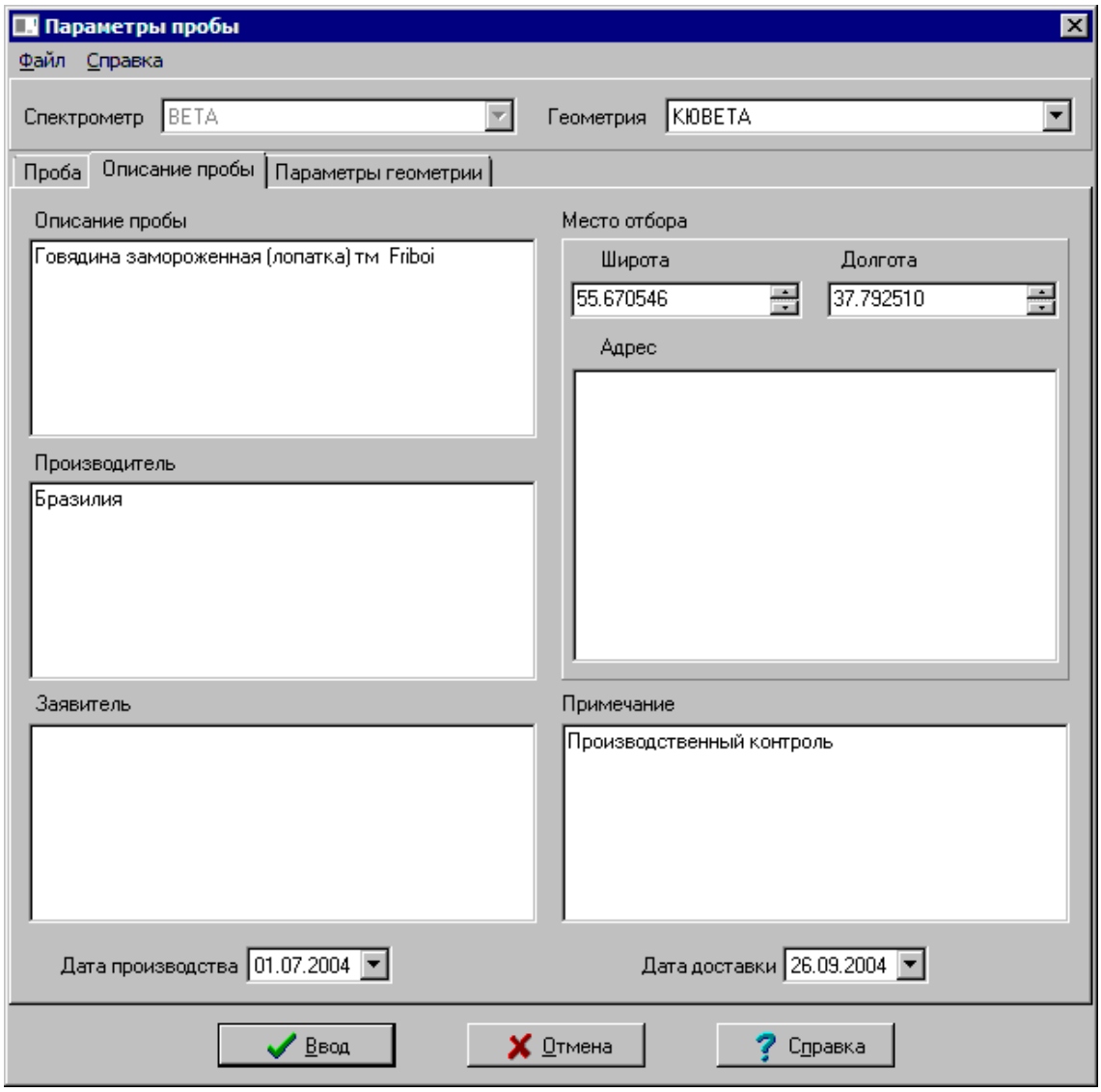
Редактирование архива

Кнопка (пункт меню «***Правка / Редактировать запись...***») позволяет отредактировать выбранную запись журнала измерений, соответствующий ей спектр и файл результатов обработки спектра, если они существуют. Окно процедуры редактирования имеет вид:



Форма содержит три страницы параметров пробы «**Проба**», «**Описание пробы**» и «**Параметры геометрии**». Первая страница содержит основные графы описания пробы, графу «**Оператор**» для ввода данных о лаборанте проводящем измерения и два списка с шаблонами обработки спектра.

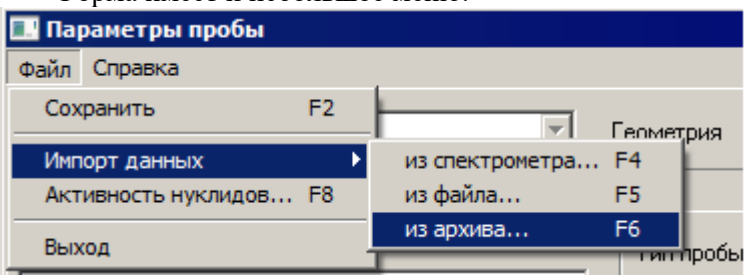
Вторая страница содержит графы для ввода дополнительной информации о пробе и имеет вид:



На третьей странице оператор может изменить и некоторые параметры геометрии измерений. Параметры геометрии не отображаются в журнале, но являются составной частью спектров и результатов обработки сохраняемых в архиве измерений.

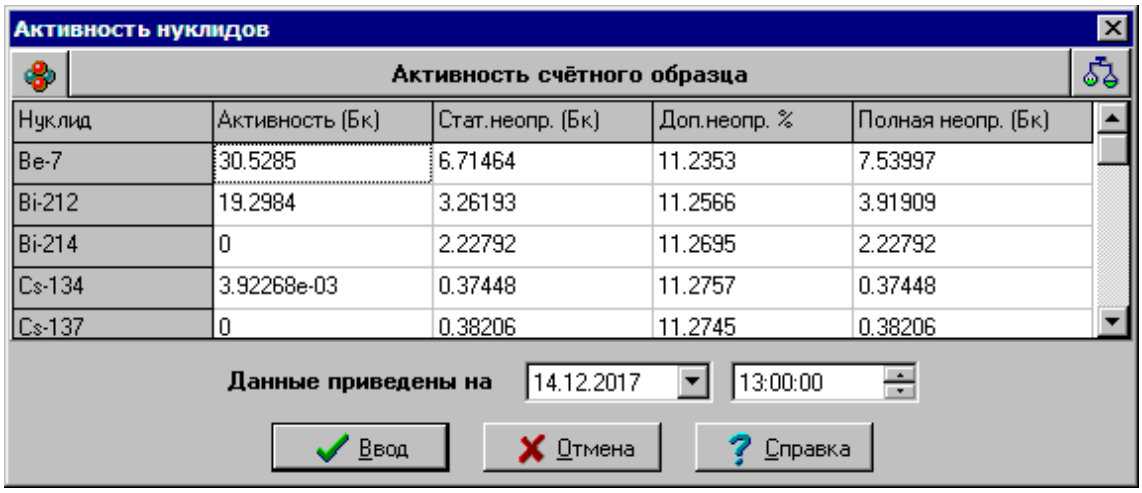
Нажатие на клавишу «**Ввод**» сохранит изменения в журнале измерения и в файлах спектра и результатов обработки. В том случае, если были изменены данные о величине пробы (масса счётного образца, масса концентрата и/или количество исходного материала) соответствующим образом изменятся и данные об удельных активностях в результатах обработки. Такой перерасчёт будет корректным, если не менялась масса счётного образца. И будет относительно корректным, если корректировалась масса счётного образца, но только в случае если результаты связаны с обработкой жёсткого гамма спектра. В случае альфа, бета излучения, низкоэнергетического гамма излучения необходимо учитывать изменение поглощения излучения при изменении массы счётного образца, и в данном случае требуется провести повторную обработку спектра после коррекции данных.

Форма имеет и небольшое меню:



Пункт меню "***Файл / Импорт данных***" позволяет импортировать параметры пробы из другого спектрометра, файла спектра или из выбранной записи архива, что позволяет экономить время на заполнение полей формы.

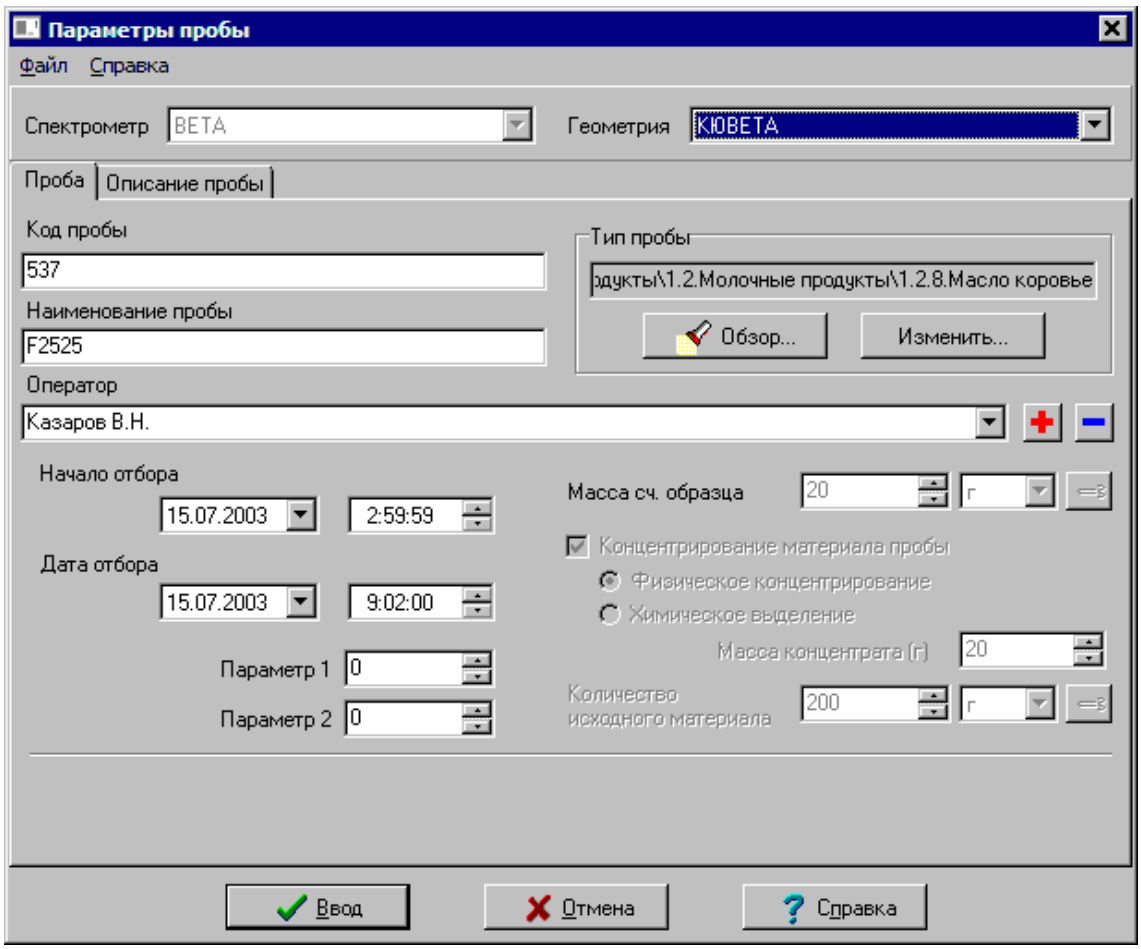
Пункт меню «***Файл/Активность нуклидов…***» формы «**Параметры пробы**» позволяет отредактировать список нуклидов и рассчитанных значений активностей, добавить в файл результатов обработки данные об активностях нуклидов полученные на других приборах или внести данные об аттестованных значениях активностей нуклидов. При этом на экране появится форма ввода априорных данных об активностях нуклидов:



Нуклид	Активность (Бк)	Стат.неопр. (Бк)	Доп.неопр. %	Полная неопр. (Бк)
Be-7	30.5285	6.71464	11.2353	7.53997
Bi-212	19.2984	3.26193	11.2566	3.91909
Bi-214	0	2.22792	11.2695	2.22792
Cs-134	3.92268e-03	0.37448	11.2757	0.37448
Cs-137	0	0.38206	11.2745	0.38206

Оператор имеет возможность отредактировать данные об активностях и неопределённостях пробы, изменить список нуклидов (кнопка). Данные могут вводиться либо в форме общей активности пробы (счётного образца), либо в форме удельной активности. Кнопка переключает форму ввода. В качестве неопределённости должна указываться случайная составляющая общей неопределённости в абсолютных значениях и дополнительная неопределённость в процентах от активности, полную неопределённость процедура рассчитывает самостоятельно.

Кнопка (пункт меню «***Правка / Новая запись...***») позволяет создать новую запись в журнале измерений на основе выбранной записи. Окно процедуры создания записи имеет вид:



Форма идентична форме редактирования записи за исключением того, что недоступны поля для ввода величины пробы (масса счётного образца, масса концентрата и количество исходного материала) и поля для задания шаблонов обработки спектра. Недоступна и страница параметров геометрии измерений.

Процедура создания новой записи позволяет регистрировать в журнале измерений пробы, которые будут измерены в будущем. При запуске измерений, зарегистрированной таким образом пробы, оператору потребуется дополнить сведения о пробе только параметрами величины пробы и шаблонами обработки. Запуск измерений при этом должен осуществляться из окна архива измерений с требуемой выбранной записью.

Для группового редактирования записей предназначены процедуры «**Импорт данных**» и «**Перенос данных**». При этом предварительно оператор должен выделить записи для группового редактирования. Выделять записи можно несколькими способами:

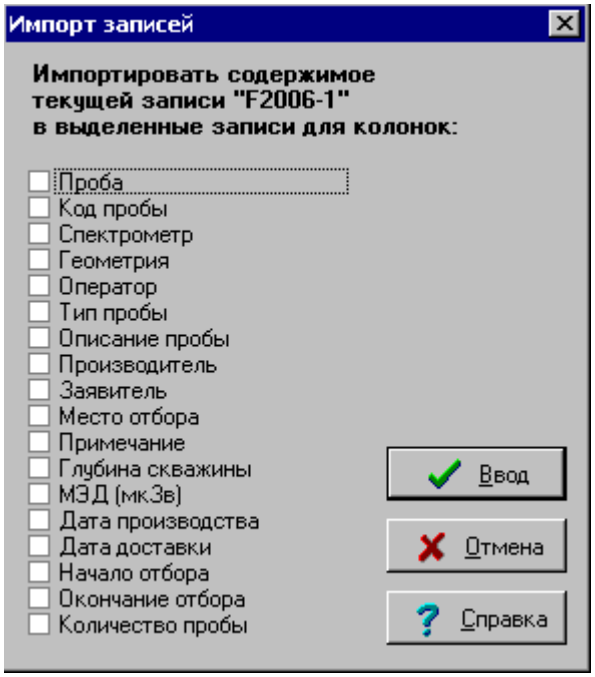
- нажатие на клавишу «**Insert**» клавиатуры компьютера выделяет текущую строку и делает следующую строку текущей;
- щелчок левой кнопкой мышки при нажатой клавише «**Ctrl**» клавиатуры компьютера выделяет запись, по которой щёлкнули;
- щелчок левой кнопкой мышки по первой записи при нажатой клавише «**Shift**» выделяет первую запись в группе, а второй щелчок по другой записи при нажатой клавише «**Shift**» выделяет всю группу от первой до последней записи.

Выделенные записи отмечаются зелёным цветом.

Процедура «**Импорт данных**» осуществляет импорт содержимого указанных оператором колонок текущей записи (выделяется жёлтым или синим цветом) в соответствующие колонки выделенных записей и поля описаний и параметров пробы для спектра и файла результатов обработки. Групповое редактирование в этом случае осуществляется следующим способом – предварительно редактируется одна запись,

затем выделяется требуемая группа записей и данные отредактированной записи импортируются в выделенные записи.

Пункт меню «***Правка / Импорт данных...***» вызывает форму процедуры «**Импорт данных**»:

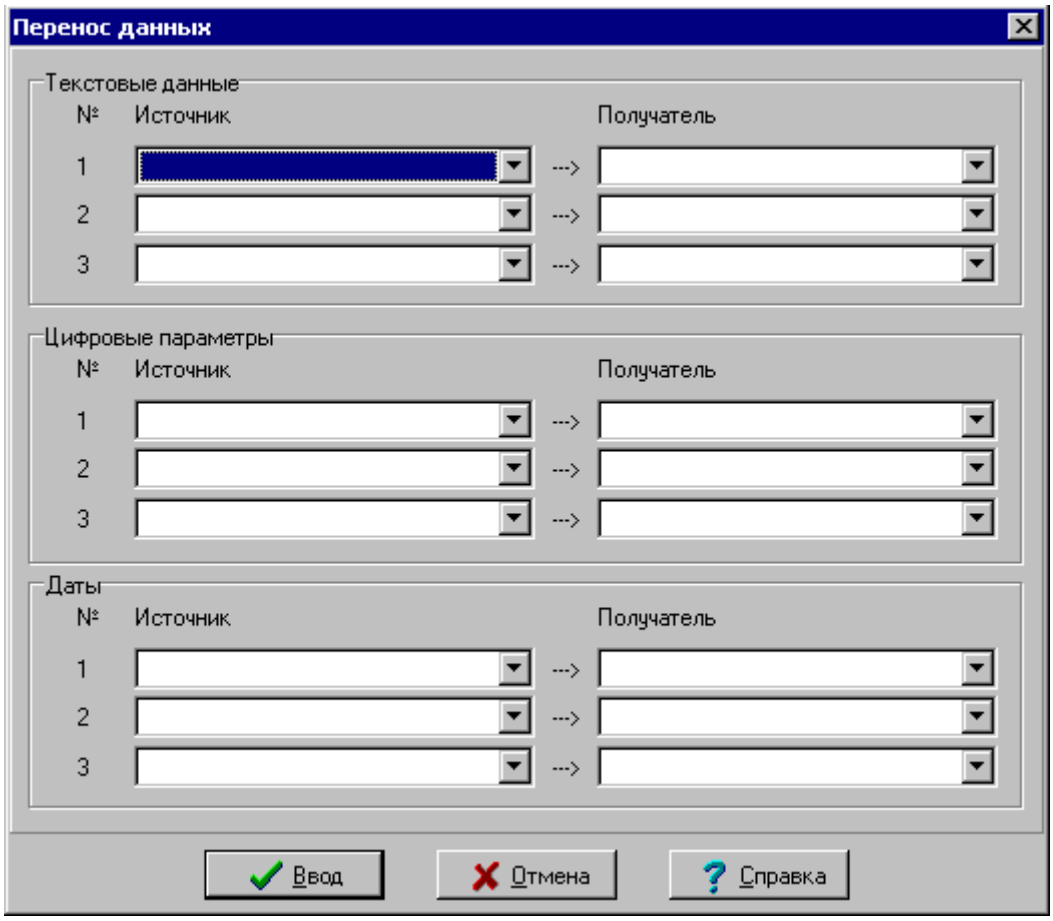


Оператор должен установить «галочки» для тех колонок, содержимое которых будет импортироваться.

Назначение и название многих колонок журнала измерений в пакете «SPECTRRAD» не жёстко регламентировано, а определяется пользователем. Поэтому может возникнуть необходимость при переименовании колонок журнала перенести и их содержимое. Для одиночной записи это можно сделать вручную, отредактировав запись. Для большого количества записей ручное редактирование - не лучший способ. В этом случае поможет операция «**Перенос данных**».

Процедура позволяет очистить выбранные колонки или перенести содержимое указанных оператором колонок в другие колонки, «корзину» или из «корзины» в заданные колонки. Операция производится для всех выделенных записей архива.

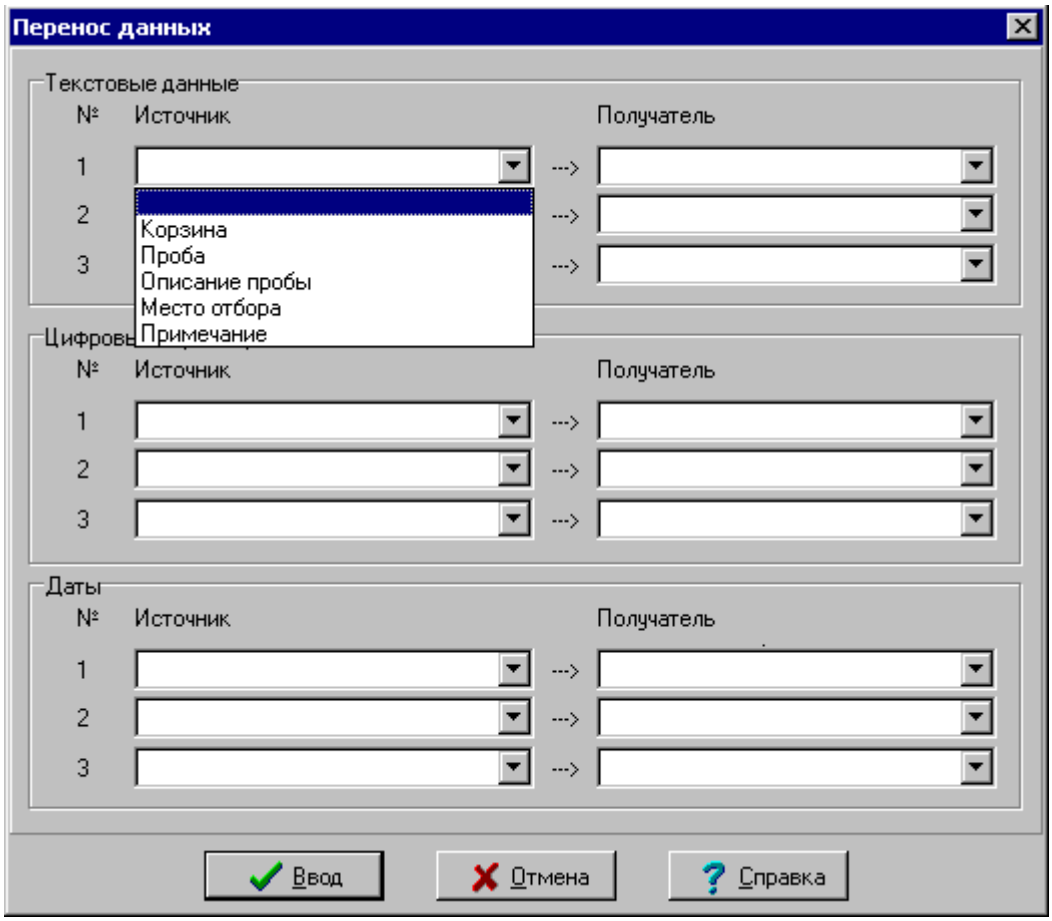
Форма процедуры имеет три группы: «**Текстовые данные**», «**Цифровые параметры**» и «**Даты**».



В каждой группе можно определить три операции переноса - минимум необходимый для обмена данными между **источником** и **получателем.** Например, для обмена данными между колонками “**Место отбора**” и “**Примечание**” требуется три операции:

1. **Место отбора → Корзина**
2. **Примечание → Место отбора**
3. **Корзина → Примечание**

Выбор **источника** и **получателя** для каждой группы производится из выпадающего списка содержащего действующий набор колонок данного типа в журнале измерений дополненный «**корзиной**» (буфер для сохранения данных) и пустой строкой. Например, для текстовых данных:

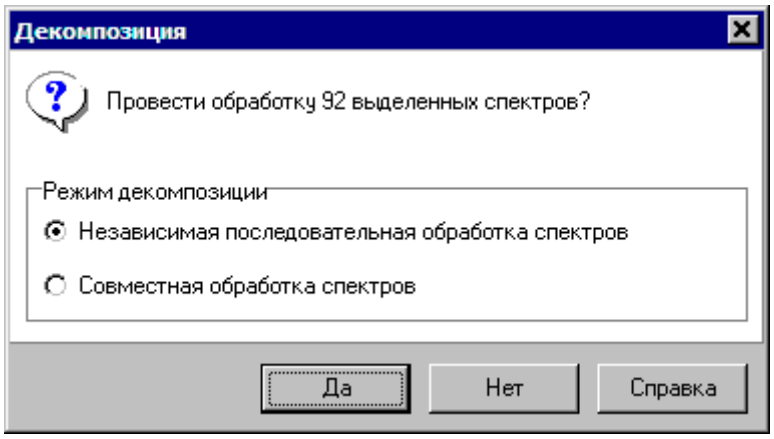


Задание в качестве источника пустой строки обнуляет приёмник.

Стандартные для многих программ процедуры правки: «**Вырезать**», «**Копировать**» и «**Вставить**» в архиве измерений производят операции над выделенными записями и соответствующими им файлам спектров и результатов обработки. Процедура «**Вырезать**» и «**Копировать**» помещает отмеченные записи в буфер обмена, а процедура «**Вставить**» копирует записи из буфера обмена в архив. При вставке записей их наличие в архиве не проверяется, поэтому возможно дублирование записей.

Групповая обработка спектров

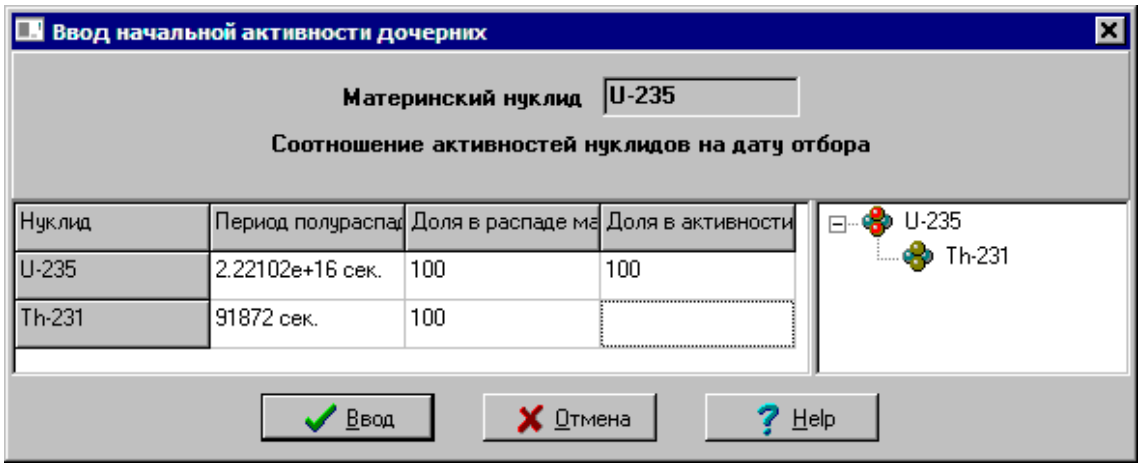
Кнопка (пункт меню «***Команды / Обработать спектр...***»), в том случае, если оператор выделил несколько записей журнала измерений вызывает процедуру групповой декомпозиции спектров. При этом на экране появляется форма:



Оператор должен выбрать один из двух режимов обработки: «**Независимая последовательная обработка спектров**» или «**Совместная обработка спектров**». При выборе режима **независимой последовательной обработки** производится последовательная обработка спектров для всех выделенных записей. При этом отсутствует ограничение на количество выделенных записей и записи могут относиться к спектрам от различных счётных образцов.

При выборе режима **совместной обработки спектров** все спектры должны быть спектрами излучения от одного и того же счётного образца, измеренного в разное время. Включить в совместную обработку можно не более 100 спектров. В этом режиме для всех спектров формируется общая система уравнений и поскольку при этом учитывается скорость распада нуклидов, общая система уравнений позволяет разделять нуклиды, имеющие идентичные или близкие по форме спектры излучения, и получать наиболее эффективные оценки активностей. Таким образом реализуется методика амплитудно-временного анализа.

В том случае, если в списке определяемых нуклидов в шаблоне обработки присутствуют нуклиды, входящие в цепочки распада, программа запросит сведения о начальном соотношении активностей нуклидов в цепочке распада. Форма для ввода значений может выглядеть следующим, например, образом:



Оператор должен ввести для дочерних нуклидов активность в процентах относительно материнского нуклида на дату отбора пробы. Датой отбора может быть

дата химического выделения элемента или дата окончания протяжки воздуха через фильтр. В примере датой отбора должна быть дата выделения урана. И соответственно, активность Th-231 на эту дату будет равной нулю. При протяжке воздуха через фильтр на фильтре через некоторое время наступает равновесие между скоростью накопление нуклида на фильтре и скоростью его распада. И это соотношение пропорционально периодам полураспада нуклидов. Возможным вариантом может быть и состояние радиоактивного равновесия на дату отбора. В этом случае соотношение активностей требуется предварительно рассчитать процедурой «**Сервис / Библиотека нуклидов / Сервис / Равновесная цепочка / Сформировать**».

Эти данные необходимы для корректного расчёта процессов накопления и распада нуклидов в цепочке. Нажатие оператором на клавишу «**Отмена**» приводит к отмене процедуры декомпозиции, поскольку без такой информации корректный расчёт невозможен.

Двойной щелчок мышкой по значку нуклида в дереве распада вызывает процедуру редактирования дерева. Процедура предложит оператору либо разорвать связь с материнским нуклидом, либо разорвать все связи для все нуклидов дерева, если выбран материнский нуклид дерева распада. Выполнение процедуры не приведёт к некорректному расчёту только в том случае, если мы знаем, что активность материнского на момент первого измерения равна нулю или пренебрежимо мала.

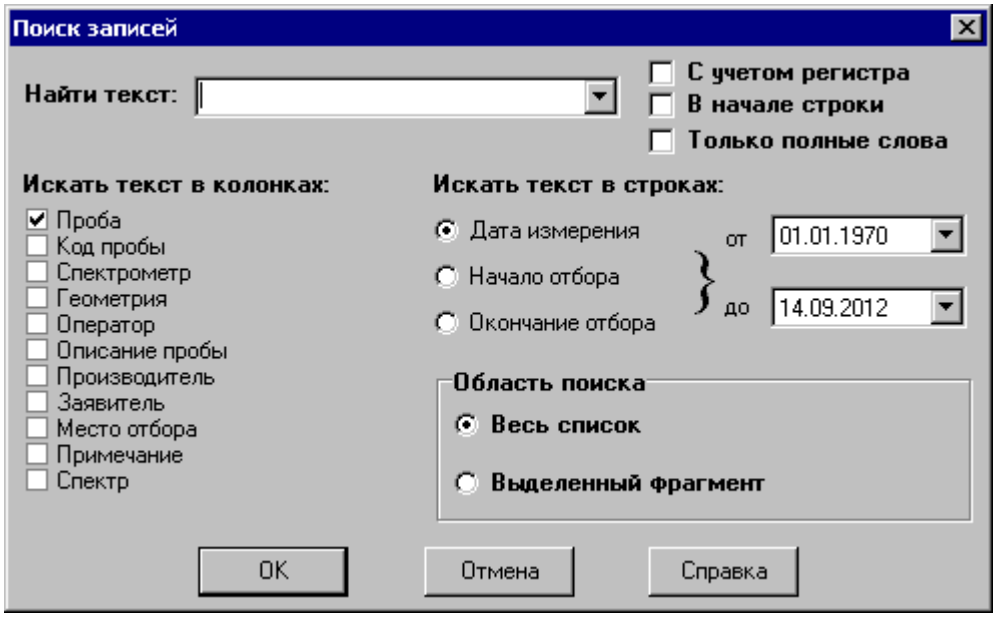
Для того чтобы не вводить данные о соотношениях активностей в цепочках распада каждый раз при запуске процедуры декомпозиции, программа предложит сохранить введённые данные в качестве априорных данных. После сохранения оператор должен в шаблоне декомпозиции указать сохранённые сведения **для использования в качестве сведений о соотношении активностей в цепочках распада на дату отбора пробы** (см..«**Создание шаблонов декомпозиции / Параметры декомпозиции**»).

Результаты совместной обработки сохраняются в первой записи выбранной группы записей в журнале измерений, и данная запись помечается знаком Σ. Для всех остальных записей результаты обработки стираются (если они существовали) и дата обработки для всех записей группы устанавливается одной и той же.

При любом режиме обработки все спектры должны быть получены измерением проб на одном и том же спектрометре в одной и той же геометрии измерений.

Поиск записей

Кнопка (пункт меню «***Правка / Найти запись...***») вызывает процедуру поиска и выделения записей содержащих указанный оператором текст в отмеченных “галочками” колонках архива результатов измерений. Окно процедуры поиска имеет вид:



Поиск проводится либо с учетом регистра (прописные и строчные буквы считаются разными), либо без учета таких различий, в соответствии с пометкой “**С учетом регистра**”. Область поиска текста в колонке (в начале строки или по всей строке) задается флажком «**В начале строки**». Поиск целых слов или фраз производится при установке флажка «**Только полные слова**».

Задание области поиска по дате измерения (флажок «**Дата измерения**») или дате отбора пробы (флажок «**Начало отбора**» или «**Окончание отбора**») устанавливается в поле таблички «**Искать текст в строках**». Поскольку «пустой» текст присутствует во всех записях, поиск записей без указания текста для поиска найдет все записи с датой измерения или датой отбора попадающие в заданный интервал (при этом хотя бы одна колонка для поиска должна быть указана).

Область поиска по списку записей устанавливается в поле таблички «**Область поиска**» флажками «**Весь список**» или «**Выделенный фрагмент**». Поиск во всем списке добавляет к уже выделенным записям дополнительные записи, отвечающие условиям поиска. Поиск в выделенном фрагменте позволяет найти в уже отобранных записях записи, удовлетворяющие дополнительным условиям.

Статистическая обработка результатов измерений

Кнопка (пункт меню «***Команды / Статистика...***») вызывает программу, рассчитывающую ряд статистических параметров для группы выбранных оператором записей результатов обработки спектров:

Кол-во записей — n - количество не пустых ячеек в колонке.

Минимум — Минимальное значение в колонке $X_{\min}$.

Максимум — Максимальное значение в колонке $X_{\max}$.

Среднее — Среднее арифметическое $X_0 = (\sum X_i)/n$ для величин активностей и вычисляемых параметров Calc1 – Calc8 и оценка погрешности среднего арифметического $\Delta_0 = (\sqrt{\sum \Delta_i^2})/n$ для значений погрешностей и параметров ErCalc1 – ErCalc8.

Среднеквадратичное — Среднеквадратичное для величин погрешностей и вычисляемых параметров ErCalc1 - ErCalc8 $\Delta_S = \sqrt{(\sum \Delta_i^2)/n}$.

Ср.квадр.откл. — Среднее квадратичное отклонение для величин активностей и вычисляемых параметров Calc1 – Calc8 $S_x = \sqrt{\sum (X_i - X_0)^2/(n-1)}$.

Стат. неопределённость — Статистическая неопределённость (доверительный интервал соответствующий 95 % доверительной вероятности) для величин активностей и вычисляемых параметров Calc1 – Calc8

$$US_x = t_{95}(n-1) \cdot S_x .$$

Полная неопределённость

Усреднённая полная неопределённость для величин активностей.

$$UT_x = \sqrt{US_x^2 + U_\delta^2}\ .$$

полная неопределённость включает статистическую неопределенность US_x и погрешность средства измерения и метода измерения $U_\delta = X_0 \cdot \sqrt{\delta_{си}^2 + \delta_м^2}$.

Средневзвешенное

Средневзвешенная МНК оценка активностей $X_m = \sum (X_i / \Delta_i^2) / \sum (1/\Delta_i^2)$

и погрешностей $\Delta_m = \sqrt{1/\sum (1/\Delta_i^2)}$.

Смещение

$Bias = abs(X_{Norm} - X_0)$ - отклонение оценки среднего от заданного значения.

Норм.ср.кв.откл.

Нормированное на оценку случайной составляющей погрешностей среднеквадратичное отклонение

$$S_{norm} = 2 \cdot \sqrt{\sum ((X_i - X_m)^2 / \Delta_i^2) / \chi^2 (n-1)}\ .$$

Коэффициент 2 для учёта того, что в качестве Δ_i используется 95% доверительный интервал. В качестве предполагаемого значения нормированной суммы квадратов отклонений используется либо математическое ожидание Хи-квадрат распределения, если в настройках выбрано нормальное распределение, либо медиана Хи-квадрат распределения, если выбрано распределения Стьюдента (медиана считается более помехоустойчивой оценкой).

Относительная точность

Отношение реальной статистической точности оценивания к декларируемой (рассчитываемой программой): $RAcc = 1/S_{norm}$.

Запас точности

Запас точности в процентах $AccSpls = 100 \cdot (RAcc - 1)$.

Коэфф. вариации

Отношение среднеквадратичного отклонения к среднему

$$K_{\mathrm{var}} = \sqrt{\sum (X_i - X_0)^2 / (n-1)} / X_0\ .$$

Ср.кв.откл. среднего

Среднеквадратичное отклонение оценки среднего

$$S_{x0} = \sqrt{\sum (X_i - X_0)^2 / (n \cdot (n-1))}\ .$$

Стат. неопр. среднего

Статистическая неопределённость (доверительный интервал соответствующий 95 % доверительной вероятности) оценки среднего

$$US_{x0} = t_{95}(n-1) \cdot S_{x0}\ .$$

Полная неопр. среднего	Полная неопределённость оценки среднего $UT_{x0} = \sqrt{US_{x0}^2 + U_\delta^2}$. Полная неопределённость включает статистическую неопределенность (US_{x0}) и погрешность средства измерения и метода измерения (U_δ).
Относ. полная неопр. среднего	Относительная полная неопределённость оценки среднего $\mathrm{Re}lUT_{x0} = UT_{x0} / X_0$.
Мин.Измер.Активность	Минимально измеряемая активность $LOD = k_{lod} \cdot \Delta_S^0 \cdot \sqrt{I_B^0 / I_S^0}) / 2$.
Коэфф. изменчивости (%)	Коэффициент изменчивости α в формуле составной Пуассоновской статистики $D_N = N + (\alpha \cdot N)^2$ рассчитывается для колонок «Загрузка» и «Интенсивность в окне (имп./с)» $\alpha = \sqrt{(S_x)^2 - (I_S^0 \cdot T_m)} / (I_S^0 \cdot T_m)$.

X_i - значение величины в колонке активностей или параметров Calc1 – Calc8.

Δ_i - значение величины в колонке погрешностей или параметров ErCalc1 – ErCalc8.

$\delta_{си}$ и $\delta_м$ - относительные погрешности средства измерения и метода измерения.

k_{lod} - количество среднеквадратичных отклонений используемых при расчёте МИА (устанавливается в параметрах настройки архива).

Δ_S^0 - случайная составляющая среднеквадратичной погрешности.

I_B^0 - интенсивность фона в использованном при обработке энергетическом окне.

I_S^0 - интенсивность спектра пробы в том же энергетическом окне.

T_m - время измерения пробы.

$t_{95}(n)$ - длина доверительного интервала в единицах среднеквадратичных отклонений для 95 % вероятности и n степеней свободы соответствующая выбранному статистическому распределению (нормальному или распределения Стьюдента).

Поскольку форма представления результатов измерений в журнале измерений является настраиваемой (настраиваемой, в том числе, является и степень округления результатов измерений), для корректной статистической обработки рекомендуется переформировать журнал измерений, отменив требование округления результатов (см. «Настройка архива»).

Статистические параметры могут рассчитываться для двух вариантов представления погрешностей: для полной погрешности и для случайной (статистической) составляющей полной погрешности. Верхний индекс «^{0}» в формуле расчёта минимально измеряемой активности указывает, что статистические параметры рассчитаны для случайной составляющей погрешности. Колонки погрешностей и интенсивностей зарегистрированных импульсов при этом в окне «Статистика» будут окрашены в голубой цвет, а колонки интенсивностей в этом случае будут содержать интенсивность зарегистрированных импульсов в использованных при расчёте активностей энергетических окнах. Количество и ширина окон при этом определяется процедурой

обработки, а значения левой и правой энергетической границы говорят только о том, что все окна находятся в указанных границах.

Минимально измеряемая активность рассчитывается только в том случае, если в таблице «Статистика» представлены все необходимые для расчёта столбцы: «Интенсивность в окне», «Интенсивность фона в окне», «Общая невязка» и задан режим вывода случайной погрешности.

Нормированное среднеквадратичное отклонение рассчитывается и для колонок архива «**Загрузка**» и «**Интенсивность в окне**», хотя для этих колонок отсутствуют колонки погрешностей. Расчет, тем не менее, ведётся, поскольку известна формула для расчёта погрешностей для величин загрузки спектрометра и интегральной интенсивности в окне: $\Delta_x = 2 \cdot \sqrt{X \cdot t + (\alpha \cdot X \cdot t)^2}$. Здесь X – значение в колонке, $\cdot t$ – время измерения, α – коэффициент линейной составляющей для составной Пуассоновской статистики. В случае, если значения загрузки и интенсивности в окне относятся к спектру фона $\alpha = K_{изм.фона} /100$ ($K_{изм.фона}$ – коэффициент изменчивости фона задаётся в параметрах настройки процедуры контроля фона в процентах). Для любого другого спектра $\alpha = K_{дифф.нелина} /100$ ($K_{дифф.Нелина}$- коэффициент дифференциальной нелинейности АЦП задаётся в параметрах настройки АЦП спектрометра). Спектр считается спектром фона, если для него указан тип пробы, зарегистрированный для спектра фона.

Окно программы «Статистика» дублирует форму таблицы записей архива результатов (количество и ширину колонок) и может иметь следующий, например, вид:

Статистика

Файл Сервис Настройка Вид Справка

Закрыть Справка

Номер з	Проба	Cs-137	+/- Cs-137	K-40	+/- K-40	Единиц
410	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1859.7	299.6	15876	3575	Бк
411	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1824.9	176.6	16365	1379	Бк
409	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1785.1	175.8	16652	1437	Бк
2429	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1813.3	183.3	16314	1539	Бк
408	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1813.3	183.3	16314	1539	Бк
407	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1755.9	168.7	15991	1447	Бк
Σ 2428	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1780.3	100.1	16353.1	849.6	Бк
406	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1775.7	169.2	16743	1436	Бк
405	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1775.2	166.9	16412	1365	Бк
404	КИ № ЭЦ-Г 071/98	1783.9	161.5	16387	1455	Бк
	Данные сравнения	1500	75	16500	825	
	Кол-во записей	10	10	10	10	
	Минимум	1755.9	168.7	15876	3575	
	Максимум	1859.7	299.6	16743	1436	
	Среднее	1796.73	58.32	16340.7	550.8	
	Смещение	296.73		159.3		
	Среднеквадратичное		184.42		1741.9	
	Ср.квадр.откл.	30.642		259.57		
	Стат. неопределённость	69.313		587.15		
	Полная неопределённость	113.47		1006.1		
	Средневзвешенное	1789.19	51.35	16380.4	434.8	
	Норм.ср.кв.откл.	0.3086		0.3023		
	Запас стат. точности (%)	224		231		
	Коэфф. вариации	0.017		0.016		
	Ср.кв.откл. среднего	9.69		82.083		
	Стат.неопр. среднего	21.919		185.67		
	Полная неопр. среднего	92.472		837.87		
	Относ.полная неопр. среднего	0.051		0.051		
	Мин.Изм.Акт.(МИА=4.0 ско)	18.64		176		
	Коэфф. изменчивости (%)					

Голубым цветом выделяются ячейки со случайной составляющей неопределённости, красным цветом - ячейки со статистическим параметрами, выходящими за допустимые пределы, жёлтым цветом – ячейка с максимальным значением в колонке, оливковым - ячейка с минимальным значением в колонке.

Красными символами в начале строки выделяются строки, включенные в список с предупреждением о нежелательности их включения:

Символ	Значение
⊠	Запись помечена оператором для удаления.
Σ	Строка с суммарным отчётом, сформированном для группы записей. Проследить корреляционные связи невозможно.
◄	Запись с результатами обработки коррелированными с результатами обработки в других строках выборки, поскольку эти результаты обработки относятся к одному и тому же спектру.
►	Запись с результатами обработки коррелированными с результатами обработки в других строках выборки, поскольку при обработке использовались общие априорные данные.
N	В записи нет информации об активностях нуклидов.
R	Для записи отсутствует файл результатов обработки.
E	Различные типы неопределённостей (полная/статистическая) для данной записи и для остальных записей в выборке.
U	Различные единицы измерения для данной записи и для остальных записей в выборке.

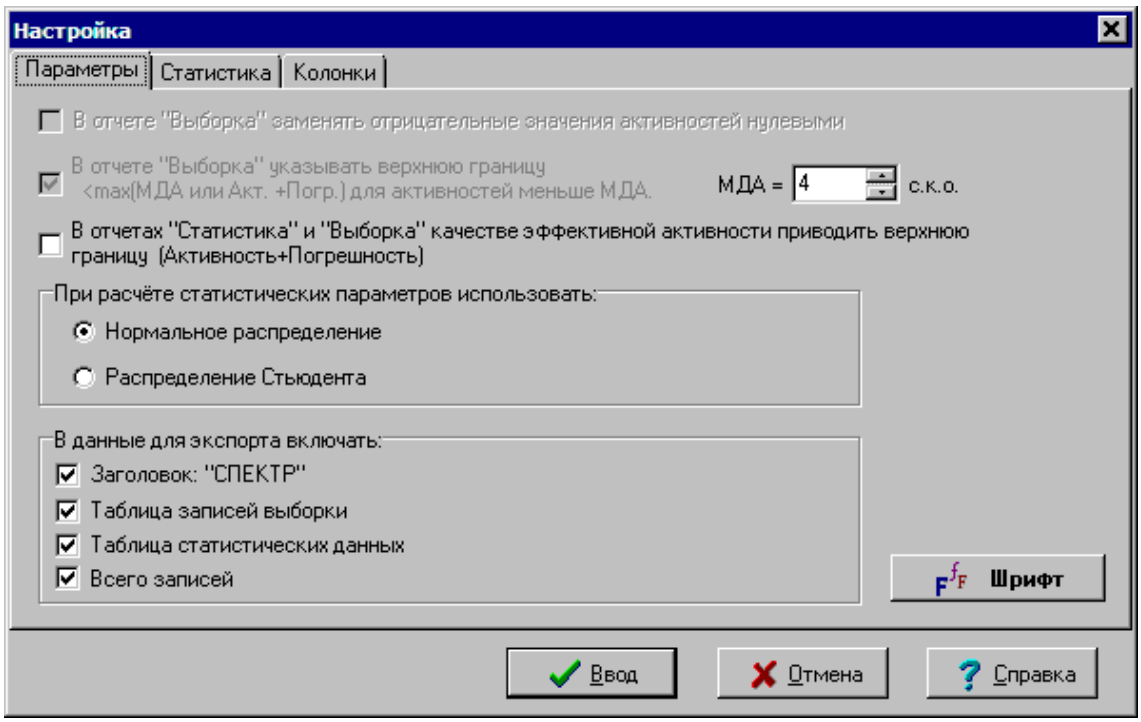
Ширина колонок, кроме первой (она выделена серым цветом), также настраивается. Ширину первой колонки можно установить предварительно в главном окне архива, но есть возможность изменить её и непосредственно в окне «Статистика». Для этого щелкните мышкой по названию первой колонки - «Проба», при этом её цвет станет таким же, как и у остальных колонок, и, не выводя указатель мышки за пределы строки названий колонок, отредактируйте её ширину.

Оператор имеет возможность редактировать значения данных сравнения и результатов обработки в ячейках таблицы (значения в архиве результатов не изменяются), статистические параметры при этом соответственно изменяются. Ненужную строку или столбец можно удалить, щелкнув правой кнопкой мышки по заголовку строки или столбца.

Необходимо учитывать, что оценка погрешностей среднего или средневзвешенного по группе измерений не может в общем случае служить оценкой погрешностей активности нуклидов (или рассчитанных по ним значений каких-либо параметров), поскольку формулы расчёта статистических параметров не учитывают коррелированности значений (журнал измерений не содержит полных данных о коррелированности величин). Коррелированность величин происходит из-за присутствия в значениях погрешностей неслучайных величин (систематической погрешности связанной, например, с погрешностями эталонов и т.п.), использования при обработке идентичных априорных данных. Журнал может содержать и несколько записей об одном и том же измерении, но такого рода коррелированность отслеживается и корректируется процедурой на этапе формирования отчёта. В случае если в параметрах настройки архива задан режим вывода в качестве погрешности случайной составляющей общей погрешности, исчезнет коррелированность значений за счёт систематической погрешности и оценка случайной составляющей погрешностей среднего или средневзвешенного будет корректна, но только в том случае если при обработке спектров не использовались коррелированные априорные данные и все измерения независимы.

В качестве погрешности среднего можно использовать полную неопределённость среднего. При этом надо учитывать, что полная неопределённость среднего будет корректна только при разрешении отрицательных значений активностей в параметрах шаблона декомпозиции используемого при обработке спектров (априорная информация о положительной определённости оценок активностей делает оценки коррелированными).

Кнопка (пункт меню «***Настройка***») позволяет настроить параметры формирования и расчёта статистических данных. При этом на экран выводится форма:



Форма содержит три страницы: «**Параметры**», «**Статистика**» и «**Колонки**».

На первой странице «**Параметры**» оператор может установить несколько флажков и величин, определяющих содержание, форму и значения статистических данных:

Значение минимально детектируемой (измеряемой) активности (МДА) в единицах среднеквадратичных отклонений (**с.к.о.**) задаётся в поле «**МДА** = ». Это значение используется для расчёта минимально измеряемой активности в единицах активности. Заданная величина **МДА** используется и при формировании отчета для одиночных измерений.

Флажок «**В отчётах «Статистика» и «Выборка» в качестве эффективной активности приводить верхнюю границу (Активность + Погрешность)**» определяет режим вывода значений эффективной активности в окнах «Статистика» и «Выборка». При установке флажка в колонке значений эффективной активности приводится верхняя оценка значения эффективной активности ($А.эфф.м=А.эфф+\Delta_{А.эфф.}$), колонка погрешностей не изменяется.

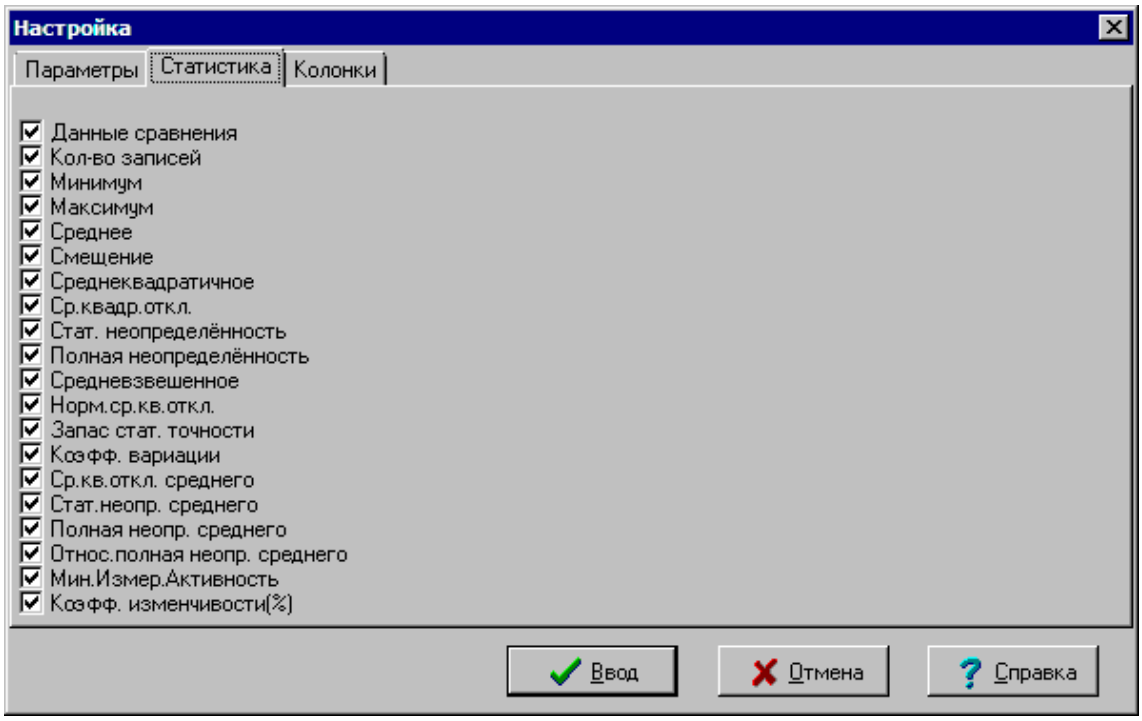
Выбор функции распределения плотности вероятности в группе «**При расчёте статистических параметров использовать: нормальное распределение, распределение Стьюдента»** определяет расчёт полной и статистической неопределённости оценок среднего. По умолчанию используется нормальное распределение.

Группа флажков «**В данные для экспорта включать**:» определяет содержание данных передаваемых в Word или Excel, а также на печать или во внешний файл.

Кнопка

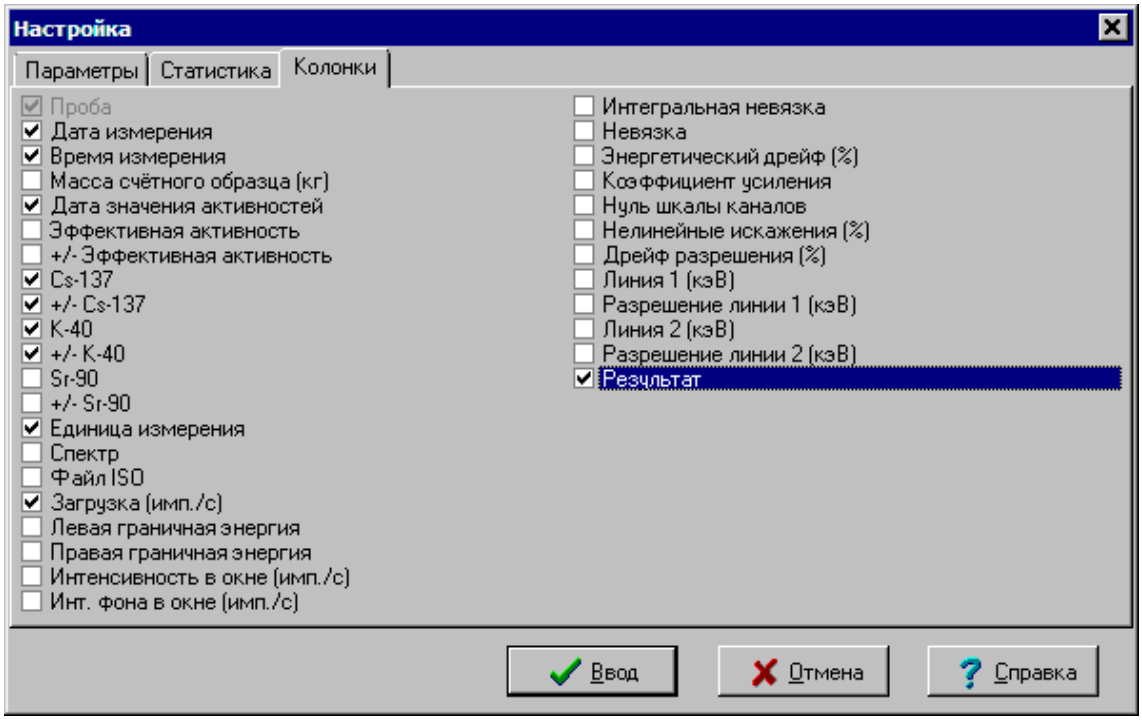
- установка шрифта для данных формы.

На второй странице «**Статистика**» оператор может выбрать строки рассчитываемых статистических параметров таблицы «Статистика», которые будут приведены на форме:



Первая строчка списка - «**Данные сравнения**» не относится к числу рассчитываемых статистических параметров, а используется для ввода аттестованных значений параметров, которые будут использованы для расчёта смещения среднего относительно заданного значения.

Третья страница «**Колонки**» позволяет выбрать колонки журнала измерений, которые будут приведены в таблице «Статистика»:



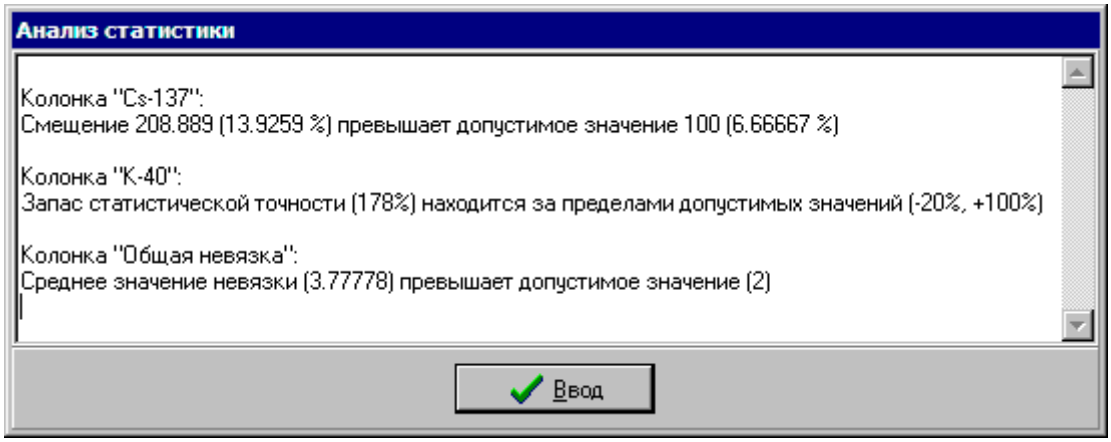
«Кнопка» (пункт меню «***Файл \ Открыть...***») позволяет вставить данные формы в шаблон отчета (произвольный текст в виде документа Microsoft Word или в формате RTF). При этом значения данных замещают набор меток в шаблоне отчёта. Если шаблон отчёта является документом Word, то и сам отчёт формируется как документ Word.

«Кнопка» - печать отчёта (пункт меню «***Файл \ Печать...***»).

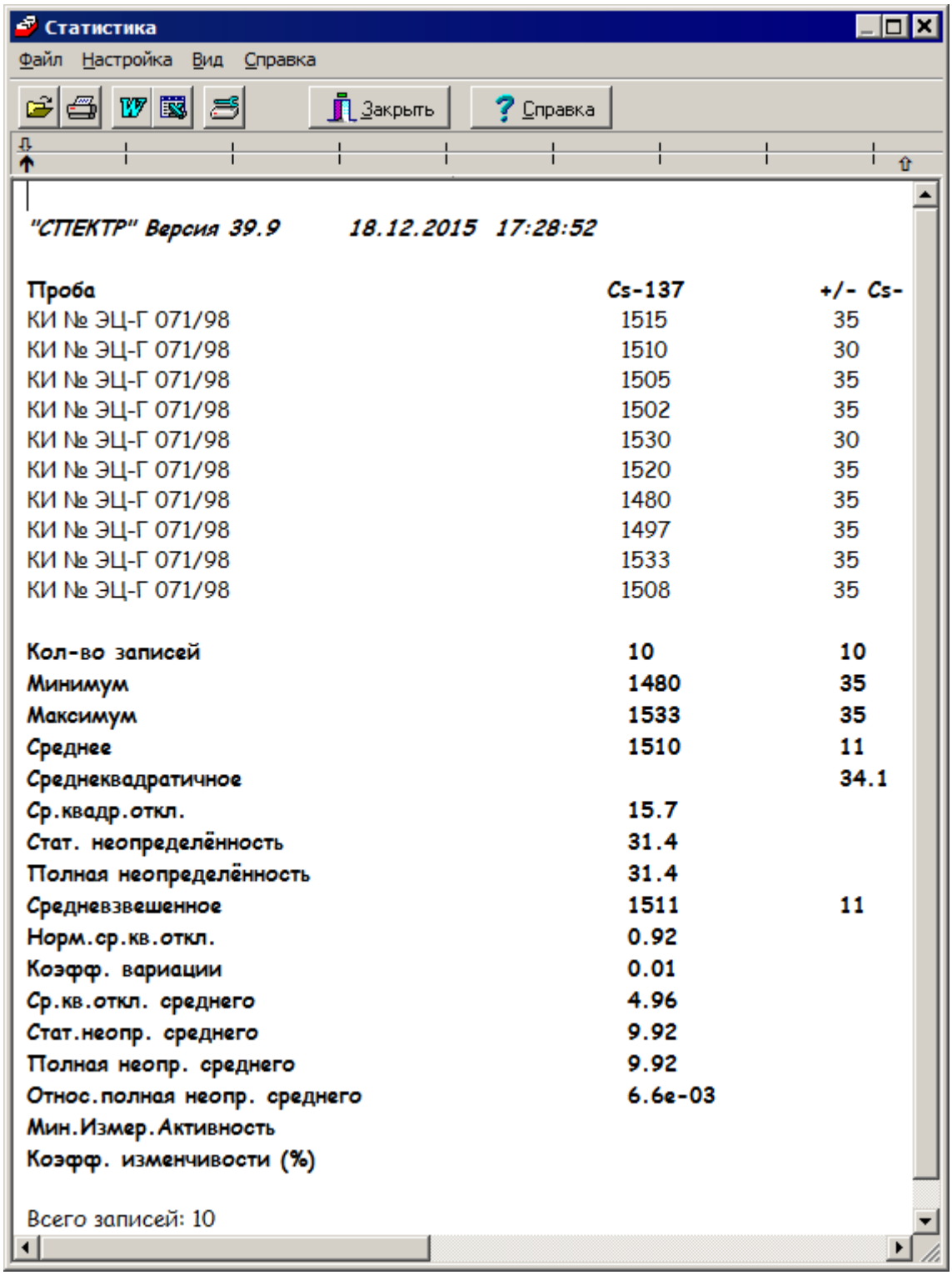
«Кнопка» (пункт меню «***Файл \ Экспорт в Word***») - передача содержимого в «Microsoft Word».

«Кнопка» (пункт меню «***Файл \ Экспорт в Excel***») - передача содержимого в «Microsoft Excel».

Пункт меню «***Сервис \ Анализ статистики***» вызывает процедуру анализа ряда статистических параметров, и результаты выводит в окно следующего вида:



Пункт меню «***Вид \ Текст***» позволяет просматривать таблицу статистических данных в виде текста. Форма статистики в этом случае может выглядеть так:



Статистика

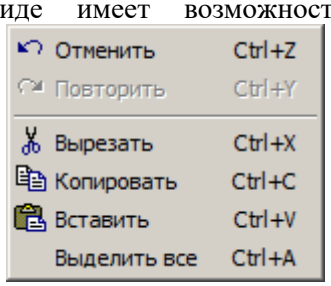
Файл Настройка Вид Справка

Закрыть Справка

"СПЕКТР" Версия 39.9 18.12.2015 17:28:52

Проба	Cs-137	+/- Cs-
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1515	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1510	30
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1505	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1502	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1530	30
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1520	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1480	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1497	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1533	35
КИ № ЭЦ-Г 071/98	1508	35
Кол-во записей	10	10
Минимум	1480	35
Максимум	1533	35
Среднее	1510	11
Среднеквадратичное		34.1
Ср.квадр.откл.	15.7	
Стат. неопределённость	31.4	
Полная неопределённость	31.4	
Средневзвешенное	1511	11
Норм.ср.кв.откл.	0.92	
Коэфф. вариации	0.01	
Ср.кв.откл. среднего	4.96	
Стат.неопр. среднего	9.92	
Полная неопр. среднего	9.92	
Относ.полная неопр. среднего	6.6e-03	
Мин.Измер.Активность		
Коэфф. изменчивости (%)		

Всего записей: 10

Оператор при отображении данных в таком виде имеет возможность отредактировать их как текст, пользуясь всплывающим меню: 

и передать в Word или Excel не весь текст, а только выделенный фрагмент.

Формирование отчёта

Формирование любого отчёта, в том числе статистического отчёта и отчёта по выборке, в пакете «SPECTRRAD» основывается на том, что в предварительно подготовленном документе MSWord - шаблоне отчёта, часть текста замещается на определённый текст. Таким замещаемым тестом являются:

- Определённые слова, заключённые в фигурные скобки – метки шаблона отчёта, например **{Act[Cs-137]}**. Метки шаблона отчёта служат для вставки параметров пробы, условий измерения и результатов обработки спектра в текст шаблона
- Арифметическое выражение состоящее из чисел и меток, замещаемых численными значениями, связанными символами арифметических операций и функций в соответствии с синтаксисом и орфографией встроенного программируемого калькулятора, заключённое в операторные скобки “~<” и “>~”, например **~<2*({Act[Cs-137]}+{Err[Cs-137]})+100>~**

Шаблон статистического отчёта включает две части: общую часть и повторяемую часть (повторяемая часть шаблона может отсутствовать). Повторяемая часть шаблона отчёта заключается в двойные угловые скобки, например **<<{Report}>>**. И общая и повторяемая части шаблона отчёта могут содержать произвольный текст, включающий метки.

Формирование итогового отчёта происходит следующим образом:

- Все метки шаблона отчёта замещаются данными первой записи выборки.
- Повторяемая часть копируется, и метки повторяемой части замещаются данными второй записи выборки.
- Процесс повторяется до окончания записей в выборке.
- Арифметические выражения замещаются вычисленными значениями.
- Метки содержащие орфографические ошибки удаляются из текста.

Метки статистического отчёта

Набор меток для статистического отчёта позволяет вставить в отчёт информацию, отсутствующую в таблице статистического отчета, но сохранённую в архиве. В этом случае информация берётся не из ячеек таблицы, а непосредственно из результатов обработки.

Метка	*Описание*
{Date}	Дата создания отчёта.
{Program}	Версия программы.
{DecTemplate}	Наименование использованного шаблона обработки.
{NuclidesTable}	Использованная при обработке таблица нуклидов.
{Analyser}	Наименование и описание спектрометра. Текст копируется из описания спектрометра, введённого при его установке.

{AnalNick}	Краткое наименование спектрометра.
{Geometry}	Наименование и описание геометрии измерений. Текст копируется из описания геометрии, введённого при установке геометрии.
{GeomNick}	Краткое наименование геометрии измерений.
{Info}	Сведения о поверке спектрометре. Текст копируется из графы "Свидетельство о поверке" описания спектрометра, введённого при его установке.
{AddNote}	Дополнительные сведения о спектрометре. Текст копируется из графы «Дополнительные сведения» описания спектрометра, введённого при его установке.
{SampleCode}	Код пробы.
{Sample}	Наименование пробы.
{Operator}	Оператор - данные оператора (лаборанта) проводившего измерения.
{SampleType}	Тип пробы и информация о нормативах и константах, связанная с данным типом пробы. Информация о нормативе копируется из графы «Комментарий» соответствующего норматива.
{SampleNote}	Описание пробы.
{Producer}	Производитель.
{ProductionDate}	Дата производства.
{Declarant}	Заявитель – организация или частное лицо подавшее заявку на исследование пробы.
{DeliveryDate}	Дата доставки.
{SampleArea}	Место отбора.
{Comment}	Примечание.
{Size}	Параметр 1.
{SParam}	Параметр 2.
{RawValue}	Количество исходного материала, использованного при концентрировании пробы.
{ConcMass}	Масса концентрата полученного при концентрировании исходного материала.
{ChemYield}	Выход выделяемого вещества (%) при химическом концентрировании.
{SampleMass}	Масса счётного образца.
{Weight}	Масса счётного образца или количество исходного материала использованного при концентрировании пробы, в зависимости от того, как представлены значения удельной активности в результатах обработки.
{ExposeDate}	Дата начала отбора (экспозиции) пробы.
{SampleDate}	Дата окончания отбора (экспозиции) пробы.
{DecompDate}	Дата обработки спектра.

{MeasDate}	Дата начала измерения.
{MeasEndDate}	Дата окончания измерения.
{ActualDate}	Дата, на которую приведены значения активностей нуклидов и интенсивностей излучения. Дата значения активностей может совпадать либо с датой начала измерений, либо с датой отбора.
{MeasTime}	Продолжительность измерения в секундах.
{Calculator}	Результаты выполнения программы калькулятора.
{Calc1}, {ErCalc1}... **{Calc8}, {ErCalc8}**	Значения сохраняемых переменных программы калькулятора.
{Calc&Err1},... **{Calc&Err8}**	Значения сохраняемых переменных программы калькулятора в форме: Calc±ErCalc (например 125±15).
{AUnit}	Размерность активности нуклидов.
{Act[Name]} **{Activ[Name]}**	Активность нуклида **Name** (например **{Act[Cs-137]}**). Для суммарной активности зарезервированы наименования условных нуклидов: **SumAct-A**, **SumAct-B** и **SumAct-G** – суммарная по альфа, бета и гамма.
{SAct[Name]}	Активность нуклида. Отличие от метки {Act[]} в том, что в отчёте метка {Act[]} может быть замещена либо активностью нуклида, либо значением Акт.+Погр. в зависимости от настройки отчёта, а метка {Sact[]} всегда замещается активностью нуклида.
{StErr[Name]}	Статистическая неопределённость оценки активности заданного нуклида в единицах активности.
{TotErr[Name]}	Полная погрешность оценки активности заданного нуклида в единицах активности. Полная погрешность включает статистическую неопределённость, погрешность средства измерения и метода измерения.
{Err[Name]} **{AbsErr[Name]}**	Погрешность (неопределённость) оценки активности нуклида в единицах активности. Погрешность либо полная, либо статистическая, либо отсутствует, в зависимости от настройки формы отчёта.
{SErr[Name]}	Погрешность оценки активности заданного нуклида в единицах активности. Отличие от метки {Err[]} такое же как для метки {Sact[]}.
{Act&Err[Name]}	Активность и погрешность оценки активности нуклида в форме: Act±Err (например 125±15).
{RelErr[Name]}	Относительная погрешность оценки активности нуклида в процентах.
{Mass[Name]}	Масса нуклида **Name** (например **{Mass[Cs-137]}**). Для геометрии «тонкого» слоя масса приводится в килограммах, для геометрии «толстого» слоя в относительных долях массы счётного образца.
{MassErr[Name]}	Погрешность оценки массы заданного нуклида в единицах массы.
{Norm1[Name]}-	Пять нормативов для заданного нуклида.

-{Norm5[Name]}

{AEff}	Суммарная эффективная активность нуклидов в пробе рассчитанная в соответствии с заданными в использованной при обработке таблице нуклидов значениями гамма эквивалента излучения нуклида по Ra-226. В качестве AEff может использоваться либо непосредственно значение AEff, либо верхний порог (AEff+AeffErr), в зависимости от установки параметров отчёта.
{SAEff}	Суммарная эффективная активность нуклидов в пробе. В качестве SAEff всегда используется непосредственно значение AEff.
{AEffErr} **{AEffAbsErr}**	Погрешность оценки AEff в единицах активности.
{SAEffErr}	Погрешность оценки AEff в единицах активности. В качестве SAEffErr всегда используется непосредственно значение погрешности AEff.
{AEff &Err}	Активность и погрешность оценки суммарной эффективной активности нуклидов в форме: Act±Err (например 125±15).
{AEffRelErr}	Относительная погрешность оценки AEff в процентах.
{InputRate}	Суммарная интенсивность зарегистрированного спектрометром излучения в имп./с.
{SumIntens}	Суммарная интенсивность зарегистрированного излучения от счётного образца и фона в заданном энергетическом диапазоне в имп./с.
{BgdIntens}	Интенсивность фонового излучения в заданном энергетическом диапазоне.
{ModelIntens}	Интенсивность излучения от нуклидов сформированной модели в заданном энергетическом диапазоне.
{ComptonIntens}	Интенсивность спектра непрерывного рассеяния в заданном энергетическом диапазоне.
{Residuals}	Невязка декомпозиции.
{GlbResiduals}	Общая невязка.
{EnergyPar}	Использованный при обработке энергетический диапазон и параметры энергетического дрейфа.
{LEnergy}	Левая граница энергетического диапазона.
{REnergy}	Правая граница энергетического диапазона.
{Drift}	Энергетический дрейф тракта спектрометра в процентах.
{ADrift}	Дрейф коэффициента усиления относительно начальной калибровки.
{BDrift}	Дрейф нуля энергетической шкалы в каналах
{CDrift}	Изменение нелинейной составляющей энергетического дрейфа.
{WDrift}	Дрейф разрешения тракта спектрометра в процентах

{Line1En}	Энергия левой граничной линии использованной при энергетической калибровке спектрометра.
{Line1Width}	Разрешение спектрометра (ширина пика на полувысоте) для линии 1 в единицах энергии.
{Line2En}	Энергия правой граничной линии использованной при энергетической калибровке спектрометра.
{Line2Width}	Разрешение спектрометра для линии 2.
{Result}	Результат операции обработки спектра (декомпозиции или калибровки спектрометра). Знак «+» соответствует успешной обработке, знак «-» - неудачной.
{NumberOfSamples}	Число счётных образцов, результаты измерений которых использовались для формирования отчёта.
{Spectrum}	Имя файла спектра в архиве для данной записи.
{IsoFile}	Имя файла результатов обработки спектра в архиве для данной записи.
{SN}	Порядковый номер записи в выборке.
{RN}	Номер записи в журнале измерений.
{NumberOfLines}	Число записей в выборке.
{Table}	Таблица активностей нуклидов для одной записи выборки. В таблицу активностей включается кроме непосредственно активностей и результаты выполнения программы калькулятора и дополнительная информация: интенсивность модели, фона, невязка, энергетический диапазон, число образцов, предупреждения о превышении заданных контрольных параметров.
{Report}	Результаты обработки для одной записи выборки. Метка {Report} замещается полным текстом отчета для пробы, включающим и таблицу активностей нуклидов, и информацию о пробе, средствах измерения и т.п.
{GrossReport}	Таблица отчёта по всей выборке. Метка {GrossReport} замещается таблицей отчёта по всей выборке записей. При этом если число колонок статистического отчёта не превышает 16-ти, текст статистического отчёта преобразуется в таблицу.
{CmpVal[Par]} **{CmpErr[Par]}**	Данные сравнения (аттестованные или приписанные значения): величина и неопределённость для указанного числового параметра (например, {CmpVal[Cs-137]} аттестованное значение активности Cs-137, {CmpErr[Cs-137]} аттестованное значение неопределённости Cs-137). **Par** – код колонки журнала измерений (список кодов названий приводится ниже).
{N[Par]}	Количество записей в колонке для указанного числового параметра (например, {N[Cs-137]} для значений активностей Cs-137). **Par** – код колонки журнала измерений (список кодов названий приводится ниже).
{Xmin[Par]}	Минимальное значение параметра.

{Xmax[Par]} Максимальное значение параметра.

{Gmin[Par]} Значение неопределённости для минимального значения параметра.

{Gmax[Par]} Значение неопределённости для максимального значения параметра.

{X0[Par]} Среднее арифметическое для величин активностей и вычисляемых параметров Calc1 – Calc8

$$X_0 = (\sum X_i)/n.$$

{G0[Par]} Оценка погрешности среднего арифметического для значений погрешностей и параметров ErCalc1 - ErCalc8

$$\Delta_0 = (\sqrt{\sum \Delta_i^2})/n.$$

{GS[Par]} Среднеквадратичное для величин погрешностей и вычисляемых параметров ErCalc1 - ErCalc8

$$\Delta_S = \sqrt{(\sum \Delta_i^2)/n}.$$

{Sx[Par]} Среднее квадратичное отклонение для величин активностей и вычисляемых параметров Calc1 – Calc8

$$S_x = \sqrt{\sum (X_i - X_0)^2 /(n-1)}.$$

{USx[Par]} Статистическая неопределённость (доверительный интервал соответствующий 95 % доверительной вероятности) для величин активностей и вычисляемых параметров Calc1 – Calc8

$$US_x = t_{95}(n-1) \cdot S_x.$$

{UTx[Par]} Усреднённая полная неопределённость для величин активностей.

$$UT_x = \sqrt{US_x^2 + U_\delta^2}.$$

Полная неопределённость включает статистическую неопределенность US_x и погрешность средства измерения и метода измерения $U_\delta = X_0 \cdot \sqrt{\delta_{си}^2 + \delta_м^2}$.

{Xm[Par]} Средневзвешенная МНК оценка активностей

$$X_m = \sum (X_i / \Delta_i^2) / \sum (1/\Delta_i^2).$$

{Gm[Par]} Средневзвешенная МНК оценка погрешностей

$$G_m = \sqrt{1/\sum (1/\Delta_i^2)}.$$

{Snorm[Par]} Нормированное на оценку погрешностей среднеквадратичное отклонение:

$S_{norm} = 2 \cdot \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / \Delta_i^2)/(n-1)}$ при установленном режиме нормального распределения.

Или $S_{norm} = 2 \cdot \sqrt{\sum((X_i - \overline{X})^2 / \Delta_i^2)/\chi_{50}^2(n-1)}$, где $\chi_{50}^2(n-1)$ - медиана хи-квадрат распределения, при установленном распределении Стьюдента.

Коэффициент 2 для учёта того, что в качестве Δ_i используется 95% доверительный интервал.

{Bias[Par]} Смещение значения среднего от данных сравнения {CmpVal[Par]} в размерности параметра Par.

{BiasPercent[Par]} Смещение значения среднего от данных сравнения в процентах.

{RAccuracy[Par]} Относительная точность $RAcc = 1/S_{norm}$.

{AccurSurplus[Par]} Запас точности в процентах $AccSpls = 100 \cdot (RAcc - 1)$.

{Kvar[Par]} Отношение среднеквадратичного отклонения к среднему $K_{\text{var}} = \sqrt{\sum(X_i - X_0)^2/(n-1)} / X_0$.

{Sx0[Par]} Среднеквадратичное отклонение оценки среднего $S_{x0} = \sqrt{\sum(X_i - X_0)^2/(n \cdot (n-1))}$.

{USx0[Par]} Статистическая неопределённость (доверительный интервал соответствующий 95 % доверительной вероятности) оценки среднего

$US_{x0} = t_{95}(n-1) \cdot S_{x0}$.

{UTx0[Par]} Полная неопределённость оценки среднего

$UT_{x0} = \sqrt{US_{x0}^2 + U_\delta^2}$.

Полная неопределённость включает статистическую неопределенность (US_{x0}) и погрешность средства измерения и метода измерения (U_δ).

{RelUTx0[Par]} Относительная полная неопределённость оценки среднего $\mathrm{Re}lUT_{x0} = UT_{x0} / X_0$.

{RelUSx0[Par]} Относительная статистическая неопределённость оценки среднего $\mathrm{Re}lUS_{x0} = US_{x0} / X_0$.

{LOD[Par]} Минимально измеряемая активность

$LOD = k_{lod} \cdot \Delta_S^0 \cdot \sqrt{I_B^0 / I_S^0})/(2 \cdot Rs)$.

{KDx[Par]}	Коэффициент изменчивости α в формуле составной Пуассоновской статистики $D_N = N + (\alpha \cdot N)^2$ рассчитывается для колонок «Загрузка» и «Интенсивность в окне (имп./с)» $\alpha = \sqrt{(S_x)^2 - (I_S^0 \cdot T_m)} / (I_S^0 \cdot T_m)$.
{Warnings}	Текст сообщений формируемых процедурой анализа статистики при превышении заданных допустимых уровней статистических параметров.

Текст, связанный с соответствующей меткой, при формировании отчета замещает текст метки, наследуя стиль и шрифт текста метки. Поскольку названия граф («Спектрометр», «Геометрия», «Код пробы» и т.д.) в программном пакете «SPECTRRAD» могут изменяться, для меток, от метки **{Analyser}** до метки **{MeasTime},** существуют дополнительные метки вида **{lbxxxx},** которые замещаются текущим наименованием соответствующей графы. Например: метка **{lbAnalyser}** будет замещена текстом «Спектрометр» или «Анализатор», а метка **{lbSize}** текстом «Размер пробы», «Глубина скважины» или «Число адсорберов» в зависимости от настройки архива измерений.

Регистр в названии метки значения не имеет – метка **{Analyser}** и метка **{analyser}** – идентичные метки.

Коды колонок

Наименования колонок журнала измерений задаются при настройке архива и могут изменяться. В то же время каждой колонке, за исключением колонок нуклидов, присвоено внутреннее неизменяемое имя – код колонки. Код колонки используется при формировании меток статистического отчёта: **{KDx[Par]}**, **{LOD[Par]}** и т.д., где **Par** – код колонки (регистр значения не имеет). Метки статистического отчёта имеют смысл только для числовых колонок журнала измерений. Коды колонок для нуклидов совпадают с обозначением нуклидов принятым в пакете «SPECTRRAD» - принятое сокращение химического элемента со следующим за ним через тире атомным весом изотопа и буквой изомера, например: **Cs-137**, **Ba-137m** и т.п.

Название колонки	*Код колонки*	*Тип колонки*
Код пробы	SampleCode	Текст
Наименование пробы	Sample	Текст
Спектрометр	Analyser	Текст
Геометрия	Geometry	Текст
Оператор	Operator	Текст
Тип пробы	SampleType	Текст
Описание пробы	SampleNote	Текст
Производитель	Producer	Текст
Заявитель	Declarant	Текст
Место отбора	SampleArea	Текст
Примечание	Comment	Текст
Параметр 1	Size	Число
Параметр 2	SParam	Число
Дата производства	ProductionDate	Дата
Дата доставки	DeliveryDate	Дата
Начало отбора	ExposeDate	Дата
Окончание отбора	SampleDate	Дата
Дата измерения	MeasDate	Дата
Время измерения	MeasTime	Число

Дата обработки	DecompDate	Дата
Количество пробы	Weight	Число
Дата значения активностей	ActualDate	Дата
Эффективная активность	AEff	Число
Неопределённость эффективной активности	AEffErr	Число
Единица измерения	AUnit	Текст
Calc1	Calc1	Число
ErCalc1	ErCalc1	Число
Calc2	Calc2	Число
ErCalc2	ErCalc2	Число
Calc3	Calc3	Число
ErCalc3	ErCalc3	Число
Calc4	Calc4	Число
ErCalc4	ErCalc4	Число
Calc5	Calc5	Число
ErCalc5	ErCalc5	Число
Calc6	Calc6	Число
ErCalc6	ErCalc6	Число
Calc7	Calc7	Число
ErCalc7	ErCalc7	Число
Calc8	Calc8	Число
ErCalc8	ErCalc8	Число
Спектр	Spectrum	Текст
Результаты обработки	IsoFile	Текст
Загрузка (имп./с)	InputRate	Число
Левая граничная энергия	LEnergy	Число
Правая граничная энергия	REnergy	Число
Интенсивность в окне (имп./с)	SumIntens	Число
Инт. комптона в окне (имп./с)	ComptonIntens	Число
Инт. фона в окне (имп./с)	BgdIntens	Число
Общая невязка	GlbResiduals	Число
Невязка декомпозиции	Residuals	Число
Энергетический дрейф (%)	Drift	Число
Коэффициент усиления	ADrift	Число
Нуль шкалы каналов	BDrift	Число
Нелинейные искажения (%)	CDrift	Число
Дрейф разрешения (%)	WDrift	Число
Линия 1 (кэВ)	Line1En	Число
Разрешение линии 1 (кэВ)	Line1Width	Число
Линия 2 (кэВ)	Line2En	Число
Разрешение линии 2 (кэВ)	Line2Width	Число
Результат	Result	Текст

Коды нуклидов и вычисляемых параметров **Calc1-Calc8** определяют два значения: величина и погрешность (неопределённость) величины. Что конкретно будет использовано в качестве значения **Par** в рассчитываемом статистическом параметре определяется рассчитываемым статистическим параметром:

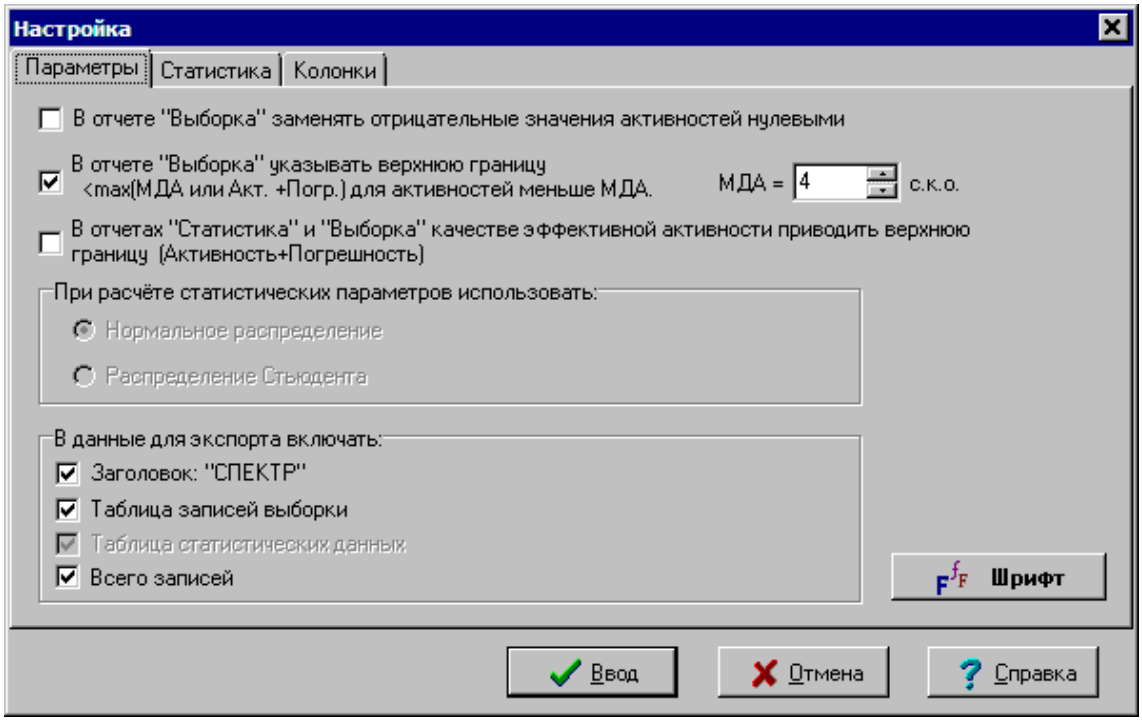
- **{N[Par]}, {Xmin[Par]}, {Xmax[Par]}, {X0[Par]}, {Sx[Par]}, {USx[Par]}, {UTx[Par]}, {Kvar[Par]}, {Sx0[Par]}, {USx0[Par]}, {UTx0[Par]}, {RelUTx0[Par]}, {RelUSx0[Par]}, {KDx[Par]} –** используют величину параметра;
- **{Gmin[Par]}, {Gmax[Par]}, {G0[Par]}, {GS[Par]}, {Gm[Par]} –** используют погрешность параметра;
- **{Xm[Par]}, {Snorm[Par]}** и **{LOD[Par]} –** используют оба значения параметра.

Выборка

Кнопка (пункт меню «***Команды / Выборка...***») вызывает программу, формирующую таблицу для группы выбранных оператором записей результатов обработки спектров.

Окно программы “Выборка” идентично окну «Статистика» за исключением того, что отсутствуют строки статистических параметров и данные в колонках активностей и погрешностей могут быть приведены обычной форме или в форме верхней границы значений (<Акт.+Погр.) в зависимости от установки параметров архива.

Кнопка позволяет настроить парметры формирования данных по выборке. При этом на экран выводится форма «**Настройка**»:



Форма содержит три страницы: «**Параметры**», «**Статистика**» и «**Колонки**».

На первой странице «**Параметры**» оператор может установить несколько флажков и величин, определяющих содержание, форму и значения данных по выборке:

Флажок «**В отчёте «Выборка» заменять отрицательные значения активностей нулевыми**» позволяет формировать отчёты по группе измерений не содержащие отрицательных значений.

Флажок «**В отчёте «Выборка» указывать верхнюю границу <max(МДА или Акт.+Погр.) для активностей меньше МДА»** - режим вывода результатов в отчёте «Выборка». При установке флажка, в том случае, если величина активности или рассчитанного параметра меньше минимально детектируемой (МДА) погрешность не выводится, а в колонке активности (рассчитанного параметра) указывается значение равное максимальному из МДА или суммы активности (величины параметра) и погрешности с предшествующим знаком «меньше» (<). Заданная величина **МДА** в единицах средне-квадратичных отклонений (**с.к.о.**) используется и при формировании отчета для одиночных измерений.

Флажок «**В отчётах «Статистика» и «Выборка» в качестве эффективной активности приводить верхнюю границу (Активность + Погрешность)**» определяет режим вывода значений эффективной активности в окнах «Статистика» и «Выборка». При установке флажка в колонке значений эффективной активности приводится верхняя

оценка значения эффективной активности (А.эфф.м=А.эфф+$\Delta_{А.эфф.}$), колонка погрешностей не изменяется.

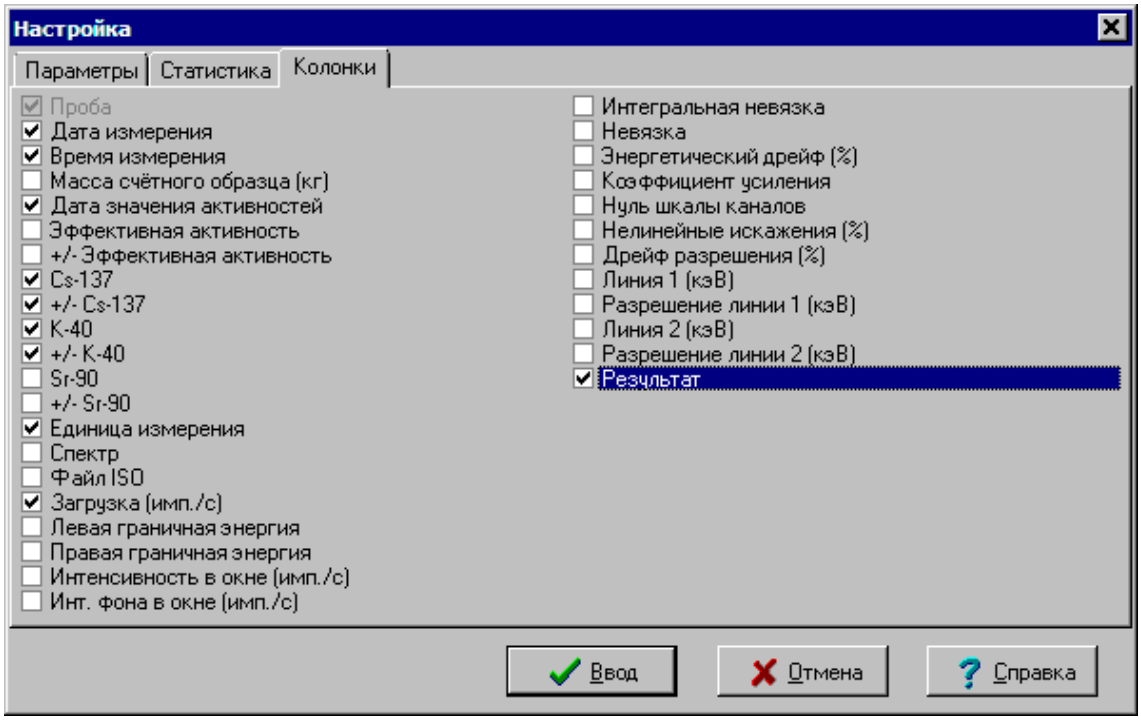
Группа флажков «**В данные для экспорта включать**:» определяет содержание данных передаваемых в Word или Excel, а также на печать или во внешний файл.

Кнопка

- установка шрифта для данных формы.

Вторая страница «**Статистика**» для выборки недоступна.

Третья страница «**Колонки**» позволяет выбрать колонки журнала измерений, которые будут приведены в таблице «Выборка»:



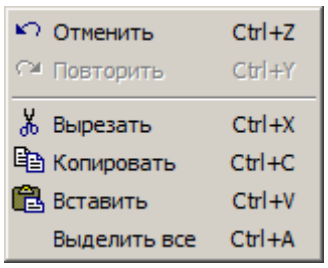
«Кнопка» (пункт меню «***Файл \ Открыть...***») позволяет вставить данные формы в шаблон отчета (произвольный текст в виде документа Microsoft Word или в формате RTF). При этом значения данных замещают набор меток в шаблоне отчёта. Если шаблон отчёта является документом Word, то и сам отчёт формируется как документ Word.

«Кнопка» - печать отчёта (пункт меню «***Файл \ Печать...***»).

«Кнопка» (пункт меню «***Файл \ Экспорт в Word***») - передача содержимого в «Microsoft Word».

«Кнопка» (пункт меню «***Файл \ Экспорт в Excel***») - передача содержимого в «Microsoft Excel».

Пункт меню «***Вид \ Текст***» позволяет просматривать таблицу выборки в виде текста. Оператор при отображении данных в таком виде имеет возможность отредактировать их

как текст, пользуясь всплывающим меню: 

и передать в Word или Excel не весь текст, а только выделенный фрагмент.

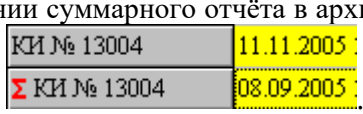
Набор меток шаблона отчёта «Выборка» идентичен набору меток статистического отчёта за исключением того, что в наборе меток для «выборки» отсутствуют метки для вставки результатов статистической обработки. Ряд меток для шаблонов статистических отчётов имеет смысл только в отчётах «Выборка» - например, метка **<<{Report}>>** сформирует документ Word включающий все отчёты по выбранным операторам записям.

Суммарный отчёт

Кнопка (пункт меню «***Команды / Суммарный отчёт***») вызывает процедуру, формирующую объединённый отчёт для группы выбранных оператором записей результатов обработки спектров. Такой отчёт, как правило, может быть сформирован только для результатов обработки одной и той же пробы – процедура проверяет идентичность пробы по одной, двум или трём колонкам журнала измерений: «**Код пробы**», «**Наименование пробы**» и «**Тип пробы»** для всех выбранных записей и исключает из выборки записи с наименованием, кодом и типом пробы, отличающимися от наименования, кода и типа пробы для первой записи. Колонка «**Тип пробы»** всегда участвует в сравнении. Две первые колонки журнала «**Код пробы**» и «**Наименование пробы**» участвуют в сравнении, если присутствуют (визуализируются) в журнале измерений. В случае если обе колонки: и «**Код пробы**», и «**Наименование пробы**» исключены из списка визуализируемых колонок, суммарный отчёт можно сформировать и для разных проб. В то же время в отчёт можно включать измерения, проведённые на различных спектрометрах и в различных геометриях.

Данные о пробе (описание пробы, место отбора и т.п.), которые будут включены в суммарный отчёт, берутся из первой по дате измерения записи выборки.

Активность нуклидов пересчитывается на массу, дату и время измерения спектра первой по дате измерения записи выборки. Время измерения суммируется. Активность идентичных нуклидов в выборке усредняется с весами соответствующими их ковариационной матрице (учитываются погрешности и коррелированности величин). Погрешности для усреднённых значений активностей рассчитываются также с учётом полной ковариационной матрицы (учитывается коррелированность величин обусловленная систематической погрешностью спектрометра и использованием коррелированных априорных данных). Данные о величинах и их погрешностях при формировании суммарного отчёта берутся не из журнала измерений, а из результатов обработки спектра, которые содержат сведения о коррелированности величин, поэтому все данные рассчитываются корректно.

Запись в журнале измерений при сохранении суммарного отчёта в архиве измерений помечается знаком **Σ** в первой позиции записи: 
.

Создание графиков, контрольных карт Шухарта

Наглядное представление зависимости параметров спектрометра (разрешение, коэффициент усиления, интенсивность фона и т.п.) от времени эксплуатации спектрометра весьма полезно при анализе состояния спектрометра, поверке спектрометра. Графики коррелированности активности нуклидов (например

коррелированность содержания Sr-90 с содержанием Cs-137) полезны при анализе радиоактивного загрязнения.

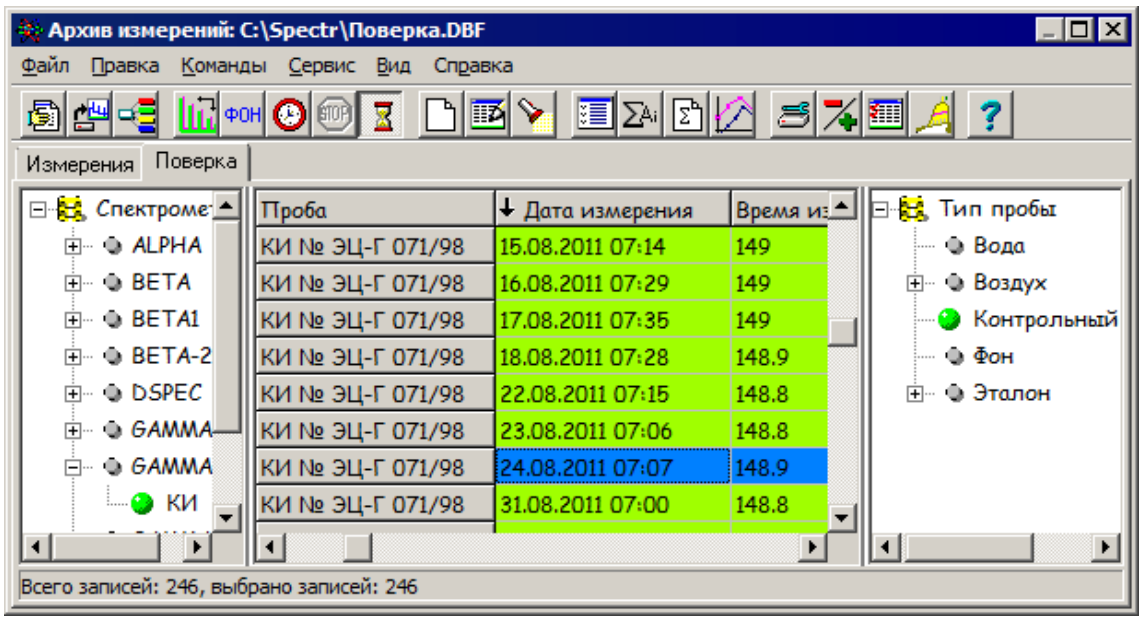
В 30-х годах прошлого века американский учёный Уолтер Шухарт, занимавшийся вопросами повышения качества промышленной продукции, предложил использовать графики изменения параметров какого-либо процесса или параметров продукции дополненные линиями заданных контрольных уровней для принятия решений об управлении процессом. График значительно информативнее таблицы, поскольку корректно отображает временную ось и позволяет прогнозировать развитие процесса. Такие графики с тех пор называют контрольными картами Шухарта.

Параметры процесса или продукции являются результатами измерений, а значит случайными величинами. Поэтому кроме графика значений единичного измерения нас могут интересовать и характеристики случайной величины (среднее, размах, среднеквадратичное отклонение, запас точности, смещение) и их зависимость от времени или других параметров. Соответственно и контрольные карты (или графики) бывают нескольких видов:

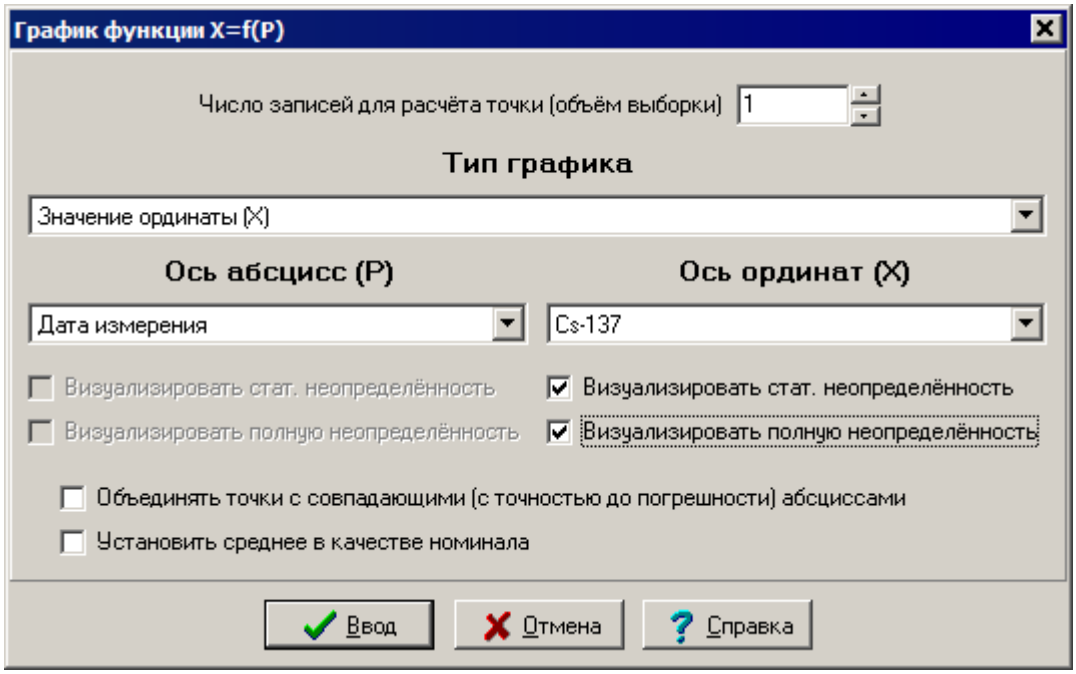
- *X*-график – зависимость величины единичного измерения от параметра.
- $\overline{X}$ – график зависимости величины среднего по выборке от параметра.
  $\overline{X} = (\sum_{i=1}^{n} x_i)/n$, *n* – объём выборки.
- *R* – график размаха по выборке. *R=Xmax-Xmin*.
- *s* – график среднеквадратичного отклонения. $s = \sqrt{((\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{X})^2/(n-1))}$[12], *n* – объём выборки.
- $AccSpls$ - запас точности в процентах для случайной составляющей неопределённости. $AccSpls = 100 \cdot (1/S_{norm} - 1)$,
  $S_{norm} = 2 \cdot \sqrt{\sum((X_i - \overline{X})^2/\Delta_i^2)/\chi_{50}^2(n-1)}$, Δ_i - «паспортное» (рассчитанное процедурой обработки спектра) значение случайной составляющей неопределённости X_i, $\chi_{50}^2(n-1)$ - медиана хи-квадрат распределения.
- $Bias$ - смещение в процентах для систематической погрешности.
  $Bias = 100 \cdot (X_{real} - \overline{X})/X_{real}$, X_{real} - паспортное значение измеряемой величины.

Для создания графика оператор предварительно должен включить визуализацию требуемых колонок журнала измерений (см. «Настройка архива»), в том случае если эти колонки отсутствуют в журнале, и выделить нужную группу записей. Например:

[12] Уолтер Шухарт работал инженером по качеству на большом заводе, выпускающем однотипную продукцию. Определяющим показателем качества были размеры производимой детали. За день производилось большое количество деталей. Поэтому из произведённых деталей ежедневно производилась случайная выборка определённого количества деталей, по этой выборке рассчитывался средний размер и размах разброса размеров. Эти данные использовались для построения двух графиков: $\overline{x}$ - среднего и *R*- размаха разбросов. Номер выборки в этом случае был адекватным отображением оси времени. В нашем случае нельзя для построения контрольной диаграммы или графика использовать измерения рабочих проб – они все разные. Можно и нужно использовать результаты измерений контрольного образца. Таких измерений может быть и менее одного в день. В этом случае более информативной будет карта разовых значений параметра и нельзя заменять ось времени номером выборки – это будет полной профанацией отображения процесса во времени.



Затем, нажав на кнопку (пункт меню «***Команды / График…***»), вызвать процедуру создание графика. При этом на экране появится форма:



В статистике принято случайную величину обозначать латинской буквой X, поэтому форма называется «**График функции X=f(P)**».

Если требуется построить график характеристик случайной величины (**Xmean** - среднее, **R** – размах, **s –** среднеквадратичное отклонение, **AccSpls** – запас точности, **Bias** – смещение) или объединённый график **Xmean±ErX**, необходимо задать **число записей для расчёта точки (объём выборки)**. Для построения графика характеристик случайной величины требуются, как минимум, две точки для графика размаха или три точки для остальных параметров. Если объём выборки равен одной точке будет построен **X график** – зависимость единичных значений **X** от **P**. При задании объёма выборки больше единицы все выбранные записи журнала разделяются на выборки по заданному числу записей. И расчёт точек графика проводится по этим выборкам. Для графиков **X** и **R** в

качестве неопределённостей приводятся неопределенности, рассчитанные по оценкам неопределенностей единичных измерений. Для всех остальных графиков случайная составляющая неопределённости рассчитывается по среднеквадратичным отклонениям, рассчитанным по выборкам и пересчитанным на 95%-й доверительный интервал, $ErX_{par} = s * t_{95}(n-1)$. $t_{95}(n\text{-}1)$ – 95 % доверительный интервал распределения Стьюдента для *n-1* числа степеней свободы (*n* – объём выборки). Если флажок «**Визуализировать полную неопределённость**» не установлен, значение дополнительной систематической погрешности устанавливается равным нулю.

Затем выбрать из выпадающего списка **тип графика** и выбрать из выпадающих списков **колонки журнала измерений** для **оси абсцисс (P)** и **оси ординат (X)** формируемой функции **X=f(P)**. В том случае, если в качестве оси абсцисс или ординат используются колонки «**Интенсивность в окне (имп/с)**», «**Инт. комптона в окне (имп/с)**» или «**Интенсивность фона в окне (имп/с)**», необходимо учитывать, что значения в колонках зависят не только от установленных энергетических границ, но в режиме вывода случайной составляющей погрешности, и от процедуры обработки.

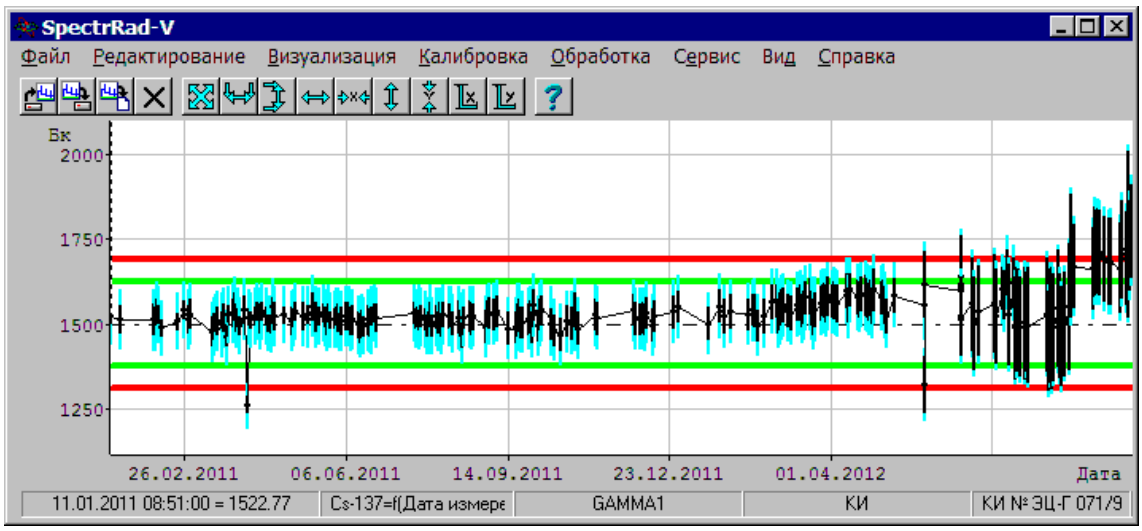
Процедура построения графика рассчитает неопределённость выходного значения и включит его в результирующую таблицу при установке оператором «галочек» в пунктах «**Визуализировать стат. неопределённость**» и «**Визуализировать полную неопределённость**». Для объединённого графика **Xmean±ErX** статистическая неопределённость ординаты рассчитывается по среднеквадратичному отклонению выборки и всегда визуализируется. Надо помнить, что в качестве **ErX** приводится оценка погрешности не среднего (**Xmean**), а единичного значения случайной величины **X**.

При установке «галочки» в пункте «**Объединять точки с совпадающими (с точностью до погрешности) абсциссами**» процедура формирования графика для точек с близко расположенными абсциссами ($Pi+\Delta Pi \leq Pj-\Delta Pj$) сформирует точку с усреднёнными координатами.

Установка «галочки» в пункте «**Установить среднее в качестве номинала**» позволяет задать среднее по всем значениям выборки в качестве линии номинального значения карты Шухарта.

После нажатия на клавишу «**Ввод**» программа формирует таблицу функции, сохраняет её в папке «SPECTRA» в файле с уникальным именем включающем дату создания и визуализирует в окне программы «SPECTRRAD-V».

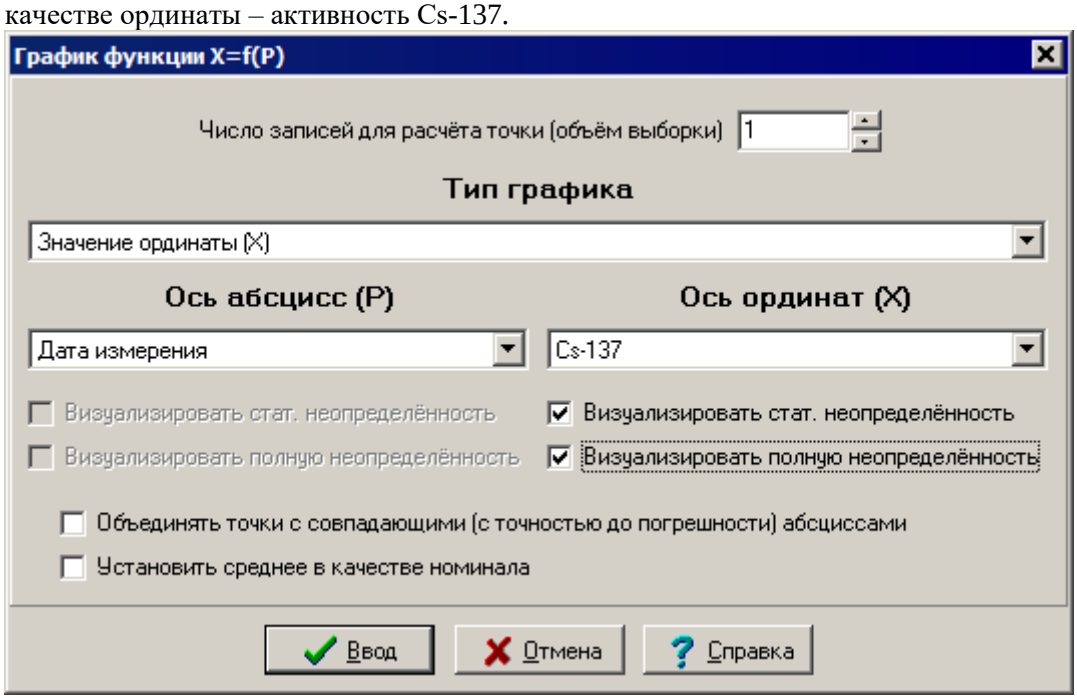
В том случае, если формировался **X** или **Xmean** график и в качестве абсциссы использовалась дата измерения, а в качестве ординаты активность нуклида, процедура формирования графика дополняет график линиями контрольных уровней. Уровнем номинала будет заданная активность нуклида, если она задана. Если активность нуклида не задана или установлен флажок «**Установить среднее в качестве номинала**», уровнем номинала будет значение среднего для всех записей. В качестве уровней предупреждения будут линии отклонения от номинала на неопределённость активности. Если неопределённость не задана оператором, используется усреднённая неопределённость. В качестве уровней действия – увеличенные в 1.5 раза уровни предупреждений (99% доверительный интервал). В итоге график может выглядеть следующим образом:



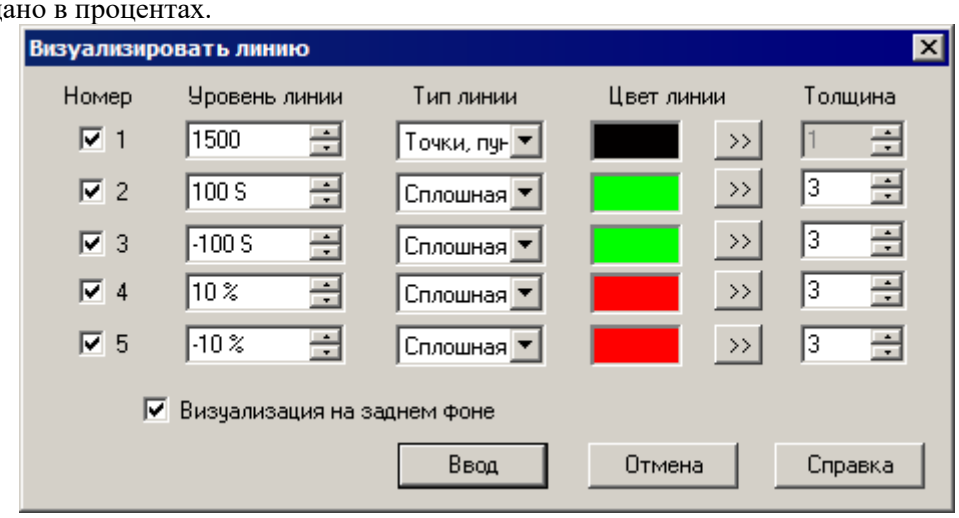
Пакет «SPECTRRAD» сохраняет в журнале измерений (поверки) кроме оценок активностей нуклидов контрольного источника (который рекомендуется измерять ежедневно) ещё одиннадцать служебных параметров говорящих о состоянии спектрометра (дрейф коэффициента усиления, дрейф нуля шкалы, дрейф разрешения, нелинейные искажения, интенсивность регистрируемых импульсов от фона и контрольного источника и т.п.). Можно при желании строить карты Шухарта для всех этих параметров. Рекомендуется строить карты Шухарта для значения активностей контрольных источников (включая и контрольную фоновую пробу) используемых при ежедневной поверке спектрометра и для невязки разложения спектра на компоненты, поскольку этот параметр является интегральным индикатором изменения формы спектра не компенсируемой предусмотренными процедурами настройки спектрометра.

Рассмотрим создание карты Шухарта на примере графика активности Cs-137, содержащегося в контрольном источнике от даты измерения:

1. Выделим требуемые записи в журнале измерений и сформируем график, так как это описано в предыдущем параграфе. В качестве абсциссы выбираем дату измерения, а в качестве ординаты – активность Cs-137.

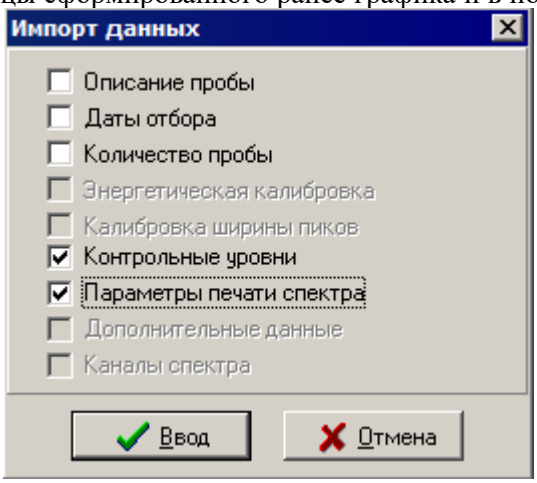


2. Дополним график линиями контрольных уровней или отредактируем существующие. Для этого используем пункт «**Визуализация\Линия…**» главного меню. На открывшейся форме зададим нужные параметры пяти уровней: номинала (номер 1), границ уровня предупреждений (номер 2, номер 3) и границ уровня действий (номер 4, номер 5). Линии с номерами больше первого можно задавать либо в абсолютном значении, либо в виде отклонения в абсолютных значениях или в процентах от значения первой линии. Буква **S** после числа указывает, что значение является смещением (**S**hift) от первой линии в абсолютных числах, знак процента (**%**) указывает, что смещение задано в процентах.



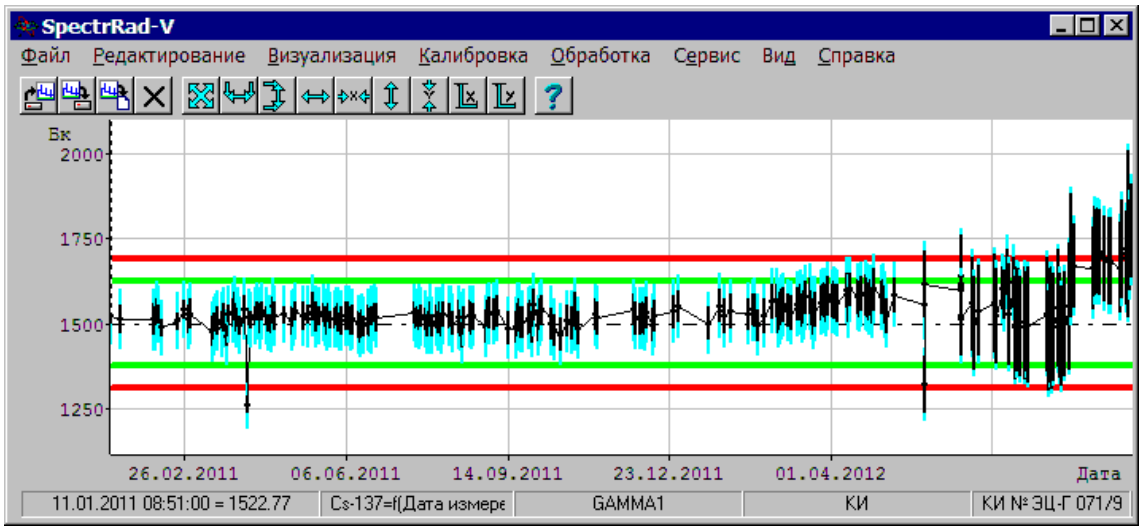
В нашем случае – 1500 это аттестованное значение активности Cs-137 в Беккерелях, 100 S и -100 S - границы уровней предупреждений, 10 % и -10 % - границы уровней действий.

Если такая карта создаётся не в первый раз можно импортировать параметры линий из файла графика сформированного ранее. Для этого вызываем процедуру редактирования параметров спектра (пункт меню «**Сервис\Параметры спектра…**»). В открывшейся форме щёлкаем по пункту меню «**Файл\Импорт данных\Из файла…**», выбираем файл таблицы сформированного ранее графика и в появившейся форме выбора параметров импорта



отмечаем «Контрольные уровни» и «Параметры печати спектра».

В итоге получаем картинку графика с контрольными уровнями:

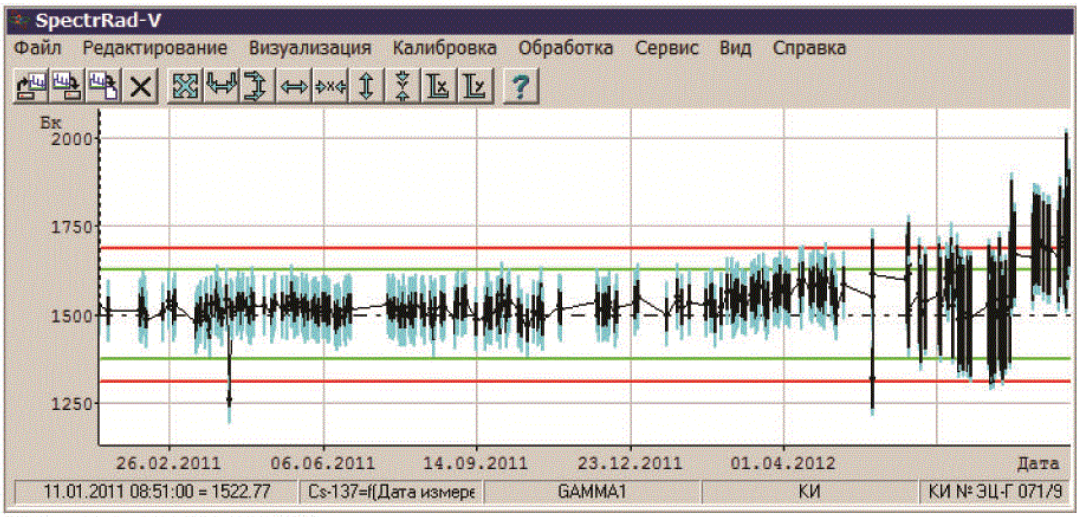


3. Дополним картинку текстовой информацией. Для этого выберем пункт главного меню «**Файл\Печать…**». Процедура, вызываемая по данному пункту меню, формирует отчёт по спектру (или таблице графика), включая и несколько основных статистических параметров. Отчёт можно напечатать или экспортировать в MS WORD. Выбираем экспорт в MS WORD с использованием подготовленного шаблона для экспорта «Карта Шухарта». В итоге получаем документ MS WORD:

ГРАФИК ИЗМЕРЕНИЙ КОНТРОЛЬНОГО ИСТОЧНИКА

Проба:**КИ № ЭЦ-Г 071/98**
Наименование пробы:**Акт Cs-137 = 1500 Бк.,Акт K-40 = 16500 Бк.**
Описание пробы: **Контрольный источник Cs-137+K-40 № ЭЦ-Г 071/98 Акт Cs-137 = 1500 Бк. Акт K-40 = 16500 Бк.**
Тип пробы: **Контрольный источник**
Примечание: **Cs-137=f(Дата измерения)**
Дата аттестации: **06.04.1998 12:00:00**

Средство измерения	
Наименование средства измерения	Свидетельство о поверке
0781-Ар-Б-Г	3004845



Дополнительная погрешность: 5 %

Минимум:	1260±70 Бк
Максимум:	1800±160 Бк
Среднее:	1500±100 Бк
Смещение:	36.7954 Бк (2.45303 %)
Средне квадр. отклонение:	60 Бк
Стат. неопределённость:	120 Бк
Полная неопределённость:	140Бк
Запас стат. точности:	-59 %

Контрольные уровни:

Номинал:	1500 Бк
Верхняя граница уровня предупреждений:	1625 (+125) Бк
Нижняя граница уровня предупреждений:	1375 (-125) Бк
Верхняя граница уровня действий:	1687.5 (+187.5) Бк
Нижняя граница уровня действий:	1312.5 (-187.5) Бк

Временной диапазон: 11.01.2011 - 04.10.2012 (5.46043e+07 с)
Все активности пересчитаны на 06.04.1998 12:00:00

20 (8.16 %) значений за границами уровня предупреждений.
12 (4.90 %) значений за границами уровня действий.
Запас точности лежит вне допустимых значений (-20%, +100%).

Приведённые на графике активности пересчитаны на дату аттестации контрольного источника.

Ответственный
за оформление протокола лаборант — должность; Васильева В.Ю. — Ф.И.О.; _____ — подпись

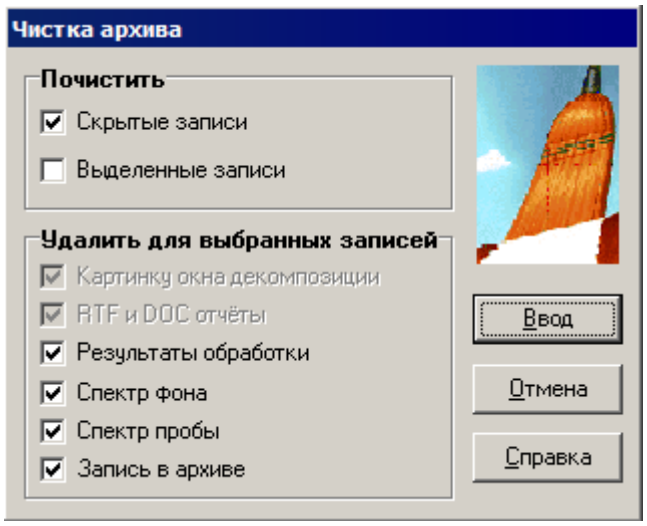
Для создания шаблонов карт Шухарта используются дополнительные метки:

Метка	***Описание***
{AddError}	Дополнительная к статистической неопределённость связанная с погрешностью калибровки, поглощения излучения, нарушений геометрии и т.п. Задаётся в процентах при настройке спектрометра.
{Ymin}	Минимальной значение ординаты спектра, таблицы.
{YminErr}	Неопределённость минимального значения.
{YminStatErr}	Статистическая часть неопределённости минимального значения.
{Ymax}	Максимальной значение ординаты спектра, таблицы.
{YmaxErr}	Неопределённость максимального значения.
{YmaxStatErr}	Статистическая часть неопределённости максимального значения.
{Ymid}	Среднее для приведённых значений $Y_{mid} = (\sum y_i)/n$.
{YErrmid}	Усреднённая неопределённость $YErr_{mid} = \sqrt{(\sum \Delta_i^2)/n}$. В качестве неопределённости для среднего приводится эта величина, а не неопределённость среднего.
{StatYErrmid}	При расчёте $StatYErr_{mid}$ используется статистическая часть неопределённости Δ_i^0.
{YmidStatErr}	Статистическая неопределённость среднего $Y_{mid}StatErr = \sqrt{(\sum(\Delta_i^o)^2)}/n$. Δ_i^0 - статистическая неопределённость величины y_i.
{YmidErr}	Неопределённость среднего $Y_{mid}Err = \sqrt{(\sum(\Delta_i^0)^2)/n^2 + (Ymid \cdot AddError/100)^2}$.
{StDvn}	Среднее квадратичное отклонение для ординат $StDvn = \sqrt{\sum(y_i - Y_{mid})^2/(n-1)}$.
{ExStDvn}	Расширенная статистическая неопределённость (доверительный интервал соответствующий 95 % доверительной вероятности) для величин ординат $ExStDvn = t_{95}(n-1) \cdot StDvn$. Используется распределение Стьюдента
{ExTotDvn}	Расширенная полная неопределённость для величин ординат. $ExTotDvn = \sqrt{ExStDvn^2 + U_\delta^2}$. Полная неопределённость включает статистическую неопределенность $ExStDvn$ и дополнительную погрешность (погрешность средства измерения и метода измерения) $U_\delta = Y_{mid} \cdot \sqrt{\delta_{си}^2 + \delta_м^2}$.

{RAccuracy}	Относительная точность $RAcc = 0.5/\sqrt{\sum((X_i - X_m)^2/(\Delta_i^0)^2)/(n-1)}$. Коэффициент 0.5 для учёта того, что в качестве Δ_i^0 используется 95% доверительный интервал.
{AccurSurplus}	Запас точности в процентах $AccSpls = 100 \cdot (RAcc - 1)$.
{Bias}	Смещение значения среднего от аттестованного значения в размерности ординаты.
{BiasPercent}	Смещение значения среднего от аттестованного значения в процентах.
{Level1} – {Level5}	Значения контрольных уровней 1 – 5.
{Yunit}	Размерность ординаты.

Чистка архива

Кнопка (пункт меню «***Сервис / Чистка архива...***») вызывает процедуру, чистки архива. Окно процедуры чистки имеет вид:



Оператор должен отметить флажками тип записей, которые необходимо удалить из архива: «**Скрытые**» и (или) «**Выделенные**» записи и тип данных для выбранных записей, которые будут удалены из архива: «**Картинку окна декомпозиции**», «**RTF и DOC отчёты**», «**Результаты обработки**», «**Спектр фона**», «**Спектр пробы**» и (или) «**Запись в архиве**». В том случае если не указаны записи для чистки, архив будет очищен от ошибочных записей (нечитаемых записей, записей с испорченными данными) и соответствующих им файлов.

По нажатию на кнопку «**Ввод**» начнётся операция чистки архива, которая может потребовать значительного времени. Прерывать операцию чистки не рекомендуется, так как это может привести к потере данных.

При операции чистки записи архива, которые должны остаться в архиве, и соответствующие им файлы переписываются во временный архив **~tmp.dbf**. По завершении процедуры старый архив удаляется, а временный архив переименовывается в старый.

Поскольку операция чистки перемещает и удаляет файлы и папки, предварительно должны быть закрыты все программы, которые могут обращаться к файлам и папкам архива, так как операционная система не позволяет перемещать или удалять файлы и

папки, к которым имеют доступ другие программы, включая и программы просмотра (проводник, Norton commander, Windows commander и т.п.).

Восстановить архив в случае неудачи операции можно следующим образом: Программа создаёт копию файла архива с тем же именем и расширением **~db**. Необходимо переименовать её в наименование старого архива и скопировать все файлы из папки **~tmp** в папку архива.

Файлы и программы

Структура и размещение

Программа установки пакета записывает неизменяемую часть пакета (программы и динамические библиотеки) в папку «Program Files\Dremin\SpectrRad», изменяемую часть пакета (библиотеки нуклидов, нормативы и константы измеряемых проб, вспомогательные файлы) в папку указанную пользователем. В версии AD (ApplicationDir) все файлы устанавливаются в папку указанную пользователем. Версию программы можно узнать вызвав пункт меню «**Справка/О программе…**».

Структура папки, в которую записывается изменяемая часть пакета (для версии AD – весь пакет), представляет собой дерево, в корневой папке которого находятся общие файлы (файлы общих настроек, файл лицензии) и ряд папок:

- Папка «**Devices**» содержащая папки включенных в систему спектрометров.
- Папка «**Все типы проб**» для хранения папок и файлов, содержащих описания, нормативы (СанПиН, НРБ и т.п.), сечения поглощения излучения и химический состав для различных типов проб.
- Папка «**Manuals&Methods**», содержащая документацию по пакету.
- Папка «**Help**», содержащая файлы справочной системы.
- Папка «**DocTemplate**», содержащая шаблоны отчётов формируемых в MsWord.

Архивы результатов измерений и библиотеки нуклидов могут быть расположены где угодно (в том числе и на дисках других компьютеров, если они объединены в сеть). По умолчанию архивы создаются в папке «**Archives**», расположенной в корневой папке пакета. Таблицы нуклидов по умолчанию хранятся в папке «**Nuclides**», расположенной в корневой папке пакета.

Папки спектрометров, в свою очередь, содержат относящиеся к ним общие файлы, папку «**SPECTRA**» и папки установленных для данного спектрометра геометрий измерений. Каждая геометрия содержит папку «**ELEMENTS**» для хранения калибровочных данных, относящихся к данному спектрометру и данной геометрии, папку «**COMP**» для временного хранения спектров компонентов разложения и два файла «**decomp.ini**» и «**decomp.par**» содержащие информацию о файлах и параметрах процедуры обработки спектра.

Программы:

SpectrRad.exe	Основная программа пакета. Обеспечивает управление измерениями и обработку спектров.
SpectrRadDemo.exe	Демонстрационная версия основной программы пакета. В демоверсии программы отключено управление спектрометрами.
SpectrRadView.exe	Версия программы, предназначенная только для целей визуализации спектров и таблиц функций.
SpectradNucl.exe	Программа создания и редактирования библиотек нуклидов.
Radbgd.exe	Программа расчёта фона при измерении радона с использованием угольных адсорберов.

Файлы:

****.srs, *.srp, *.clb, *.mdl, *.cpt, *.spt***	Файлы спектров. Звездочка «*» соответствует произвольному набору символов, допустимых для имен файлов.
Backgr.srs	Зарезервированное имя для файла временного хранения спектра

	фона.
Autoclbr.clb	Файл спектра контрольного источника для автокалибровки.
****.mdl***	Файлы моделей спектров линий определенных энергий.
****.spt***	Файлы спектров сохраненных в текстовом формате.
****.tbl***	Файлы спектров или функций в табличном представлении.
Peakeff.tbl	Зарезервированное имя для файла эффективности регистрации квантов в пиках полного поглощения.
Totaleff.tbl	Зарезервированное имя для файла полной эффективности регистрации квантов в спектре.
Effesc1.tbl	Зарезервированное имя для файла эффективности регистрации гамма квантов в пиках утечки.
Effesc2.tbl	Зарезервированное имя для файла эффективности регистрации гамма квантов в пиках двойной утечки.
****.srr***	Файлы результатов обработки спектров.
****.pkr***	Файлы результатов поиска пиков в спектре.
****.cpt***	Файлы гамма спектров непрерывного рассеяния (комптоновского рассеяния, тормозного рентгеновского излучения бета частиц), сформированные процедурой поиска пиков.
****.srp***	Файлы гамма спектров с вычтенным спектром непрерывного рассеяния – спектры пиков.
****.ncl***	Файлы таблиц нуклидов.
****.aln***	Файлы таблиц альфа линий соответствующие таблицам нуклидов.
****.btl***	Файлы таблиц бета линий.
****.gml***	Файлы таблиц гамма линий.
****.dbf***	Файлы заголовков архивов результатов измерений.
****.ini***	Файлы настроек и сохраняемых параметров.
Saspar.ini	Файл сохраняемых данных для программы «SpectrRad».
NuclBase.ini	Файл настроек для программы «SpectrRadNucl».
Analyser.ini	Файл настроек спектрометра.
Decomp.ini	Текстовый файл, содержащий настройки процедур обработки спектров для данного спектрометра и заданной геометрии.
****.hlp, *.cnt***	Файлы справок и подсказок.
****.bmp***	Графические файлы справочной системы.
****.wav***	Звуковые файлы сопровождения событий.
****.rtf***	Файлы отчетов, шаблонов отчетов.
****.doc***	Файлы описаний, шаблонов отчетов.
****.dll***	Файлы динамических библиотек.
****.hlp***	Файлы справок и подсказок.
Analyser.par	Файлы сведений о подключенных спектрометрах.
Analyser.hd	Файлы сведений о последней измеренной (измеряемой) пробе.
Decomp.par	Файлы шаблонов декомпозиции.
Norms.nrm	Файлы нормативов и констант для различных типов проб.
Norms.txt	Файлы примечаний и комментариев для нормативов.
RsAlpha.obj	Объектный модуль процедуры расчёта среднего пробега альфа частиц в веществе счётного образца.
RsAlpha.h	Файл описания переменных процедуры расчёта среднего пробега альфа частиц в веществе счётного образца.
RsAlpha.c	Файл описания процедуры расчёта среднего пробега альфа частиц в веществе счётного образца.
RsBeta.obj	Объектный модуль процедуры расчёта экстраполированного пробега бета частиц в веществе счётного образца.
RsBeta.h	Файл описания переменных процедуры расчёта экстраполированного пробега бета частиц в веществе счётного образца.
RsBeta.c	Файл описания процедуры расчёта экстраполированного пробега бета частиц в веществе счётного образца.

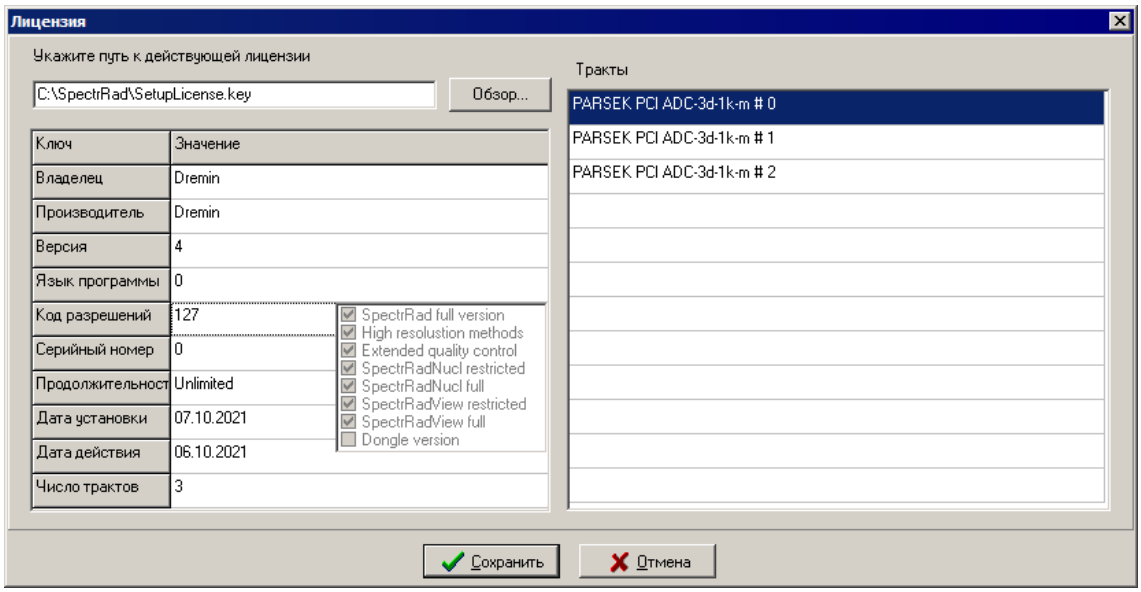
RsPhoto.obj	Объектный модуль процедуры расчёта сечения реакции фотопоглощения гамма квантов в веществе счётного образца.
RsPhoto.h	Файл описания переменных процедуры расчёта сечения реакции фотопоглощения гамма квантов в веществе счётного образца.
RsPhoto.c	Файл описания процедуры расчёта сечения реакции фотопоглощения гамма квантов в веществе счётного образца.
RsCompton.obj	Объектный модуль процедуры расчёта сечения реакции комптоновского рассеяния гамма квантов в веществе счётного образца.
RsCompton.h	Файл описания переменных процедуры расчёта сечения реакции комптоновского рассеяния гамма квантов в веществе счётного образца.
RsCompton.c	Файл описания процедуры расчёта сечения реакции комптоновского рассеяния гамма квантов в веществе счётного образца.
RsPair.obj	Объектный модуль процедуры расчёта сечения реакции образования электрон-позитронных пар гамма квантами в веществе счётного образца.
RsPair.h	Файл описания переменных процедуры расчёта сечения реакции образования электрон-позитронных пар гамма квантами в веществе счётного образца.
RsPair.c	Файл описания процедуры расчёта сечения реакции образования электрон-позитронных пар гамма квантами в веществе счётного образца.
SetupLicense.key	Файл установочной лицензии.
License.key	Файл продления лицензии.

Установка

Лицензия

Разрешение на использование программ пакета «SPECTRRAD» даёт приобретаемая у автора **лиценция** – небольшой файл **SetupLicense.key** (установочная лицензия) или **License.key** (файл пролонгации лицензионных соглашений). В файле записана информация о владельце лицензии, фирме производителе спектрометра, опциях пакета (разрешениях на использование тех или иных возможностей пакета) и сроке действия лицензии (лицензия может быть и бессрочной).

После установки пакета всю информацию, записанную в файле лицензии, можно посмотреть, выбрав пункт «***Сервис / Лицензия…***» главного меню программы. Форма процедуры просмотра лицензии может иметь вид:



Продолжительность действия лицензии - число дней действия лицензии после установки программ пакета. **Дата установки** – последняя разрешённая дата для установки программ пакета. **Дата действия** рассчитывается из реальной даты установки пакета на компьютер и продолжительности действия лицензии.

В лицензии может быть указано требование наличия для работы программ пакета электронного ключа – небольшого устройства вставляемого в USB порт компьютера (опция **Dongle version** строки **Код разрешений**). В пакете «SPECTRRAD» используются электронные ключи компании «Актив» - «**Guardant Sign**».

Если указано ограниченное **число** поддерживаемых **трактов**, то в правой части лицензии приводятся разрешённые к использованию спектрометрические тракты.

Установка ключа защиты

Электронный ключ подсоединяется к USB порту компьютера. Такой способ защиты позволяет вам создавать неограниченное количество копий программного пакета, менять в процессе эксплуатации пакета компьютеры, но пакет будет работать только на компьютере с установленным ключом «Guardant Sign».

Для работы пакета необходимо установить на компьютер драйвер **Guardant**. Во время установки драйверов все приложения должны быть закрыты во избежание ошибки разделения файлов. Пользователь должен обладать правами администратора системы,

иначе установка драйверов будет невозможна. При установке драйвера USB ключа предварительно отсоедините все USB ключи от портов компьютера.

Для установки драйвера установите в дисковод компьютера, входящий в состав поставленного набора дискет, диск «**Drivers**» и запустите программу **GrdDriversRU.msi** (или **Setup.exe** или **Instdrv.exe)**, находящуюся в папке «**Guardant**» и следуйте указаниям программы установки.

После установки драйвера подсоедините электронный ключ к порту.

Свидетельством того, что USB ключ был успешно инициализирован операционной системой, является световая индикация ключа. Кроме того, ключ должен появиться в списке устройств Диспетчера оборудования Windows.

Удаление драйвера

Для удаления загруженного в систему драйвера нужно нажать кнопку «**Удалить драйвер»** в главном окне программы установки драйвера. В режиме удаления драйвера утилита удаляет файлы драйвера и восстанавливает файл системного реестра.

Правила эксплуатации

Так как электронный ключ является обычным электронным устройством, он может быть выведен из строя в результате неверной эксплуатации. Во избежание этого придерживайтесь следующих инструкций:

Оберегайте электронный ключ от механических воздействий (падения, сотрясения, вибрации и т.п.), а также от воздействия высоких и низких температур и агрессивных сред; все это может привести к поломке корпуса, элементов печатного монтажа и разъемов электронного ключа.

Не прилагайте излишних усилий при подключении электронного ключа к Вашему компьютеру. Подключение разъемов должно быть плотным и без перекосов.

Не допускайте попадания на электронный ключ (и в особенности на его разъемы) пыли, грязи, влаги и т.п.

Не разбирайте электронный ключ! Это может привести к поломке его корпуса, а также к порче или поломке элементов печатного монтажа и как следствие - к ненадежной работе или выходу из строя самого ключа.

Установка программ пакета

Для установки пакета на Ваш компьютер запустите программу «**SpectrRad_setup.exe**», находящуюся на установочном диске, предварительно закрыв все выполняющиеся на компьютере программы. Процесс установки сопровождается необходимыми подсказками и не требует дополнительных разъяснений.

Установка драйвера спектрометров

Пакет обеспечивает управление спектрометрическими платами (устанавливаются в разъёмы “ISA” или “PCI” IBM PC) и автономными (подключаемыми к параллельному, последовательному или USB порту) спектрометрами фирм «Canberra», «GBS ELEKTRONIK», «GreenStar», «ORTEC», «Амплитуда», «Аспект», «Доза», «Парсек» и «Радэк».

Пакет «SpectrRad» является надстройкой над стандартным пакетом управления спектрометром, который поставляется фирмой производителем оборудования: Для фирмы «CANBERRA» - пакет «GENIE2K». Для фирмы «ORTEC» - пакет «MAESTRO» или «GammaVision». Для фирмы «АМПЛИТУДА» - программа «Прогресс» (часть пакета, обеспечивающая управление и обмен данными с аппаратурой). Для фирмы «АСПЕКТ» - программный пакет «SCAR» (для части оборудования фирмы «АСПЕКТ» достаточно драйверов оборудования). Для фирмы «GreenStar» - пакет управления одноплатными спектрометрами фирмы. Для остальных фирм достаточно драйверов оборудования.

Для подключения платы или автономного спектрометра к компьютеру и подключения детекторов воспользуйтесь соответствующей инструкцией, которая должна поставляться в комплекте с приобретенным Вами оборудованием.

Пакет обеспечивает управление платами АЦП и автономными спектрометрами фирмы «ПАРСЕК» для которых авторами программного пакета «SpectrRad» были написаны и необходимые драйверы оборудования. Для установки драйверов подключенного оборудования фирмы «ПАРСЕК» необходимо воспользоваться стандартной процедурой Windows «**Настройка / Панель управления / Установка оборудования**». Для «ISA» плат оператор должен выбрать ручной режим установки (ответ «**Нет**» на предложение автоматического поиска новых устройств) и в списке подключаемого оборудования (типы устройств) выбрать «**Спектрометрические АЦП**» или «**Другие устройства**», если установка спектрометров производится впервые (при этом на предложение указать изготовителя и модель устройства оператор должен выбрать «**Неизвестные устройства**»). Далее необходимо установить в дисковод, поставляемый с пакетом диск «**Drivers**» выбрать режим установки с диска и выбрав, в соответствии с рабочей версией Windows, папку Win9x (Windows 95, 98) или Win2k (Windows NT, 2000, XP, 7. 8, 10), выбрать из предложенного списка поддерживаемого оборудования нужный тип платы АЦП или автономного спектрометра.

При запуске программы «SpectrRad» она ищет подключённые к компьютеру АЦП или автономные спектрометры поддерживаемых фирм производителей оборудования. Для некоторых фирм («CANBERRA» и «АСПЕКТ») автоматический поиск оборудования не работает и требуется подключение устройства к программе оператором в процедуре установки спектрометра.

Для подключения аппаратуры фирмы «Амплитуда» (распространяется фирмами «Амплитуда», «Доза» и «Экспертцентр») к пакету «SPECTRRAD» необходимо, после установки пакетов «Прогресс» и «SPECTRRAD», вручную отредактировать разделы [SPHOME0]- [SPHOME11] файла **Saspar.ini** пакета «SPECTRRAD», дополнив их информацией о подключаемой аппаратуре в соответствии с правилами подключения аппаратуры к пакету «Прогресс». Например:

```
[SPHOME0]
Name=Gamma
DllName=serialdrv.hmd
```

Connection=TypeOfDevice=Unknown Port=COM1 ID=0 DCB={baud=19200 parity=N data=8 stop=2} SpLen=1024 LLD=0 HLD=16 Active=true Buffer=0

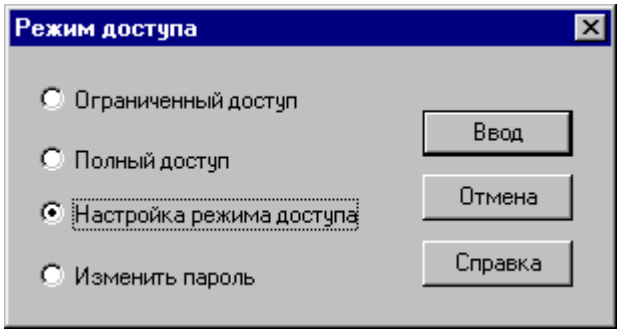
Возможен и другой вариант подключения аппаратуры фирмы «Амплитуда» - запустить установленную и настроенную программу «Прогресс», а затем программу «SPECTRRAD». В этом случае программа «SPECTRRAD» импортирует настройки подключения из программы «Прогресс» и сохранит их в своём файле настроек при выходе из программы.

Режим доступа

В пакете «SPECTRRAD» существует два режима доступа к функциям и процедурам пакета: **режим полного доступа**, разрешающий пользователю доступ ко всем функциям и процедурам и **режим ограниченного доступа**, запрещающий доступ к ряду процедур и функций. Режим ограниченного доступа предназначен для защиты настроек параметров спектрометрических трактов, параметров обработки, архива измерений, таблиц нуклидов и таблиц нормативов и констант от неквалифицированного доступа.

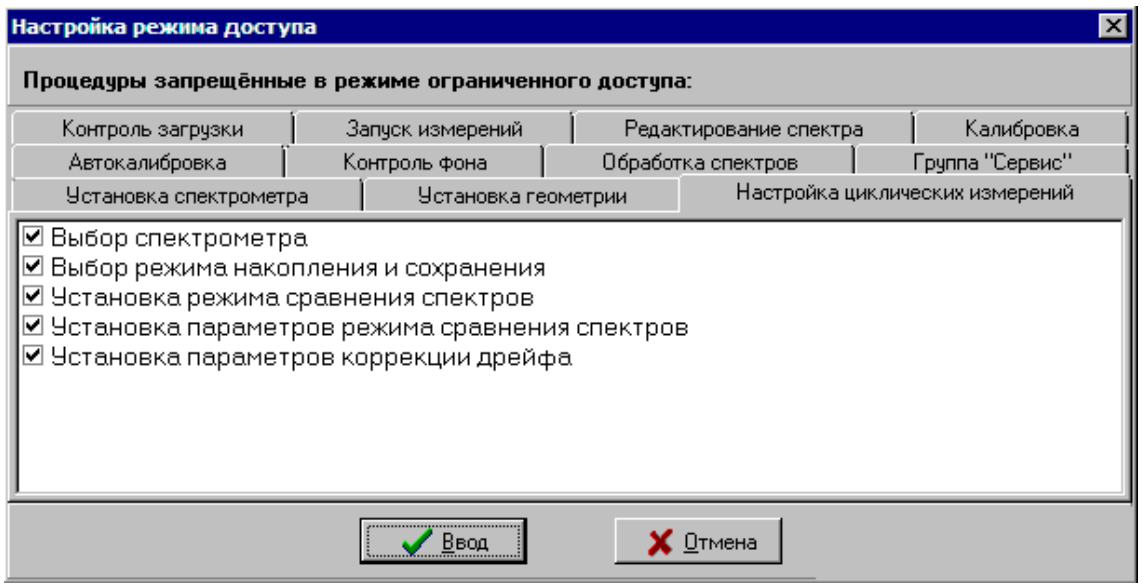
Переход в режим полного доступа защищён паролем, который программа запрашивает при первом запуске пакета. Оператор может не задать пароль (ввести пустой пароль), в этом случае программа не будет запрашивать пароль при требовании перехода в режим полного доступа.

Смена режима доступа, смена пароля и настройка режима ограниченного доступа производится вызовом пункта меню «***Сервис / режим доступа…***». При этом на экран выводится небольшая табличка для выбора необходимой процедуры:



Выбор процедур: перехода в полный доступ, настройки режима доступа и смены пароля потребуют ввода пароля доступа.

Процедура «**Настройка режима доступа**» позволяет оператору сформировать список операций запрещённых в режиме ограниченного доступа. При этом на экран выводится форма, содержащая список операций, которые могут быть либо запрещены, либо разрешены в режиме ограниченного доступа, объединённые в функционально близкие группы:



Установленная перед названием операции «галочка» означает запрет данной операции в режиме ограниченного доступа.

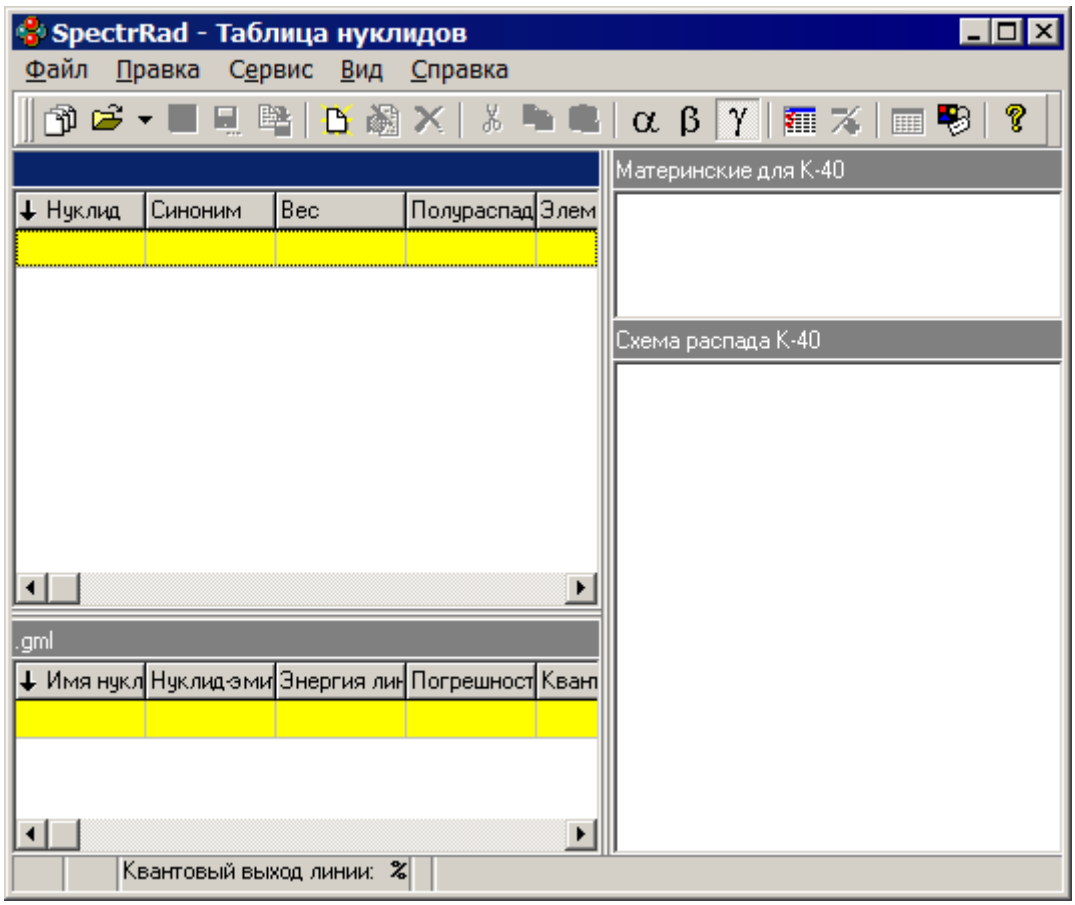
Создание таблиц нуклидов[13]

Таблицы нуклидов в программном пакете «SPECTRRAD» используются при обработке спектров, калибровке спектрометра, при создании и редактировании файлов нормативов (СанПиН, НРБ и т.п.). Энергетическая калибровка спектрометра, калибровка ширины пиков, калибровка эффективности регистрации, расчёт элементарных спектров – все эти процедуры, к которым пользователю придётся не один раз обращаться, требуют предварительно сформированных таблиц нуклидов.

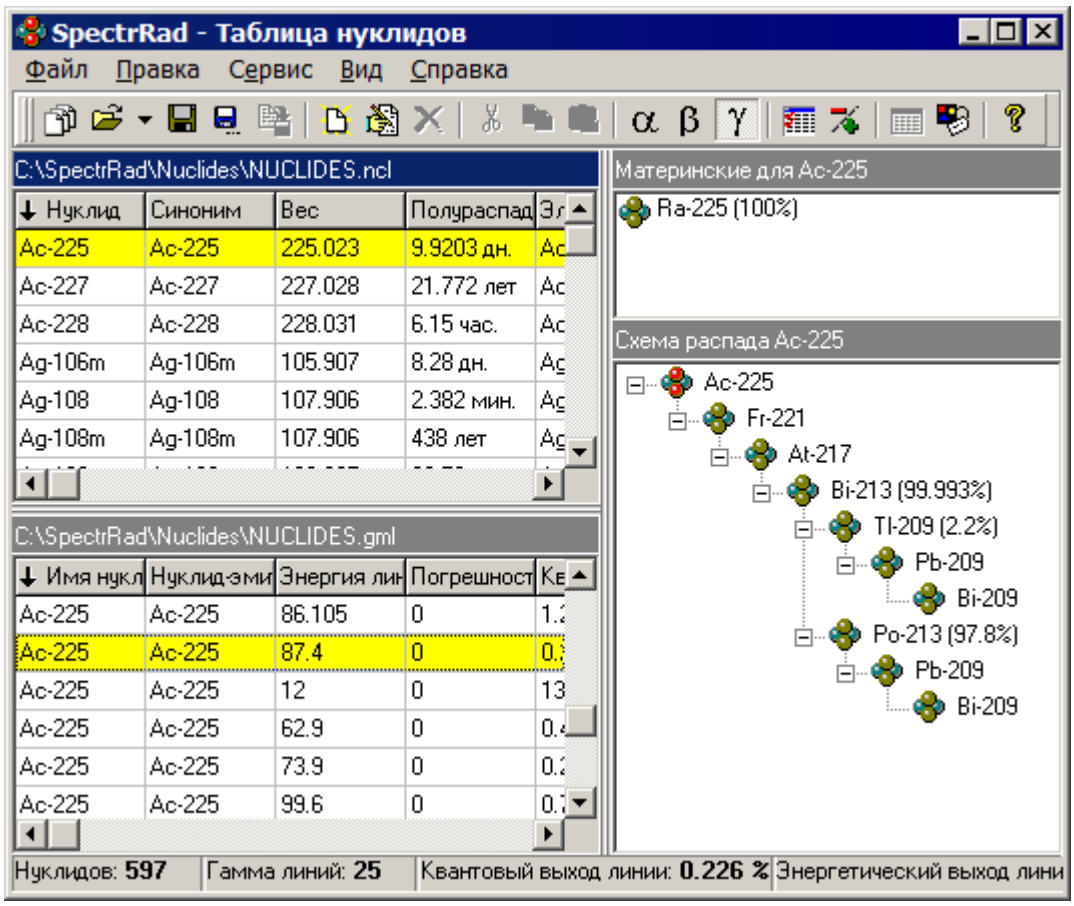
Подробно процедуры создания и редактирования таблиц нуклидов описываются в разделе «**Таблицы нуклидов**». Здесь, в качестве примера, мы рассмотрим процесс формирования таблицы нуклидов, которая будет использоваться при калибровке гамма спектрометра с охлаждаемым HPGe детектором, работающим в диапазоне 30-1500 кэВ. Хорошее энергетическое разрешение детектора позволяет проводить обработку спектров с предварительным вычитанием спектра непрерывного рассеяния.

Предварительно требуется установить режим полного доступа к процедурам пакета (п. меню «***Сервис/ Режим доступа...***»), затем вызвать программу формирования и редактирования таблиц нуклидов (п. меню «***Сервис / Библиотека нуклидов...***»). Окно программы редактирования таблиц нуклидов до подключения спектрометров и создания геометрий измерений будет иметь следующий вид:

[13] Процедуры создания таблиц нуклидов, установки, настройки и калибровки спектрометра доступны только в режиме полного доступа (п. меню «***Сервис / Режим доступа…***»)

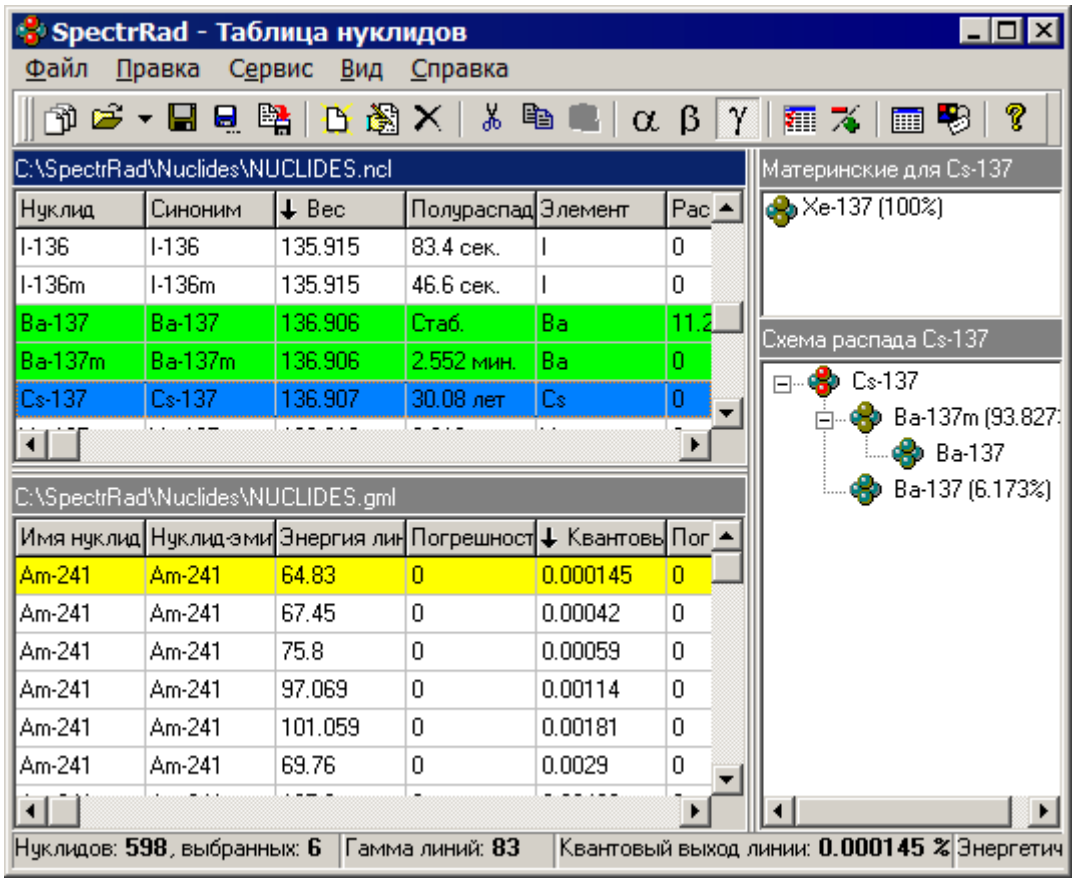


В комплект поставки программного пакета «SPECTRRAD» входит ряд предварительно сформированных таблиц нуклидов и базовая таблица «**Nuclides.ncl**», которая находится в папке «**Nuclides**». Откроем её (п. меню «***Файл / Открыть...***» программы «**Таблица нуклидов**»). Окно программы примет вид:



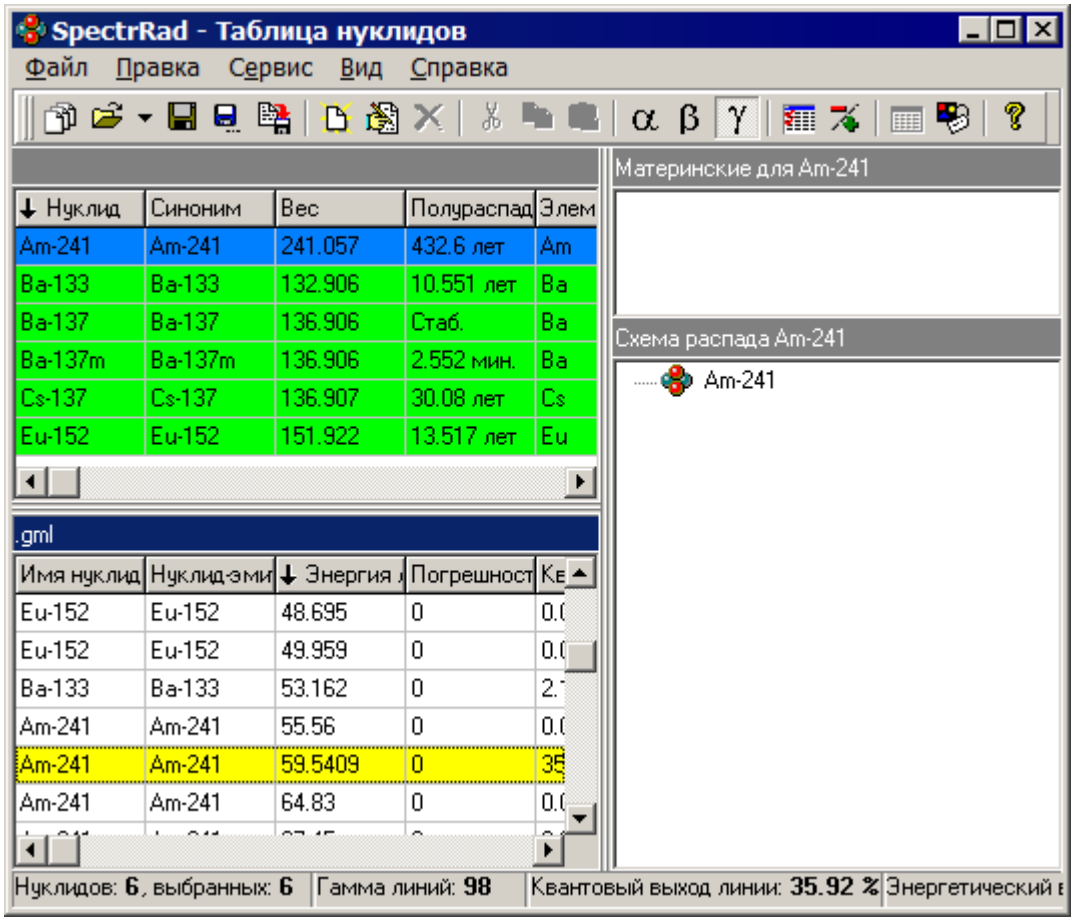
Предположим, что в нашем распоряжении для калибровки спектрометра есть набор эталонов, включающий нуклиды Am-241, Eu-152, Ba-133, Cs-137. Пользуясь клавишами перемещения курсора или полосой прокрутки для мышки, выделим требуемые нуклиды (выделение можно производить щелчком левой кнопки мышки по требуемой записи при нажатой клавише «Ctrl» клавиатуры). Затем выделим дочерние нуклиды для выделенных нуклидов. Нам в данном случае требуется один единственный дочерний для Cs-137 – Ba-137m (именно Ba-137m и является гамма излучателем в цепочке Cs-137-Ba-137). Выделить его можно точно также как и другие нуклиды. Но можно воспользоваться всплывающим меню (п. меню «***Выделить / Цепочку распада***») - в этом случае к выделенным оператором нуклидам будут добавлены и все нуклиды являющиеся дочерними для выделенных нуклидов. Вызов всплывающего меню производится щелчком правой кнопки мышки по списку нуклидов.

В итоге получим (при выделении цепочки распада Cs-137) следующую картинку:

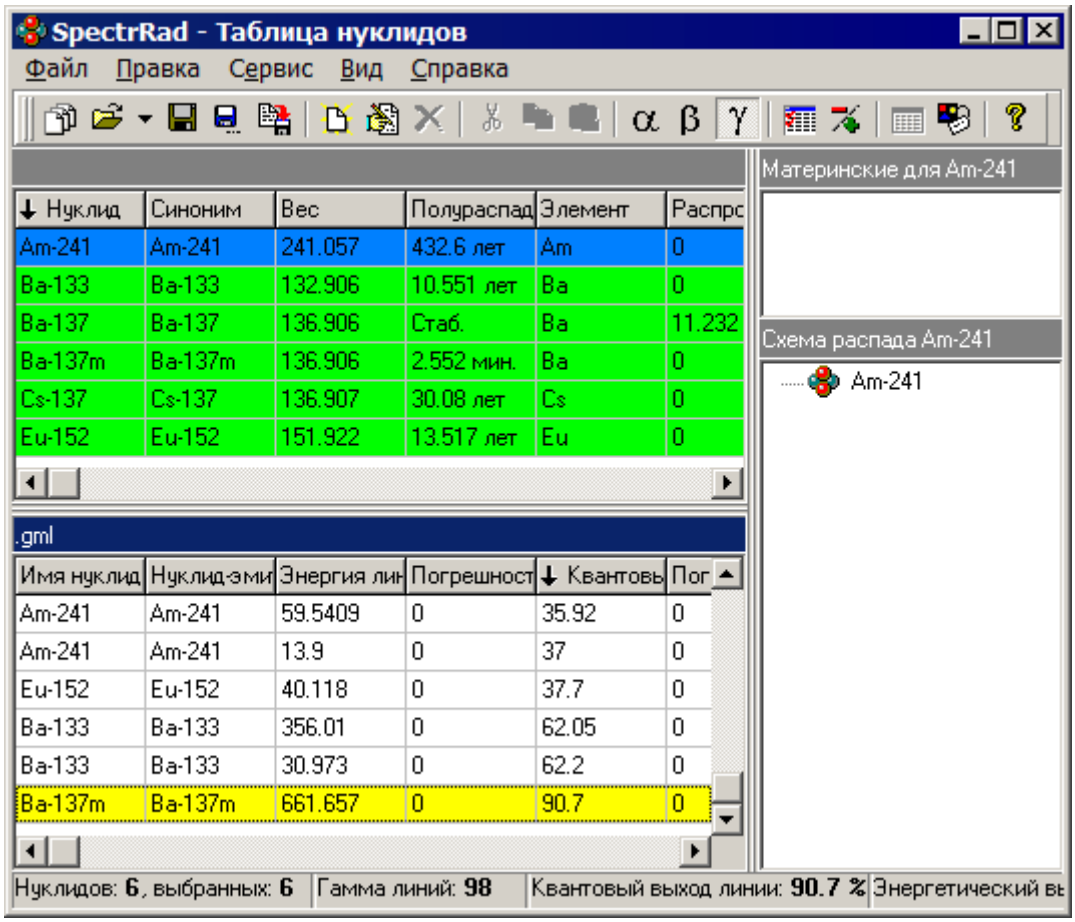


Таким же образом выделим и оставшиеся из требуемых нам нуклидов Am-241, Eu-152 и Ba-133. Цепочки распада Am-241 и Eu-152 нас не интересует (радиоактивное равновесие в этих цепочках после выделения Am-241 и Eu-152 не наступит и через миллион лет), поэтому выделяем не цепочки, а нуклиды. Ba-133 цепочки распада не имеет.

Скопируем выбранные записи в буфер обмена пользуясь пунктом меню «***Правка / Копировать***», создадим новую таблицу нуклидов (п. меню «***Файл / Создать***») и вставим скопированные записи в новую таблицу (п. меню «***Правка / Вставить***»). В итоге получим картинку:



Отсортируем список гамма линий по квантовому выходу, щелкнув по названию колонки «Квантовый выход». Получим:



Выделим мощные одиночные линии, которые будем использовать при калибровке. Например:

SpectrRad - Таблица нуклидов

Файл Правка Сервис Вид Справка

Нуклид	Синоним	Вес	Полураспад	Элемент	Распрс
Am-241	Am-241	241.057	432.6 лет	Am	0
Ba-133	Ba-133	132.906	10.551 лет	Ba	0
Ba-137	Ba-137	136.906	Стаб.	Ba	11.232
Ba-137m	Ba-137m	136.906	2.552 мин.	Ba	0
Cs-137	Cs-137	136.907	30.08 лет	Cs	0
Eu-152	Eu-152	151.922	13.517 лет	Eu	0

Материнские для Am-241

Схема распада Am-241

Am-241

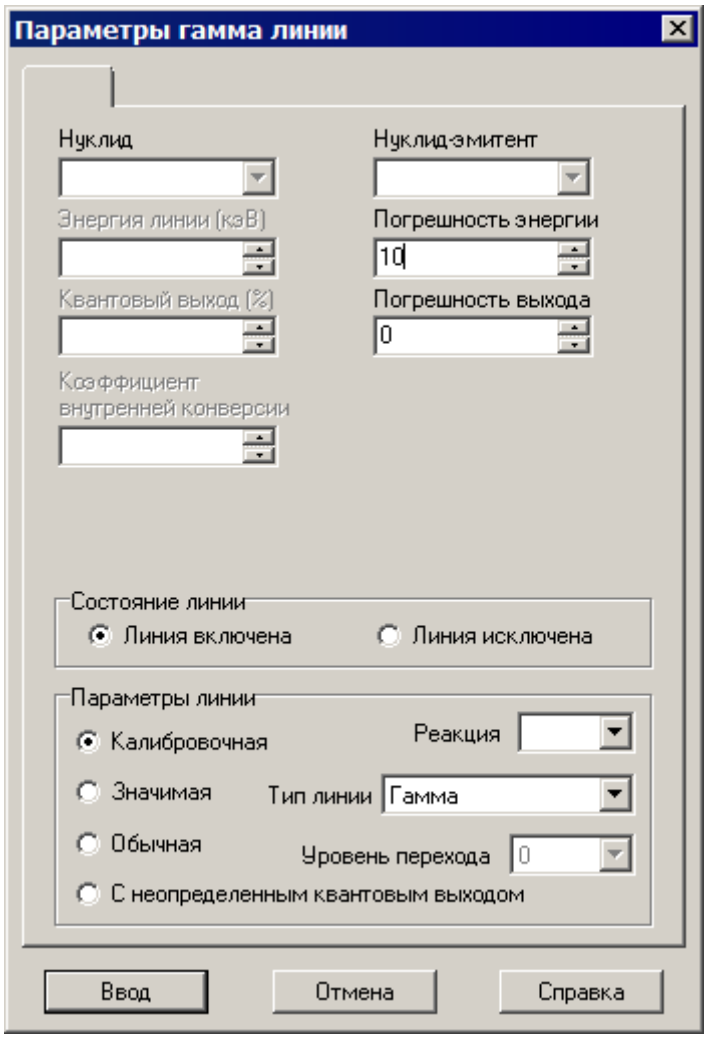
.gml

Имя нуклид	Нуклид-эми	Энергия лин	Погрешност	Квантовы	Пог
Eu-152	Eu-152	1085.837	0	10.11	0
Ba-133	Ba-133	34.987	0	11.4	0
Eu-152	Eu-152	778.905	0	12.93	0
Eu-152	Eu-152	1112.076	0	13.67	0
Eu-152	Eu-152	5.64	0	14	0
Eu-152	Eu-152	964.057	0	14.51	0
Ba-133	Ba-133	4.29	0	15.7	0
Ba-133	Ba-133	302.85	0	18.34	0
Eu-152	Eu-152	1408.013	0	20.87	0
Eu-152	Eu-152	39.522	0	21	0
Eu-152	Eu-152	344.2785	0	26.59	0
Eu-152	Eu-152	121.782	0	28.53	0
Ba-133	Ba-133	80.998	0	32.973	0
Ba-133	Ba-133	30.625	0	33.9	0
Am-241	Am-241	59.5409	0	35.92	0
Am-241	Am-241	13.9	0	37	0
Eu-152	Eu-152	40.118	0	37.7	0
Ba-133	Ba-133	356.01	0	62.05	0
Ba-133	Ba-133	30.973	0	62.2	0
Ba-137m	Ba-137m	661.657	0	90.7	0

Нуклидов: **6**, выбранных: **6** | Гамма линий: **98**, выбранных: **11** | Суммарный квантовый выход: **354.2**

В программе «**Таблица нуклидов**» есть возможность группового редактирования записей. Воспользуемся такой возможностью и отредактируем выделенную группу записей в списке гамма линий, вызвав щелчком правой кнопки мышки по списку линий пункт всплывающего меню «***Изменить***».

На экране появится форма процедуры редактирования линий:



Для группового редактирования доступны только несколько полей, но в данном случае нам нужны только поле «**Погрешность энергии**» и группа «**Параметры линии**». В «**Параметрах линии**» мы должны выбрать пункт «**Калибровочная**», установив таким образом статус калибровочных линий для гамма линий редактируемой группы. Для калибровочных линий процедуры калибровки будут искать в диапазоне энергий от **E-ΔE** до **E+ΔE** наиболее мощный пик спектра для привязки его к данной линии. Здесь **E** – энергия линии, а **ΔE** – заданная погрешность энергии.

Установив в поле «**Погрешность энергии**» значение, например 10 кэВ, и нажав на клавишу «**Ввод**» получим следующий вид программы «Таблица нуклидов»:

Нуклид	Синоним	Вес	Полураспад	Элемент	Распростра
Am-241	Am-241	241.057	432.6 лет	Am	0
Ba-133	Ba-133	132.906	10.551 лет	Ba	0
Ba-137	Ba-137	136.906	Стаб.	Ba	11.232
Ba-137m	Ba-137m	136.906	2.552 мин.	Ba	0
Cs-137	Cs-137	136.907	30.08 лет	Cs	0
Eu-152	Eu-152	151.922	13.517 лет	Eu	0

Имя нуклид	Нуклид-эми	Энергия лин	Погрешност	Квантовы	Атрибут
Eu-152	Eu-152	1085.837	10	10.11	4!
Ba-133	Ba-133	34.987	0	11.4	3X
Eu-152	Eu-152	778.905	0	12.93	1!
Eu-152	Eu-152	1112.076	10	13.67	4!
Eu-152	Eu-152	5.64	0	14	4X
Eu-152	Eu-152	964.057	10	14.51	4!
Ba-133	Ba-133	4.29	0	15.7	3X
Ba-133	Ba-133	302.85	10	18.34	3!
Eu-152	Eu-152	1408.013	10	20.87	4!
Eu-152	Eu-152	39.522	0	21	4X
Eu-152	Eu-152	344.2785	10	26.59	1!
Eu-152	Eu-152	121.782	10	28.53	4!
Ba-133	Ba-133	80.998	10	32.973	3!
Ba-133	Ba-133	30.625	0	33.9	3X
Am-241	Am-241	59.5409	10	35.92	0!
Am-241	Am-241	13.9	0	37	0X
Eu-152	Eu-152	40.118	0	37.7	4X
Ba-133	Ba-133	356.01	10	62.05	3!
Ba-133	Ba-133	30.973	0	62.2	3X
Ba-137m	Ba-137m	661.657	10	90.7	5!

Мы видим, что у выбранных линий появилась **погрешность энергии** равная 10 кэВ и восклицательный знак в колонке «**Атрибуты**», указывающий что линия имеет статус калибровочной.

Нам осталось сформировать требуемые равновесные цепочки, дополнить таблицу списком линий суммирования каскадных переходов, создать аттестат эталона и сохранить сформированную таблицу нуклидов под каким-либо приемлемым именем.

Начнём с формирования равновесных цепочек. Радиоактивное равновесие в цепочке распада наступает в том случае, если время жизни дочерних нуклидов более чем на

порядок меньше времени жизни материнского нуклида. В данном случае нам требуется сформировать единственную цепочку Cs-137-Ba-137m.

Предварительно снимем выделение у всех нуклидов (п. меню «***Правка / Выделение / Отменить выделение***», клавиша «**Del**») и выберем в качестве текущей записи в списке нуклидов Cs-137:

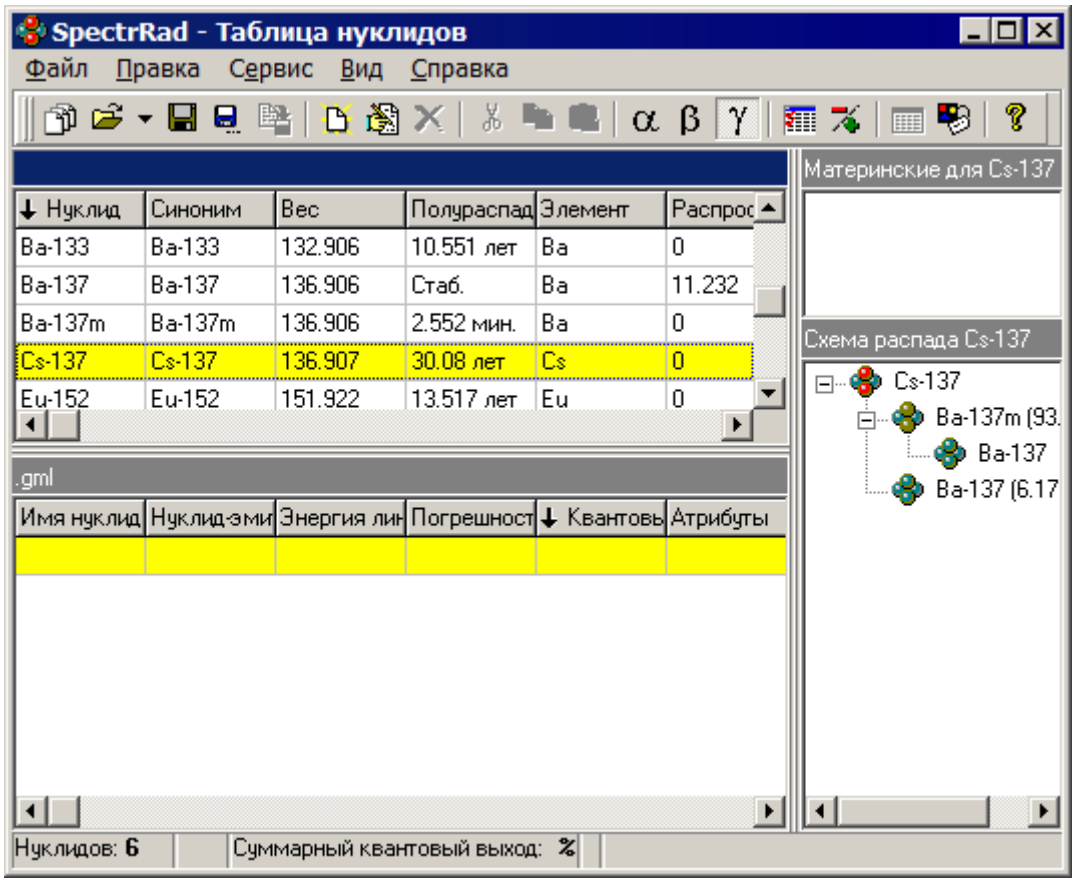
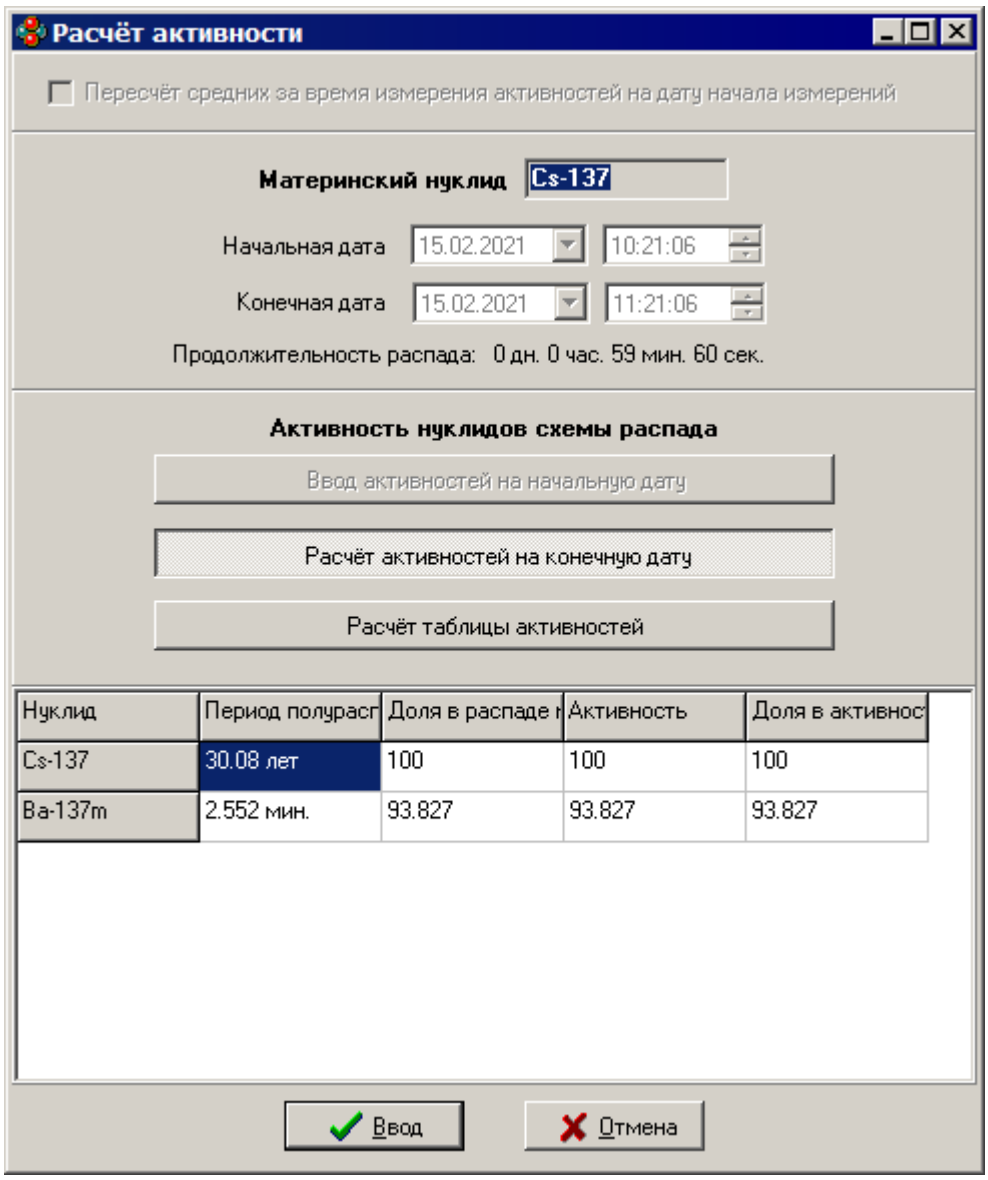


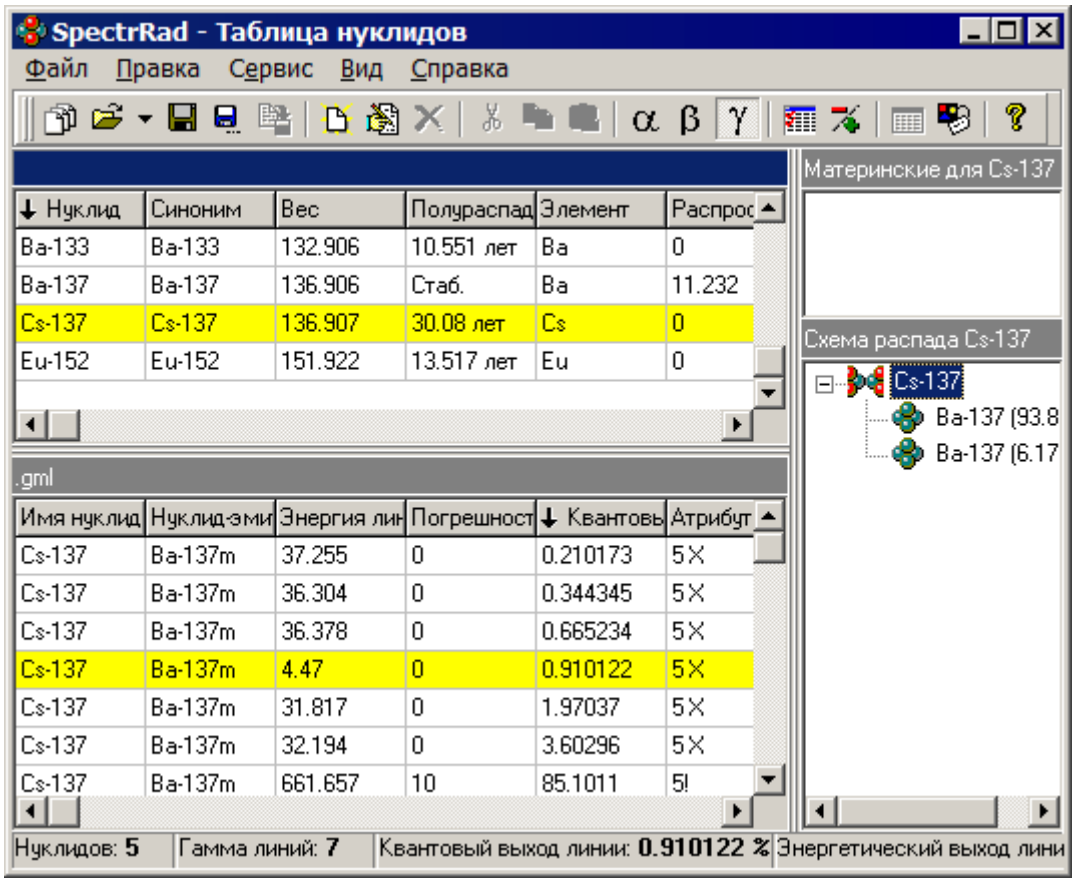
Схема распада Cs-137 очень простая. Если бы она была сложнее, нам пришлось бы указать в схеме распада («**Схема распада**» в правой части окна программы) какие конкретно участки ветвей схемы мы собираемся превратить в равновесную цепочку. Процедура формирования цепочки вызывается по пункту меню «***Сервис / Равновесная цепочка / Сформировать...***».

При этом программа рассчитывает активность нуклидов цепочки на дату формирования радиоактивного равновесия в соответствии с процессами накопления, распада нуклидов в цепочке:



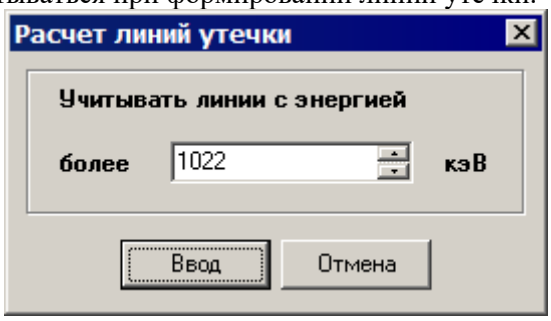
В том случае если требуется задать условия не полного равновесия, оператор может откорректировать данные по начальной активности нуклидов.

В нашем случае это не требуется. Нажатие на «**Ввод**» формирует равновесную цепочку:



В списке нуклидов нашего эталона присутствуют два нуклида с ветвистой каскадной схемой гамма переходов при распаде: Ba-133 и Eu-152. Можно пренебречь процессами формирования пиков суммирования при каскадных переходах и соответствующим перетеканием зарегистрированных импульсов из фотопиков в пики суммирования и в спектр комптоновского рассеяния, если относительная эффективность нашего детектора не превышает 10 %. Если мы заботимся о точности, после формирования равновесных цепочек надо дополнить таблицу нуклидов линиями сложения каскадных переходов. Выбор пункта меню «***Сервис / Линии сложения каскадных / Включить в таблицу***» вызывает требуемую процедуру, которая рассчитывает квантовые выходы каскадных переходов нормированные не на распад нуклида, а на вероятность предыдущего перехода для линий сложения двух и трёх каскадных переходов.

Пункт меню «***Сервис/ Линии утечки/ Включить в таблицу...***» вызывает программу дополняющую таблицу гамма линий нуклидов линиями одиночного и двойного вылета. При этом программа предлагает ввести граничную энергию для линий, которые будут учитываться при формировании линий утечки.

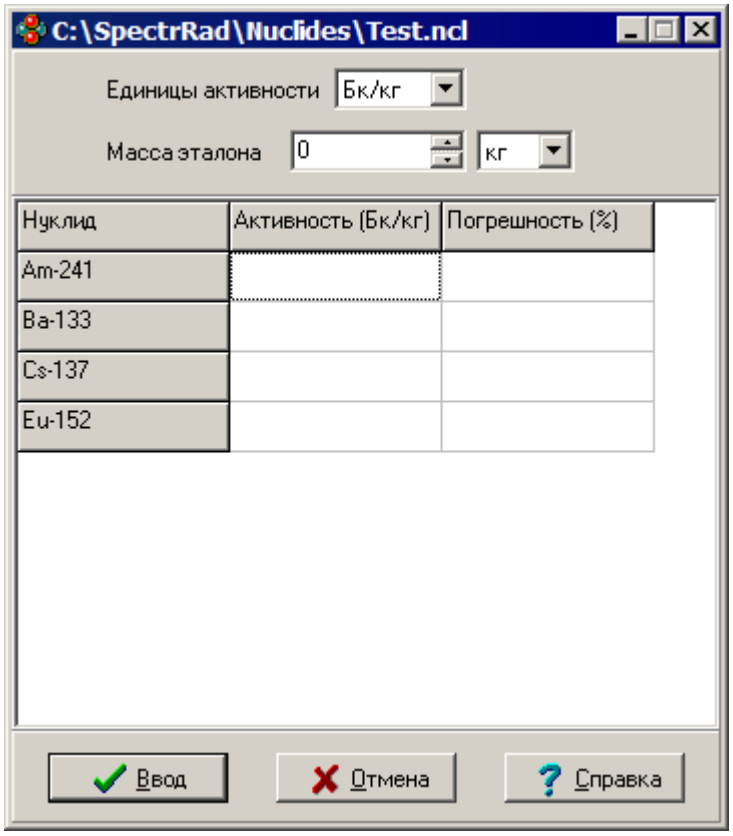


Линии утечки образуются из-за эффекта образования в веществе пробы и детектора электрон- позитронных пар гамма квантами с энергиями превышающими 1022 кэВ. 1022 килоэлектронвольта для гамма кванта соответствуют нулевой энергии для линий утечки, поэтому, если мы используем для обработки диапазон от 30 кэВ, то граничную энергию для процедуры расчёта линий утечки рекомендуется задать равной 1022+30 = 1052 кэВ.

Для корректного расчёта функции полной эффективности регистрации из таблицы линий требуется удалить все линии, которые не будут регистрироваться в спектре в соответствии с установкой дискриминатора нижнего уровня в регистрирующем устройстве (АЦП). Для этого требуется предварительно выделить линии с энергиями меньше пороговой, и вызвав процедуру редактирования линий, отметить выделенные линии исключёнными.

Сформированную таблицу требуется сохранить. В головной папке пакета есть папка «**Nuclides**», где хранятся поставленные в составе пакета таблицы нуклидов и рекомендуется хранить и вновь создаваемые таблицы. Для сохранения таблицы требуется вызвать пункт меню «***Файл / Сохранить как...***».

Поскольку процедурой калибровки с использованием данного эталона нам придётся пользоваться не раз, разумно где-то записать данные об активностях нуклидов в эталоне, так чтобы процедуры калибровки не запрашивали эти данные у оператора, а брали из файла, где эти данные записаны. Для этих целей в программе «**Таблица нуклидов**» существует процедура формирования аттестата эталона (п. меню «***Сервис / Аттестат эталона...***»). Окно процедуры в данном случае будет иметь вид (в предположении, что мы сохранили таблицу нуклидов в файле «Test»):



Оператор должен задать активности нуклидов в «**Бк**» или «**Бк/кг**» и погрешности (неопределённости) активностей в процентах. Значения активностей должны быть указаны на дату аттестации эталона (эталонов). Дата аттестации не задаётся при формировании аттестата, а указывается при запуске измерений эталона. Задание массы эталона требуется в том случае, если активность приводится в «**Бк**».

Установка спектрометра

Параметры спектрометра в программном пакете «SPECTRRAD» хранятся в папке с именем соответствующим названию спектрометра. Такая папка формируется процедурой установки спектрометра.

Для установки и подключения спектрометрического тракта (спектрометра) к программе необходимо в окне «**SPECTRRAD**» открыть пункт меню: «***Устройство / Спектрометр / Установить…***».

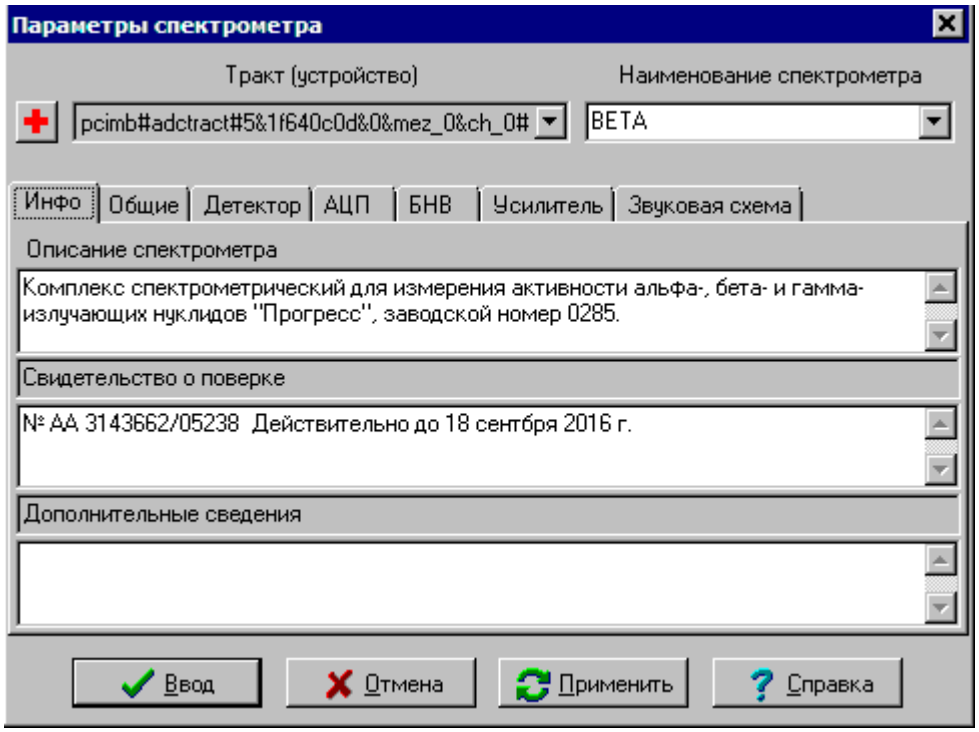
Верхняя часть формы для задания параметров спектрометра содержит кнопку и две графы:

- **Тракт (устройство)** - название подключаемого тракта, который определяется названием и номером платы АЦП и положением разъёма для подключения детектора на плате или значением адреса, или идентификатором тракта.
- **Наименование спектрометра** - название папки, связанное с конкретным спектрометром (трактом). С одним и тем же детектором может быть связано несколько имен с различными характеристиками тракта, что может быть полезно при анализе различных энергетических диапазонов спектра (низкоэнергетический диапазон при большом коэффициенте усиления, высокоэнергетический - при меньшем коэффициенте усиления).

При запуске программы «SPECTRRAD» она ищет подключённые к компьютеру спектрометрические тракты и включает их в список «**Тракт (устройство)**». Для некоторых спектрометрических систем автоматический поиск не работает и оператор должен самостоятельно указать подключённые к компьютеру спектрометрические тракты (устройства). Для этого служит кнопка . Для спектрометров фирмы «CANBERRA», после нажатия на кнопку , оператор должен ввести название подключенного тракта спектрометра – например: «DET01». Для спектрометров фирмы «АСПЕКТ», работающих по управлением системы «SCAR», выбрать с помощью системы «SCAR» подключённый тракт.

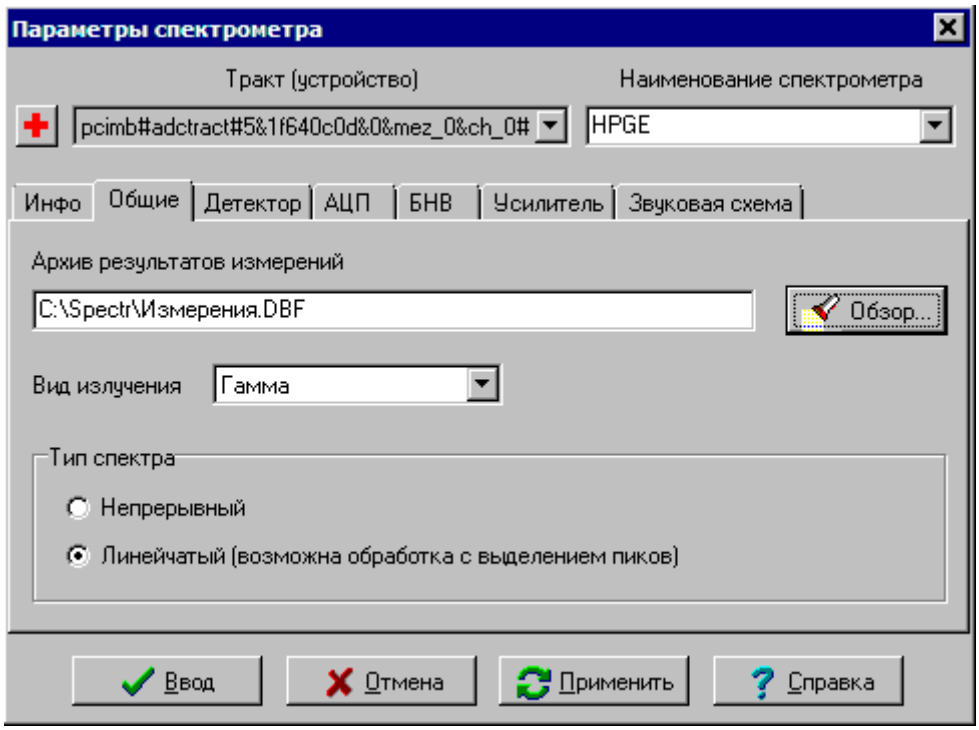
Тракты найденные программой или указанные оператором включаются в список подключённых трактов (устройств) и запоминаются в файле настроек пакета «SASPar.ini».

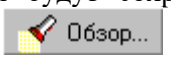
Оператор должен выбрать **тракт** и либо выбрать **наименование спектрометра** из списка существующих спектрометров (при подключении спектрометра, для которого папка параметров сформирована ранее, к выбранному тракту), либо ввести название нового спектрометра (при установке спектрометра) и заполнить графы семи страниц параметров спектрометра:



На первой странице «**Инфо**»: описание спектрометра, данные свидетельства о поверке и дополнительные сведения - произвольная информация, включаемая в отчет о результатах обработки спектров. Содержимое этой страницы можно редактировать в режиме ограниченного доступа и во время проведения измерений. Названия второй и третьей графы (в примере «**Свидетельство о поверке**» и «**Дополнительные сведения**») задаются оператором. Для редактирования названия достаточно дважды щёлкнуть мышкой по названию графы или нажать на клавиатуре клавишу «F4».

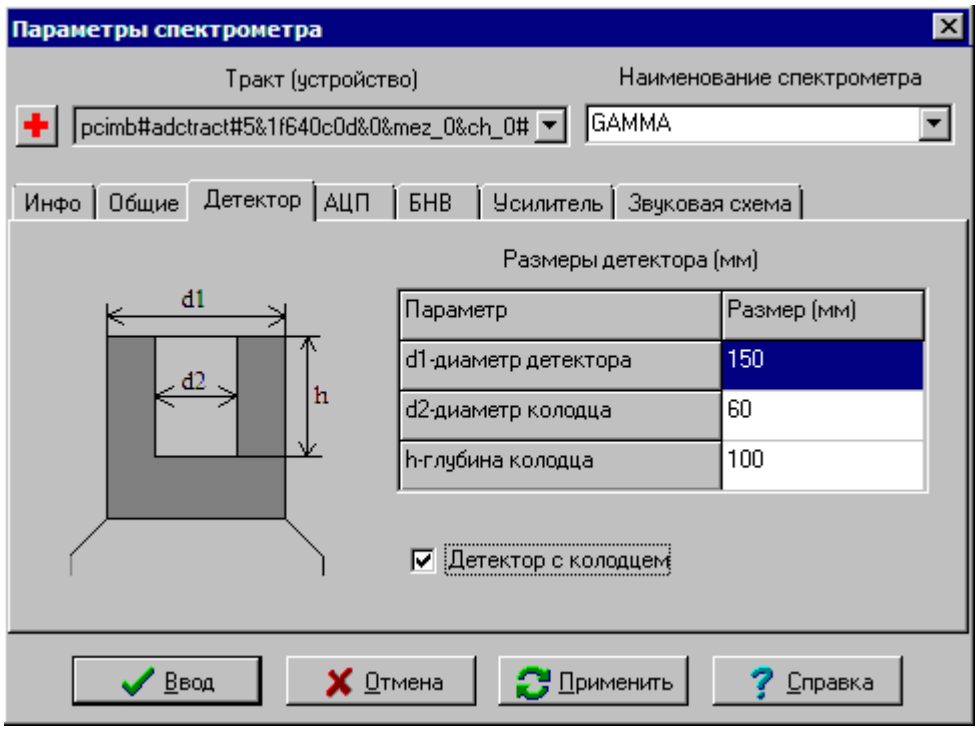
На второй странице **общие** параметры спектрометра:



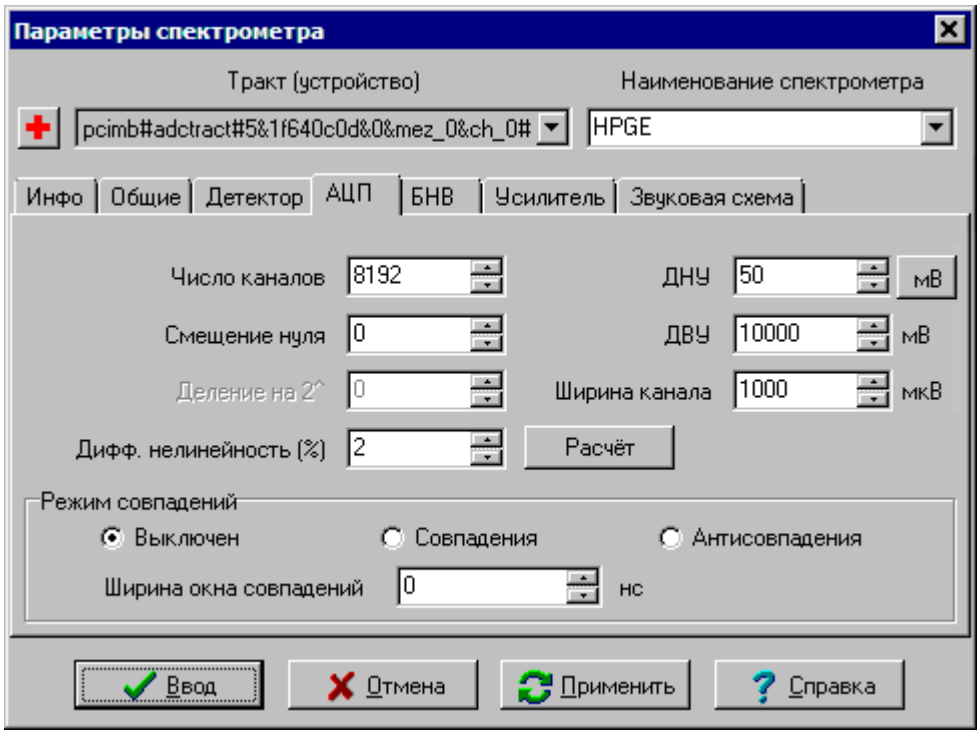
- **Архив результатов измерений** - адрес файла архива (путь и имя файла) в котором будут сохраняться результаты измерений на данном спектрометре. Кнопка 

- обзор существующих архивов.
- **Вид излучения** - выбор из списка четырёх возможных видов излучения: альфа, бета, гамма и альфа+бета, регистрируемых данным спектрометром.
- **Тип спектра** - выбор двух возможных вариантов обработки спектра: **непрерывный** - обработка без выделения пиков (регистрируемый спектр может быть и линейчатым, но плохое разрешение детектора не позволяет выделить пики спектра), **линейчатый** - обработка с выделением пиков возможна.

На третьей странице “**Детектор**” оператор должен задать основные параметры и размеры детектора спектрометра:

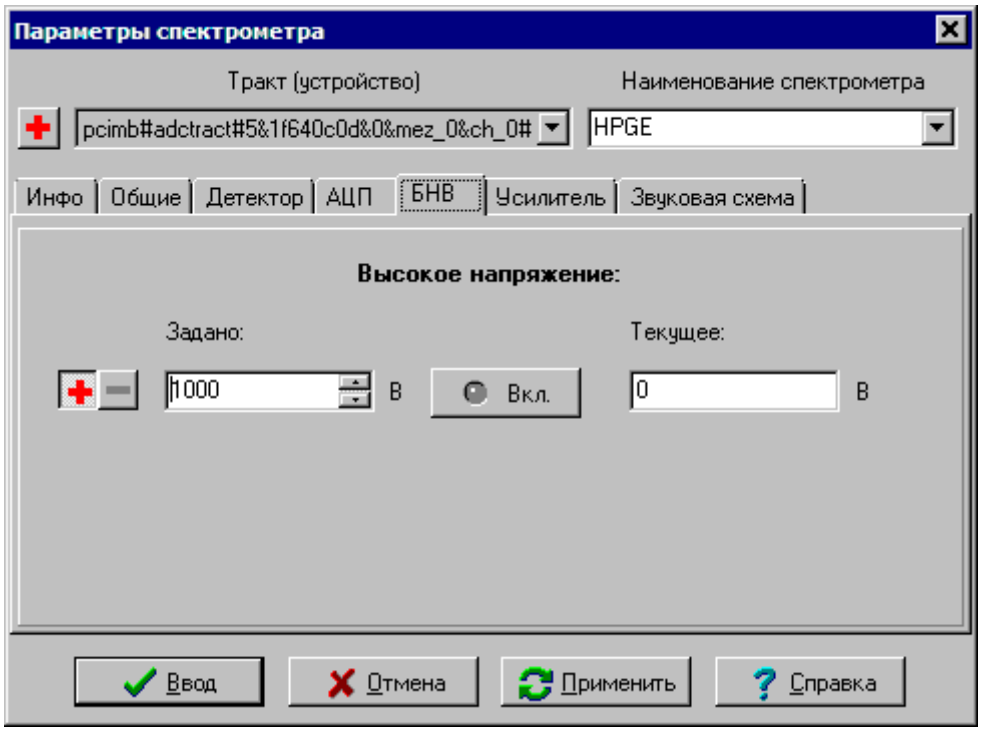


На четвёртой странице – настраиваемые для данного **АЦП** (аналого-цифрового преобразователя) параметры:



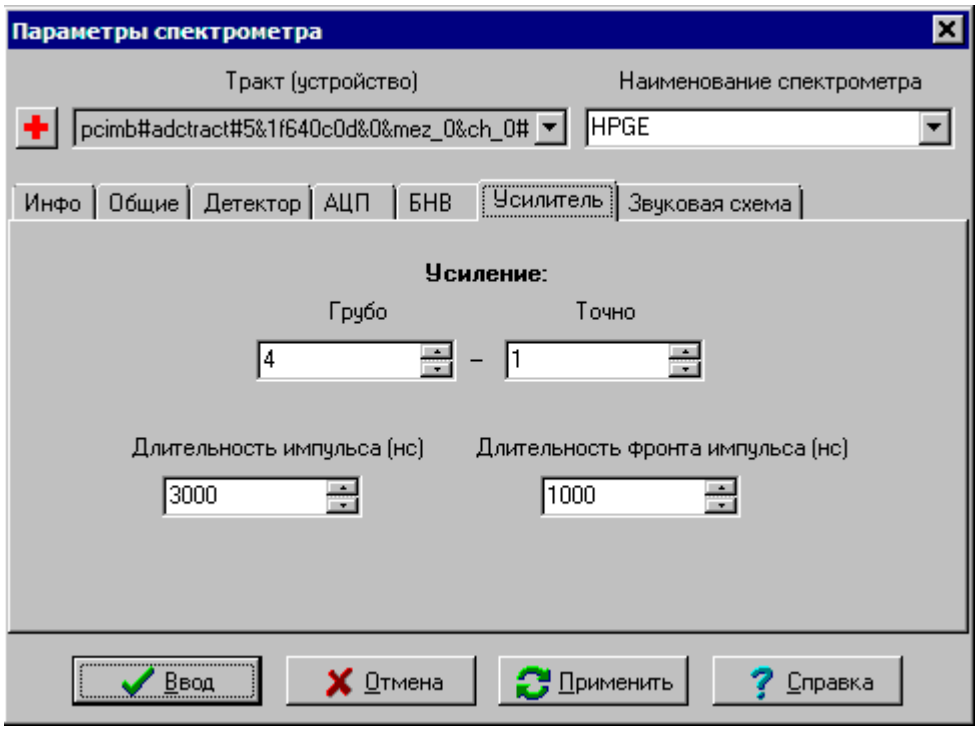
- **Число каналов** – число уровней квантования амплитуды импульса.
- **Смещение нуля** – сдвиг спектра в каналах влево для положительного значения смещения и вправо для отрицательного. На практике используется сдвиг влево для отсечки низкоэнергетического шума в спектре.

- **Дискриминатор нижнего уровня (ДНУ)** – уровень сигнала ниже которого сигнал не обрабатывается.
- Кнопка мВ (**мВ/Кан**) – выбор единиц измерения для величин ДНУ и ДВУ. Отжатое состояние кнопки – уровень сигнала в милливольтах, нажатое состояние кнопки – ДНУ и ДВУ задаются в каналах.. Выбор единиц измерения определяется типом АЦП и приводится в техническом описании АЦП.
- **Дискриминатор верхнего уровня (ДВУ)** - уровень сигнала, при превышении которого сигнал не обрабатывается.
- **Ширина канала** – шаг квантования амплитуды импульса в микровольтах. Например, максимальной амплитуде сигнала 1 вольт и числу каналов 1000 соответствует значение ширины канала равное 1000 мкВ.
- **Деление сигнала на 2^** - деление сигнала на два в заданной степени: сдвиг двоичного значения амплитуды импульса вправо на заданное число разрядов. Применяется в АЦП с оцифровкой площади импульса для исключения переполнения разрядной сетки АЦП.
- **Дифф. нелинейность** – значение дифференциальной нелинейности спектрометра в процентах. Дифференциальная нелинейность – составляющая часть статистической неопределённости значений в каналах спектрометра и необходима для корректной оценки погрешностей результатов обработки спектра. Клавиша Расчёт - расчёт дифференциальной нелинейности по заданному участку выбранного спектра. Для расчёта должен использоваться спектр измеренный на данном спектрометре с хорошей статистикой. Заданный для расчёта участок спектра не должен содержать пиков и других резонансных участков.
- **Режим совпадений** – запрет или разрешение набора спектра в зависимости от внешнего управляющего сигнала или имульса на втором входе АЦП. Используется для уменьшения уровня фона или интенсивности спектра комптоновского рассеяния в некоторых типах АЦП.
- **Ширина окна совпадений** – интервал времени в наносекундах, начиная с момента детектирования импульса, в течение которого схема совпадений/антисовпадений детектирует второй импульс.



На пятой странице – параметры блока высокого напряжения для питания детектора:

- **Задано** – значение заданного уровня высокого напряжения в вольтах. Кнопки определяют полярность напряжения.
- **Кнопка** – определяет состояние блока питания детектора высоким напряжением и позволяет управлять этим состоянием. Нажатое состояние кнопки соответствует включённому состоянию схемы питания. Нажатие на кнопку переключает состояние блока питания (для предотвращения случайного нажатия на кнопку, изменение состояния блока питания происходит только после нажатия на кнопку).
- **Текущее** – значение уровня высокого напряжения на детекторе в вольтах. Поскольку резкое изменение величины высокого напряжения на детекторе для некоторых типов детекторов недопустимо, схема питания детектора, как правило, обеспечивает плавное изменение величины питающего напряжения. Значение заданного отличаются от значения текущего во время набора или спада высокого напряжения.



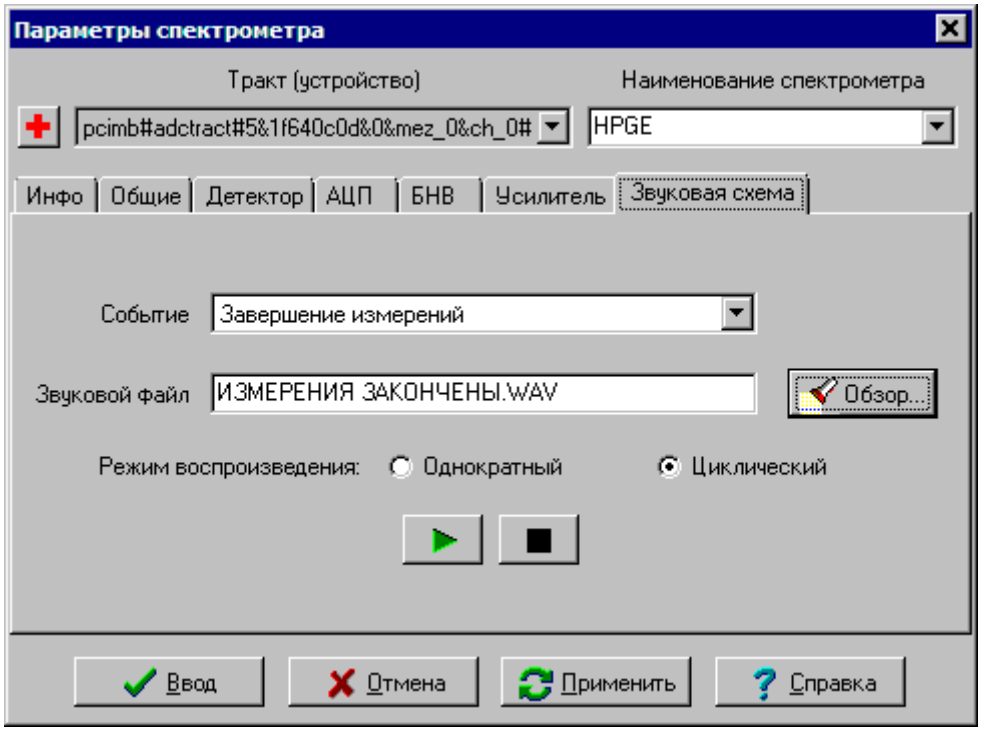
Шестая страница «**Усилитель**» позволяет устанавливать параметры блока формирования и усиления сигнала от детектора:

- **Усиление: Грубо и Точно** – задание коэффициента усиления усилителя. В графе «Точно» задаётся дробная часть коэффициента усиления.
- **Длительность импульса** – задание длительности импульса на выходе усилителя в наносекундах.
- **Длительность фронта импульса** – задание длительности переднего фронта импульса на выходе усилителя в наносекундах.

Количество настраиваемых параметров для страниц «АЦП», «БНВ» и «Усилитель» зависит от типа подключаемого оборудования.

Установка величин настраиваемых параметров АЦП, БНВ и усилителя должна обеспечивать измерение спектров в необходимом энергетическом диапазоне с

разрешением не менее 5 каналов для ширины пиков на половине высоты для нижней граничной энергии выбранного диапазона. Поэтому оператору, возможно, придется возвращаться к настройке параметров АЦП, БНВ и усилителя после энергетической калибровки спектрометра.



Седьмая страница служит для настройки звуковой схемы сопровождения событий возможных при проведении измерений. В дополнение к стандартной звуковой схеме Windows программа «**SPECTRRAD**», при наличии звуковой карты, воспроизводит несколько звуковых файлов при определённых событиях при наборе спектра:

Событие	**Звуковой файл по умолчанию**	**Примечание**
Завершение измерений.	***Измерения закончены.wav***	Звуковой сигнал воспроизводится после завершения измерений.
Завершение одного цикла измерений	***Цикл измерений закончен.wav***	Звуковой сигнал воспроизводится однократно после завершения цикла в режиме циклических измерений.
Ошибка в циклических измерениях	***Ошибка в циклических измерениях.wav***	При выполнении циклических измерений произошла ошибка: недопустимо высокое значение невязки или параметров дрейфа при сравнении спектров.

Загрузка превышает норму.	***Загрузка превышает норму.wav***	Загрузка спектрометра превышает уровень нормы. Горит желтый индикатор перегрузки в окне «Спектрометры».
Загрузка превышает допустимую.	***Загрузка превышает допустимую.wav***	Загрузка спектрометра превышает уровень допустимой. Горит красный индикатор перегрузки в окне «Спектрометры».
Резкое изменение загрузки	***Резкое изменение загрузки.wav***	Изменение загрузки спектрометра превышает заданный при настройке контрольных уровней загрузки порог.
Нет набора в спектрометре.	***Нет набора в спектрометре.wav***	В спектрометре идут измерения, но регистрации импульсов не происходит.
Ошибка автокалибровки	***Ошибка автокалибровки.wav***	При выполнении автокалибровки произошла ошибка: недопустимо высокое значение невязки или параметров дрейфа спектрометрического тракта.
Ошибка контроля фона	***Ошибка контроля фона.wav***	При выполнении процедуры контроля фона произошла ошибка: недопустимо высокое значение невязки или параметров дрейфа спектрометрического тракта.

Программа ищет необходимый звуковой файл, прежде всего в папке спектрометра, в котором произошло событие, но если он отсутствует в данной папке, программа производит поиск в головной папке программы. Таким образом можно создавать либо индивидуальные звуковые схемы для каждого (или какого-либо) спектрометра, либо общую схему для всех.

Клавиша

позволяет найти и задать требуемый звуковой файл для выбранного события отличный от звукового файла по умолчанию.

Группа переключателей **«Режим воспроизведения**: **однократный, циклический»** позволяет задать необходимый режим воспроизведения звукового сигнала для всех событий кроме завершения одного цикла измерений, для которого возможен режим только однократного воспроизведения. В циклическом режиме воспроизведение звукового файла будет повторяться до вмешательства оператора.

Клавиши и позволяют запустить и остановить прослушивание выбранного звукового файла.

Установка геометрии измерений

Доля излучения от счётного образца, регистрируемого в детекторе, зависит от размеров детектора и счётного образца и их взаимного расположения – **геометрии измерений**. Как правило, измерения проводятся в фиксированной геометрии, с которой связана определённая эффективность регистрации излучения от пробы. Таких геометрий измерений требуется несколько для различных объёмов проб.

В программном пакете «SPECTRRAD» допускается установка геометрий с одним переменным геометрическим параметром (например: расстояние от детектора или высота насыпки пробы). В этом случае требуется калибровка спектрометра для нескольких значений изменяемого геометрического параметра и расчёт эффективности регистрации для конкретного значения параметра, при котором проводились измерения, производится интерполяцией по измеренным значениям.

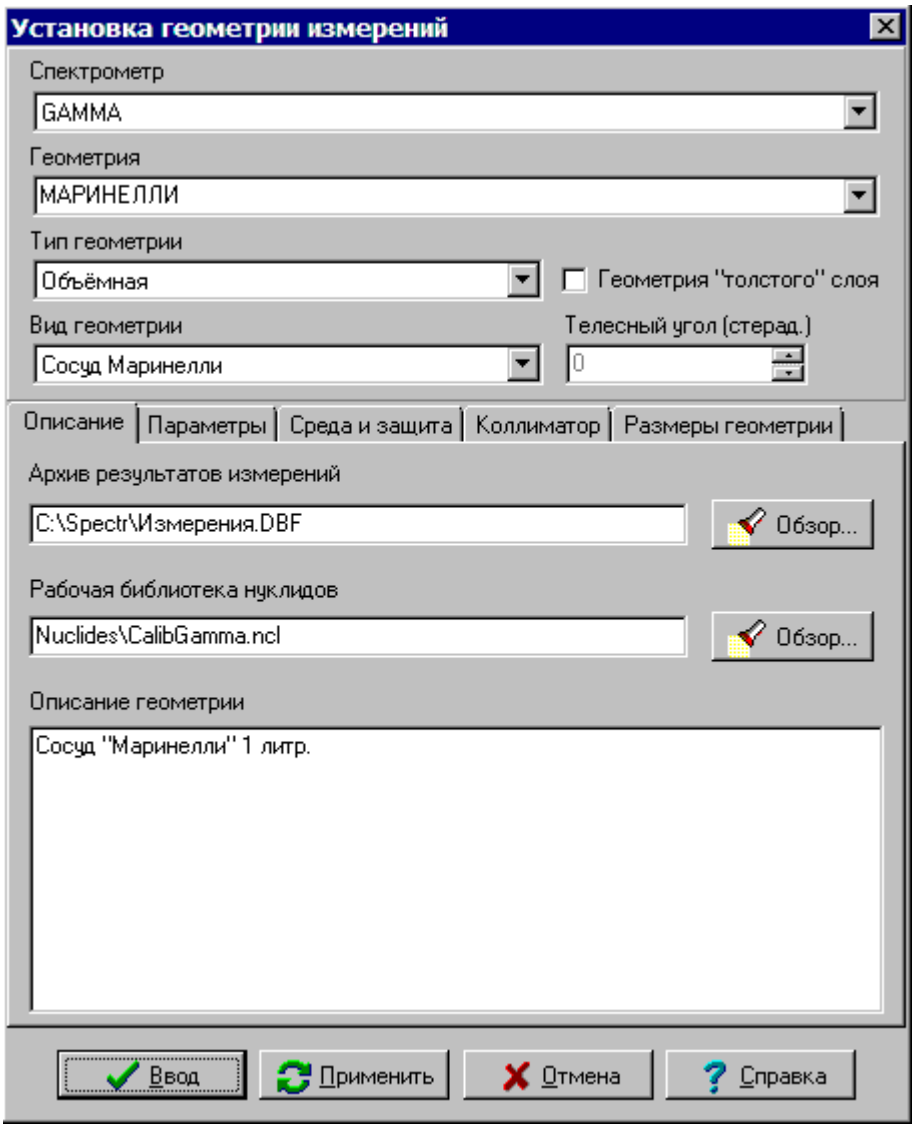
Перерасчёт эффективности регистрации в зависимости от плотности[14] счётного образца проводится также интерполяцией по нескольким заранее проведённым калибровкам. Но если существует только одна калибровка, такой перерасчёт будет проводиться по сечениям реакций взаимодействия излучения с веществом счётного образца. Расчёт фотопоглощения для гамма излучения проводится по сечению реакции фотопоглощения в любом случае.

В пакете «SPECTRRAD» все параметры, связанные с конкретной геометрией измерений хранятся в папке, название которой и является названием геометрии измерений

Геометрия измерений устанавливается по вызову пункта главного меню «***Устройство / Геометрия / Установить...***».

[14] В том случае, если заданы значения эффективного заряда и эффективной атомной массы вещества счётного образца и вещества эталонов или заданы химические формулы, расчёт рассеяния альфа и бета частиц и комптоновского рассеяния гамма квантов ведётся по плотности электронов, если эти данные отсутствуют – используется плотность массы.

Форма для ввода параметров геометрии имеет следующий вид:



На первой странице формы «**Описание**» название, тип, вид и описание геометрии и связанные с геометрией два файла: файл **архива результатов измерений** и **рабочей библиотеки нуклидов**.

Оператору необходимо:

- Ввести название и описание геометрии. Название геометрии не должно содержать пробелов и специальных символов.
- Выбрать тип геометрии: **точечная**, **плоская** или **объёмная**. Тип геометрии определяет характер поглощения излучения в счётном образце и соответствующий набор параметров. В точечной геометрии отсутствует поглощение излучения в счётном образце. В плоской геометрии поглощение связано с поверхностной плотностью счётного образца. В объёмной геометрии поглощение определяется объёмной плотностью счётного образца и средней толщиной счётного образца.
- Для плоского типа геометрии указать характер геометрии (флажок «**Геометрия «толстого» слоя**»[15]). Толщина материала источника излучения в «толстом» слое

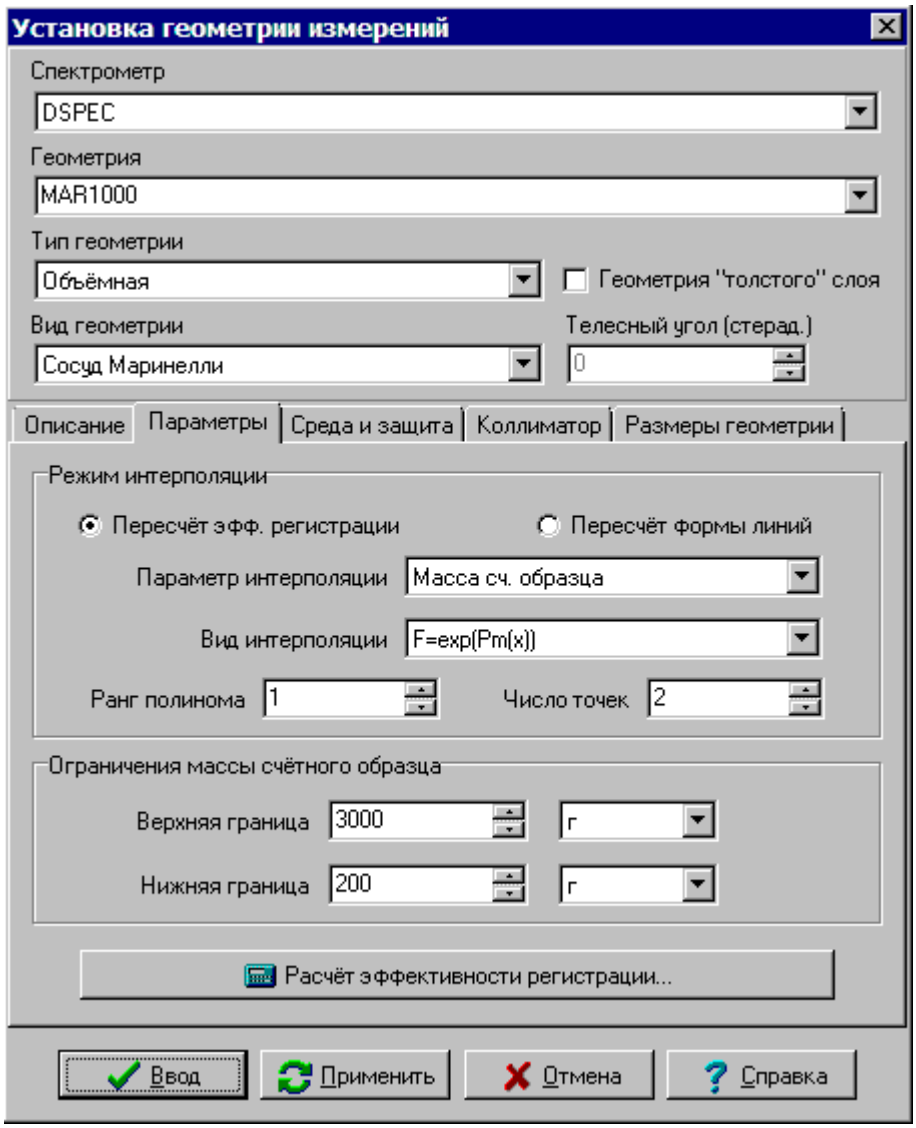
[15]Считается, что геометрия является геометрией "толстого" слоя, если средний пробег регистрируемых детектором частиц в веществе счётного образца значительно меньше толщины счётного образца. Для альфа частиц с энергией 4 - 6 МэВ "толстым" будет слой с поверхностной

должна превышать пробег квантов излучения в данном материале. Для геометрии толстого слоя отклик спектрометра пропорционален не общей активности, а удельной активности счётного образца.

- Для объёмной геометрии выбрать один из видов геометрии связанный с формой и размерами геометрии: сосуд «Маринелли», цилиндр (чашка «Петри»), усечённый конус, цилиндр в колодце (для детекторов с колодцем). Для плоской геометрии при измерениях гамма активности выбрать вид плоской геометрии из списка: полусфера (2pi), сфера (4pi) или заданный телесный угол. Геометрия полусферы соответствует измерениям на плоскости (детектор над поверхностью земли). Геометрия «Сфера» - детектор внутри материала (в шахте, в скважине и т.п.). Геометрия «Заданный телесный угол» - геометрия, в которой телесный угол излучения квантов ограничен конструкционно.
- Выбрать один из существующих архивов для сохранения результатов измерений проб в данной геометрии или ввести название нового архива. Если архив не указан, программа будет использовать архив, заданный в параметрах спектрометра.
- Выбрать рабочую библиотеку нуклидов - таблицу нуклидов, используемую при некоторых процедурах калибровки спектрометра (расчет элементарных спектров, спектров линий и функций эффективности регистрации) для данной геометрии.

плотностью более 20 мг/кв.см. Для "толстого" слоя обычно не требуется перерасчёт элементарных спектров в зависимости от плотности или массы счётного образца.

На второй странице «**Параметры**»



оператору необходимо:

- Установить параметры режима интерполяции.
- Задать граничные значения для массы счётного образца. Если для нижней или верхней границы массы указано нулевое значение или не указаны единицы измерения – масса счётного образца контролироваться программой не будет.

Пояснений требует только группа параметров «**Режим интерполяции**», определяющая метод расчета спектров компонентов декомпозиции, спектров моделей и функций эффективности регистрации, соответствующих **параметру интерполяции.**

В пакете «SPECTRRAD» используется четыре типа **параметра интерполяции:**

- **Масса счётного образца** (для фиксированной геометрии масса непосредственно связана с плотностью счётного образца) и влияет, прежде всего, на поглощение излучения и, соответственно, эффективность регистрации.
- **Расстояние от детектора (мм)** – расстояние от детектора до источника излучения по оси центр детектора - центр источника. Расстояние включает и толщину контейнера источника, но не включает толщину упаковки детектора.

- **Загрузка спектрометра** - интенсивность регистрируемых спектрометром импульсов во всём используемом энергетическом диапазоне. Загрузка спектрометра влияет, прежде всего, на форму линий спектров.
- Какой либо выбранный геометрический параметр пробы или геометрии измерений - **размер пробы** (название параметра задаётся при настройке архива, связанного с данным спектрометром и геометрией измерений, и может быть, например, высотой насыпки и т.п.);

Для спектрометров гамма излучения с хорошим разрешением (обработка с выделением пиков) возможна интерполяция по двум параметрам: для таблиц эффективности регистрации по одному параметру (пункт «**Пересчёт эфф. регистрации**», например - масса счётного образца), а для таблиц линий по другому параметру (пункт «**Пересчёт формы линий**», например - загрузка спектрометра). При этом для каждого вида интерполяции сохраняется свой набор параметров интерполяции.

При обработке спектров без поиска пиков используется единый тип параметра интерполяции и при расчёте элементарных спектров и при расчёте спектров моделей линий.

Вид интерполяции определяет метод кусочно-полиномиальной интерполяции (экстраполяции) вида F=F([EXP](Pm[LOG](X))) и может быть выбран из следующего списка:

F=Pm(x)	
F=Pm(log(x))	
F=exp(Pm(x))	Рекомендуемый режим интерполяции для гамма спектрометров с геометрией «тонкого слоя», в том случае если параметром интерполяции является масса счётного образца.
F=exp(Pm(log(x)))	
F=1/Pm(x)	Рекомендуемый вид интерполяции, если параметром интерполяции является расстояние счётного образца от детектора. Если **число точек** = 2 и **ранг полинома** = 1, то $\mathbf{F=1/(ax+b)^2}$.
F=1/Pm(log(x))	
F=1/exp(Pm(x))	
F=1/exp(Pm(log(x)))	
F=F0·(1-exp(-k·x))	Вид интерполяции наиболее подходящий для геометрий «толстого слоя», в том случае если параметром интерполяции является масса счётного образца.
F=F0·(1-exp(-k·x))/(k·x)	Режим интерполяции, рекомендуемый для альфа и бета спектрометров с геометрией «тонкого слоя»**.**

Здесь:

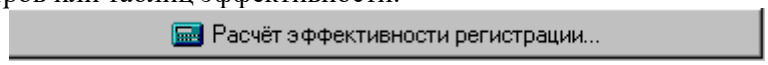
F	Функция интерполируемых значений:
X	Параметр интерполяции.
Pm	Полином заданного ранга - «**Ранг полинома**». В примере задан значением по умолчанию.

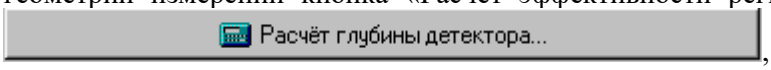
Выбор конкретного вида интерполяции зависит от параметра интерполяции. Если параметр интерполяции - расстояние образца от детектора рекомендуется обратная полиномиальная интерполяция **F=1/Pm(x)**. Прежде чем выбрать вид интерполяции, требуется выяснить теоретическую зависимость ослабления интенсивности излучения от выбранного параметра интерполяции и, соответственно, выбрать наиболее близкий вид интерполяции.

Для зависимости интенсивности излучения от массы (или плотности) пробы теоретически наилучшим образом подходят две последние формулы: **F=F0·(1-exp(-k·x))** для геометрий «толстого слоя» и **F=F0·(1-exp(-k·x))/(k·x)** для геометрий тонкого слоя. И это действительно так для всех видов излучения в геометриях «толстого слоя» и для альфа и бета спектрометров при измерениях в геометрии «тонкого слоя». Для сцинтилляционных гамма спектрометров (обработка спектров без выделения спектра непрерывного рассеяния) за счёт сложного характера перераспределения импульсов из фотопиков в спектр комптоновского рассеяния при изменении плотности счётного образца лучше подходит более свободная интерполяция вида **F=exp(Pm(x))** или **F=exp(Pm(log(x)))**. Для гамма спектрометрии с выделением спектра непрерывного рассеяния формулы **F=F0·(1-exp(-k·x))** и **F=F0·(1-exp(-k·x))/(k·x)** подходят. Но за счёт того, что параметры формул определяются нелинейной процедурой и она более чувствительна к статистическим шумам аппроксимируемых спектров и функций, их применение требует осторожности.

Ранг полинома и **число точек** - связанные между собой параметры. **Число точек** - число участвующих в расчёте спектров или таблиц, по которым проводится интерполяция. **Ранг полинома** должен быть как минимум на единицу меньше числа точек (если мы используем три спектра, то можно пользоваться параболической интерполяцией, при двух - только линейной). Для увеличения скорости расчёта рекомендуется пользоваться кусочно-линейной интерполяцией.

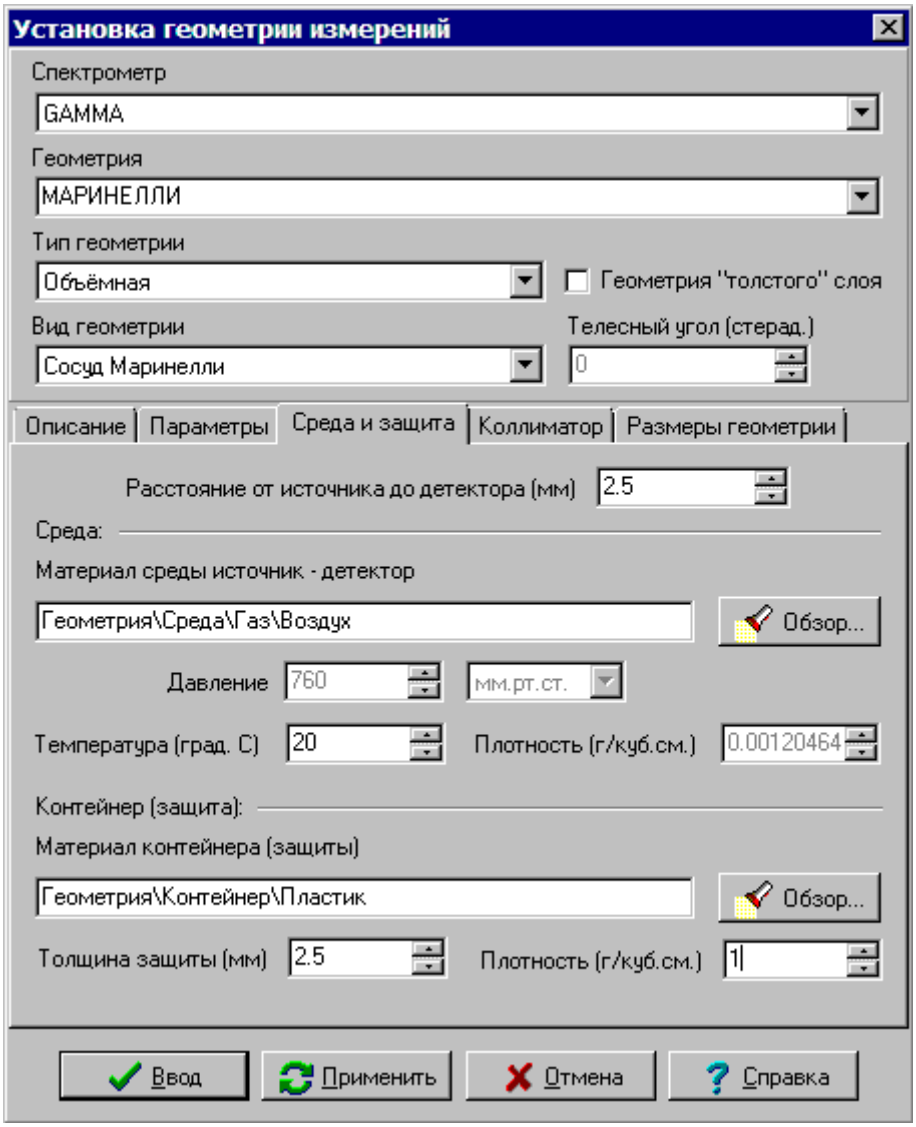
Расчет производится для каждого канала спектра интерполяцией выбранного вида по заданному количеству спектров имеющих значения параметра интерполяции наиболее близкие к такому же параметру счётного образца из набора элементарных спектров, спектров линий или таблиц эффективности. Пользователь может использовать до 6 исходных спектров или таблиц эффективности.

Кнопка 

вызывает процедуру расчёта функций эффективности регистрации гамма квантов для ряда видов геометрий (геометрии «толстого» слоя) по функциям эффективности регистрации для точечной геометрии. Предварительно должен быть проведён расчёт «эффективной глубины детектора» (расчёт геометрических параметров регистрирующей области детектора) по функциям эффективности регистрации гамма квантов для, как минимум, двух положений точечного источника излучения относительно детектора. Для точечной геометрии измерений кнопка «Расчёт эффективности регистрации…» меняет вид на 

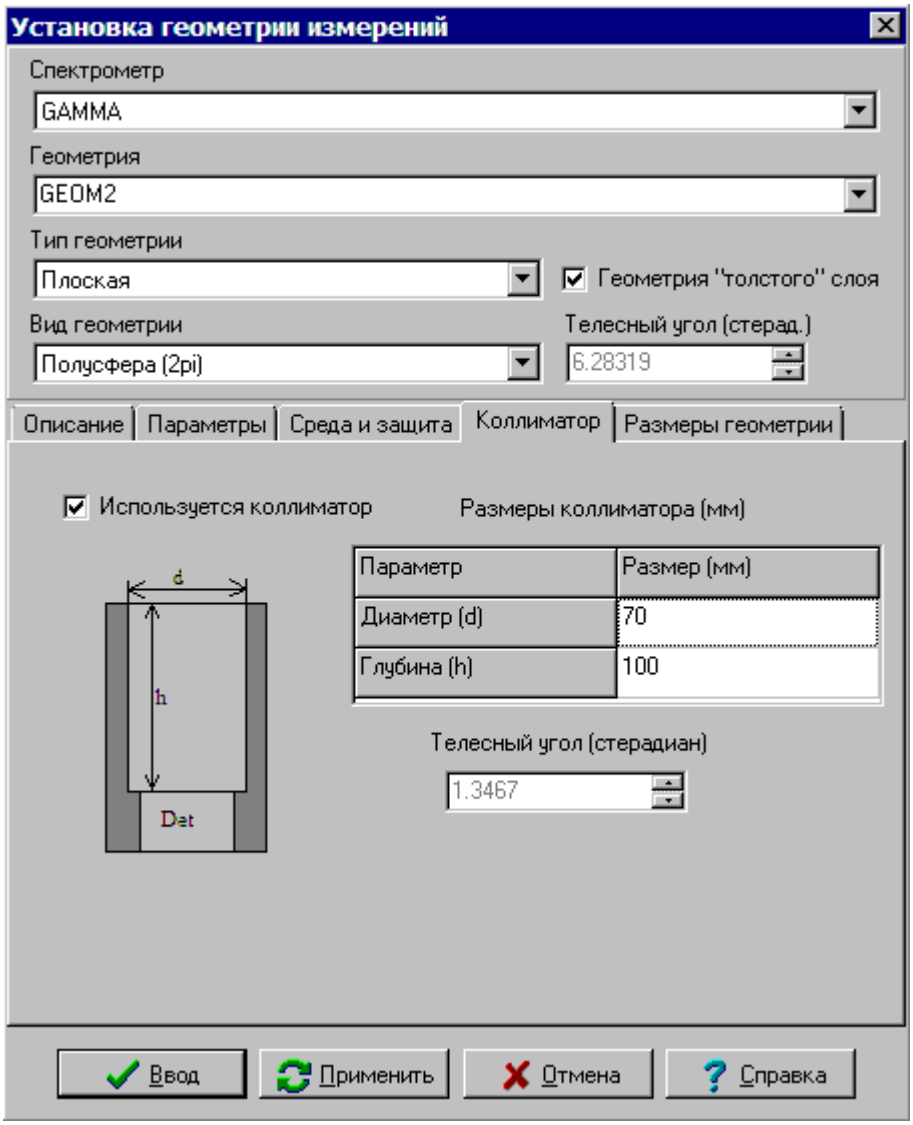
, нажатие на которую вызывает процедуру расчёта «эффективной глубины детектора».

На третьей странице «**Среда и защита**» оператор должен задать параметры среды, в которой находятся источник излучения и детектор, контейнера, в которой находится источник излучения, или дополнительной защиты.



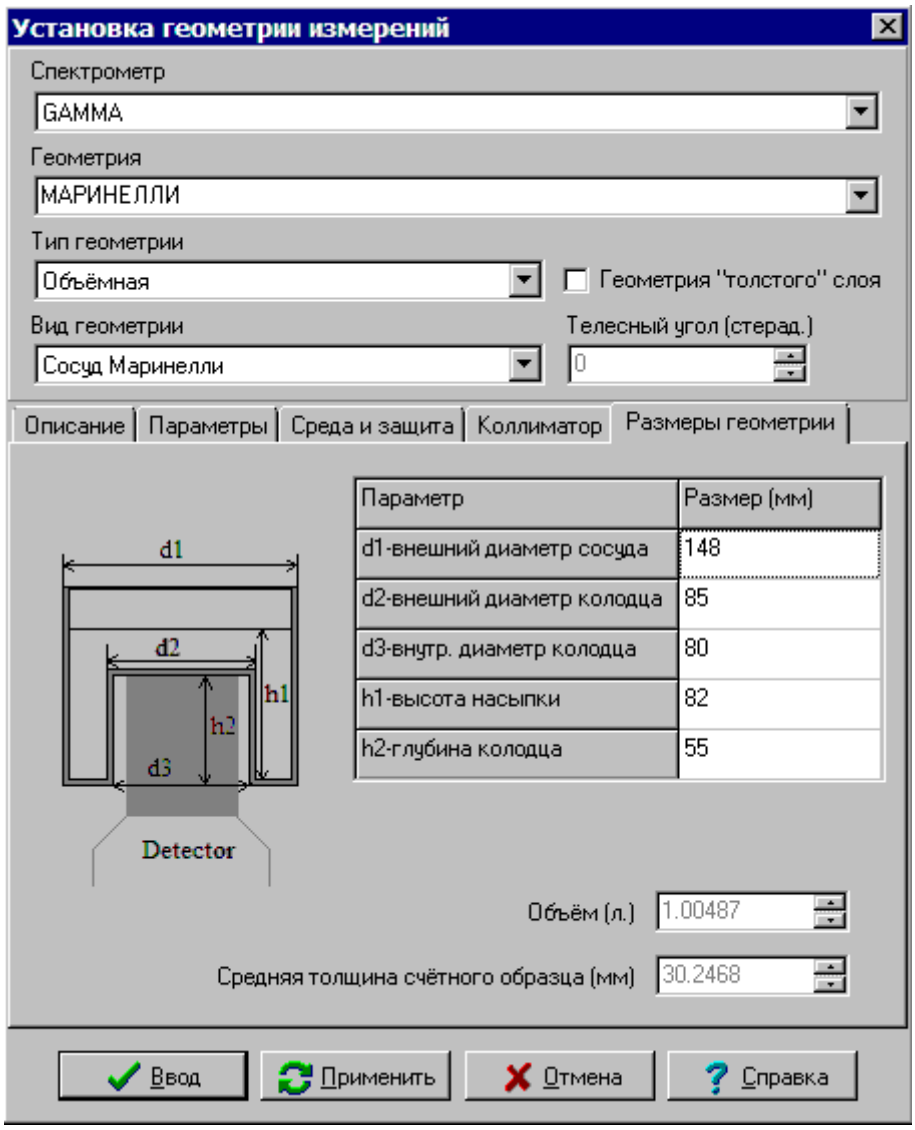
Толщина контейнера (защиты) не должна превышать расстояния от источника до детектора. Если толщина контейнера равна расстоянию от источника до детектора, то значит, что весь материал среды вытеснен материалом контейнера и расчёт ослабления излучения в среде производится не будет, параметры среды будут недоступны для редактирования. Если средой является газ, то плотность газа не задаётся прямо, а рассчитывается по химической формуле газа, значениям температуры и давления.

На четвёртой странице «**Коллиматор**» оператор должен задать размеры коллиматора, если при измерениях используется коллиматор излучения.



Размеры коллиматора и рассчитанная «эффективная глубина детектора» определяют телесный угол регистрации квантов для коллиматора. Используемый для расчёта эффективности регистрации телесный угол регистрации квантов будет минимальным значением из телесного угла излучателя и телесного угла коллиматора.

На последней странице «**Размеры геометрии**» оператор должен задать размеры используемого при измерениях в данной геометрии сосуда (контейнера) счётного образца. По заданным размерам программа рассчитывает объём геометрии и эффективную толщину счётного образца - параметры необходимые для расчёта поглощения излучения в веществе счётного образца.



Рекомендуется отдельной геометрией установить геометрию контрольного источника, даже в том случае, если геометрия контрольного источника совпадает с одной из рабочих геометрий. В этом случае есть возможность задать для геометрии контрольного источника отдельный архив измерений, в котором будут сохраняться все измерения, связанные с контролем работоспособности спектрометра: измерения контрольного источника и фона, что позволит более удобно формировать необходимые для процедуры поверки выборки из такого рода измерений.

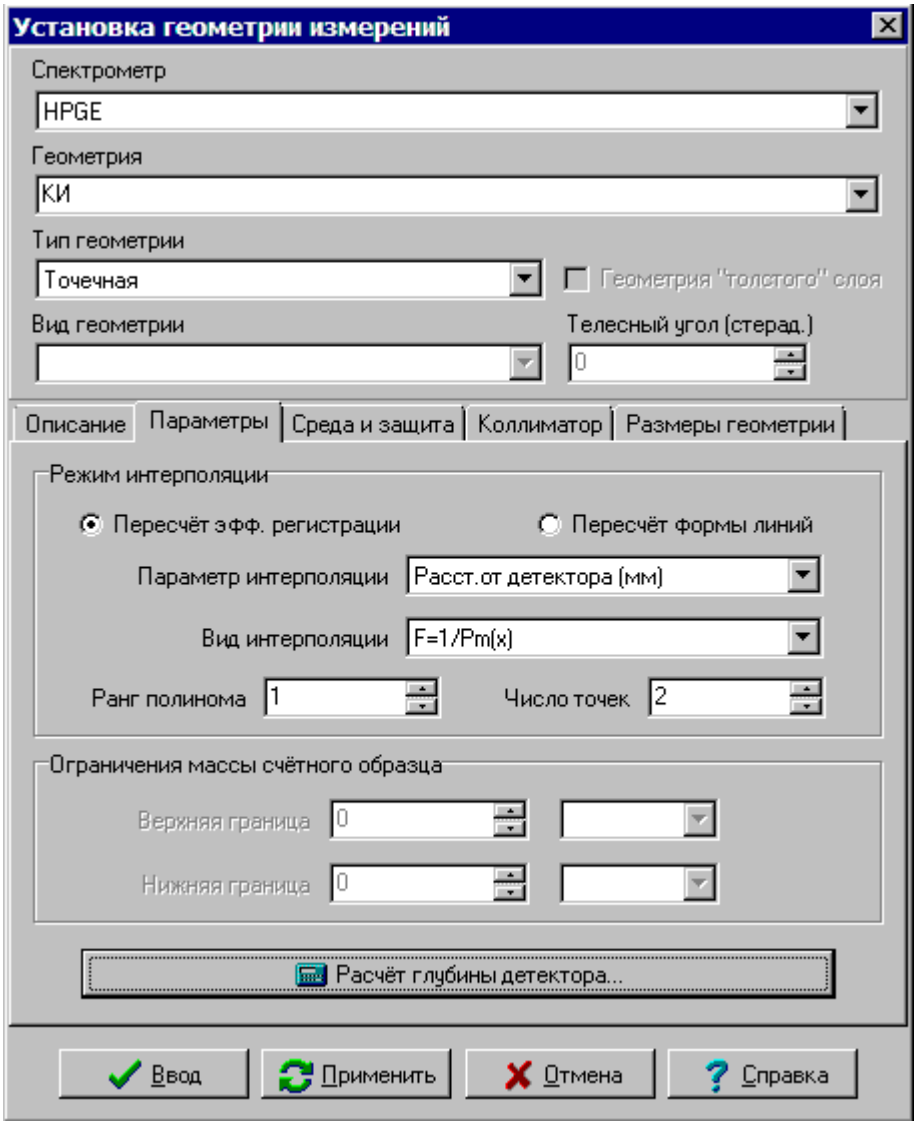
После установки геометрии контрольного источника требуется измерить в данной геометрии контрольный источник, затем провести энергетическую калибровку спектрометра, установить рабочие геометрии измерений, настроить процедуры автокалибровки, контроля фона и циклических измерений, промерить в установленных геометриях фон, эталоны, рассчитать и установить в программу элементарные спектры нуклидов. Для спектрометров излучения имеющих выраженный линейчатый характер, провести калибровку ширины пиков, провести калибровку эффективности регистрации

излучения в пиках полного поглощения и пиках утечки, рассчитать и установить в программу модели линий.

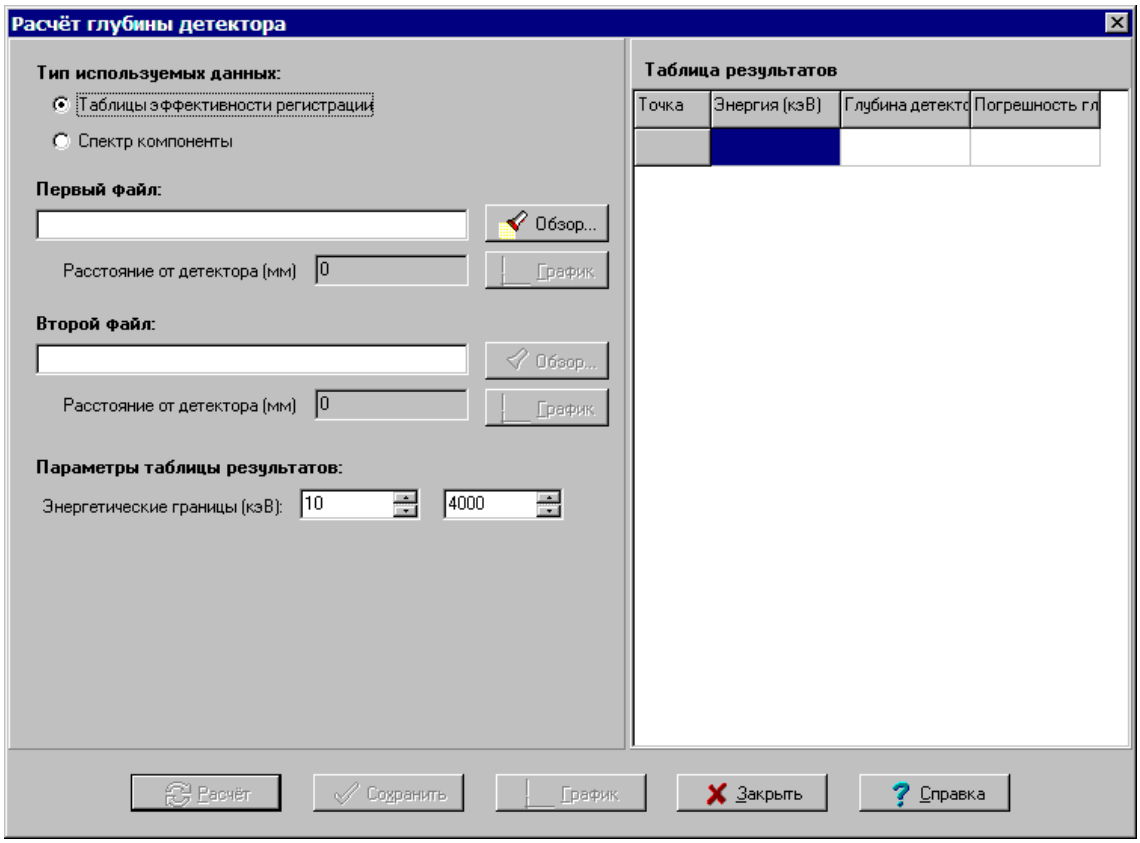
Для ряда геометрий невозможно рассчитать эффективность регистрации по эталонам из-за отсутствия эталонов данной геометрии (измерение активности почвы, грунта на местности, в скважине), в этом случае эффективность регистрации квантов для таких геометрий рассчитывается по эффективности регистрации квантов в точечной геометрии. Для этого необходимо установить точечную геометрию измерений, провести калибровку эффективности регистрации точечных источников для нескольких положений источников относительно детектора для оценки геометрических параметров регистрирующего объёма детектора – рассчитать «глубину детектора» и после расчёта «глубины детектора» рассчитать эффективность регистрации в требуемой геометрии.

Расчёт глубины детектора

После калибровки точечной геометрии по эффективности регистрации становится доступной процедура расчёта «глубины детектора» - расчёта эффективного центра регистрации квантов по заданному направлению. Изменение эффективности регистрации точечного источника относительно такого центра по заданному направлению носит характер квадратичного ослабления по расстоянию от центра. Форма установки геометрии в этом случае имеет следующий вид:

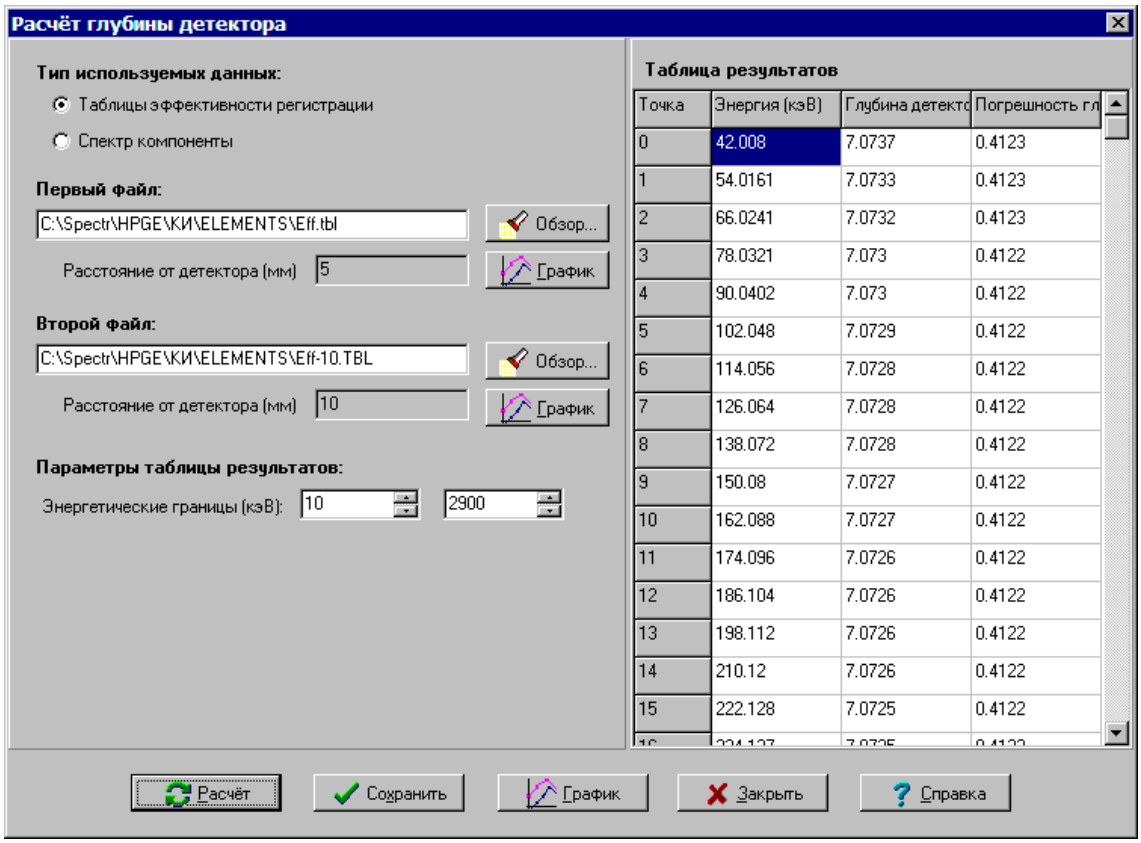


Щелчок по кнопке «**Расчёт глубины детектора…**» вызывает форму процедуры расчёта:



Оператор должен выбрать тип используемых данных: **таблицы эффективности регистрации** в пиках полного поглощения или **спектры компонентов**. Спектры компонентов можно использовать, если отсутствуют калибровки эффективности регистрации (сцинтилляционная спектрометрия). Выбрать первый и второй калибровочный файл с различными значениями расстояния от детектора, задать **параметры таблицы результатов** и щёлкнуть по кнопке «**Расчёт**».

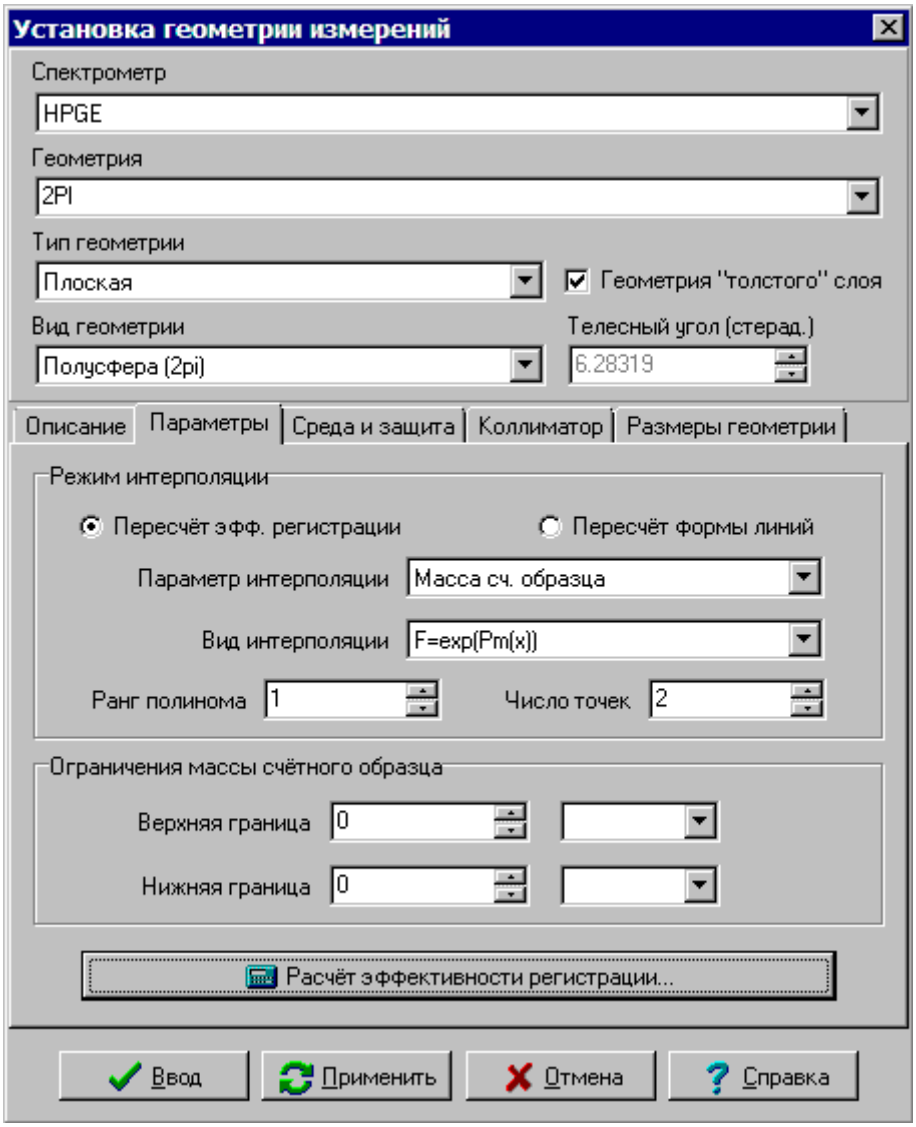
Форма будет иметь следующий, например, вид:



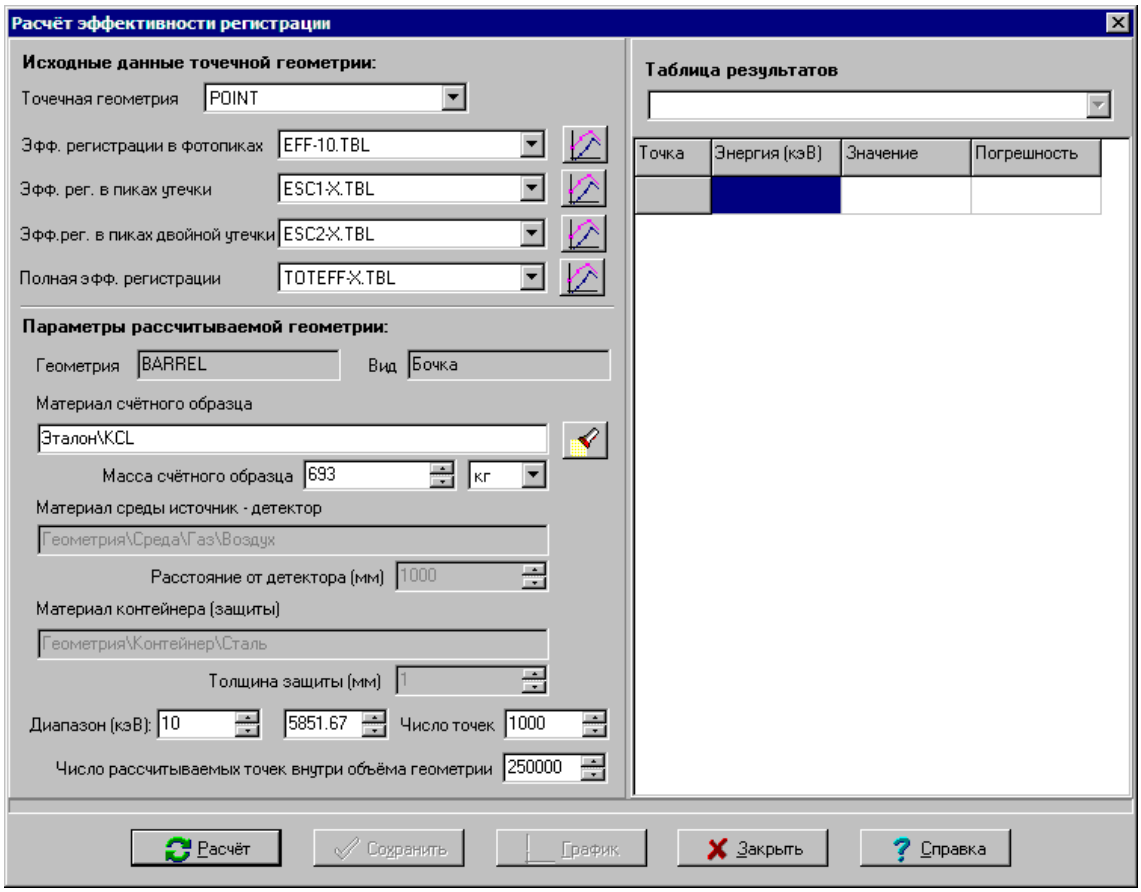
Оператор должен сохранить рассчитанную таблицу. Таблица сохраняется под названием «**DetectorDepth.tbl**» в папке спектрометра. Оператор может визуализировать таблицу и использованные для расчёта файлы спектров или таблиц эффективности регистрации. При этом, поскольку при расчёте исходные спектры или таблицы эффективности приводятся к нулевому поглощению излучения, вид исходных файлов до расчёта и после расчёта будет отличаться на значения поглощения квантов излучения.

Расчёт эффективности регистрации

После калибровки точечной геометрии по эффективности регистрации и расчёта «глубины детектора» становится доступной процедура расчёта эффективности регистрации детектора в данной геометрии по эффективности регистрации детектора в точечной геометрии. Форма установки геометрии в этом случае может иметь следующий вид:



Щелчок по кнопке «**Расчёт эффективности регистрации…**» вызывает форму процедуры расчёта:



Оператор должен выбрать одну из существующих точечных геометрий, файлы **эффективности регистрации** для точечной геометрии, задать **тип материала для рассчитываемых данных**, **массу счётного образца,** энергетический **диапазон, число точек** рассчитываемых таблиц и **число рассчитываемых точек внутри объёма геометрии**.

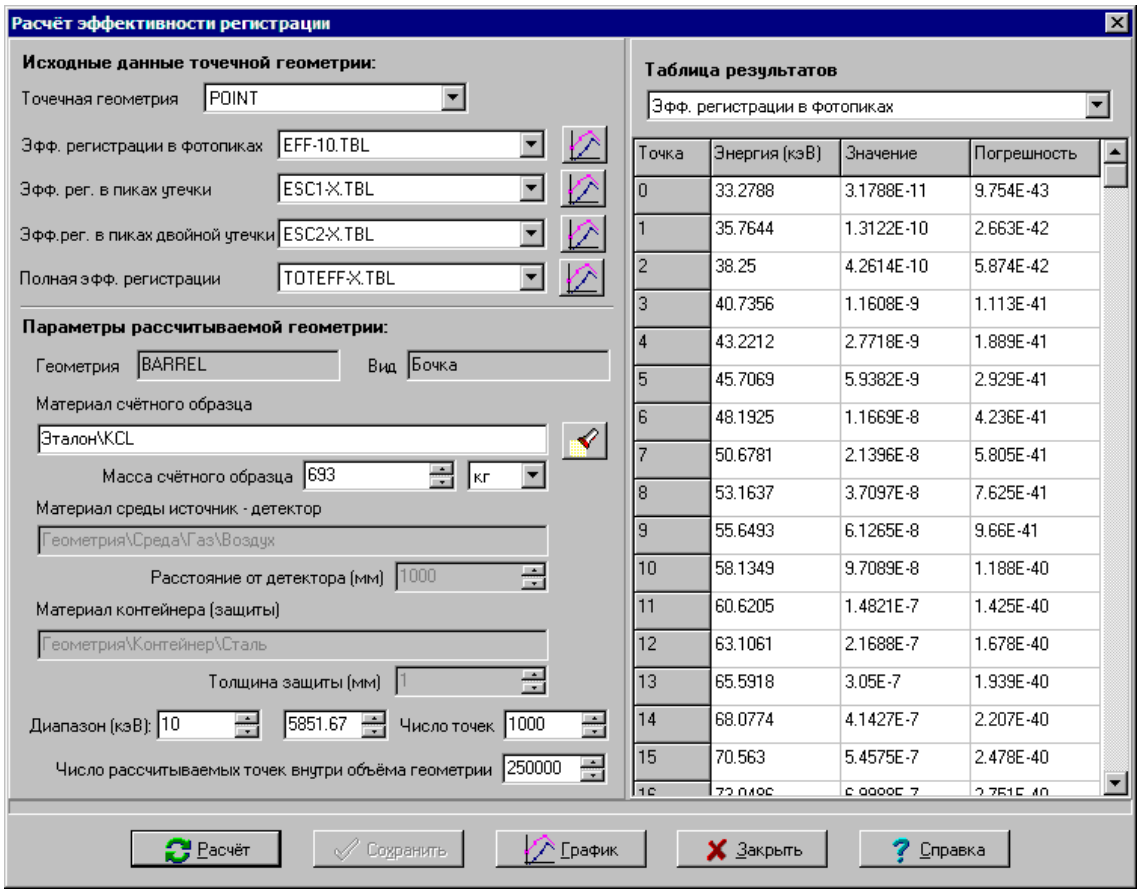
Расчёт эффективности регистрации для объёмной или плоской геометрии производится усреднением точечной эффективности регистрации для выбранного числа точек внутри объёма рассчитываемой геометрии с учётом расстояния до эффективного центра детектора и поглощения в веществе счётного образца, контейнера (защиты) и среды в которой находится счётный образец и детектор.

Число точек рассчитываемой таблицы (плотность рассчитываемой таблицы) и число рассчитываемых точек внутри объёма геометрии определяют длительность расчёта. Чем больше точек, тем точнее, но продолжительнее расчёт. Поэтому число точек выбирается из компромисса между точностью и скоростью.

Кнопка позволяет визуализировать выбранный файл данных, кнопка найти требуемый файл с данными о материале счётного образца.

Процедура расчёта запускается нажатием на кнопку «**Расчёт**». Процедуру расчёта можно прервать, нажав на клавишу «**Esc**» на клавиатуре компьютера.

По завершении процедуры расчёта форма будет иметь следующий, например, вид:



Если в наборе исходных данных присутствовала и таблица эффективности регистрации гамма квантов в фотопиках, процедура дополнительно к эффективности регистрации в фотопиках (пиках полного поглощения энергии гамма квантов) рассчитывает и таблицу коэффициентов коррекции эффективности регистрации для эффектов связанных с регистрацией совпадающих во времени гамма квантов.

Оператор должен сохранить рассчитанные таблицы. Таблицы эффективности регистрации сохраняются в папке «**Elements**» соответствующей геометрии спектрометра. Таблица коэффициентов коррекции эффективности регистрации сохраняется в папке геометрии спектрометра под названием «**CoincFactor.tbl**». Оператор может визуализировать рассчитанные таблицы и использованные для расчёта таблицы эффективности регистрации.

Для подключения рассчитанных таблиц эффективности регистрации к процедуре обработки спектров можно вызвать список файлов сохранённых в папке «**Elements**» соответствующей геометрии спектрометра. Список формируется по вызову пункта главного меню «***Калибровка / Список таблиц эффективности...***».

Список может выглядеть следующим, например, образом:

Список таблиц

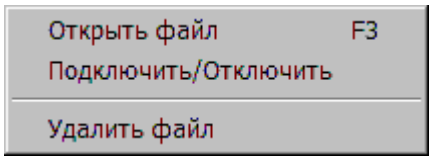
Спектрометр RUL13_1 Геометрия BARREL

	Файл	Назначение	Левая граница (кэВ	Правая граница (кэ	Макс.эфф.(Имп./кв	Статус
	EFF-10-new.TBL	Эфф.рег. в фотопик	0	2869.19	1.01329e-05	Подключен
	EFF-10.TBL	Эфф.рег. в фотопик	0	2869.19	1.01329e-05	
	ESC1-X-new.TBL	Эфф.рег. в пиках ул	0	2311.6	5.53293e-07	Подключен
	ESC1-X.TBL	Эфф.рег. в пиках ул	0	2311.6	5.53293e-07	
	ESC2-X-new.TBL	Эфф. в пиках двойн	0	2310.53	2.25197e-07	
	ESC2-X.TBL	Эфф. в пиках двойн	0	2310.53	2.25197e-07	Подключен
	TOTEFF-X-new.TBL	Полная эфф. регис	0	2311.09	9.69529e-05	
	TOTEFF-X.TBL	Полная эфф. регис	0	2311.09	9.7411e-05	Подключен

Всего 8 файлов.

Ввод Отмена Применить Справка

С помощью всплывающего меню



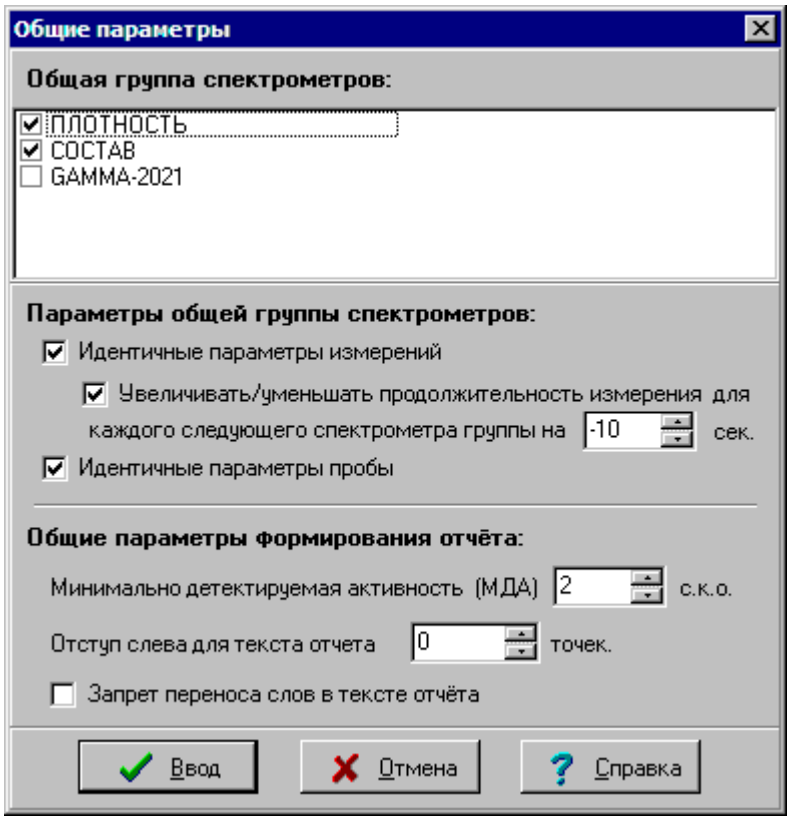
(п. меню «Подключить/Отключить») оператор может подключить требуемые таблицы или элементарные спектры.

Настройка

Настройка процедуры измерений

Настройка общих параметров

Процедура служит для формирования общей группы спектрометров и установки параметров используемых при формировании всех отчетов. Вызов процедуры осуществляется пунктом меню «***Устройство / Настройка / Общих параметров...***». При этом на экране появляется форма процедуры:



Общая группа спектрометров - группа в которой все операции связанные с запуском измерений синхронизированы – производятся одновременно. Остановка измерений оператором будет также синхронной. Завершение измерений будет одновременным, если установлен флажок «**Идентичные параметры измерений**». В этом случае все параметры измерений в группе будут идентичными. Если при этом установлен флажок «**Увеличивать/уменьшать продолжительность измерения для каждого следующего спектрометра группы на n сек.**» (**n** – заданное значение, отрицательное значение **n** уменьшает продолжительность измерений), параметры измерений в спектрометрах группы будут отличаться длительностью набора спектра. Это позволяет упорядочить обработку спектров, что бывает важно при реализации последовательной обработки спектров в группе спектрометров. Например, при Байесовском оценивании, когда результаты измерений в предыдущем спектрометре используются как априорные данные для обработки спектра в текущем спектрометре.

Если установлен флажок «**Идентичные параметры пробы**» ввод параметров пробы будет производиться только для одного спектрометра из группы. Ведённые данные будут использованы и для других спектрометров группы.

Для создания общей группы спектрометров оператор должен отметить галочками нужные спектрометры. Создание и редактирование группы доступно только в режиме полного доступа.

Общие параметры формирования отчёта:

- **Минимально детектируемая активность (МДА)**- установка значения минимально детектируемой активности в величинах среднеквадратичных отклонений.
- **Отступ слева для текста отчета** - отступ от левой границы формы до текста отчёта. Величина задается в точках. Параметр используется в том случае, если отчет не включается в шаблон отчёта (в этом случае его положение определяется положением метки **{Report}** или **{Table}**).
- **Запрет переноса слов в тексте отчёта**- установка или запрет режима автоматического переноса слов в абзаце.

Режим циклических измерений

Калибровка спектрометра по эффективности регистрации излучения от нуклидов (или квантов различных энергий) потребует проведения измерений эталонных источников. Причем, для того чтобы минимизировать вклад погрешности (неопределенности) элементарных спектров (функций эффективности) в погрешность оценки активностей проб, спектры эталонов должны быть измерены с очень хорошей статистикой, что потребует длительных измерений эталонов. Длительных измерений требует и исследование некоторых типов проб с очень жесткими нормами СанПиН.

Измерения проб, содержащих короткоживущие нуклиды, требует для эффективной оценки активностей нуклидов, изменяющихся во времени, реализации схемы измерений через заданные промежутки времени – схемы амплитудно-временного анализа.

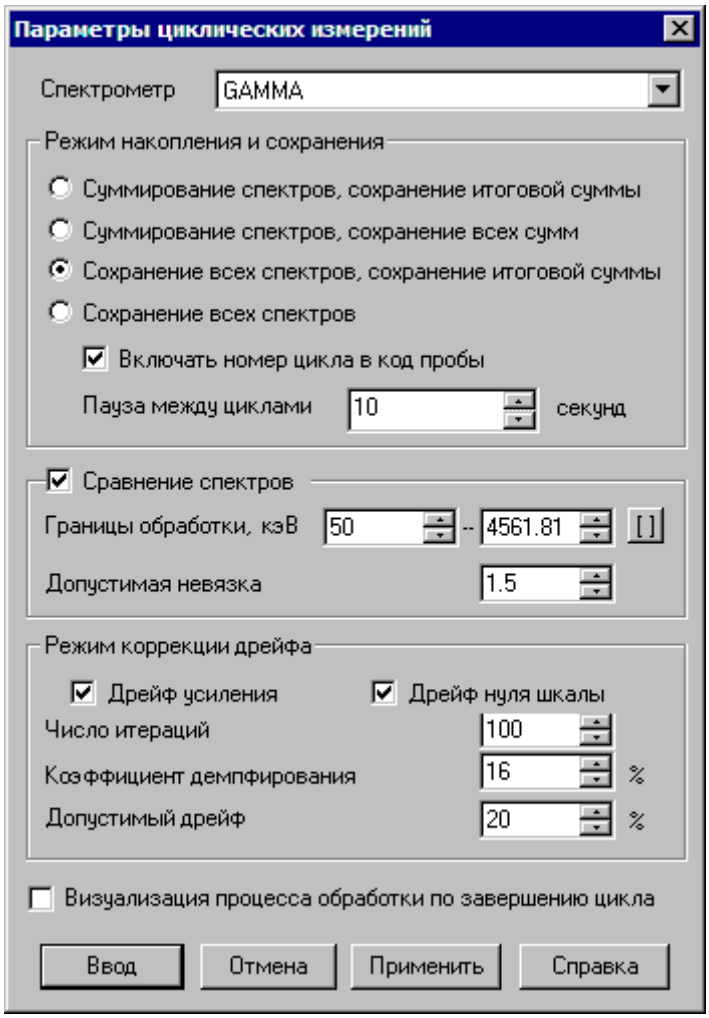
Организация режима контроля (мониторинга) технологических процессов требует непрерывных измерений или измерений через заданные интервалы времени.

Для этих целей в пакете «SPECTRRAD» предусмотрена процедура циклических измерений. Суть циклических измерений состоит в том, что измерения пробы производятся заданное количество циклов определённой длительности и результаты измерений в отдельных циклах либо суммируются и сохраняются, либо сохраняются без суммирования. При этом программа может производить сравнение спектра измеренного в последнем цикле с накопленным ранее (или измеренного в предпоследнем цикле) и таким образом контролировать стабильность загрузки спектрометра (что связано со стабильностью тракта спектрометра), и корректировать энергетический дрейф спектрометра. Процедура сравнения спектров и, соответственно, коррекции дрейфа предполагает неизменность (или незначимые изменения) нуклидного состава и соотношения активности нуклидов в пробе (радиоактивное равновесие в цепочках нуклидов присутствующих в пробе). В том случае, если данное условие не выполняется (в пробе присутствуют короткоживущие нуклиды), операции сравнения спектров и коррекции дрейфа могут быть отключены.

Циклические измерения позволяют сохранить накопленный спектр в случае, если произошла авария спектрометра (пропало питание, безнадёжно завис компьютер и т.п.), поскольку все циклы, накопленные к моменту аварии, уже сохранены в архиве измерений и потерян будет только последний цикл. После устранения аварии (в принципе, в любое время, если и не было аварии) оператор может продолжить измерения пробы в циклическом режиме. Для этого необходимо запустить измерения их архива, выбрав в качестве рабочей записи, запись нужной пробы и продолжить накопление в тот же файл спектра в архиве.

Существует возможность обработки спектра после каждого цикла (при задании шаблона обработки в параметрах пробы), что может быть полезно при экспресс-анализе нуклидного состава, анализе изменения нуклидного состава или режиме мониторинга технологического процесса. В том случае, если коррекция дрейфа по процедуре сравнения накопленного спектра и спектра последнего цикла невозможна из-за изменчивости спектра, коррекцию дрейфа спектрометра при циклических измерениях можно проводить после каждого цикла по результатам обработки суммарного спектра.

Перед проведением циклических измерений требуется установить необходимые параметры режима циклических измерений. Для этого, выбрав пункт меню «***Устройство / Настройка / Циклических измерений...***», необходимо заполнить поля таблички «**Параметры циклических измерений**»:



Форма имеет три группы параметров. В группе «**Режим накопления и сохранения**» оператор может выбрать один из четырёх режимов циклических измерений:

- ***Суммирование спектров, сохранение итоговой суммы*** - основной режим, при котором программа производит накопление в один итоговый спектр, как правило, с коррекцией энергетического дрейфа спектрометра после каждого цикла.
- ***Суммирование спектров, сохранение всех сумм*** - режим, при котором сохраняются все промежуточные спектры сумм.
- ***Сохранение всех спектров, сохранение итоговой суммы*** - сохранение всех спектров накопленных в каждом цикле измерений, сохранение в отдельном файле спектра суммы всех циклов.
- ***Сохранение всех спектров*** - сохранение всех спектров накопленных в каждом цикле измерений.

Для режимов с сохранением файлов для каждого цикла при установленной галочке «**Включать номер цикла в код пробы**» код (наименование) пробы для файла спектра каждого цикла будет дополнено номером цикла.

Графа «**Пауза между циклами**» позволяет задать временной интервал между циклами измерений, что может быть необходимо при реализации схемы амплитудно-временного анализа, синхронизации измерений с работой автоматического сменщика проб или схемы измерений связанных с контролем каких-либо процессов.

Группа «**Сравнение спектров**» при установленном флажке включает режим сравнения спектров, позволяющий корректировать энергетический дрейф спектрометра и оценить стабильность тракта спектрометра. Группа содержит два параметра:

- ***Границы обработки*** в единицах энергетической шкалы определяют энергетический диапазон, в котором происходит сравнение измеренного в последнем цикле и накопленного спектра. «Кнопка» [ ] служит для подстановки положений маркеров в качестве границ обработки. Рекомендуется использовать весь энергетический диапазон за исключением областей начала и окончания спектра, которые вследствие дрейфа спектрометра могут выйти из области набора спектра. Поскольку границы обработки задаются в единицах энергетической шкалы, оператору придётся вернуться к настройке параметров циклических измерений после начальной калибровки спектрометра.

Допустимая невязка - максимально допустимый уровень отношения реального расхождения спектров к теоретическому (нормированное среднеквадратичное отклонение $G = \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / G_i^2)/(n-m)}$). Рекомендуемая величина - от 1.5 до 2.0. При невязке, превышающей заданный порог, программа будет считать процесс сравнения спектров неудавшимся и приостановит циклические измерения. При этом оператору будет предложено решить: продолжить или прекратить измерения. Если оператор решит прекратить измерения, последний неудачный цикл не будет суммироваться с накопленным спектром, а будет сохранён в отдельном файле. При решении продолжить измерения спектры будут сложены и измерения продолжены.

В группе «**Режим коррекции дрейфа**» - оператор должен определить параметры коррекции энергетического дрейфа спектрометра во время измерения.

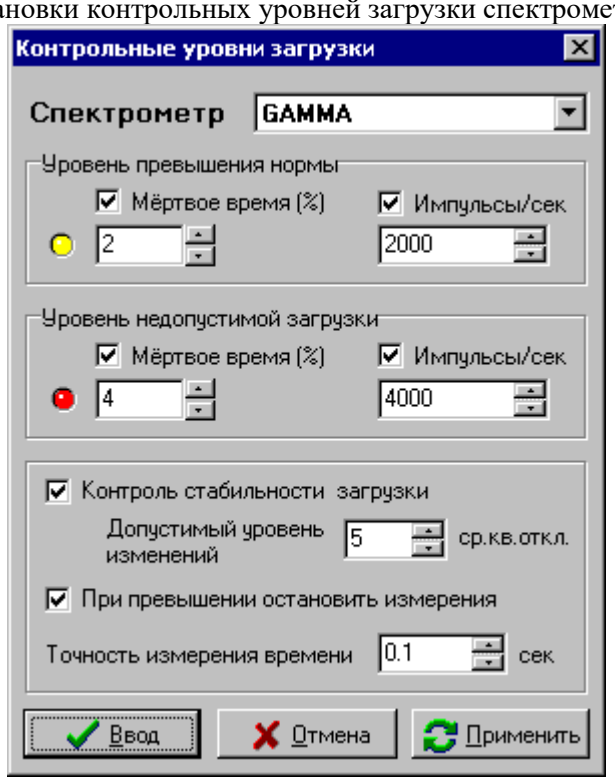
- Прежде всего выбрать «дрейфующие» параметры спектрометрического тракта: ***дрейф усиления*** и (или) ***дрейф нуля шкалы***». При установке соответствующих флажков программа будет корректировать дрейф коэффициента усиления тракта, и (или) дрейф нуля шкалы. Обычно дрейфуют оба параметра, и рекомендуется установить оба флажка.
- ***Число итераций*** ограничивает процесс уточнения параметров дрейфа заданным числом. Установка небольшого числа итераций имеет смысл для компьютеров с небольшим быстродействием.
- ***Коэффициент демпфирования*** - константа (задаётся в процентах) повышает устойчивость процесса решения. Имеет смысл, если процесс решения имеет колебательный характер, что может быть при плохой обусловленности системы (слабое изменение формы спектра при больших изменениях параметров дрейфа или почти идентичное изменение формы спектров при изменениях различных параметров).
- ***Допустимый дрейф*** - при дрейфе, превышающем заданный порог, программа будет считать процесс коррекции дрейфа неудавшимся и прервёт циклические измерения.

Поскольку режим коррекции дрейфа основан на сравнении формы спектра измеренного в последнем цикле с формой накопленного спектра, предполагается неизменность нуклидного состава пробы во время измерения и в случае, если спектр пробы изменяется во время измерения (в пробе присутствуют короткоживущие нуклиды), коррекция дрейфа должна быть отключёна.

Контроль загрузки

Загрузка спектрометра - термин, связанный с интенсивностью регистрируемого спектрометром потока импульсов (квантов излучения) и быстродействием спектрометра. Обработка каждого зарегистрированного детектором импульса требует определённого времени, в течение которого спектрометр не может регистрировать другие импульсы. Это время - «**мёртвое время**» спектрометра. Соответственно, время, когда спектрометр открыт для регистрации импульсов - **«живое время»**, меньше реального (астрономического) времени на величину «мёртвого».

Пункт «***Устройство / Настройка / Контроля загрузки…***» главного меню (пункт «***Настройка…***» всплывающего меню окна «Спектрометры») выводит окно для установки контрольных уровней загрузки спектрометров:



Оператор должен установить два контрольных уровня загрузки спектрометра: «**Уровень превышения нормы**» и «**Уровень недопустимой загрузки**» и может установить режим **контроля стабильности загрузки**, установив соответствующие «галочки». Если установлены обе «галочки»: для контроля по «мёртвому» времени и по абсолютной загрузке, программа будет выдавать соответствующее предупреждение в случае превышения любого из порогов.

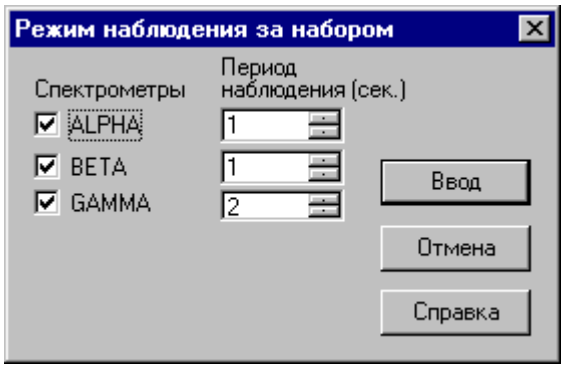
В режиме контроля стабильности загрузки спектрометр через определенное время (время измерения загрузки) сравнивает уровни загрузки в импульсах/сек за прошлый и истекший период и, если они отличаются на величину большую заданной в графе «**Допустимый уровень изменений**», программа контроля выдает предупреждающее сообщение и, в случае если установлен флажок «**При превышении остановить измерения**», приостанавливает измерения до решения оператора продолжить или прервать измерения.

Наблюдение за набором

Программа позволяет осуществлять наблюдение за набором во всех включенных спектрометрах (можно подключить до шести спектрометров и проводить измерения одновременно во всех спектрометрах).

Временные параметры режима наблюдения за набором устанавливаются по вызову пункта «***Устройство / Настройка / Режима наблюдения...***» главного меню. Если в

программе подключено, например, три спектрометра «ALPHA», «BETA» и «GAMMA» окно для установки параметров режима наблюдения за набором может выглядеть следующим образом:



Оператор имеет возможность включить или выключить режим наблюдения за набором, щелчком левой кнопки мышки поставив или удалив «галочку» в квадратном окошке перед названием спектрометра.

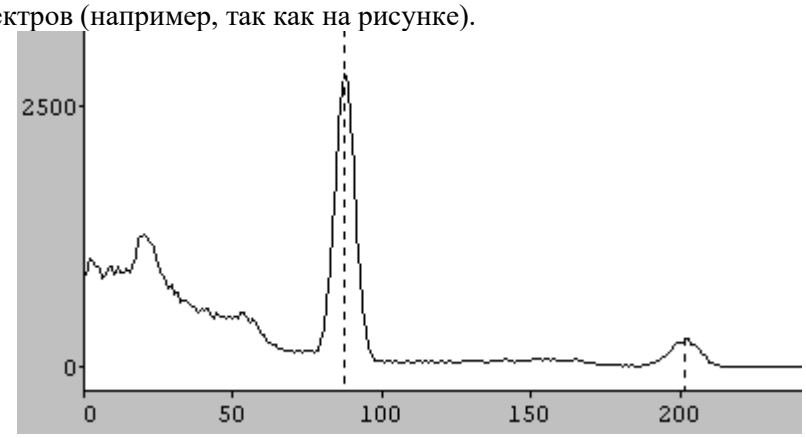
Период наблюдения (время через которое спектр из спектрометра будет считываться в окно программы) устанавливается в окошке справа от названия спектрометра.

Калибровка спектрометра

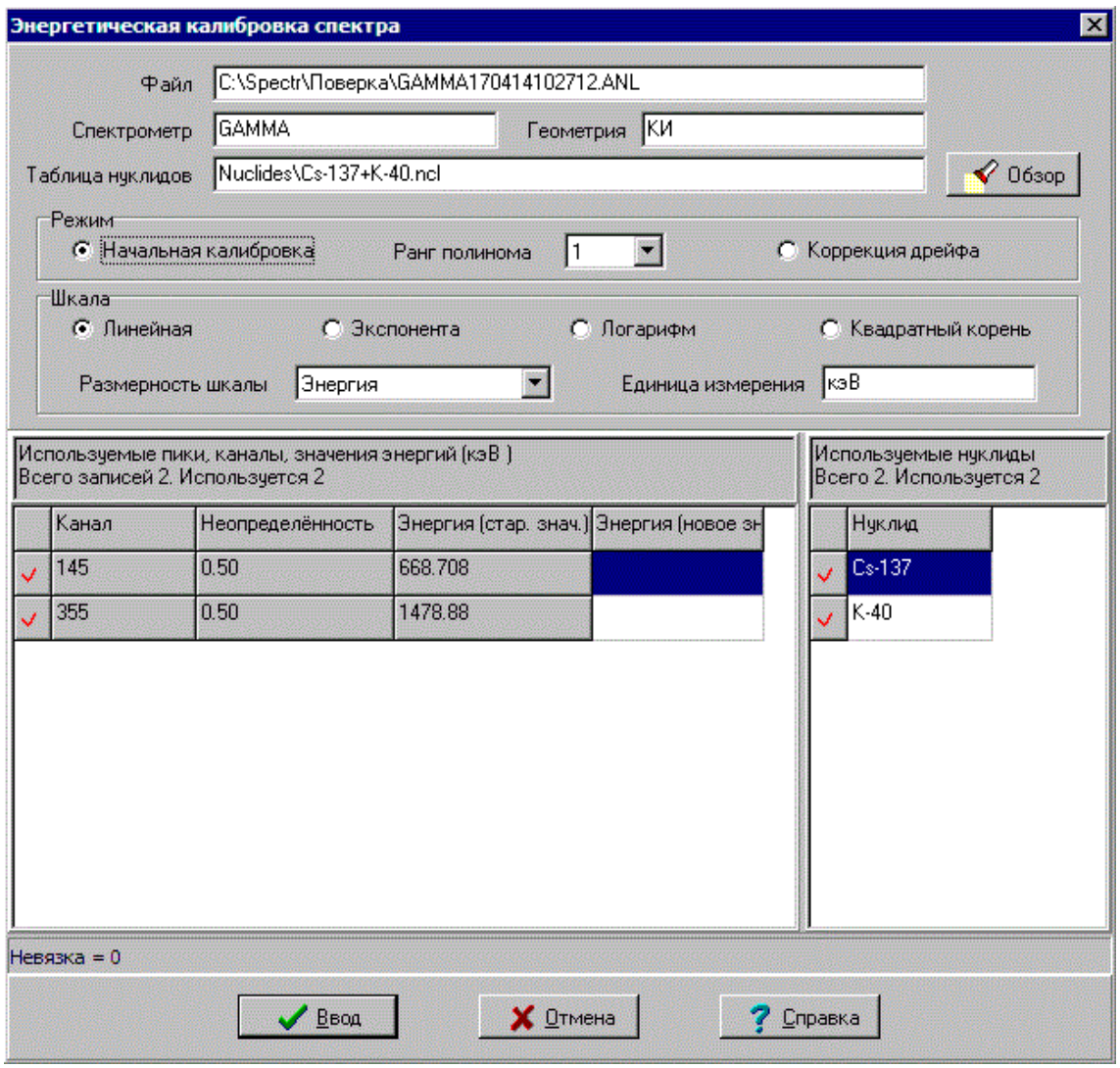
Энергетическая калибровка спектрометра

Энергетическая калибровка спектрометра (или выбранного спектра) используется для определения связи между каналами спектрометра (спектра) и энергией регистрируемого излучения. В пакете «SPECTRRAD» предполагается, что спектр может быть распределением числа отсчётов не только по энергии, но и по какому-нибудь другому параметру – например, времени (временной анализ), дате и др. Поэтому шкала абсцисс может быть не только шкалой энергий, но и шкалой других заданных параметров.

После выбора энергетического диапазона и установки параметров спектрометрического тракта, необходимо провести начальную энергетическую калибровку спектрометра. Для этого, измерив калибровочный источник, требуется пометить с помощью подвижного маркера каналы спектра, соответствующие известным энергиям: вершины или медианы пиков известных энергий, граничные энергии для бета спектров (например, так как на рисунке).



Затем, выбрав пункт меню «***Калибровка / Шкалы X (Энергетическая) / Ввод…***», вызвать процедуру энергетической калибровки. Окно (форма) процедуры будет иметь следующий вид:



Два верхних поля формы процедуры энергетической калибровки:“***Файл***” и “***Спектрометр***” являются информационными и содержат название файла спектра, для которого проводится калибровка и название спектрометра, к которому относится данный спектр.

Поле “***Таблица нуклидов***” указывает на используемую таблицу нуклидов. Кнопка Обзор позволяет выбрать требуемую таблицу. Использование таблицы нуклидов при калибровке делает процедуру калибровки более удобной: оператор может подставить требуемое значение энергии непосредственно из таблицы, может выделить требуемые для калибровки пики, пользуясь информацией содержащейся в таблице нуклидов. Предварительно таблица нуклидов, используемая для калибровки, должна быть подготовлена. Она должна содержать информацию о “**калибровочных линиях**” - наиболее мощных гамма или альфа линях, которые оператор при создании или редактировании таблицы назначил калибровочными и указал для них энергетический диапазон, в котором процедура калибровки будет искать наиболее мощный пик в спектре для привязки энергии линии к положению пика. По умолчанию в качестве таблицы нуклидов используется таблица, указанная при установке геометрии измерений.

Существует два **режима** энергетической калибровки:

- **Начальная калибровка** - формирует базовую калибровку спектрометра. Базовая калибровка является действительной калибровкой для всех элементарных спектров спектрометра (включая файл автокалибровки) и проводится при начальной калибровке спектрометра после установки параметров АЦП

спектрометра. Для начальной калибровки требуется задать “**Ранг полинома”** (может принимать значения от 1 до 3), который вместе с числом используемых для калибровки точек определяет ранг калибровочного полинома. В том случае если число точек равно или меньше заданного ранга, ранг калибровочного полинома будет на единицу меньше числа калибровочных точек.

- **Коррекция дрейфа** - используется в процессе эксплуатации для коррекции чрезмерно большого энергетического дрейфа спектрометра, в том случае, если процедуре автокалибровки не удается справиться с таким дрейфом. После ручной коррекции дрейфа рекомендуется провести автокалибровку спектрометра для уточнения параметров дрейфа.

Ниже группы параметров «**Режим**» расположена группа параметров «**Шкала**» определяющая характер преобразования энергии квантов в величину электрического импульса трактом спектрометра:

Шкала	**Функция обратного преобразования**[16]
Линейная	$E = Pn(z)$
Экспонента	$E = \exp(Pn(z))$
Логарифм	$E = \log(Pn(z))$
Кв. корень	$E = \sqrt{Pn(z)}$

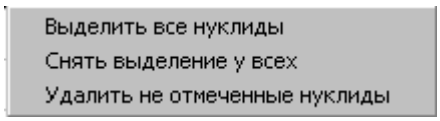
Здесь: E - энергия (абсцисса); z - положение импульса на шкале каналов; $Pn(z)$ - полином.

По умолчанию используется линейная шкала $E = Pn(z)$ используемая для большинства спектрометров.

В нижней части группы **«Шкала»** выпадающий список - **«Размерность шкалы»** и поле **«Единица измерения»**. Список **«Размерность шкалы»** имеет три строки: **«Энергия», «Дата / Время»** и **«Произвольная»**, доступные только в режиме начальной калибровки. Поле **«Единица измерения»** служит для ввода наименование единицы измерения при выборе значения «**Произвольная**» для размерности шкалы. При выборе значений **«Энергия»** или **«Дата/Время»** поле «Единица измерения» имеет информативный характер.

В центральной части формы процедуры калибровки две таблицы: таблица используемых пиков (каналов) и соответствующих им энергий и таблица используемых при калибровке нуклидов. Участвуют в процедуре калибровки только помеченные записи таблиц. Помеченные записи выделяются красной галочкой в первой колонке таблиц.

Оператор может указать нуклиды (в правой таблице формы), присутствующие в калибровочном источнике (эталоне). Выбор нуклидов производится двойным щелчком левой кнопки мышки или вызовом всплывающего меню щелчком правой кнопки мышки:

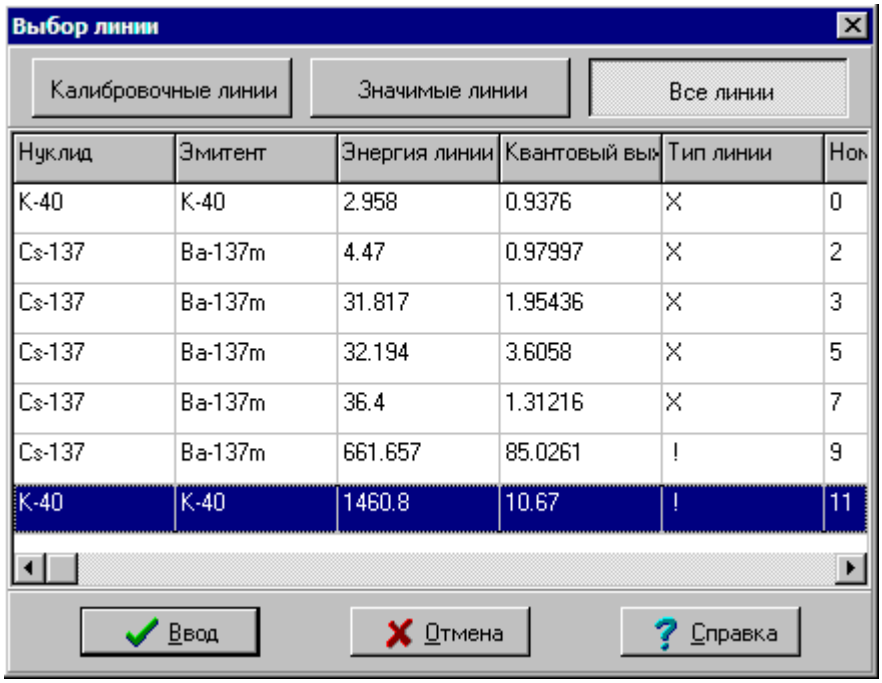


Оператору необходимо, выбрав режим ***«Начальная калибровка»***, ввести значения энергий помеченных каналов спектра или положений пиков в килоэлектронвольтах[17] в колонку «***Энергия (новое значение)***». Значения энергий можно подставить из

[16] При энергетической калибровке используется функция обратного преобразования, связывающая энергию квантов с положением ипульсов на шкале каналов. В названии шкалы конкретного спектрометра может указываться и прямое преобразование и, в этом случае, экспоненциальная шкала будет называться логарифмической, а логарифмическая - экспоненциальной.

[17] Единицы измерения энергии для шкалы спектрометра должны быть такими же, как и единицы измерения энергии в используемых таблицах нуклидов. Поскольку в комплект поставки входят таблицы нуклидов, в которых энергия линий задана в килоэлектронвольтах, шкалу спектрометра рекомендуется калибровать также в килоэлектронвольтах.

используемой при калибровке таблицы нуклидов. Двойной щелчок по ячейке колонки «***Энергия (новое значение)***» или вызов меню правой кнопкой мышки (пункт меню «***Выбрать линию***») позволяет подставить требуемое значение энергии. При этом на экран выводится табличка

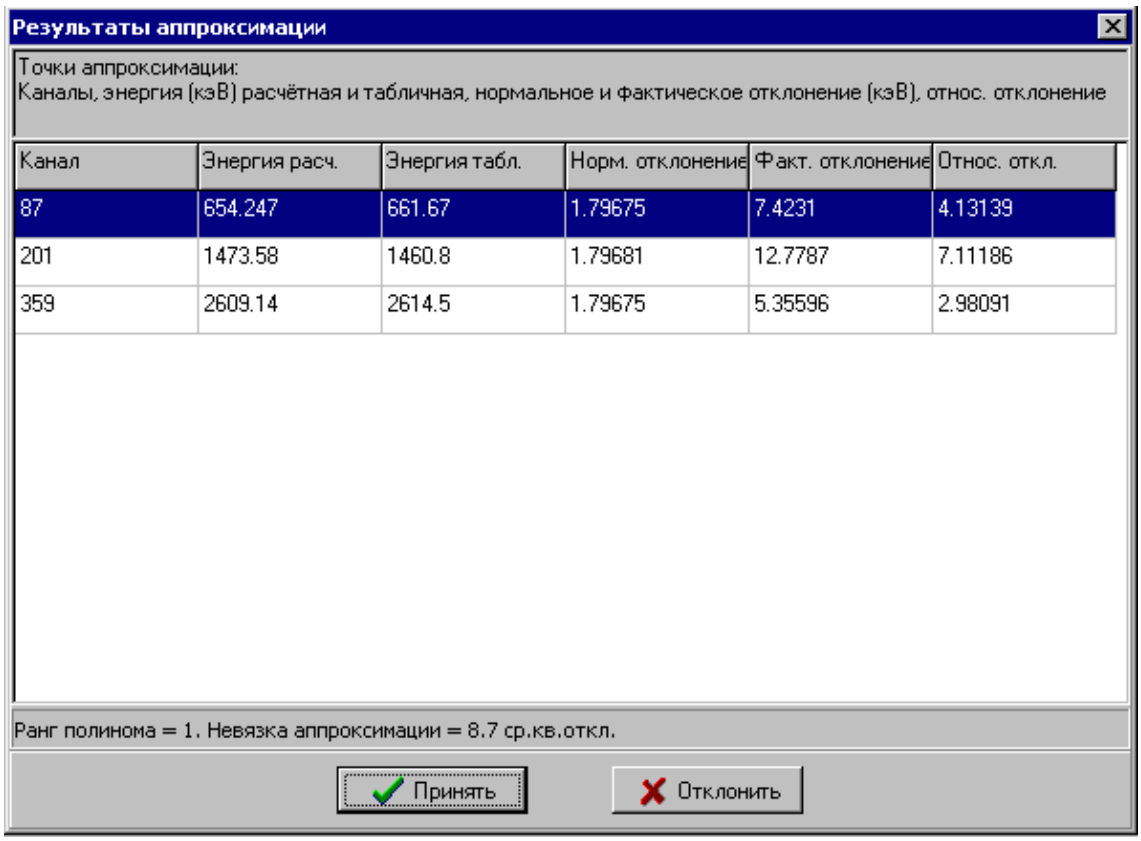


Нуклид	Эмитент	Энергия линии	Квантовый вых	Тип линии	Ном
K-40	K-40	2.958	0.9376	X	0
Cs-137	Ba-137m	4.47	0.97997	X	2
Cs-137	Ba-137m	31.817	1.95436	X	3
Cs-137	Ba-137m	32.194	3.6058	X	5
Cs-137	Ba-137m	36.4	1.31216	X	7
Cs-137	Ba-137m	661.657	85.0261	!	9
K-40	K-40	1460.8	10.67	!	11

В таблице выводятся линии отмеченных оператором нуклидов (отмеченные записи выделяются красной галочкой в первой колонке списка) используемой таблицы нуклидов. Для удобства выбора линии оператор может переключиться в режим отображения только калибровочных линий, нажав на клавишу «***Калибровочные линии***» или значимых линий, нажав на кнопку «***Значимые линии***». Калибровочные линии помечены в колонке «***Тип линии***» восклицательным знаком. Значимые линии помечены в колонке «***Тип линии***» знаком «процент - %» или восклицательным знаком (поскольку значимые линии включают и калибровочные линии).

Нажатие на кнопку «***Ввод***» главной формы процедуры калибровки запускает программу расчёта калибровочного полинома.

В случае если количество используемых для калибровки точек более чем на одну превышает ранг калибровочного полинома, то есть число точек избыточно для расчета коэффициентов полинома, процедура калибровки рассчитывает их методом наименьших квадратов и рассчитывает невязку аппроксимации. При этом на экран выводится форма: с таблицей результатов аппроксимации:



Канал	Энергия расч.	Энергия табл.	Норм. отклонение	Факт. отклонение	Относ. откл.
87	654.247	661.67	1.79675	7.4231	4.13139
201	1473.58	1460.8	1.79681	12.7787	7.11186
359	2609.14	2614.5	1.79675	5.35596	2.98091

Колонка «***Нормальное отклонение***» содержит рассчитанное из погрешности задания положения калибровочных точек допустимое энергетическое отклонение. Погрешность положения, определяемая маркером, полагается равной 0.5 канала. «***Фактическое отклонение***» - отклонение табличного значения энергии от рассчитанного по аппроксимирующему полиному. «***Относительное отклонение***» - фактическое отклонение поделённое на нормальное. Внизу таблицы указывается ранг калибровочного полинома и усреднённая нормированная невязка аппроксимации.

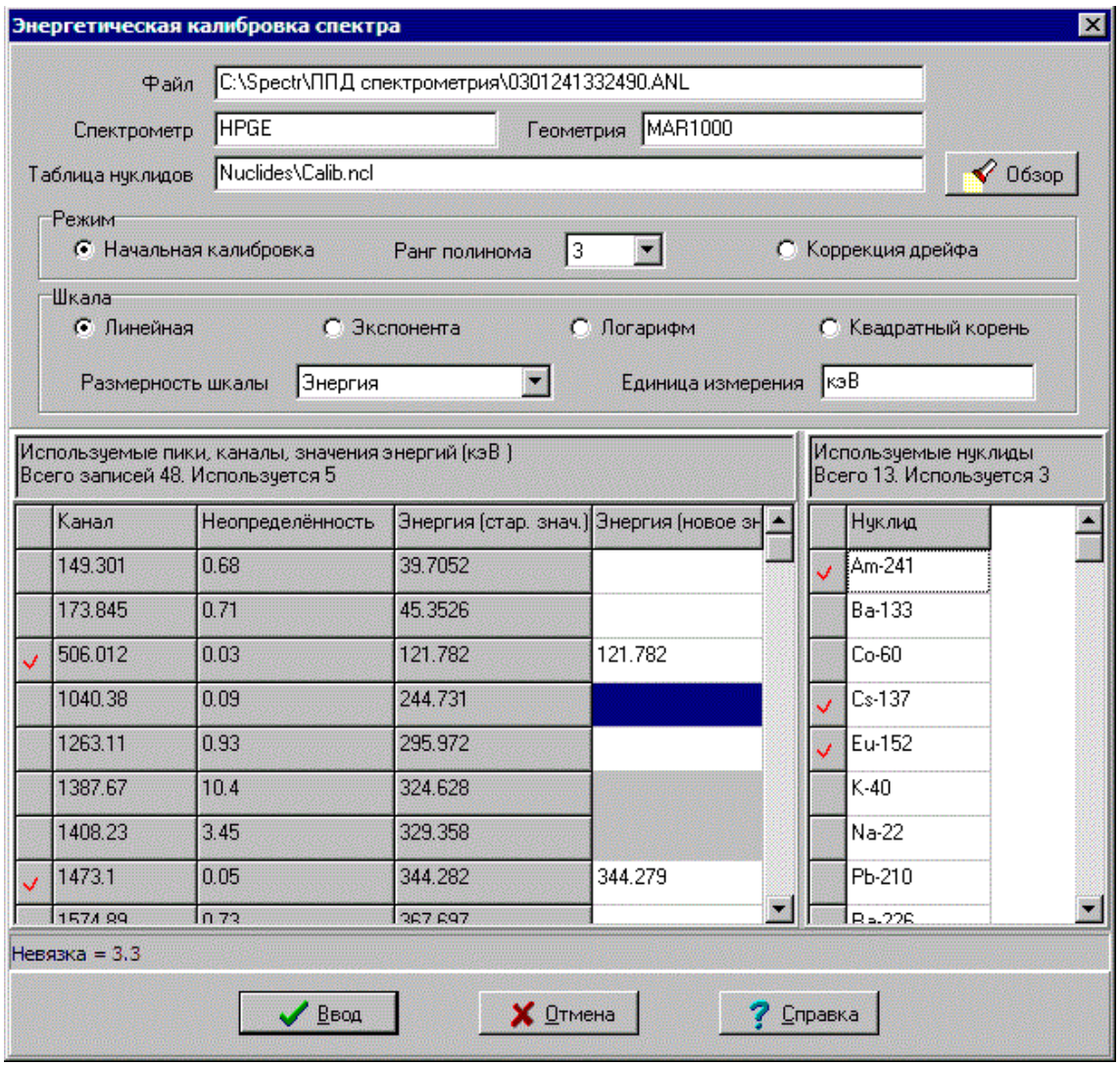
Оператор может принять или отклонить результаты калибровки. При отклонении результатов программа возвращается к форме процедуры калибровки, и оператор имеет возможность поправить калибровочные данные или изменить ранг полинома.

При нажатии на клавишу «***Принять***» программа предложит калибровку, принятую для использованного спектра, сохранить как калибровку спектрометра, что требуется выполнить.

При желании график калибровочной кривой можно посмотреть, выбрав пункт меню «***Калибровка / Энергетическая / Визуализация…***».

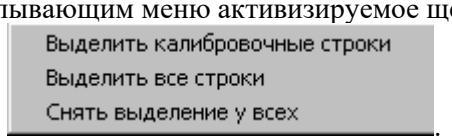
Для плохо разрешённых или непрерывных спектров (сцинтилляционная гамма спектрометрия, бета спектрометрия) энергетическую калибровку спектрометра можно считать завершённой. Для разрешенных линейчатых спектров (ППД гамма спектрометрия) к энергетической калибровке спектрометра придётся ещё не раз возвращаться: более точная калибровка по положениям пиков и ещё более точная – по положениям рассчитанных моделей линий требуют дополнительных калибровок и настроек программы.

Поэтому после калибровки ширины пиков, настройки процедуры поиска пиков и обработки спектра по процедуре «***Поиск пиков***» для разрешённых спектров мы должны вернуться к процедуре энергетической калибровки спектрометра. И если, например, для калибровки гамма спектрометра с охлаждаемым полупроводниковым детектором, мы использовали Eu-152, форма для энергетической калибровки может выглядеть следующим образом:



Для выделения пиков используемых для калибровки, оператор может предварительно пометить их в спектре, но может включить или исключить непосредственно в форме: двойной щелчок по строке с нужной записью в области первых четырёх колонок переключает состояние записи: включённая запись исключается, а не включенная – включается.

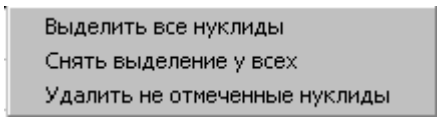
Кроме того, оператор имеет возможность выделить калибровочные пики, пользуясь всплывающим меню активизируемое щелчком правой кнопки мышки:



. Калибровочная строка – строка с минимальной погрешностью положения пика (или калибровочной точки) и значением энергии соответствующей действующей калибровке («***Энергия, старое значение***»), попадающим в диапазон указанный для калибровочной линии таблицы нуклидов.

Предварительно оператор должен, пользуясь клавишей

выбрать требуемую таблицу нуклидов (по умолчанию используется таблица нуклидов заданная при установке геометрии) и выбрать нуклиды в правой таблице формы, присутствующие в калибровочном источнике (эталоне). Выбор нуклидов производится двойным щелчком левой кнопки мышки или вызовом всплывающего меню щелчком правой кнопки мышки:



Затем выбрать режим «***Начальная калибровка***» и установить ***ранг полинома***. Рекомендуется попробовать провести калибровку с минимальным рангом – линейную калибровку, и только в случае неудовлетворительных результатов увеличить ранг калибровочного полинома.

Далее необходимо ввести значения энергий помеченных пиков в килоэлектронвольтах в колонку «***Энергия (новое значение)***». Значения энергий можно подставить из используемой при калибровке таблицы нуклидов.

Нажатие на кнопку «***Ввод***» запускает процедуру расчёта калибровочного полинома и на экран выводится таблица результатов аппроксимации:

Результаты аппроксимации

Точки аппроксимации:
Каналы, энергия (кэВ) расчётная и табличная, нормальное и фактическое отклонение (кэВ), относ. отклонение

Канал	Энергия расч.	Энергия табл.	Норм. отклонение	Факт. отклонение	Относ. откл.
482.811	121.782	121.782	5.72205e-04	2.28882e-04	0.4
1451.85	344.28	344.279	9.46045e-04	1.19019e-03	1.25806
3346.3	778.882	778.905	3.44849e-03	0.0235	6.81416
4154.09	964.082	964.079	3.41797e-03	3.05176e-03	0.89286
4799.8	1112.09	1112.08	4.57764e-03	9.8877e-03	2.16
6091.02	1408.01	1408.01	4.57764e-03	4.15039e-03	0.90667

Ранг полинома = 3. Невязка аппроксимации = 5.2 ср.кв.откл.

Принять Отклонить

Оператор может либо не принять результаты и вернуться к форме энергетической калибровки и поправить данные, либо принять и сохранить как калибровку спектрометра.

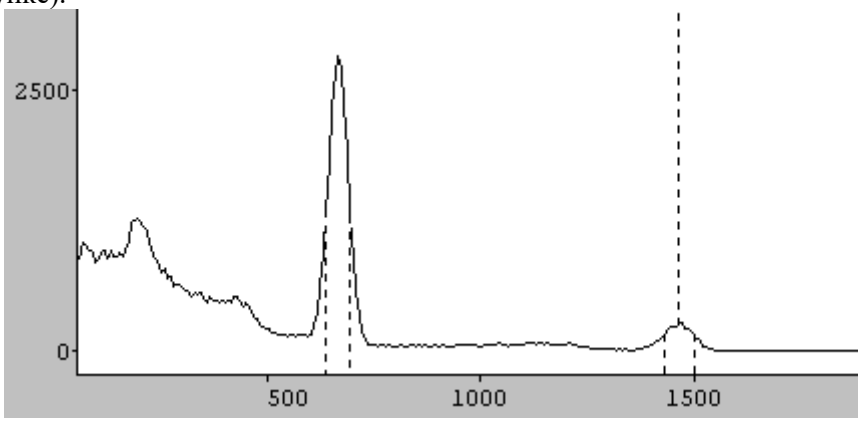
Дальнейшая калибровка спектрометра потребует измерений спектров фона и эталонов. Все измерения требуют предварительной энергетической калибровки спектрометра. Для этих целей служит процедура автоматической энергетической калибровки спектрометра - автокалибровка. Автоматическая калибровка спектрометра упрощает и ускоряет процедуру калибровки.

Для настройки процедуры автокалибровки, прежде всего, необходимо, измерив с хорошей статистикой (по режиму циклических измерений, если требуемое время измерения значительно превышает рабочее ***время измерения***) контрольный источник, который в дальнейшем будет использоваться для автокалибровки, обработать спектр по режиму «***Калибровка / Автокалибровка / Установка...***».

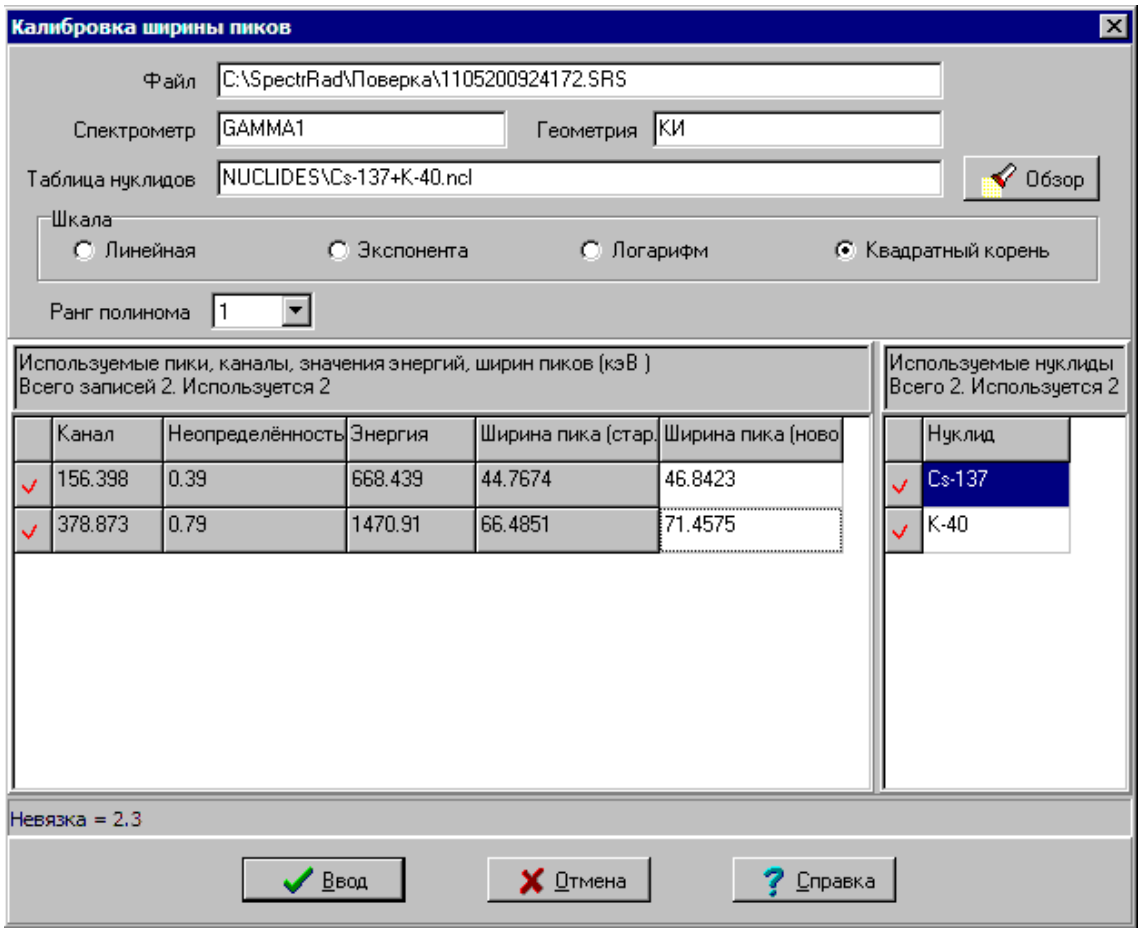
При установке спектр калибровочного источника сохраняется как эталон для последующих калибровок. Рекомендуемый нуклид для автокалибровки сцинтилляционных гамма трактов - Th-232, бета трактов - точечный Sr-90, гамма спектрометров с охлаждаемым ППД детектором - Eu-152.

Калибровка ширины пиков

После энергетической калибровки для гамма или альфа спектрометра, необходимо провести калибровку зависимости ширины пиков формируемых линиями гамма (альфа) излучения от энергии линий. Для этого, измерив калибровочный источник, требуется пометить с помощью подвижного маркера каналы спектра, соответствующие половине высоты пиков слева и справа от вершин одиночных пиков (например, так как на рисунке).



Затем выбрать пункт меню «***Калибровка / Ширины пиков / Ввод..***» и в открывшейся форме,



выбрать в группе параметров «**Шкала**» тип зависимости ширины пиков от энергии (по умолчанию предлагается квадратный корень - $FWHM = \sqrt{\mathrm{Pn(E)}}$) и скорректировав, если необходимо, значения ширины пиков на половине высоты в единицах измерения

энергии («кэВ»), щелкнуть по кнопке «Ввод». На вопрос программы: «***Сохранить как калибровку спектрометра ?***», ответить «Да».

При желании график калибровочной кривой можно посмотреть, выбрав пункт меню «***Калибровка/ Ширины пиков/ Визуализация***». В случае если установлен энергетический масштаб шкалы абсцисс, ширина пиков также выводится в единицах энергий, если шкала «X» выводится в каналах, ширина пиков будет представлена также в каналах.

При обработке линейчатых спектров без поиска пиков (сцинтилляционная спектрометрия) калибровка ширины пиков используется для автоматической генерации спектров нуклидов отсутствующих в списке нуклидов, для которых элементарные спектры рассчитаны из спектров эталонов (см. «Создание шаблона декомпозиции»).

При обработке линейчатых спектров с поиском пиков калибровка ширины пиков используется практически на всех этапах обработки. Поиск пиков в спектре невозможен без предварительной калибровки ширины пиков, в то же время наиболее точная калибровка ширины пиков возможна только после проведения процедуры поиска пиков. Поэтому для линейчатых спектров, после начальной калибровки ширины пиков и задания параметров поиска пиков, необходимо повторить процедуру калибровки, обработав калибровочный спектр по режиму «***Обработка / Поиск пиков / Поиск***». При калибровке ширины пиков обработанного таким образом спектра данные берутся из файла результатов обработки.

Оператор может пометить пики, которые будут использоваться при калибровке маркерами, причём достаточно одного маркера в области пика, а не двух как при начальной калибровке, поскольку в данном случае оператор просто указывает маркером на пик, а не задаёт с помощью маркеров ширину пика. Можно и не указывать пики маркерами, поскольку такая возможность есть и форме для калибровки ширины пиков. Форма, при калибровке, например по Eu-152, в этом случае может выглядеть следующим образом:

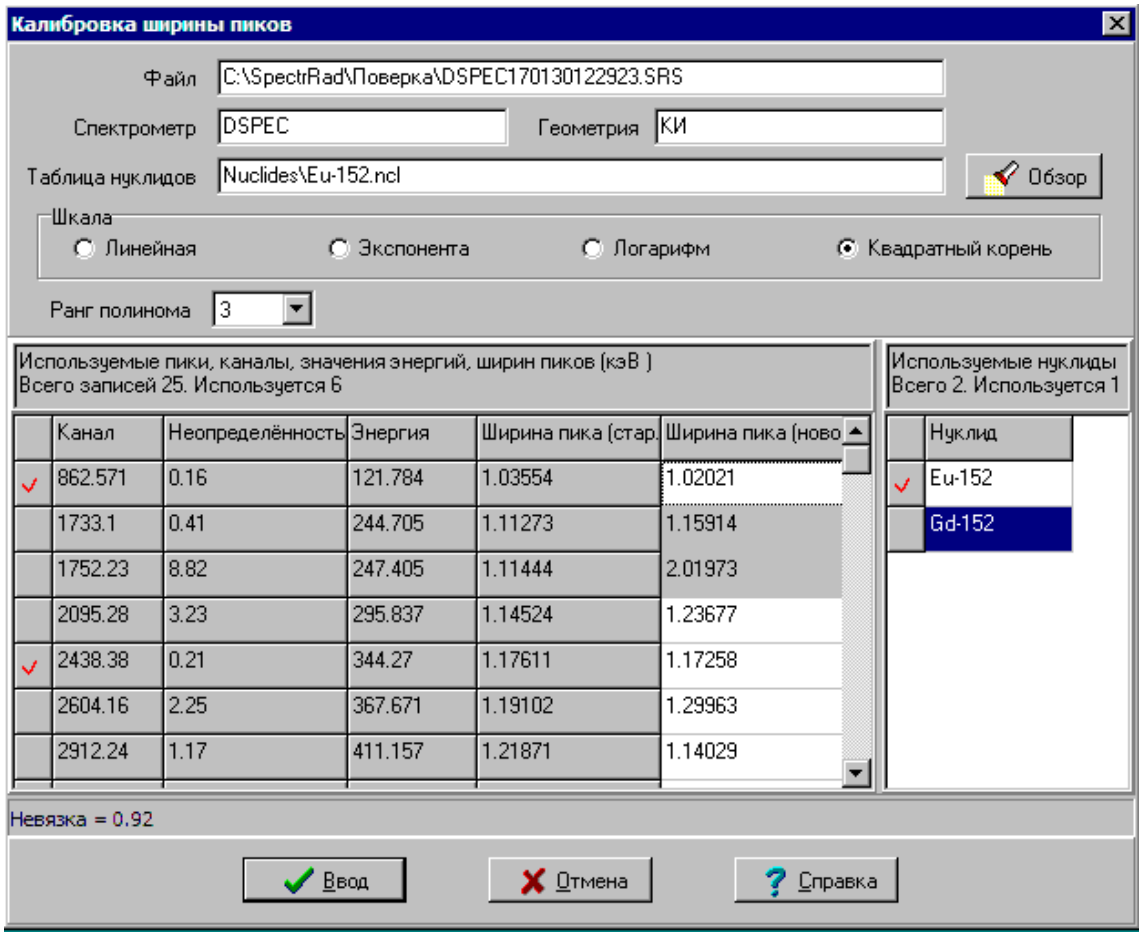
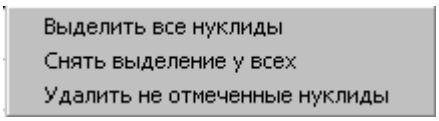
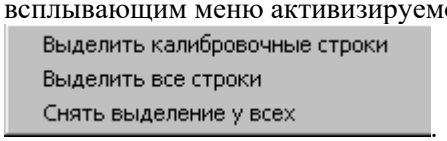


Таблица нуклидов, используемая при калибровке, требуется для выделения калибровочных пиков. Предварительно оператор может, пользуясь клавишей Обзор выбрать нужную таблицу нуклидов (по умолчанию используется таблица нуклидов заданная при установке геометрии) и указать нуклиды (в правой таблице формы), присутствующие в калибровочном источнике (эталоне). Выбор нуклидов производится двойным щелчком левой кнопки мышки или вызовом всплывающего меню щелчком правой кнопки мышки:



Затем выделить калибровочные пики, пользуясь всплывающим меню активизируемое щелчком правой кнопки мышки:



. Калибровочная строка – строка с минимальной погрешностью ширины пика и значением энергии, попадающим в диапазон указанный для калибровочной линии таблицы нуклидов.

“***Ранг полинома”*** (может принимать значения от 1 до 3) вместе с числом используемых для калибровки точек определяет ранг калибровочного полинома. В том случае если число точек равно или меньше заданного ранга, ранг калибровочного полинома будет на единицу меньше числа калибровочных точек. Рекомендуется использовать для калибровки минимальный ранг и только в случае неудовлетворительных результатов калибровки попробовать увеличить ранг полинома.

Ширины пиков для разрешённых линейчатых спектров берутся из файла результатов обработки, если он существует. Если такой файл не существует, ширина пиков вычисляется как разность энергий помеченных каналов, а положение пика - как среднее энергий левого и правого помеченного канала. Оператор может, если необходимо, скорректировать значения ширины пиков.

Нажатие на кнопку «***Ввод***» запускает процедуру расчёта калибровочного полинома и на экран выводится таблица результатов аппроксимации:

Результаты аппроксимации

Точки аппроксимации:
Энергия (кэВ), расчётная и фактическая ширина пиков (кэВ), нормальное и фактическое отклонение (кэВ), относ. отклонение

Энергия	Ширина пика расч	Ширина пика факт	Норм. отклонение	Факт. отклонение	Относ. откл.
121.78	0.99549	0.99807	4.58867e-03	2.58261e-03	0.56282
244.74	1.17874	1.14163	0.0161	0.0371	2.31086
778.839	1.76639	1.71335	0.0275	0.053	1.92648
964.075	1.92883	1.96914	0.0298	0.0403	1.35159
1112.18	2.04946	2.11044	0.0344	0.061	1.77185

Ранг полинома = 1. Невязка аппроксимации = 2.2 ср.кв.откл.

Принять Отклонить

Оператор может либо не принять результаты и вернуться к форме калибровки ширины пиков и поправить данные, либо принять и сохранить как калибровку спектрометра.

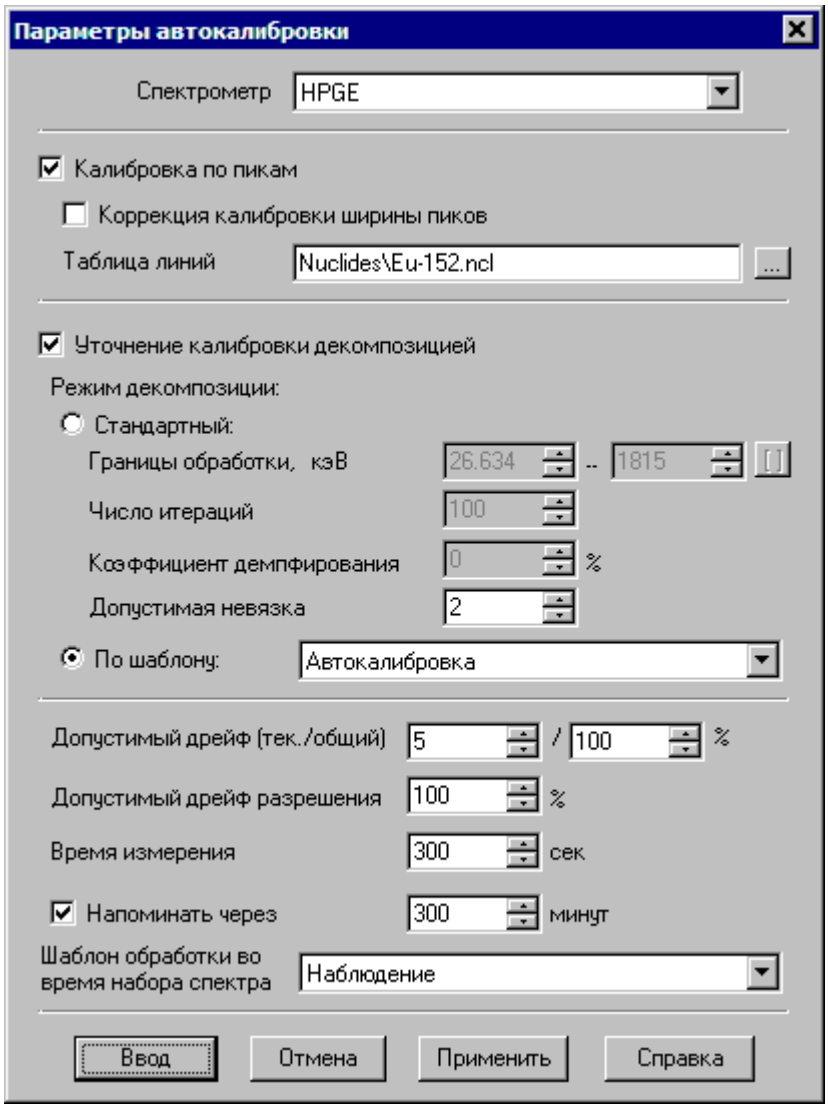
Калибровка по ширинам пиков, рассчитанным процедурой обработки пиков, значительно точнее, чем ручная калибровка оператором, но и она содержит существенный недостаток – используемый для калибровки пик может формироваться несколькими близкими линиями (являться скрытым мультиплетом) и, соответственно, быть шире пика, формируемого одиночной линией. Поэтому завершающий этап калибровки ширины пиков производится в процедуре расчёта моделей пиков. Процедура расчёта моделей пиков рассчитывает отклик именно на одну линию излучения, вычитая все возможные интерференции, и калибровка по моделям пиков свободна от указанного недостатка.

Установка параметров автокалибровки

Процедура «**автокалибровки**» служит для автоматической энергетической калибровки спектрометра по контрольному источнику и поверки спектрометра. В зависимости от настройки она либо сравнивает спектр, измеренный от контрольного источника, с таким же спектром, измеренным при установке спектрометра, либо проводит обработку спектра, определяя активности нуклидов контрольного источника, и по результатам обработки корректирует энергетическую калибровку спектрометра и оценивает его работоспособность, разрешая или запрещая проведение рабочих измерений.

Перед первым запуском процедуры автокалибровки оператор должен установить параметры автокалибровки. Пункт меню «***Калибровка / Автокалибровка / Настройка...***», вызывает процедуру установки параметров автоматической энергетической калибровки спектрометра. Оператору необходимо заполнить графы

таблицы «**Параметры автокалибровки**». Для спектрометров с линейчатым типом спектров таблица параметров может иметь вид:



При автокалибровке спектрометрических трактов регистрирующих спектры, имеющие линейчатый характер (альфа и гамма излучение), оператор может выбрать два режима автокалибровки: **калибровка по пикам** и (или) **уточнение калибровки декомпозицией**.

Процедура калибровки по пикам производит поиск пиков в спектре контрольного источника (предварительно должны быть установлены параметры процедуры поиска пиков и проведена калибровка ширины пиков) и присваивает медианам выбранных пиков спектра энергии калибровочных линий из заданной ***таблицы линий.*** Таблица должна содержать линии, помеченные как ***калибровочные***, которые соответствуют пикам спектра, используемым при калибровке спектрометра. Процедура калибровки для каждой линии в таблице ищет в заданных границах (E_{lin}-DE < E< E_{lin}+DE) наиболее мощный пик спектра и присваивает ему заданную энергию E_{lin}.

При калибровке по пикам оператор может задать и режим **коррекции калибровки ширины пиков**, установив соответствующий флажок.

Процедура уточнения энергетической калибровки декомпозицией определяет параметры энергетического дрейфа спектрометра разложением спектра на спектры с известной энергетической калибровкой и оценкой смещения параметров энергетической

калибровки относительно соответствующих параметров спектров компонентов. При этом оператор должен выбрать ***режим декомпозиции*** и установить ряд параметров:

- ***Стандартный*** - упрощенный режим автокалибровки не учитывающий изменение фона и распад контрольного источника. Измеренный спектр при стандартном режиме сравнивается со спектром калибровочного источника. При установке спектрометра (еще не установлены геометрии измерений, не измерен фон) доступен только «***стандартный***» режим. При этом надо установить следующие параметры:
  - ***Границы обработки*** - границы области спектра, которые будут использоваться при автокалибровке. «Кнопка» [ ] служит для подстановки положений маркеров в качестве границ обработки. Рекомендуется использовать весь энергетический диапазон за исключением областей начала и окончания спектра, которые вследствие дрейфа спектрометра могут выйти из области набора спектра.
  - ***Число итераций*** - число повторений процедуры уточнения параметров дрейфа. Ограничение числа итераций имеет смысл только для компьютеров с небольшим быстродействием.
  - ***Коэффициент демпфирования*** - константа (задаётся в процентах), повышающая устойчивость процедуры автокалибровки. Имеет смысл, если процесс решения имеет колебательный характер, что может быть при плохой обусловленности системы (слабое изменение формы спектра при больших изменениях параметров дрейфа или почти идентичное изменение формы спектров при изменениях различных параметров).
- ***По шаблону*** - режим автокалибровки, при котором обработка спектра калибровочного источника производится по созданному пользователем шаблону декомпозиции (см. п. «***Создание шаблона декомпозиции***»). При этом учитывается изменение фона и распад контрольного источника за время эксплуатации. Параметры обработки в этом случае задаются в параметрах шаблона декомпозиции. По окончанию настройки спектрометра (установки геометрий, измерения эталонов) рекомендуется создать шаблон для автокалибровки и установить соответствующий режим автокалибровки.

Последняя группа параметров является общей для обоих видов калибровки (калибровки по пикам и ***стандартного*** режима калибровки декомпозицией):

- ***Допустимая невязка*** - максимально допустимый уровень отношения реального расхождения спектров к теоретическому (нормированное среднеквадратичное отклонение $G = \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / G_i^2)/(n-m)}$). Рекомендуемая величина - от 1.5 до 2.0.
- ***Допустимый дрейф (тек./общий)*** - максимально допустимый уровень суммарного энергетического дрейфа коэффициента усиления и нуля шкалы спектрометра в процентах. ***Текущий дрейф*** – дрейф спектрометра за время прошедшее с предыдущей калибровки (автокалибровки). Рекомендуемая величина - удвоенное разрешение спектрометра (от 15% до 30% для сцинтилляционных детекторов). ***Общий дрейф*** - дрейф спектрометра за время прошедшее с начальной калибровки спектрометра. При общем дрейфе спектрометра, превышающем заданный уровень, измерения в режиме ограниченного доступа будут запрещены.
- ***Время измерения*** - рабочее время измерения контрольного источника при проведении автокалибровок. Время измерения должно обеспечивать набор в рабочем диапазоне спектра в среднем не менее 50 импульсов на канал.
- ***Напоминать через n минут*** - флажок и поле для ввода значения продолжительности интервала, по истечении которого программа будет требовать провести автокалибровку спектрометра (при условии, что флажок установлен).

- ***Шаблон обработки во время набора спектра*** – оператор имеет возможность выбрать из выпадающего списка шаблон декомпозиции, который будет использоваться при обработке спектра в процессе набора спектра.

Для спектрометров с непрерывным типом регистрируемых спектров (бета излучение) доступен только один вид калибровки – **уточнение калибровки декомпозицией.**

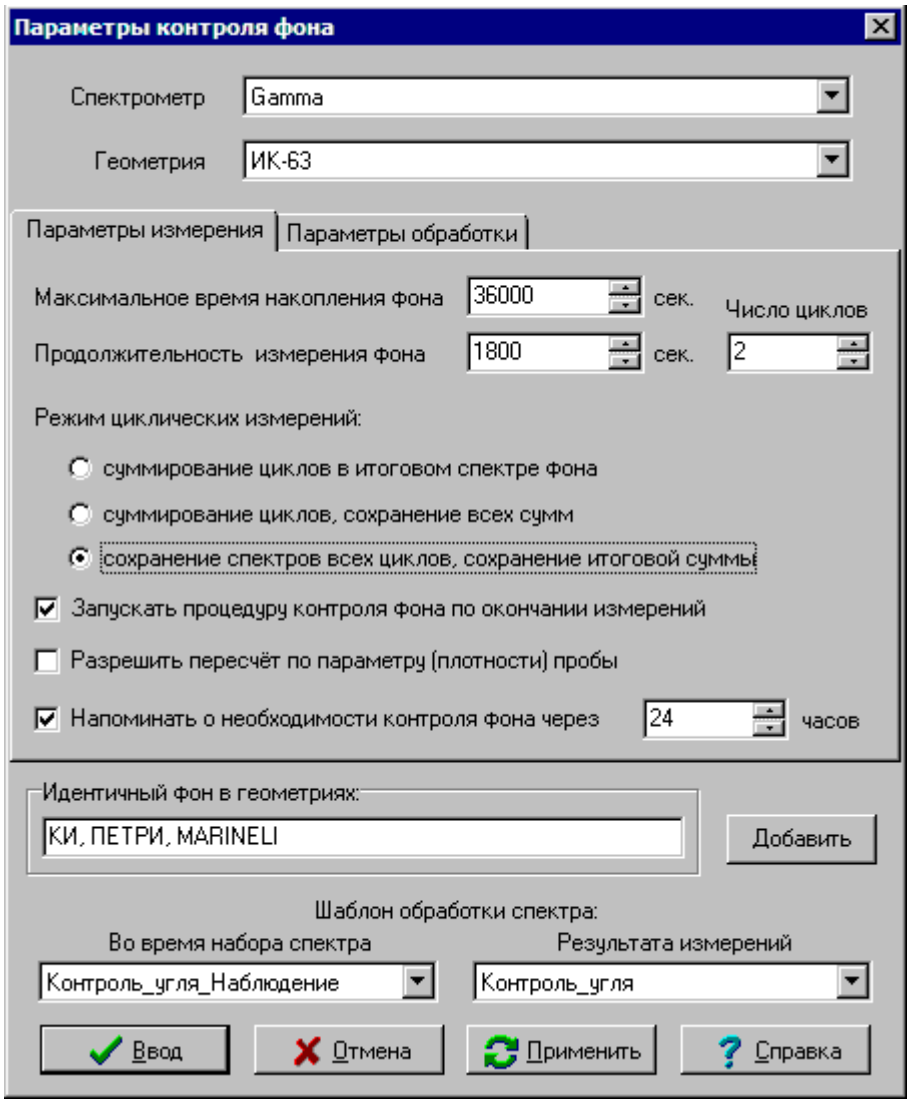
В том случае если отмечены оба вида калибровки, первой выполняется калибровка по пикам и затем производится уточнение параметров энергетической калибровки декомпозицией.

Процедура уточнения калибровки декомпозицией, кроме задачи уточнения энергетической калибровки проводит поверку спектрометра, определяя ряд параметров спектрометра (стабильность формы линий, эффективности регистрации), крайне важных для контроля качества спектрометрии и оценки работоспособности спектрометра.

Установка спектра фона в программу обработки

Спектр фона – спектр излучения, регистрируемый детектором от всех источников кроме пробы: космическое излучение, излучение от земли, материалов здания, конструкционных материалов детектора и т.д. и т.п. Измеренный спектр является суммой спектров излучения от пробы и спектра фона. Спектр фона программа обработки вычитает из измеренного спектра. Поэтому требуется измерить и установить в программу спектр фона.

Предварительно, выбрав пункт меню «***Калибровка / Фон / Настройка...***», необходимо установить параметры процедуры измерения и контроля фона спектрометра для выбранной геометрии измерений. Таблица параметров контроля фона может иметь вид:



В верхней части формы два выпадающих списка для выбора спектрометра и геометрии измерений (процедура контроля фона может быть различной для разных геометрий).

В нижней части строка со списком геометрий, фон в которых, в пределах требуемой точности, можно считать одинаковым: «***Идентичный фон в геометриях:***». В общем случае, вследствие экранирования детектора веществом пробы, наличия радионуклидов в сосудах для измерения, фон зависит от геометрии. Но эти различия могут быть пренебрежимо малы в сравнении со статистическими флуктуациями фона, и указание идентичности фона позволяет (при контроле фона) не измерять фон для каждой

геометрии, а, измерив только для одной из списка, провести операцию контроля фона (смешивание или замену фона) для всех геометрий из списка. Кнопка Добавить добавляет выбранную геометрию в список.

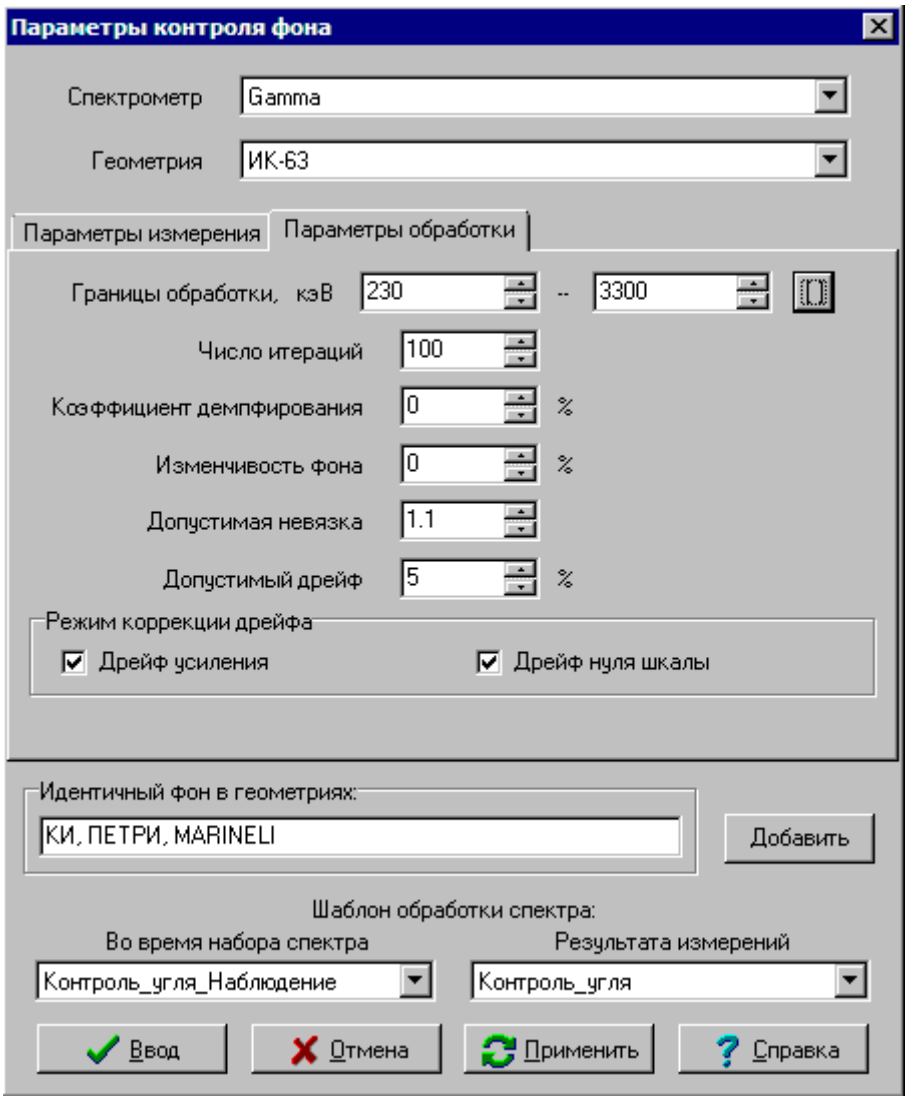
Два выпадающих списка «***Шаблон обработки спектра:*** « позволяют задать процедуру обработки спектра ***во время набора спектра*** и ***результата измерений*** спектра фона. Шаблон обработки во время набора спектра служит для наблюдения за процессом набора. По завершении измерений спектра фона запускается процедура обработки «***контроль фона***». Процедура «***контроль фона***» производит сравнение измеренного спектра фона с рабочим спектром фона (сформированным ранее), если он существует, и по результатам сравнения предлагает оператору либо смешать измеренный спектр с существующим, либо заменить рабочий спектр фона на вновь измеренный. Обработка спектра по ***шаблону обработки результата измерений***, если шаблон задан, запускается до выполнения процедуры «***контроль фона***» и служит для оценки дополнительных параметров, не учитываемых в стандартной процедуре «***контроль фона***» (например количество остаточного радона в активированном угле при измерениях потоков радона).

Центральная часть формы содержит две страницы: «***Параметры измерения***» и «***Параметры обработки***».

На первой странице оператор должен задать параметры измерения спектра фона:

- ***Максимальное время накопления фона*** - время, до достижения которого измеренный ранее спектр фона может суммироваться с вновь измеренным, а по превышении - смешиваться в пропорции определяемой отношением времени измерения к максимальному времени накопления фона.
- ***Продолжительность измерения фона*** и ***число циклов*** определяют рабочее время измерения фоновой пробы при проведении контроля фона. Рекомендуемое время измерения должно обеспечивать набор в рабочем диапазоне спектра в среднем не менее 5 импульсов на канал (для альфа радиометрии можно ограничиться требованием – не менее 16 импульсов в рабочем диапазоне). В случае если число циклов больше единицы, измерения фона будут проводиться в циклическом режиме. В этом случае оператор должен выбрать режим циклических измерений:
  - ***Суммирование циклов в итоговом спектре фона*** – результаты измерений в отдельных циклах будут сложены в итоговом спектре фона.
  - ***Суммирование циклов, сохранение всех сумм*** – все суммы спектров, полученные по завершению каждого цикла, будут сохранены в отдельных файлах архива измерений.
  - ***Сохранение всех циклов, сохранение итоговой суммы*** – спектры фона, измеренные в отдельных циклах, будут сохранены в отдельных файлах архива измерений. Дополнительно будет сохраняться и спектр суммы циклов.
- ***Запускать процедуру контроля фона по окончании измерений*** – процедура контроля фона по завершении измерений запускаться не будет, если флажок не установлен. В этом случае процедуру контроля фона оператор должен будет запустить самостоятельно из архива измерений по окончании измерений.
- ***Разрешить пересчёт на плотность фоновой пробы*** - флажок разрешающий (при установке) режим включения вновь измеренного спектра в качестве отдельного файла для расчёта спектра фона путем интерполяции или усреднения по нескольким спектрам, имеющим различные геометрические параметры (плотности) фоновых проб.
- ***Напоминать о необходимости контроля фона через n часов*** - флажок и поле для ввода значения продолжительности интервала, по истечении которого программа будет требовать провести измерения спектра фона (при условии, что флажок установлен).

На странице «***Параметры обработки***» оператор должен задать параметры процедуры сравнения рабочего и измеренного спектров - процедуры «***контроль фона***»:



- ***Границы обработки*** - левая и правая энергетические границы обработки спектра фона. «Кнопка» [ ] служит для подстановки положений маркеров в качестве границ обработки.
- ***Число итераций*** - максимально разрешенное количество итераций для уточнения оценок. Ограничение итераций имеет смысл для компьютеров с небольшим быстродействием.
- ***Коэффициент демпфирования*** - константа (задаётся в процентах), повышающая устойчивость процедуры коррекции дрейфа. Имеет смысл, если процесс решения имеет колебательный характер, что может быть при плохой обусловленности системы (слабое изменение формы спектра при больших изменениях параметров дрейфа или почти идентичное изменение формы спектров при изменениях различных параметров дрейфа).
- ***Изменчивость фона*** - величина, характеризующая нестабильность фона в детекторе. Полагается, что изменения фона обусловлены статистическими флуктуациями (Пуассоновская статистика) плюс дополнительная ***изменчивость фона*** (задаётся в процентах) обусловленная, например, нестабильностью концентрации радона в области детектора или колебаниями космической составляющей фона.

- ***Допустимая невязка*** (максимально допустимое значение невязки) и ***допустимый дрейф*** (максимально допустимое значение энергетического дрейфа) - параметры сравнения, при превышении которых процедура сравнения двух спектров (нового и старого фона) будет считаться неудавшейся (новый и старый фон существенно отличаются друг от друга).
- ***Режим коррекции дрейфа: дрейф усиления и дрейф нуля шкалы*** - флажки разрешающие (при установке) или запрещающие (при удалении) коррекцию соответствующих параметров энергетического дрейфа спектрометра при проведении процедуры контроля фона.

Затем требуется произвести автокалибровку спектрометра (измерить и обработать контрольный источник по процедуре «***Калибровка / Автокалибровка / Пуск автокалибровки…***» - кнопка). Далее провести измерения фоновой пробы в выбранной геометрии продолжительностью не менее времени измерения рабочих проб (кнопка ФОН, пункт меню «***Калибровка / Фон / Контроль фона...***»).

По окончании измерений, или по запуску процедуры контроля фона из архива измерений оператором (в случае циклических измерений с сохранением каждого цикла), программа производит сравнение ранее накопленного спектра фона с вновь измеренным по процедуре ***контроля фона*** с заданными оператором параметрами и, в зависимости от результатов сравнения, предлагает оператору либо заменить спектр фона на новый, либо смешать со старым, или установить в виде отдельного файла. Если ранее установленного спектра не существует, программа предлагает установить измеренный спектр в качестве спектра фона. Систематическое превышение допустимых параметров (дрейф и невязка) и, соответственно, запрет смешивания фона свидетельствует либо о некорректных установках параметров, либо о неудовлетворительной работе спектрометра (нестабильный фон или электронный шум тракта, большой дрейф). Некоторые виды измерений требуют установки нового спектра фона для определённой группы измерений (измерения радона на активированном угле или активационный анализ и т.п.).

Калибровка эффективности регистрации

Обработка спектров, полученных при измерениях проб на спектрометре с установленным в параметрах спектрометра **линейчатым типом спектров,** производится с предварительным вычитанием из спектра пробы непрерывного спектра, на котором находятся резонансные участки спектра - пики. Разложение спектра на компоненты (декомпозиция) проводится для спектра пиков. Для гамма спектров, при обработке которых, как правило, и используется данный метод, фотоны какой-то определённой энергии формируют в спектре ряд пиков. Например, фотоны с энергией превышающей 1022 кэВ могут сформировать в спектре более четырёх пиков: пик полного поглощения с энергией соответствующей энергии фотонов, пик вылета (утечки) с энергией на 511 кэВ меньше, пик двойного вылета с энергией на 1022 кэВ меньше энергии пика полного поглощения, аннигиляционный пик с энергией равной 511кэВ и пики сложения каскадных переходов.

В программном пакете «SPECTRRAD» можно рассчитать четыре функции эффективности регистрации квантов: эффективность регистрации квантов определённой энергии в пиках полного поглощения **Eff(e)=S(e)/Q(e)**, полную эффективность регистрации **EffTot(e) = STot(e)/Q(e)**, эффективность регистрации в пиках одиночного вылета **EffEsc1(e-511)=Sesc1(e-511)/Q(e)** и пиках двойного вылета **EffEsc2(e-1022)=Sesc2(e-1022)/Q(e)**. Здесь: **e** - энергия линии, **S(e), STot(e), Sesc1(e-511), Sesc2(e-1022)** - соответственно: площадь пика полного поглощения, полная площадь спектра, площади пиков утечки одиночного и двойного вылета, соответствующие количеству квантов излучения **Q(e)** данной энергии.

Функция полной эффективности регистрации требуется для корректного расчёта эффектов связанных с регистрацией каскадных переходов. Эффективность регистрации в

пиках утечки требуется поскольку эффект образования пар, который и приводит к появлению пиков утечки, происходит не только материале пробы, но и в конструкционных материалах детектора. И корректный расчёт влияния данного эффекта, без калибровки эффективности регистрации в пиках утечки, потребовал бы знания и материалов и конструкции детектора, что на практике не всегда известно.

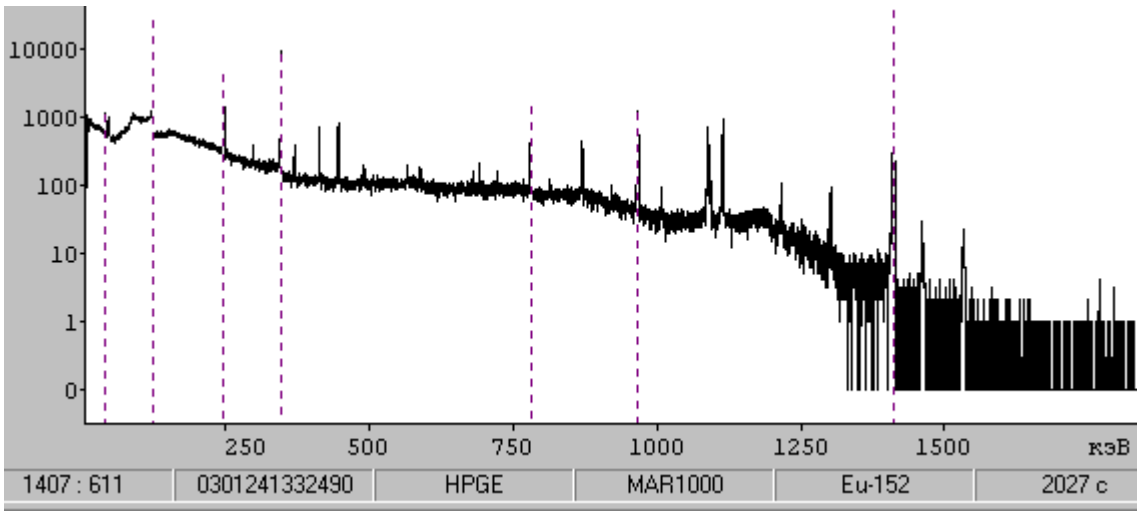
Программа расчёта функций эффективности регистрации учитывает эффекты, связанные с регистрацией каскадных переходов. Информация о каскадных переходах должна присутствовать в рабочей таблице нуклидов.

Существует два наиболее распространённых метода расчёта функций эффективности регистрации: расчёт по эталонам с геометрией соответствующей геометрии измерений и расчёт по геометрии точечного источника. Второй метод доступен, если функции эффективности регистрации для точечного источника рассчитаны по первому методу и рассчитана функция глубины детектора. Существенный недостаток расчёта функций эффективности регистрации по эталонам с геометрией соответствующей геометрии измерений состоит в том, что набор эталонов требуется для каждой геометрии. Нижеследующий текст относится к расчёту функций эффективности регистрации по эталонам с геометрией соответствующей геометрии измерений. Расчёт по функциям эффективности регистрации для точечных источников приведён в главе «**Установка геометрии измерений /Калибровка эффективности регистрации**».

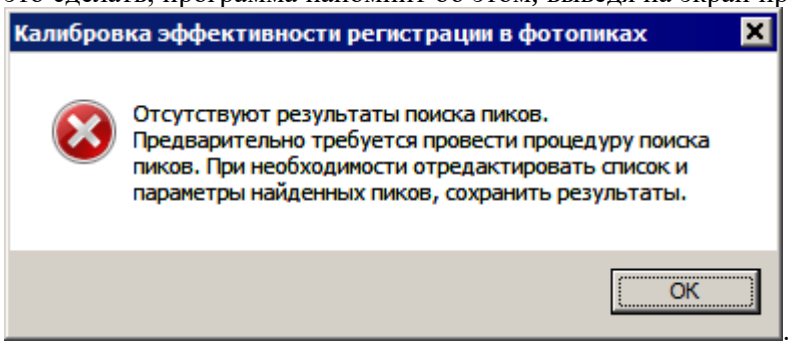
Эффективность регистрации зависит и от геометрических параметров счётного образца или геометрии измерений и от поглощения излучения в веществе пробы. Поглощение излучения в веществе пробы зависит от плотности счётного образца (для геометрий измерений в «тонком» и промежуточных слоях) и от заряда ядра элементов пробы (Z). Один из геометрических параметров геометрии или плотность вещества счётного образца можно использовать как **параметры интерполяции**, определяемые при установке геометрии измерений. Учёт эффектов, связанных с поглощением излучения в веществе пробы в зависимости от плотности пробы, рассчитывается по формулам поглощения излучения, в том случае если плотность пробы не определена как **параметр интерполяции**. Для корректной оценки эффективности регистрации, соответствующей параметру интерполяции измеренного спектра рабочей пробы, калибровку эффективности регистрации необходимо провести несколько раз с использованием эталонов с различными значениями **параметра интерполяции**.

Вначале производится калибровка эффективности регистрации в пиках полного поглощения. Предварительно требуется произвести автокалибровку спектрометра и установить параметры процедуры поиска пиков. Затем измерить образцовую меру активности нуклида или смеси нуклидов (эталон), имеющую достаточное количество пиков в рабочем диапазоне энергий, в заданной геометрии в течение времени достаточного для набора в пиках, которые будут использоваться для калибровки, не менее 1000 импульсов, по режиму циклических измерений с продолжительностью цикла равным среднему времени измерения рабочей пробы. Для диапазона от 30 до 1500 кэВ обычно используют смесь Am-241 с Eu-152.

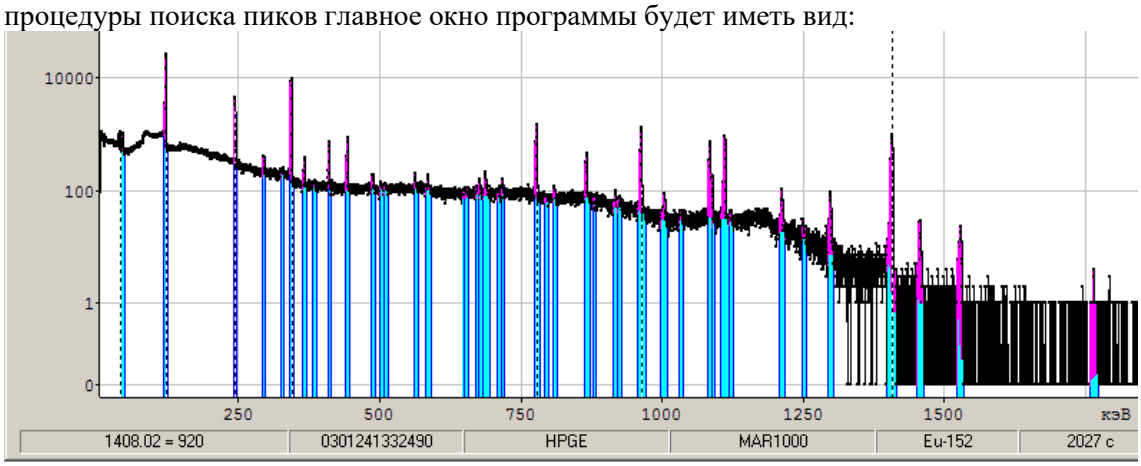
В качестве примера построения таблицы эффективности регистрации, используем спектр Eu-152. Предварительно пометим маркерами пики, которые будут использоваться для калибровки. Спектр, в этом случае может иметь вид:



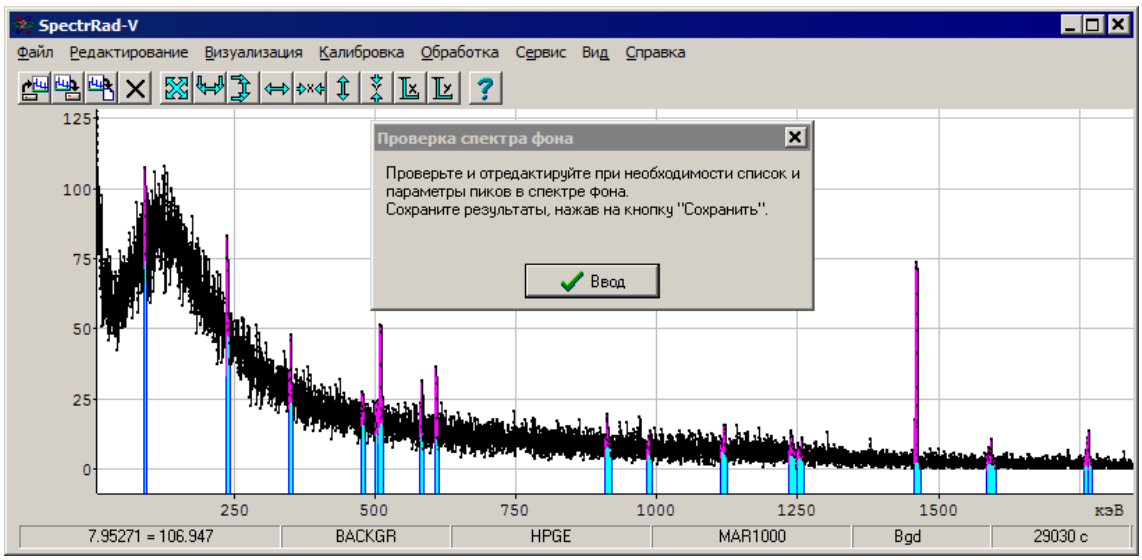
Обработаем измеренный спектр по режиму «***Калибровка / Эффективности регистрации квантов / в фотопиках...***». Для расчёта таблицы эффективности регистрации гамма квантов в пиках, необходимо предварительно провести процедуру поиска пиков в спектре (п. меню «***Обработка/ Поиск пиков/ Поиск***»). Если мы забыли это сделать, программа напомнит об этом, выведя на экран предупреждающее сообщение



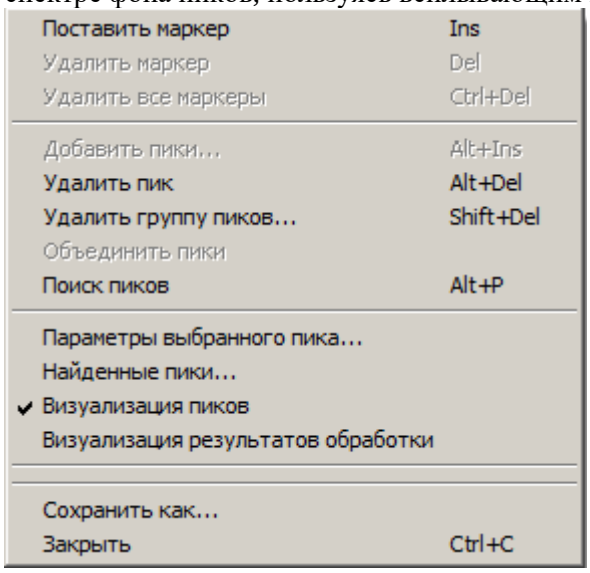
. После выполнения процедуры поиска пиков главное окно программы будет иметь вид:



Если процедура поиска пиков в спектре произведена, вызов процедуры калибровки эффективности регистрации в фотопиках откроет два дополнительных окна: диалоговое окно «**Проверка спектра фона**» и окно программы **SpectrRad-V** со спектром фона, используемом при расчёте таблицы эффективности регистрации.

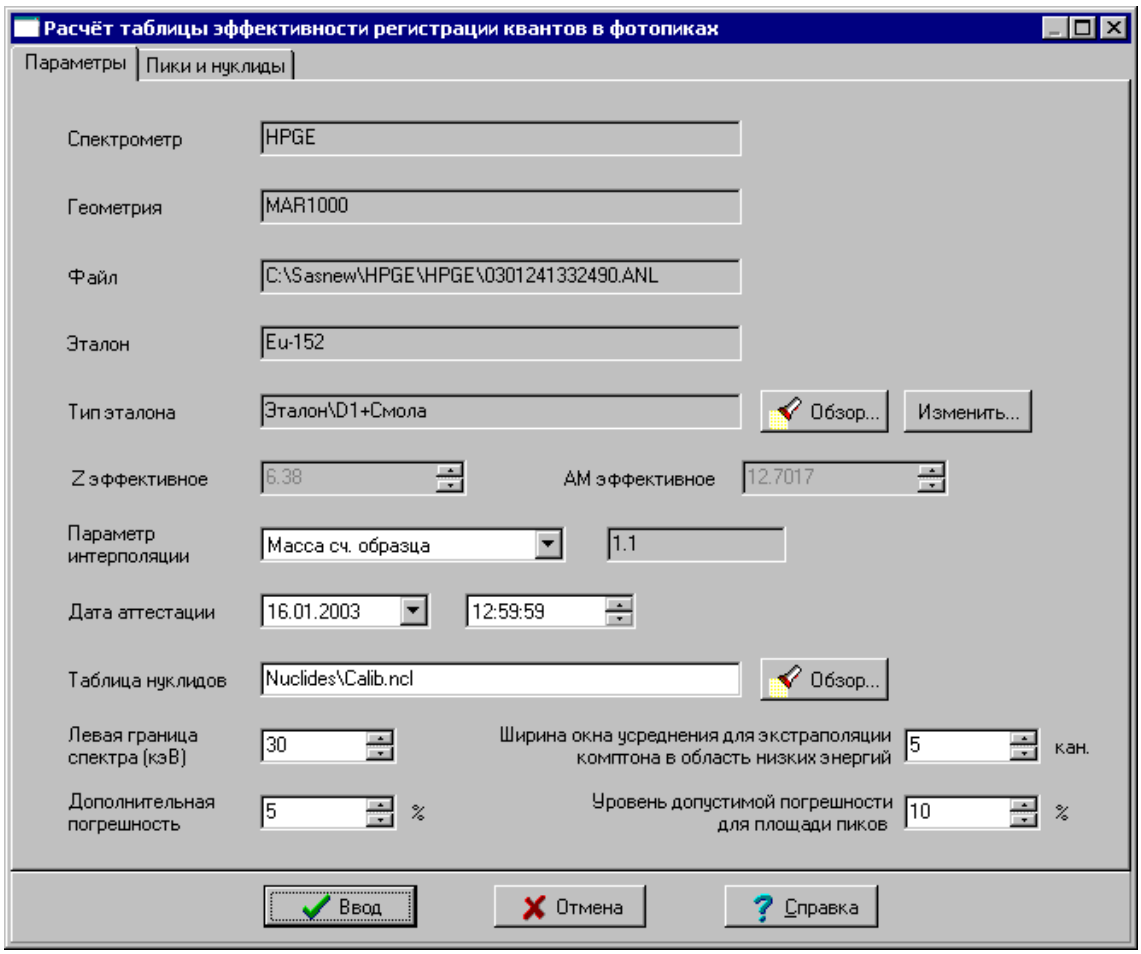


Оператор может при необходимости отредактировать список и параметры найденных в спектре фона пиков, пользуясь всплывающим меню:



Диалоговое окно можно закрыть только после закрытия окна **SpectrRad-V**. Если список или параметры пиков изменены, предварительно их надо сохранить, нажав на кнопку «**Сохранить**» в окне программы **SpectrRad-V**.

После этого на экран выводится форма программы расчёта таблицы эффективности регистрации. Форма имеет две страницы. Первая страница «**Параметры**» может иметь следующий вид:



Оператор должен выбрать из предложенного списка или задать:

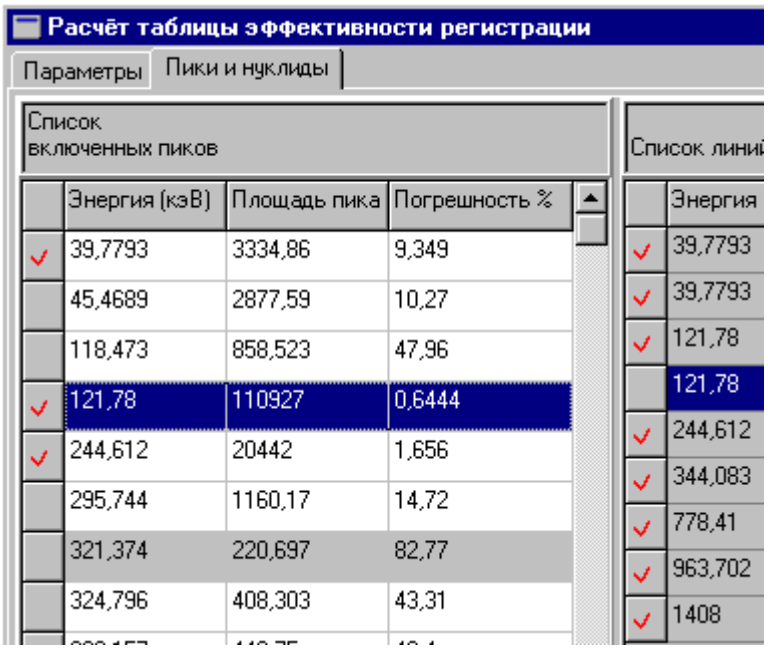
- **Параметр интерполяции** – параметр, в соответствии со значением которого, будет рассчитываться функция эффективности регистрации для конкретной пробы при расчёте эффективности регистрации из нескольких таблиц эффективности регистрации с различными значениями параметра интерполяции. Параметром интерполяции может быть масса или плотность пробы, заданный при установке геометрии геометрический параметр (расстояние пробы от детектора, высота насыпки и т.п.).
- **Дату аттестации** измеренного эталона (образцовой меры активности).
- Выбрать **таблицу нуклидов**, содержащую сведения о нуклидах эталона. Поскольку при пересчёте введённых на дату аттестации активностей нуклидов эталона на необходимые для расчёта эффективности регистрации значения средней активности нуклидов за время измерения эталона программа учитывает процессы распада и накопления нуклидов, таблица нуклидов должна содержать корректную схему распада нуклидов.
- Установить **левую границу спектра** и **ширину окна усреднения для экстраполяции комптона в область низких энергий**. Данные параметры необходимы для корректного расчёта величины полной эффективности регистрации гамма квантов в спектре. Поскольку любой спектрометр имеет так называемый «дискриминатор нижнего уровня сигнала», отсекающий шумы, набор спектра происходит не с нулевой энергии, а с некоторой левой граничной энергии. Кроме того, большинство нуклидов имеет в своём составе мягкие рентгеновские линии, которые практически невозможно корректно учесть. Поэтому для расчёта полной эффективности регистрации гамма квантов, включая кванты комптоновского рассеяния с очень малой энергией, используется экстраполяция спектра комптоновского рассеяния левее установленной границы

средним значением для участка спектра комптоновского рассеяния от левой границы до левой границы плюс ширина окна усреднения. Левая граница должна быть выбрана таким образом, чтобы отсечь рентгеновские линии нуклида используемого при калибровке.

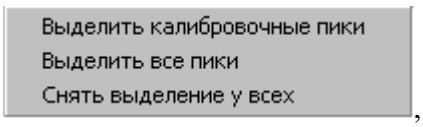
- Установить **дополнительную погрешность** - погрешность взвешивания, нарушений геометрии и т.п.
- Задать **уровень допустимой погрешности для площади пиков** – пики спектра с относительной погрешностью определения площади превышающей заданный уровень будут исключены из списка используемых пиков.

Тип эталона связан с информацией о химическом составе вещества эталона. Данная информация необходима для корректного учёта поглощения излучения в веществе пробы. Отсутствие сведений о химическом составе эталона означает, что мы пренебрегаем эффектами, связанными с фотопоглощением гамма квантов в веществе пробы. Фотопоглощение является наиболее значимым эффектом при малых энергиях (до 100 кэВ) и больших Z. Задать химический состав эталона можно нажав на кнопку Изменить..., или выбрать тип эталона с правильно заданным химическим составом, нажав на кнопку Обзор...

Переключившись на вторую страницу «**Пики и нуклиды**», ввести информацию об используемых пиках, линиях и активностях формирующих их нуклидов. Страница «**Пики и нуклиды**» имеет три графы: «**Список включенных пиков**», «**Список линий формирующих пики**», и «**Список нуклидов в эталоне**». В примере для калибровки использован эталон Eu-152. В этом случае графа «**Список включенных пиков**» может иметь вид:

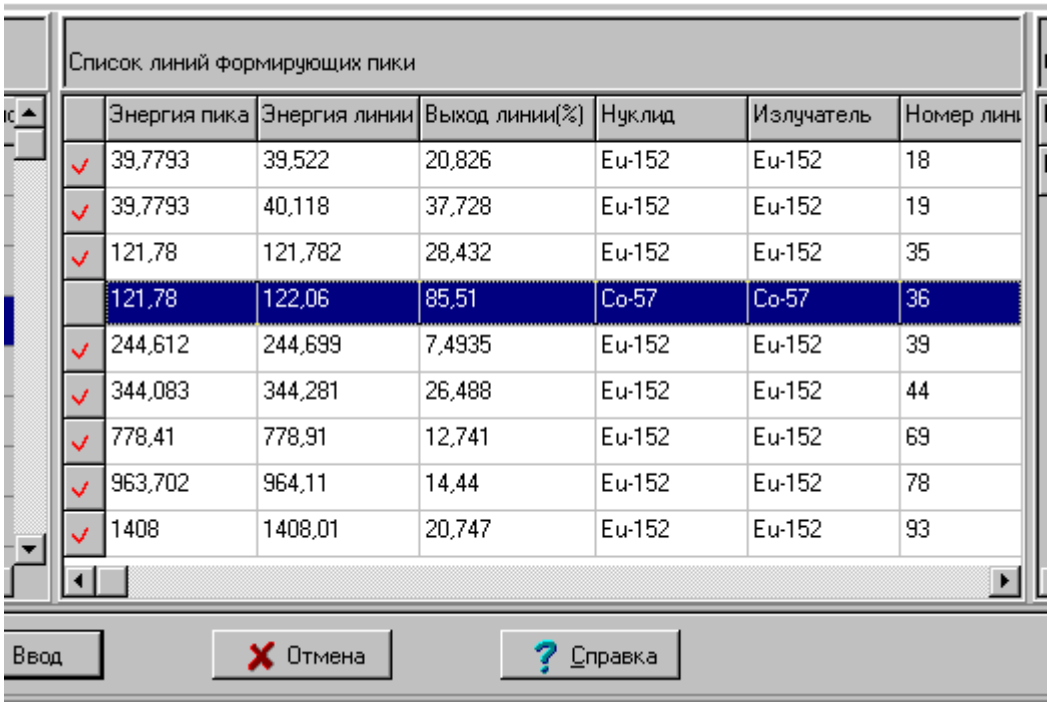


Серым цветом отмечены пики, которые нельзя использовать (пики не раскрытых мультиплетов, пики утечки, сложения каскадных, слабые пики и т.п.). Красными галочками в левой колонке помечены используемые пики. Перечёркнутая галочка говорит о том, что пик был помечен оператором, но программа не может или не рекомендует его использовать по каким-либо причинам. Оператор может снять выделение или добавить нужный пик двойным щелчком мышки по строчке с информацией о пике. Можно использовать клавишу «**Insert**» клавиатуры компьютера, нажатие на которую изменяет состояние текущей строки. Правая кнопка мышки выводит

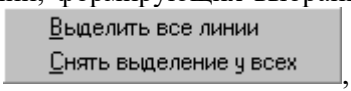
небольшое меню 

, с помощью которого оператор может выделить или снять выделение либо у калибровочных, либо у всех пиков. Калибровочными пиками считаются наиболее мощные пики, энергия которых находится в диапазоне заданном для калибровочных линий таблицы нуклидов.

Вторая графа имеет вид:

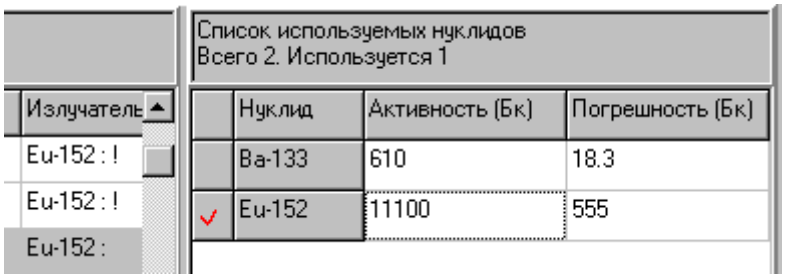


Энергия пика	Энергия линии	Выход линии(%)	Нуклид	Излучатель	Номер лини
39,7793	39,522	20,826	Eu-152	Eu-152	18
39,7793	40,118	37,728	Eu-152	Eu-152	19
121,78	121,782	28,432	Eu-152	Eu-152	35
121,78	122,06	85,51	Co-57	Co-57	36
244,612	244,699	7,4935	Eu-152	Eu-152	39
344,083	344,281	26,488	Eu-152	Eu-152	44
778,41	778,91	12,741	Eu-152	Eu-152	69
963,702	964,11	14,44	Eu-152	Eu-152	78
1408	1408,01	20,747	Eu-152	Eu-152	93

Оператор также двойным щелчком мышки по строке с информацией о линии может отредактировать список линий, формирующих выбранные пики. Правая кнопка мышки выводит небольшое меню 

, с помощью которого оператор может выделить или снять выделение у всех линий.

Третья графа содержит список нуклидов, формирующих выбранные линии.



Нуклид	Активность (Бк)	Погрешность (Бк)
Ba-133	610	18.3
Eu-152	11100	555

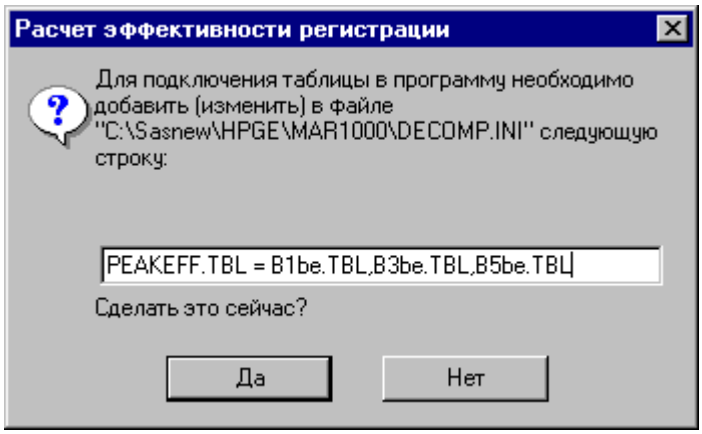
Нуклиды, отсутствующие в эталоне, использованном для калибровки, можно удалить, щелкнув правой кнопкой мышки по таблице нуклидов. Вызванное всплывающее меню содержит три пункта: «**Выделить все нуклиды**», «**Снять выделение у всех**» и «**Удалить не отмеченные нуклиды**». Выделение нуклидов производится двойным щелчком мышки по названию нуклида.

Оператор должен ввести значение активностей и погрешностей нуклидов, присутствующих в эталоне на дату аттестации. Для геометрий измерений в «тонких» и промежуточных слоях - общую активность нуклидов в эталоне в Беккерелях, для геометрии измерений в «толстом» слое - удельную активность нуклидов в Бк/кг. В случае если для используемой таблицы нуклидов предварительно сформирован **аттестат**

эталона, программа подставит данные об активностях и погрешностях нуклидов из существующего аттестата эталона.

Нажатие на клавишу «**Ввод**» запускает процедуру расчёта таблиц эффективности регистрации (при расчёте эффективности регистрации в фотопиках рассчитывается и таблица полной эффективности регистрации квантов в детекторе), по завершении которой, программа предлагает сохранить сформированные таблицы в папке «**Elements**» и добавить необходимые строки в файле «**Decomp.ini**», для подключения рассчитанных таблиц с заданным **параметром интерполяции** в программу обработки.

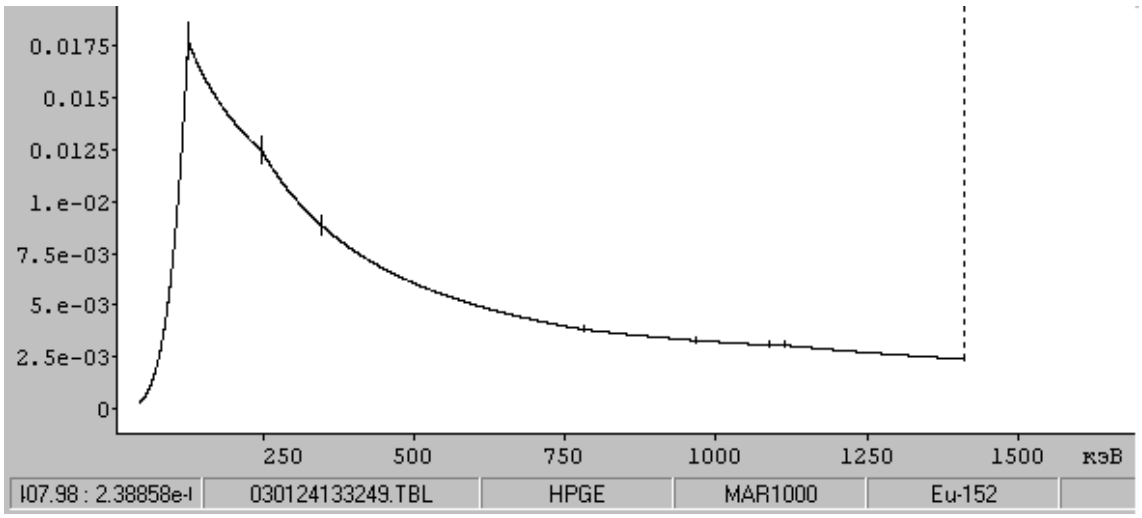
При сохранении таблицы программа формирует окно с информацией о предлагаемой модификации соответствующей строки в файле «**Decomp.ini**». Например:



Оператор может согласиться с предложенной модификацией файла «**Decomp.ini**» или отредактировать строку самостоятельно.

Дополнительно к таблице эффективности регистрации квантов в фотопиках процедура рассчитывает и полную эффективность регистрации для средней энергии линий всех нуклидов эталона и также предлагает сохранить рассчитанную таблицу и подключить её в программу, модифицировав файл «**Decomp.ini**». Полная эффективность регистрации требуется для корректного учёта эффектов связанных с одновременной регистрацией нескольких гамма квантов при каскадных переходах. Наиболее точно полная эффективность регистрации рассчитывается при калибровке по эталонам содержащим только одну мощную линию включающую 90 и более процентов выхода гамма квантов при распаде. Поэтому, если в наличии есть такие эталоны, для калибровки полной эффективности регистрации лучше использовать их, а полную эффективность рассчитанную по Eu-152 игнорировать и не подключать в программу.

Вид сформированной таблицы в режиме кусочно-линейной визуализации (а именно кусочно-линейная интерполяция применяется при расчёте промежуточных значений функций заданных табличным образом) не очень симпатичен (на рисунке представлен режим кусочно-линейной интерполяции в двойном логарифмическом масштабе):



Таблицу можно отредактировать вручную с помощью процедуры редактирования таблиц и спектров (п. Меню «***Редактирование / Редактирование данных...***»). Редактируется только выделенный участок таблицы или спектра (участок между двумя, ближайшими к подвижному маркеру, помеченными точками таблицы), а поскольку в нашем случае выделены все точки таблицы, если не снять выделение, можно будет редактировать только последнюю точку таблицы. Поэтому перед редактированием удалите метки (п. Меню «***Редактирование / Удалить маркер***» или «***Редактирование / Удалить все маркеры***»).

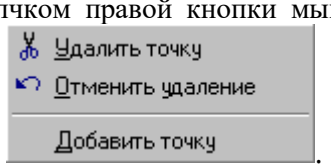
Окно процедуры редактирования имеет следующий вид:

Редактирование таблицы

Точка	Энергия (кэВ)	Погр. энергии	Величина	Погрешность
0	39,7545	0,2427	0,00023239	2,533E-5
1	121,78	0,01314	0,017744	0,0009632
2	244,728	0,03589	0,012416	0,0006999
3	344,275	0,02136	0,0088254	0,000482
4	778,849	0,07117	0,0038151	0,0002209
5	964,102	0,08008	0,0032885	0,0001898
6	1085,94	0,1111	0,0030624	0,0001823
7	1112,15	0,09937	0,0030548	0,0001778
8	1407,98	0,09814	0,0023887	0,0001365

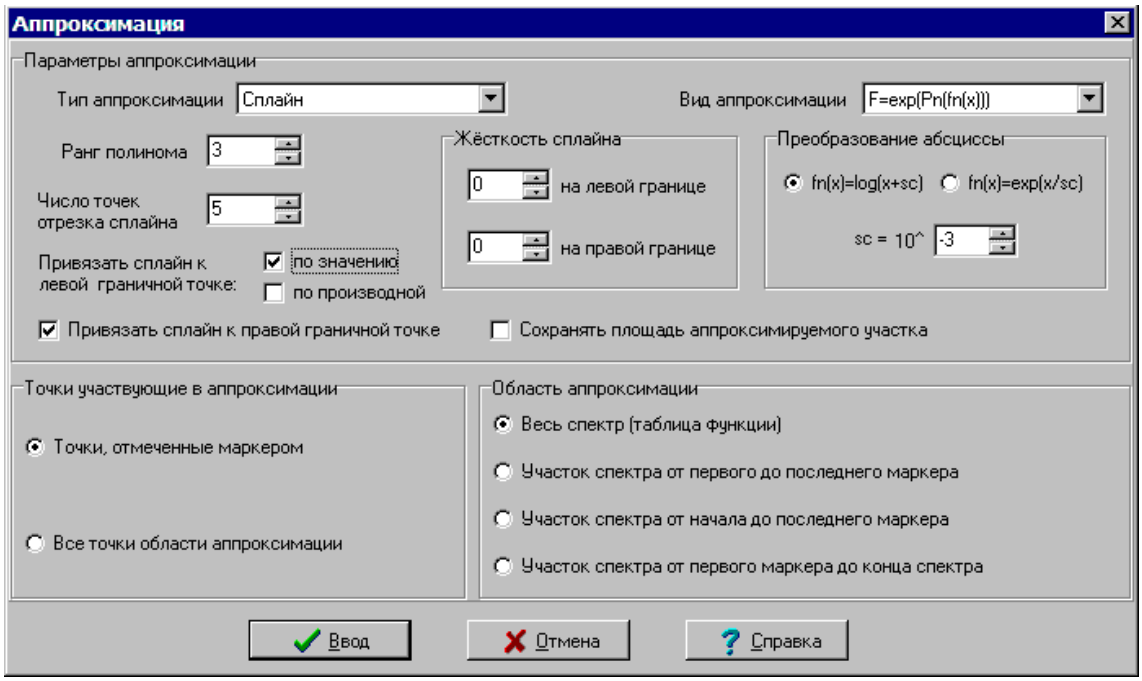
Ввод | Отмена | Справка

Оператор может изменить данные любой точки таблицы, вставить в таблицу дополнительные точки или удалить записи с помощью всплывающего меню, которое вызывается щелчком правой кнопки мышки по левой колонке (номеру точки) любой строки таблицы



.

После редактирования, если оно было необходимо, требуется аппроксимировать таблицу полиномом или сплайном. Аппроксимация требуется, с одной стороны - для придания таблице более приличного вида, а с другой - плавная кривая более адекватно отражает плавную непрерывную функцию эффективности регистрации. Предварительно оператор должен отметить маркером точки таблицы, которые будут участвовать в аппроксимации. Процедура аппроксимации вызывается по пункту меню «***Редактирование / Аппроксимация...***». При этом на экране появляется окно процедуры:



Форма содержит три группы параметров: «**Параметры аппроксимации**», «**Точки, участвующие в аппроксимации**» и «**Область аппроксимации**».

В группе «**Параметры аппроксимации**» оператор должен выбрать один из двух возможных типов аппроксимации: «**Сплайн**» или «**Полином**» (сплайном называется функция, сшитая из отрезков полиномов, сплайн – более гибкая, чем полином функция, что является и достоинством и недостатком одновременно). Выбрать один из девяти возможных видов аппроксимации:

F=Pm(x)
F=Pm(fn(x))
F=exp(Pm(x))
F=exp(Pm(fn(x)))
F=1/Pm(x)
F=1/Pm(fn(x))
F=1/exp(Pm(x))
F=1/exp(Pm(fn(x)))
F=F0*(1-exp(-k*x))

И выбрать **вид функции** преобразования шкалы энергий **fn(x)**.

Считается, что для аппроксимации функций эффективности регистрации квантов в фотопиках в диапазоне 30-3000 кэВ, лучше других подходит двойной логарифмический масштаб полиномиальной аппроксимации **F=exp(Pm(fn(x))) fn(x)=log(x+sc)**. Задаваемая оператором константа **sc** (scale coefficient) определяет диапазон изменения абсциссы для полинома - чем больше величина **sc**, тем уже диапазон изменения абсциссы и, соответственно, жёстче полином (сплайн) и наоборот. Если с приемлемой точностью удаётся аппроксимировать таблицу асимметричным гауссианом (exp(Pn(log(x+sc), **ранг полинома** равен 2), то это замечательно. Если не удаётся, можно увеличить ранг полинома. Но увеличение ранга опасно тем, что на границах диапазона полином может изогнуться не в нужном направлении. Если не удаётся аппроксимировать таблицу

полиномом – выбрать **сплайн**. Если число точек аппроксимации достаточно для формирования кубического сплайна, рекомендуется установить **ранг сплайна** равный **3**.

Число точек отрезка сплайна - число точек аппроксимируемой таблицы используемых для расчёта параметров отрезка сплайна и параметр «**Жёсткость сплайна**» определяет жёсткость сплайна. Жёсткость полинома или сплайна - определяется и задаваемой оператором константой, используемой в весовой функции подавления кривизны сплайна или полинома. Для сплайна задаётся два значения константы жёсткости: **на левой границе** области аппроксимации и **на правой границе** области аппроксимации. Значение константы жёсткости для конкретного отрезка сплайна рассчитывается линейной интерполяцией по заданным значениям.

Сплайн можно **привязать к левой и(или) к правой граничной точке** аппроксимируемого участка. К левой граничной точке сплайн можно привязать как по значению, так и по первой производной. К правой - только по значению. Привязка сплайна к левой граничной точке и по значению и по производной позволяет оператору самостоятельно создавать сшитые полиномы с различной жёсткостью – гибкий полином для области малых энергий и жёсткий – для высоких энергий. В случае если установлен флажок привязки сплайна по производной, а точки левее левой граничной точки аппроксимируемого участка отсутствуют (производную слева нельзя рассчитать), производная считается равной нулю.

Установка флажка «**Сохранять площадь аппроксимируемого участка**» позволяет сохранить площадь аппроксимируемой кривой, что необходимо при аппроксимации моделей линий и элементарных спектров. В данном случае флажок устанавливать не следует.

В группе «**Область аппроксимации**» оператор должен выбрать, какой участок таблицы будет аппроксимироваться. Поскольку мы отметили маркером нужные точки таблицы, необходимо выбрать «**Весь спектр**» и в группе «**Точки, участвующие в аппроксимации**», выбрать режим «**Точки, отмеченные маркером**». В случае если точки таблицы не отмечены, и все необходимы для аппроксимации, выбрать режим «**Все точки области аппроксимации**».

Нажатие на клавишу «**Ввод**» формирует аппроксимирующую таблицу и форму, содержащую результаты аппроксимации:

Результаты аппроксимации

Точки аппроксимации:
Энергия (кэВ), аппроксимированное и фактическое значение в точке, нормальное и фактическое отклонение (кэВ), относ. отклонение

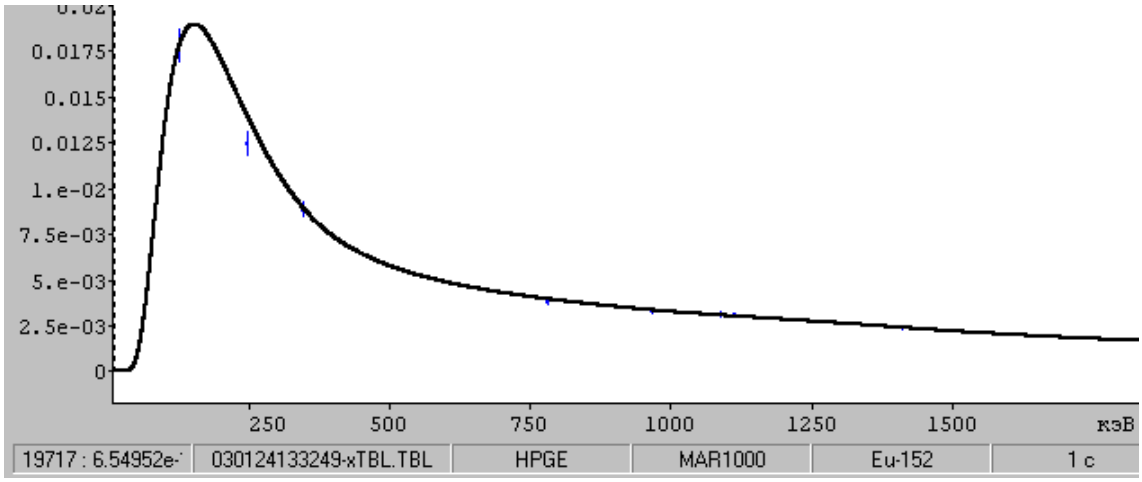
Энергия	Величина аппр.	Величина факт.	Норм. отклонение	Факт. отклонение	Относ. откл.
39.7545	2.32431e-04	2.3239e-04	1.2665e-05	4.12983e-08	3.26082e-03
121.78	0.0176	0.0177	4.816e-04	1.34243e-04	0.27874
244.728	0.0139	0.0124	3.4995e-04	1.48622e-03	4.24694
344.275	8.89445e-03	8.8254e-03	2.41e-04	6.90473e-05	0.2865
778.849	3.94322e-03	3.8151e-03	1.1045e-04	1.28117e-04	1.15995
964.102	3.34519e-03	3.2885e-03	9.49e-05	5.66898e-05	0.59736
1085.94	3.06272e-03	3.0624e-03	9.115e-05	3.1665e-07	3.47394e-03
1112.15	3.00942e-03	3.0548e-03	8.89e-05	4.53794e-05	0.51045
1407.98	2.38871e-03	2.3887e-03	6.825e-05	1.30385e-08	1.91041e-04

Ранг полинома = 2. Невязка аппроксимации = 1.8 ср.кв.откл.

Принять Отклонить

Оператор может принять или не принять результаты, и в последнем случае вернуться к исходной форме процедуры аппроксимации, отредактировать данные и повторить попытку.

При решении принять результаты аппроксимации программа предлагает сохранить аппроксимирующую таблицу в файле. Её надо сохранить под тем же именем, что и исходная таблица, поскольку именно это название файла включено в файл настройки «**Decomp.ini**», но мы не всегда можем быть уверены в удачном исходе аппроксимации (удачной, или не очень, была аппроксимация, проверяется визуально), поэтому рекомендуется создать резервную копию исходной таблицы. В итоге аппроксимированная таблица приобретает вид:

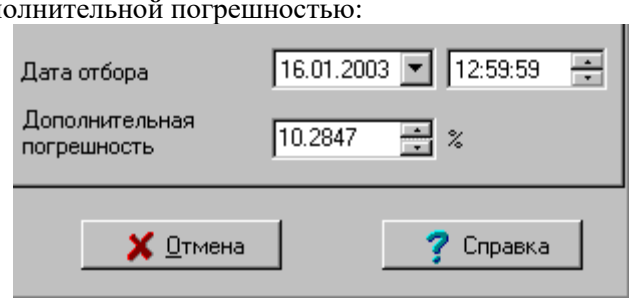


Для корректного сравнения двух таблиц (исходной и аппроксимированной) необходимо использовать «**Обычный**» масштаб оси ординат. Для наглядности сравнения выбран режим визуализации «**Точки**» (п. Меню «***Визуализация / Точки***»). Из сравнения таблиц видно, что аппроксимация достаточно удачна - аппроксимированная функция проходит внутри всех прямоугольников за исключение одной точки (при данном

масштабе оси X прямоугольники выглядят вертикальными линиями), которые отражают положения и погрешности точек исходной таблицы.

В том случае если при калибровке эффективности использовались нуклиды имеющие каскадные переходы, после установки аппроксимированной таблицы в программу рекомендуется повторить калибровку эффективности регистрации. При повторной калибровке учитывается существующая таблица эффективности регистрации в фотопиках, таблицы полной эффективности регистрации и более корректно происходит учёт эффектов связанных с каскадными переходами.

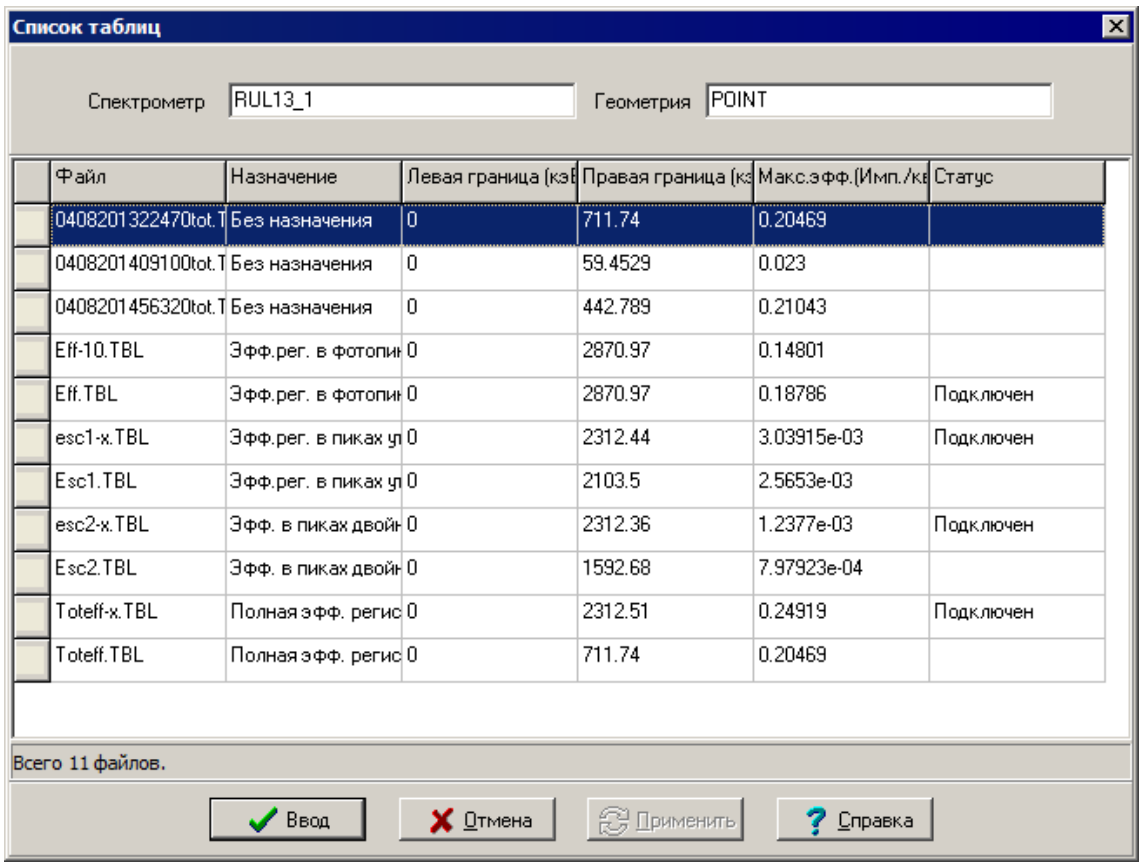
При расчёте плотной аппроксимирующей таблицы погрешности точек исходной таблицы усредняются, умножаются на невязку аппроксимации и сохраняются в заголовке таблицы, в графе «**Дополнительная погрешность**» суммируясь с исходной дополнительной погрешностью:



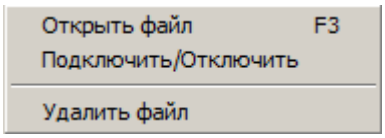
Калибровку эффективности регистрации квантов в пиках утечки необходимо проводить после калибровки эффективности регистрации квантов в пиках полного поглощения. Используемая таблица гамма линий должна содержать информацию о линиях утечки. Эталоны, используемые для калибровки должны содержать нуклиды, имеющие линии с энергиями превышающими 1022 кэВ. Линии с энергиями менее 1022 кэВ теоретически не образуют пар «электрон-позитрон», создающих линии утечки. На практике, заметные линии утечки образуются для линий с энергиями более 2000 кэВ.

Процедура калибровки не отличается от процедуры калибровки эффективности регистрации в пиках полного поглощения за исключением того, что оператор должен использовать для калибровки пики содержащие линии утечки.

Список рассчитанных таблиц эффективности регистрации квантов можно посмотреть, щелкнув по пункту меню «***Калибровка / Список таблиц эффективности…***». Форма просмотра может иметь вид:



Файл	Назначение	Левая граница (кэВ	Правая граница (кэ	Макс.эфф.(Имп./кв	Статус
0408201322470tot.T	Без назначения	0	711.74	0.20469	
0408201409100tot.T	Без назначения	0	59.4529	0.023	
0408201456320tot.T	Без назначения	0	442.789	0.21043	
Eff-10.TBL	Эфф.рег. в фотопик	0	2870.97	0.14801	
Eff.TBL	Эфф.рег. в фотопик	0	2870.97	0.18786	Подключен
esc1-x.TBL	Эфф.рег. в пиках уд	0	2312.44	3.03915e-03	Подключен
Esc1.TBL	Эфф.рег. в пиках уд	0	2103.5	2.5653e-03	
esc2-x.TBL	Эфф. в пиках двойн	0	2312.36	1.2377e-03	Подключен
Esc2.TBL	Эфф. в пиках двойн	0	1592.68	7.97923e-04	
Toteff-x.TBL	Полная эфф. регис	0	2312.51	0.24919	Подключен
Toteff.TBL	Полная эфф. регис	0	711.74	0.20469	

Пользуясь небольшим всплывающим меню 

оператор имеет возможность посмотреть файл, подключить его к процедурам обработки или отключить, удалить файл. Удалить файл можно только после его отключения.

Особенности калибровки эффективности регистрации для детекторов с высокой эффективностью регистрации

В детекторах с высокой эффективностью регистрации (более 30%) заметную роль играют процессы регистрации гамма квантов для нуклидов с каскадной схемой распада (а большинство нуклидов имеет каскадную схему распада). Для корректного учёта нюансов в процессе регистрации каскадных гамма квантов требуется калибровка полной эффективности регистрации гамма квантов в спектрометре.

В пакете «SPECTRRAD» полная эффективность регистрации рассчитывается при калибровке эффективности в фотопиках и учитывается при расчёте эффективности регистрации в фотопиках. Но если при калибровке спектрометров имеющих детекторы с невысокой эффективностью регистрации (10%-20%), приближённость оценки полной эффективности регистрации по используемому при калибровке эффективности регистрации в фотопиках единственному нуклиду с рядом линий, например Eu-152, является приемлемой, поскольку перераспределение регистрируемых импульсов вследствие каскадных переходов является незначительным, для детекторов с высокой эффективностью регистрации требуется особенный подход. Для таких детекторов, да и для любых детекторов, если точность измерения для нас весьма важна, предварительно требуется корректно провести калибровку полной эффективности регистрации гамма квантов в спектрометре.

В пакете «SPECTRRAD», как уже сказано, она рассчитывается при калибровке эффективности в фотопиках. При этом рассчитывается усреднённый выход гамма

квантов для усреднённой энергии. Такой подход вполне приемлем либо при близких энергиях линий, либо при большой энергии линий.

Точность оценки полной эффективности регистрации для конкретной энергии будет тем выше, чем больший выход гамма квантов принадлежит одной линии. В идеале – единственная линия в спектре излучения нуклида. Идеальный вариант практически не встречается. Рекомендуемый набор нуклидов для калибровки полной эффективности регистрации: Am-241, Cd-109, Co-57, Ce-139, Sn-113, Cs-137, Mn-54, Zn-65, Co-60, K-40.

Требуется измерить и провести калибровку эффективности регистрации в фотопиках, используя эталоны, изготовленные на основе данных нуклидов (не смеси нуклидов, а одиночных нуклидов). В процедуре расчёта эффективности регистрации важно правильно установить левую граничную энергию спектра. Она должна отсекать мягкое рентгеновское излучение (несмотря на то, что пики рентгеновского излучения могут использоваться при калибровке эффективности регистрации в фотопиках). В итоге мы получим, набор точек полной эффективности регистрации гамма квантов для различных энергий.

Полученный набор данных будет включать файлы полной эффективности регистрации и эффективности регистрации квантов в фотопиках. После калибровки спектрометра по предложенному набору нуклидов, можно провести калибровку спектрометра по эталонам, изготовленным из смеси нуклидов или на основе нуклидов с несколькими мощными линиями, например тот же Eu-152 и объединить полученные данные.

Стандартная процедура включения рассчитанных данных в общий набор данных для функции эффективности регистрации позволяет включить не более шести файлов таблиц эффективности – достаточный вариант для калибровки эффективности в фотопиках. Предложенный набор нуклидов – больше шести. В том случае, если количество объединяемых файлов содержащих сведения об эффективности регистрации превышает шесть, рекомендуется объединять таблицы вручную (п. меню «***Редактирование/Сложение...***») и провести аппроксимацию итоговых таблиц. Наиболее подходящий вид аппроксимации в этом случае – **F=F0*(1-exp(-k*x))**. Данный вид аппроксимации доступен только в режиме «**Полином**».

Объединение файлов таблиц эффективности регистрации в фотопиках рекомендуется проводить в любом случае для целей аппроксимации итоговой таблицы.

Расчёт эффективности регистрации для объёмных или плоских геометрий по эффективности регистрации точечного источника

В гамма спектрометрии эффективность регистрации для объёмной или плоской геометрии можно рассчитать, интегрируя эффективность регистрации для точек внутри геометрии. Параметрами, которые будут определять итоговую эффективность регистрации, являются: расстояние от рассчитываемой точки до эффективного центра детектора, расстояние, которое пролетает гамма квант в материале счётного образца, в материале контейнера и среды между детектором и счётным образцом, химический состав и плотность материала счётного образца, контейнера и среды.

Предполагается, что излучение в вакууме от выбранной точки ослабляется пропорционально квадрату расстояния от точки до эффективного центра детектора. Для расчёта этого расстояния предварительно, при калибровке эффективности регистрации для точечного источника, рассчитывается «**глубина детектора**» - расстояние от границы детектора до эффективного центра детектора. Это расстояние является функцией энергии гамма квантов и зависит от взаимного расположения точки и детектора. Было бы более корректным рассчитывать глубину детектора для различных направлений по осям детектора. На практике это сделать крайне трудно – мешает защита детектора, коллиматор. Поэтому в программном пакете «СПЕКТРРАД» используется калибровка глубины детектора только по одной, главной оси.

Для расчёта глубины детектора проводится калибровка эффективности регистрации для двух положений точечного источника с различным удалением источника от

детектора по главной оси детектора. Подробно процедура расчёта глубины детектора описана в главе «***Установка геометрии / Расчёт глубины детектора***».

Подробное описание процедуры расчёта эффективности регистрации для объёмных и плоских геометрий по эффективности регистрации точечного источника приводится в главе «***Установка геометрии / Расчёт эффективности регистрации***». Процедура позволяет пересчитать для заданных параметров объёмной или плоской геометрии четыре таблицы эффективности регистрации (в фотопиках, в пиках одинарной и двойной утечки и полную эффективность). Кроме того, рассчитывается поправочный коэффициент для эффективности регистрации суммарных гамма квантов при каскадных переходах, что позволяет более точно учитывать эффекты связанные с каскадными переходами.

Расчёт элементарных спектров из спектров эталонов

В случае если компонентами процедуры разложения спектра (декомпозиции) являются спектры отклика спектрометра на единицу активности нуклида - элементарные спектры, оценками вклада компонентов в спектр будут активности нуклидов. Поэтому калибровка спектрометра включает процедуру расчёта элементарных спектров по спектрам эталонов (образцовых мер активности). Расчёт элементарных спектров по спектрам эталонов - значительно более точная процедура, чем генерация элементарных спектров по таблицам линий и калибровкам спектрометра. И если при обработке хорошо разрешённых линейчатых спектров неплохо работает и процедура генерации спектров пиков по таблице линий и функции эффективности регистрации, для непрерывных спектров генерация грешит большими погрешностями, в связи с необходимостью генерировать полный отклик на излучение линий, включающий и непрерывный спектр. В любом случае (и для хорошо разрешённых линейчатых спектров) использование элементарных спектров рассчитанных по спектрам эталонов повышает точность декомпозиции.

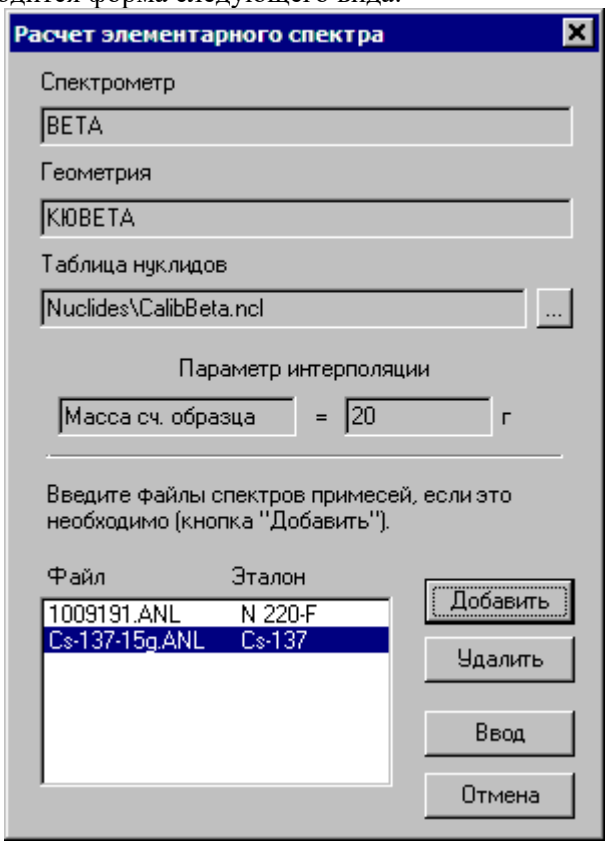
Для геометрий измерений в «толстом» слое в качестве единицы активности используется удельная активность - Беккерель/кг (отклик спектрометра зависит от удельной активности пробы и не зависит от общей активности, поскольку регистрируются только частицы верхнего слоя счётного образца). Для геометрий «тонкого» и промежуточных слоев в качестве единицы активности используется Беккерель (Бк).

Для геометрий «толстого» слоя отклик спектрометра на единицу удельной активности нуклида не зависит от плотности или массы счётного образца, но зависит от геометрических параметров счётного образца или геометрии измерений (в том случае, если используется геометрия с изменяемым геометрическим параметром) и загрузки спектрометра. Отклик спектрометра на 1 распад нуклида (для геометрий «тонкого» и промежуточных слоев) зависит и от плотности счётного образца и от геометрических параметров счётного образца или геометрии измерений и от загрузки спектрометра - от **параметра интерполяции**, задаваемого в параметрах геометрии, поэтому для корректного расчёта элементарных спектров, соответствующих параметру интерполяции измеренного спектра рабочей пробы, расчёт элементарных спектров необходимо провести несколько раз с использованием эталонов с различными значениями **параметра интерполяции**.

Поскольку при расчёте элементарного спектра рассчитывается и усреднённая энергия излучения эталона используемая при учёте поглощения излучения в определении «суммарной» альфа и бета активности, для корректного расчёта средней энергии излучения из таблицы линий используемой при калибровке спектрометра для нуклидов эталона должны быть удалены не регистрируемые мягкие линии.

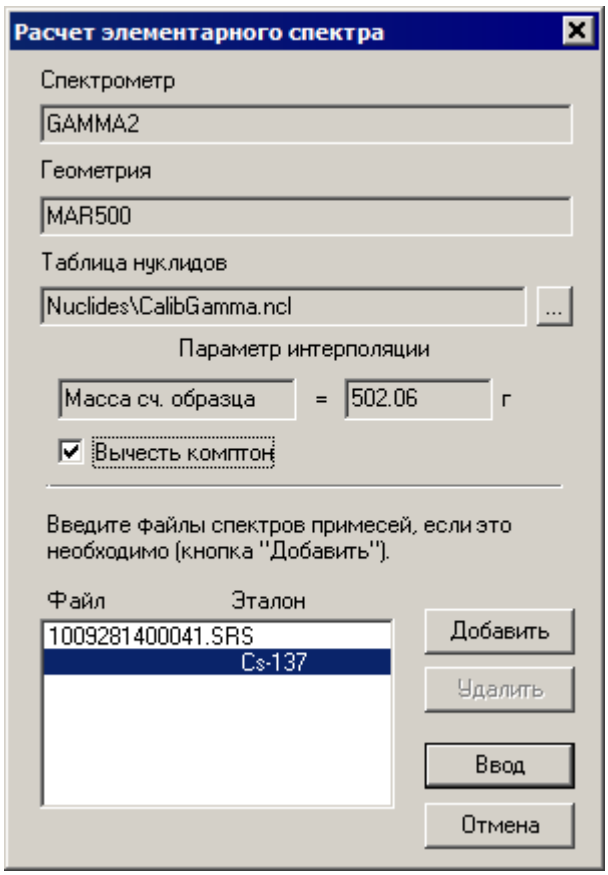
Предварительно требуется произвести автокалибровку спектрометра. Затем измерить образцовую меру активности требуемого нуклида в заданной геометрии в течение времени достаточного для набора в рабочей области спектра не менее 200 импульсов на канал по режиму циклических измерений с продолжительностью цикла равным среднему времени измерения рабочей пробы. В случае сложных эталонов, содержащих смеси

нуклидов, данную процедуру повторить для всех эталонов, содержащих связанные между собой смеси нуклидов. Затем обработать спектры эталонов по режиму «***Калибровка / Элементарный спектр / Расчёт по спектрам эталонов...***». При этом на экран выводится форма следующего вида:



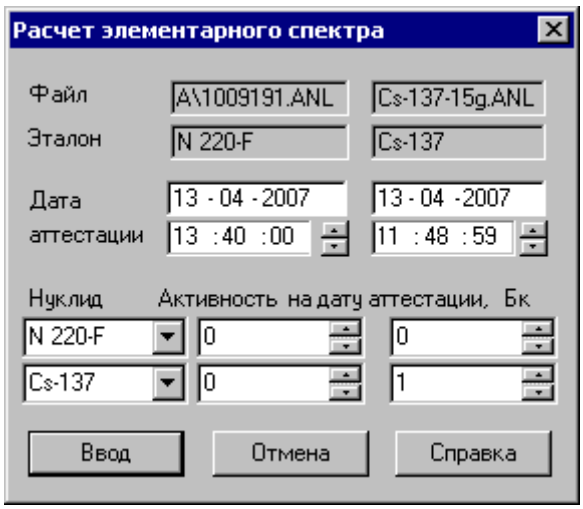
Кнопка ... позволяет выбрать необходимую таблицу нуклидов. Поскольку, при пересчёте введённых на дату аттестации активностей нуклидов эталона на необходимые для расчёта элементарных спектров значения средней активности нуклидов за время измерения эталона, программа учитывает процессы распада и накопления нуклидов, таблица нуклидов должна содержать корректную схему распада нуклидов.

Для гамма спектрометрии процедура расчёта элементарных спектров позволяет рассчитывать либо полные отклики спектрометра, включающие и спектр непрерывного рассеяния (комптоновского гамма квантов и тормозного рентгеновского бет частиц), так и спектры пиков – отклики спектрометра с вычтенным спектром непрерывного рассеяния. При этом первая форма процедуры расчёта может иметь вид:

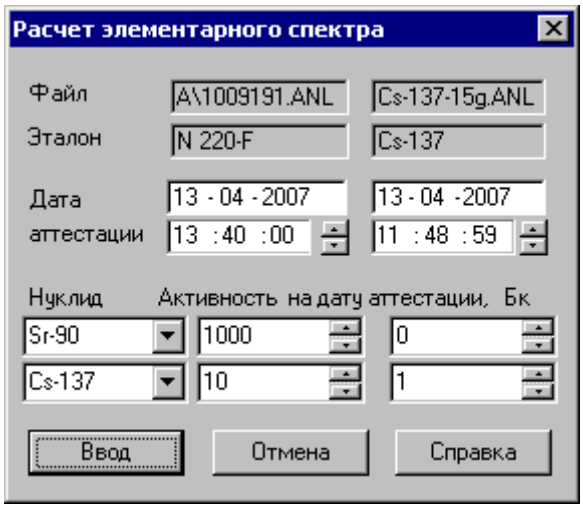


При установленной галочке «**Вычесть комптон**» будет проводиться расчёт элементарных (нормированных на единицу активности) спектров пиков нуклида (равновесной цепочки нуклидов). При этом предварительно должен быть проведён поиск пиков в спектре эталона. Поскольку из измеренного спектра должен быть вычтен спектр фона, для случая расчёта спектров пиков поиск пиков должен быть проведён и для используемого спектра фона. Поэтому процедура расчёта выведет в окне программы **SpectrRad-V** используемый спектр фона и предложит оператору отредактировать его при необходимости (подробно процедура редактирования спектра фона описана в главе «***Калибровка эффективности регистрации***»).

В случае эталонов содержащих смеси нуклидов, оператор должен добавить к списку файлы содержащие спектры примесей (до 4 файлов). При этом оператор может указать либо ранее рассчитанные элементарные спектры нуклидов примесей, либо файлы спектров эталонов, содержащих примесные нуклиды. Если эталон состоит из нуклидов образующих цепочку распада, дополнительные файлы могут быть спектрами того же самого эталона измеренные в разное время. Период между измерениями определяется периодом полураспада нуклидов в эталоне. По завершению ввода файлов на экран выводится таблица для ввода значений активности нуклидов в эталонах. Её вид зависит от количества файлов эталонов, для двух файлов она может выглядеть следующим образом:



Оператор должен ввести названия нуклидов, содержащихся в наборе эталонов и значения активности нуклидов (в примере **Sr-90** и **Cs-137)** на дату аттестации для эталона **N 220-F** и эталона **Cs-137**. Например, эталон **N 220-F** содержит 1000 Бк **Sr-90** и 10 Бк **Cs-137**, а файл **Cs-137-15g.anl** содержит элементарный спектр **Cs-137**. В этом случае таблица с введенными данными должна выглядеть так:

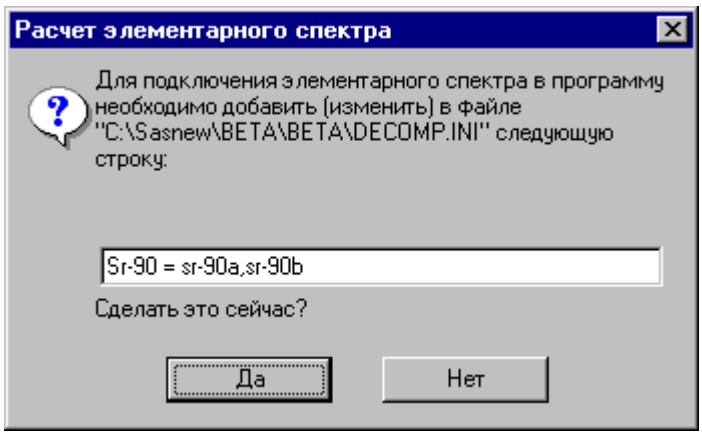


По вводу значений активностей программа запросит ввод значений погрешностей аттестации нуклидов в эталонах в таблице аналогичного вида.

Для геометрий «толстого» слоя программа будет запрашивать значения удельной активности эталонов в Бк/кг.

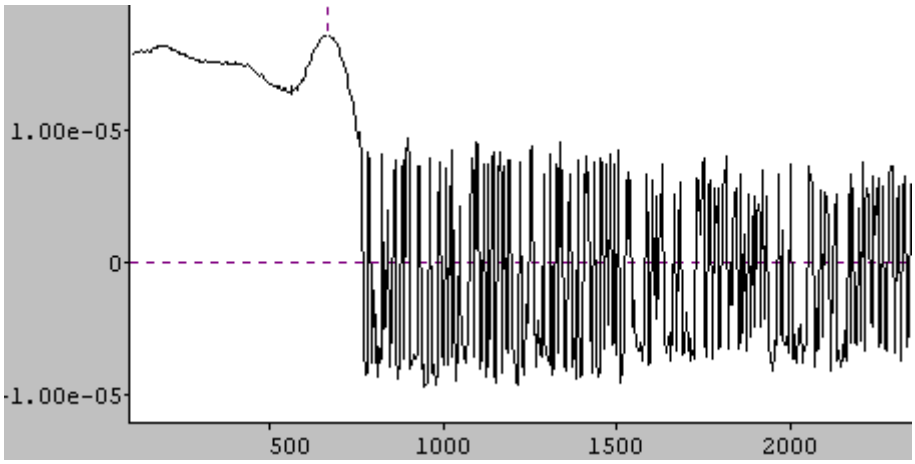
По завершении ввода всех данных программа рассчитывает элементарный спектр нуклида, сохраняет его в папке «**Elements**» данного спектрометра и данной геометрии и предлагает соответствующим образом изменить файл «**Decomp.ini**», включив в него информацию о новом элементарном спектре.

При сохранении спектра программа формирует окно с информацией о предлагаемой модификации соответствующей строки в файле «**Decomp.ini**». Например:



Оператор может согласиться с предложенной модификацией файла «**Decomp.ini**» или отредактировать строку самостоятельно.

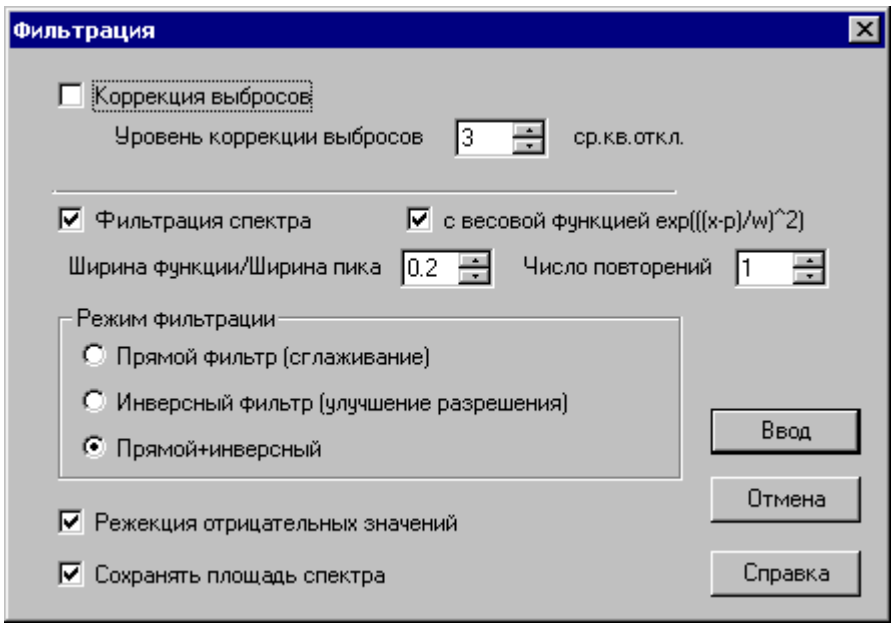
Полученный элементарный спектр содержит статистические флуктуации и может выглядеть следующим, например, образом (в примере спектр Cs-137 в логарифмическом масштабе):



Поскольку в процессе обработки спектров рабочих проб рассчитываются производные элементарных спектров, его рекомендуется отфильтровать с помощью команды «***Редактирование / Фильтрация…***» или аппроксимировать сплайном (п. меню «***Редактирование / Аппроксимация...***»). При аппроксимации сплайном необходимо установить в параметрах аппроксимации **режим сохранения площади аппроксимируемого участка**. Затем «почистить» области спектра, не содержащие статистически значимых положительных значений процедурой «***Редактирование / Обнуление…***», что позволяет более точно задать значимую область функции отклика спектрометра на излучение данного нуклида и, соответственно, более точно рассчитывать погрешности оценок активностей данного нуклида.

Процедура аппроксимации подробно описана в главе «Калибровка эффективности регистрации».

Окно (форма) процедуры фильтрации имеет вид:



Фильтрация спектра производится для выбранной секции спектра и позволяет осуществить:

- Коррекцию выбросов (установлен флажок “**Коррекция выбросов**”). Выбросом будет считаться значение в канале спектра отклоняющееся от среднего значения в трёх соседних каналах (левом, правом и исследуемом) на величину больше заданного оператором **уровня коррекции выбросов** в величинах среднеквадратичных отклонений в предположении пуассоновской статистики спектра. “Среднее” в данной процедуре рассчитывается как среднее в смысле наименьших модулей, а не наименьших квадратов. Значение выброса будет замещено значением среднего. Площадь спектра при коррекции выбросов не сохраняется.
- **Фильтрация спектра** усреднением по заданному **числу точек** или с заданной **весовой функцией** $\exp(((x-p)/w)^2)$ подавляет высокочастотные шумы спектра (сглаживает спектр), но несколько ухудшает разрешение**.** В том случае, если спектр линейчатый и откалиброван по ширине пиков при сглаживании с весовой функцией оператор задаёт отношение **ширины функции к ширине пиков** спектра ($w/fwhm$, w - ширина весовой функции, $fwhm$ - ширина пика на половине высоты). Операция выполняется заданное **число повторений**.
- Если установлен флажок “**Инверсный фильтр**” производится операция обратная сглаживанию (оператор фильтрации предварительно инвертируется). Если сглаживание уменьшает шумы и несколько ухудшает разрешение, то инверсная операция, соответственно, увеличивает шумы и несколько улучшает разрешение.
- Обнуление отрицательных значений (флажок “**Режекция отрицательных значений**”). Операция обнуления отрицательных значений изменяет площадь спектра. Для восстановления исходной площади спектра оператор должен установить флажок “**Сохранять площадь спектра**”.

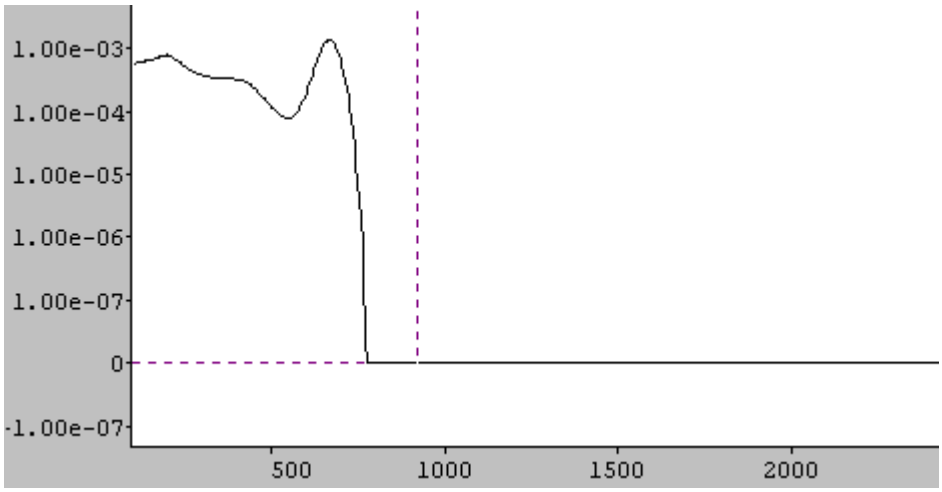
Применение к спектру прямой и обратной фильтрацию не приводит к восстановлению исходного спектра вследствие плохой обусловленности обратной матрицы, наличии краевых эффектов. В итоге применение к спектру составного фильтра (прямой+обратный) при надлежащем выборе ширины весовой функции позволяет подавить шумы без ухудшения разрешения спектра.

Операции сглаживания и обратной фильтрации сохраняют площадь спектра.

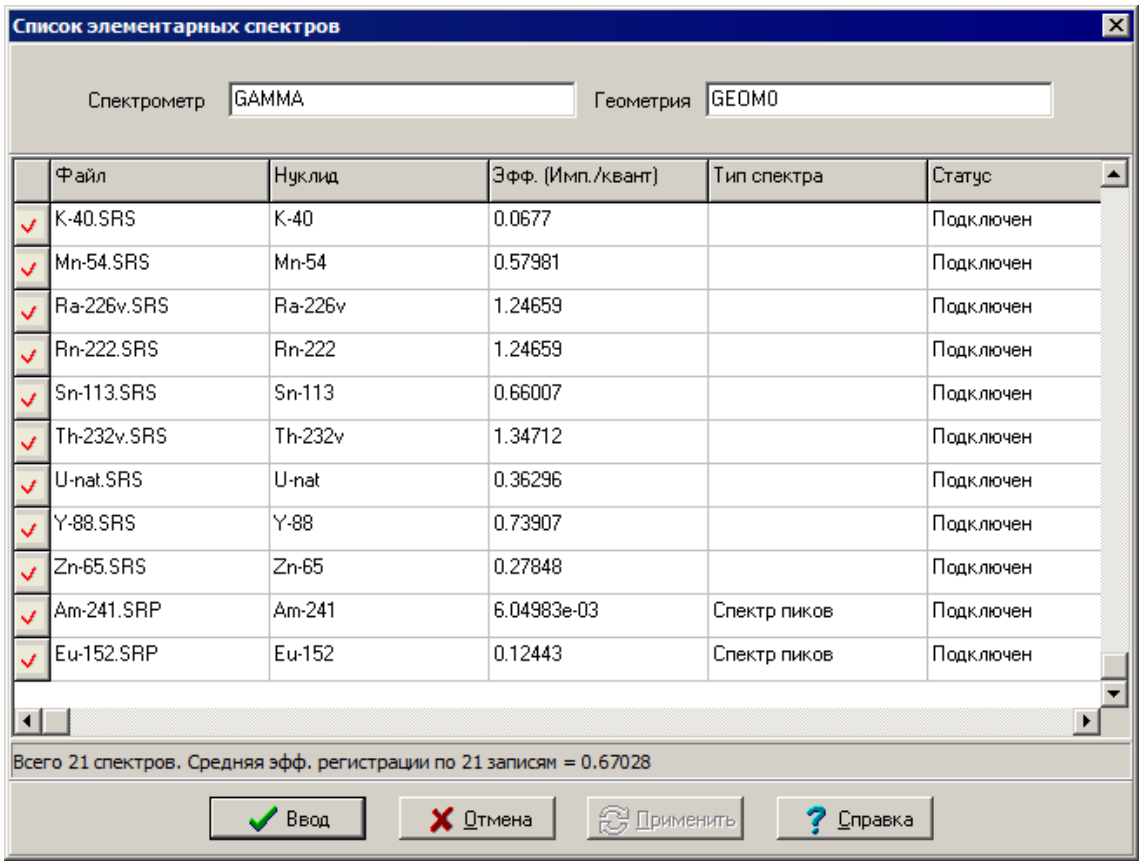
Порядок операций: коррекция выбросов, сглаживание и режекция отрицательных значений.

Рекомендуемые значения параметров приведены в примере формы процедуры фильтрации.

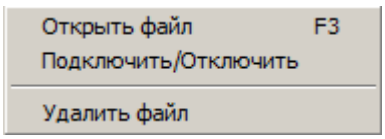
После процедур фильтрации и чистки спектр приобретает вид:



Список рассчитанных элементарных спектров можно посмотреть, щелкнув по пункту меню «***Калибровка / Список элем. спектров…***». Форма просмотра может иметь вид:



Файл	Нуклид	Эфф. (Имп./квант)	Тип спектра	Статус
K-40.SRS	K-40	0.0677		Подключен
Mn-54.SRS	Mn-54	0.57981		Подключен
Ra-226v.SRS	Ra-226v	1.24659		Подключен
Rn-222.SRS	Rn-222	1.24659		Подключен
Sn-113.SRS	Sn-113	0.66007		Подключен
Th-232v.SRS	Th-232v	1.34712		Подключен
U-nat.SRS	U-nat	0.36296		Подключен
Y-88.SRS	Y-88	0.73907		Подключен
Zn-65.SRS	Zn-65	0.27848		Подключен
Am-241.SRP	Am-241	6.04983e-03	Спектр пиков	Подключен
Eu-152.SRP	Eu-152	0.12443	Спектр пиков	Подключен

Пользуясь небольшим всплывающим меню 

оператор имеет возможность посмотреть файл, подключить его к процедурам обработки или отключить, удалить файл. Удалить файл можно только после его отключения.

Расчёт моделей пиков

Модель линии - отклик спектрометра на излучение определённой энергии. При обработке разрешённых линейчатых спектров используется часть модели линии – модель пика. Модели пиков используются и при поиске пиков и при генерации спектров пиков для нуклидов подозреваемых в формировании спектра.

Распространённый в прошлом подход использовать в качестве модели пика суперпозицию элементарных функций (обычно гауссиан сшитый по краям с экспонентами) плох тем, что реальная форма пика сложнее любой суперпозиции элементарных функций, а использование большого числа параметров для обеспечения необходимой гибкости искусственно построенной модели пика ухудшает обусловленность системы.

В программном пакете «SpectrRad» в качестве модели пика используется либо гауссиан, либо реально измеренный отклик спектрометра на излучение определённой энергии. Использование измеренного отклика спектрометра на излучение определённой энергии снимает все проблемы несоответствия формы реального пика и используемой модели. Для разрешённых гамма (рентгеновских) спектров модель пика рассчитывается по спектрам пиков (спектр непрерывного рассеяния предварительно вычитается). При этом предполагается (и подтверждается опытом), что в пределах, используемого для расчёта модели, пика или мультиплета все изменения формы достаточно точно описываются деформацией аффинного типа $\varphi(z) = \varphi(\frac{x-p}{w})$. Учёт более сложных изменений формы в зависимости от энергии и типа линии обеспечивается тем, что используется не одна модель, а набор моделей пиков для различных энергий и видов линий (гамма, рентгеновские или аннигиляционные) и модель пика для конкретной энергии и типа линии рассчитывается интерполяцией по соседним моделям пиков для данного типа линии.

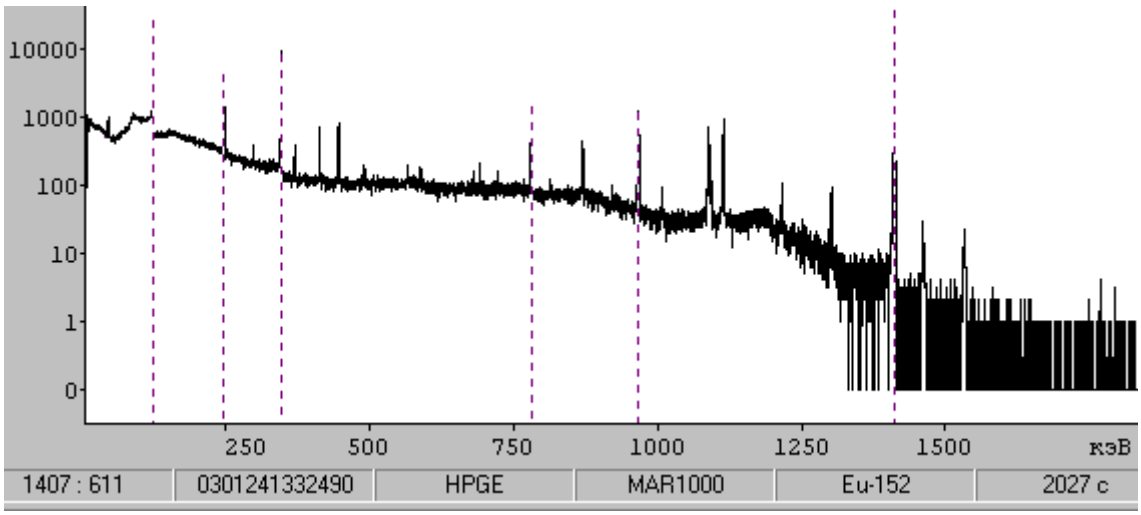
Форма спектра пика, в общем, зависит и от плотности счётного образца и от геометрических параметров счётного образца или геометрии измерений (в том случае, если используется геометрия с изменяемым геометрическим параметром) и от загрузки спектрометра - от **параметра интерполяции**, задаваемого в параметрах геометрии, поэтому для корректного расчёта спектров пиков, соответствующих параметру интерполяции измеренного спектра рабочей пробы, расчёт моделей пиков рекомендуется провести несколько раз с использованием эталонов с различными значениями **параметра интерполяции**.

Отметим, что точность описания формы пика тем выше, чем больше каналов спектра используется при формировании модели пика. Поэтому количество каналов спектрометра и используемый энергетический диапазон должны обеспечивать не менее 5 точек спектра на полуширину пика. Например: мы имеем спектрометр с числом каналов 8192 и разрешением 1,2 кэВ в начале используемого диапазона. В этом случае нам придётся ограничиться верхней энергией равной 8192*1,2/5 = 1966 кэВ.

Предварительно требуется произвести автокалибровку спектрометра и установить параметры процедуры поиска пиков, если они ещё не установлены. Затем измерить образцовую меру активности нуклида или смеси нуклидов (эталон), имеющую достаточное количество пиков в рабочем диапазоне энергий, в заданной геометрии в течение времени достаточного для набора в пиках, которые будут использоваться для расчёта моделей пиков, не менее 1000 импульсов, по режиму циклических измерений с продолжительностью цикла равным среднему времени измерения рабочей пробы. Для

диапазона от 30 до 1500 кэВ обычно используют смесь Am-241 с Eu-152. Поскольку аннигиляционные пики несколько шире обычных, рекомендуется сформировать и модель аннигиляционного пика, используя, например, эталон на основе Na-22.

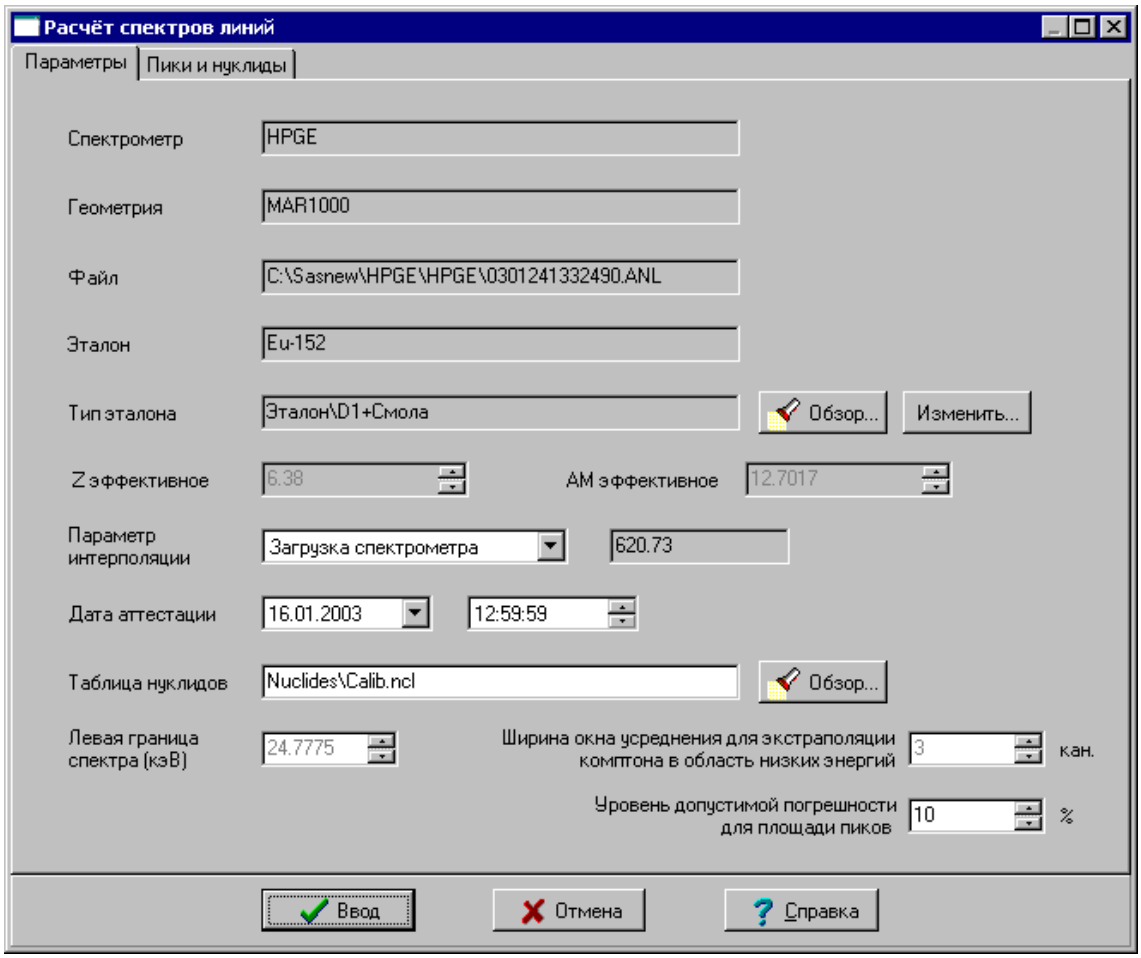
В качестве примера расчёта моделей пиков используем спектр Eu-152. Предварительно пометим маркерами пики, которые будут использоваться для моделей пиков. Спектр, в этом случае может иметь вид:



Процедура расчёта вызывается по пункту меню «***Калибровка / Расчёт моделей пиков...***». Предварительно должен быть проведён поиск пиков в спектре. Поскольку из измеренного спектра должен быть вычтен спектр фона, для случая расчёта моделей пиков поиск пиков должен быть проведён и для используемого спектра фона. Поэтому процедура расчёта выведет в окне программы **SpectrRad-V** используемый спектр фона и предложит оператору отредактировать его при необходимости (подробно процедура редактирования спектра фона описана в главе «***Калибровка эффективности регистрации***»).

Окно программы имеет такой же вид, как и при калибровке эффективности регистрации и имеет две страницы.

Первая страница «**Параметры**» может иметь следующий вид:

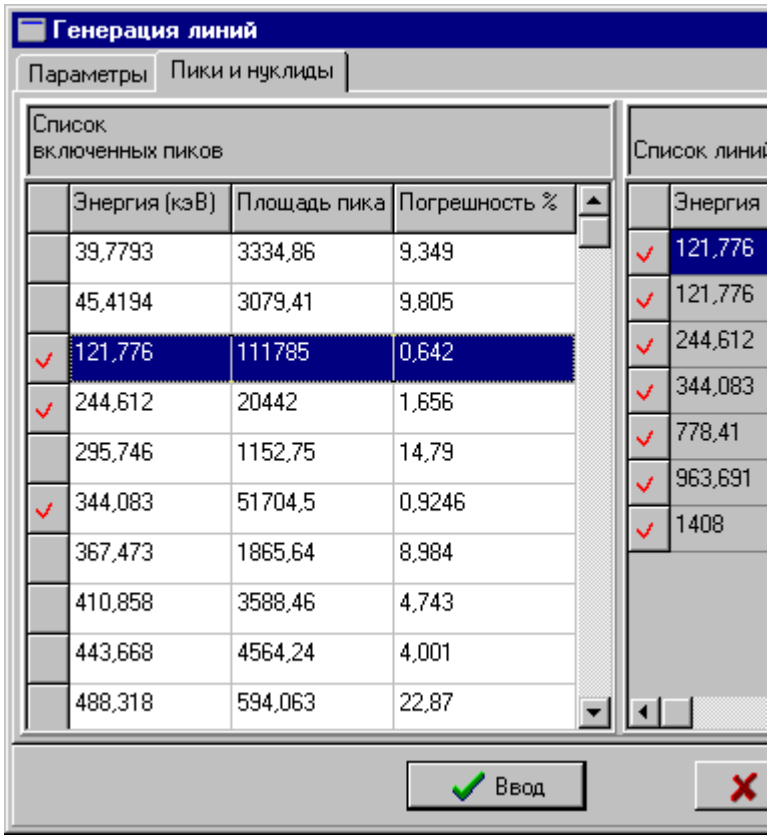


Оператор должен выбрать из предложенного списка или задать:

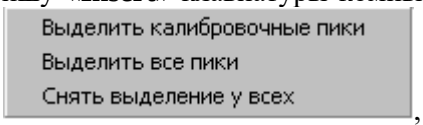
- **Параметр интерполяции** - параметр от которого зависит форма линии. Параметром интерполяции может быть масса или плотность пробы, заданный при установке геометрии геометрический параметр (расстояние пробы от детектора, высота насыпки и т.п.), загрузка спектрометра.
- **Дату аттестации** измеренного эталона (образцовой меры активности).
- Выбрать **таблицу нуклидов**, содержащую сведения о нуклидах эталона.
- Задать **уровень допустимой погрешности для площади пиков** – пики спектра с относительной погрешностью определения площади превышающей заданный уровень будут исключены из списка используемых пиков.

Переключившись на вторую страницу «**Пики и нуклиды**», ввести информацию об используемых пиках, линиях и активностях формирующих их нуклидов.

Страница «**Пики и нуклиды**» имеет три графы: «**Список включенных пиков**», «**Список линий формирующих пики**», и «**Список нуклидов в эталоне**». В примере использован эталон (образцовая мера активности) Eu-152. В этом случае графа «**Список включенных пиков**» может иметь вид:



Серым цветом отмечены пики, которые нельзя использовать (пики утечки, сложения каскадных, слабые пики и т.п.). Красными галочками в левой колонке помечены используемые пики. Перечёркнутая галочка говорит о том, что пик был помечен оператором, но программа не может или не рекомендует его использовать по каким-либо причинам. Оператор может снять выделение или добавить нужный пик двойным щелчком мышки по строчке с информацией о пике. Изменить состояние выбранной линии можно и нажатием на клавишу «**Insert**» клавиатуры компьютера. Правая кнопка мышки выводит небольшое меню



, с помощью которого оператор может выделить или снять выделение либо у калибровочных, либо у всех пиков. Калибровочными пиками считаются пики, энергия которых находится в диапазоне заданном для калибровочных линий таблицы нуклидов.

Вторая графа имеет вид:

Список линий формирующих пики

Энергия пика	Энергия линии	Выход линии(%)	Нуклид	Излучатель	Номер лин
39,7793	39,522	20,826	Eu-152	Eu-152	18
39,7793	40,118	37,728	Eu-152	Eu-152	19
121,78	121,782	28,432	Eu-152	Eu-152	35
121,78	122,06	85,51	Co-57	Co-57	36
244,612	244,699	7,4935	Eu-152	Eu-152	39
344,083	344,281	26,488	Eu-152	Eu-152	44
778,41	778,91	12,741	Eu-152	Eu-152	69
963,702	964,11	14,44	Eu-152	Eu-152	78
1408	1408,01	20,747	Eu-152	Eu-152	93

Ввод Отмена Справка

Оператор также двойным щелчком мышки по строке с информацией о линии может отредактировать список линий, формирующих выбранные пики. Правая кнопка мышки выводит небольшое меню Выделить все линии / Снять выделение у всех, с помощью которого оператор может выделить или снять выделение у всех линий.

Третья графа содержит список нуклидов, формирующих выбранные линии.

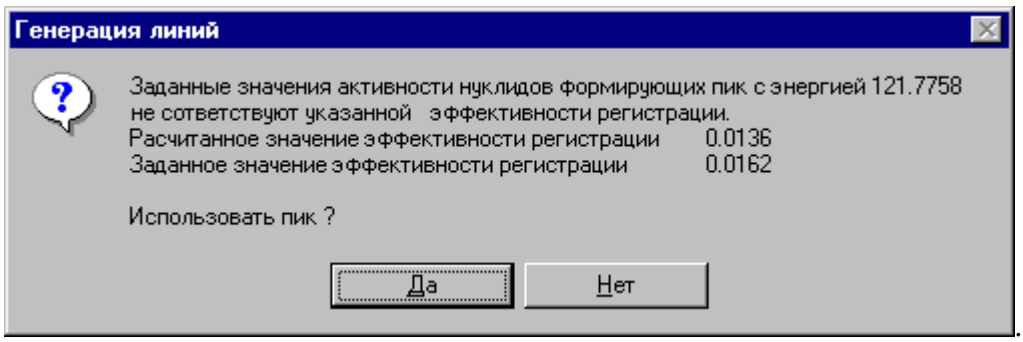
Список используемых нуклидов
Всего 2. Используется 1

Излучатель	Нуклид	Активность (Бк)	Погрешность (Бк)
Eu-152 : !	Ba-133	610	18.3
Eu-152 : !	Eu-152	11100	555
Eu-152 :			

Нуклиды, не нужные для калибровки, можно удалить, щелкнув правой кнопкой мышки по таблице нуклидов. Вызванное всплывающее меню содержит три пункта: «**Выделить все нуклиды**», «**Снять выделение у всех**» и «**Удалить не отмеченные нуклиды**». Выделение нуклидов производится двойным щелчком мышки по названию нуклида.

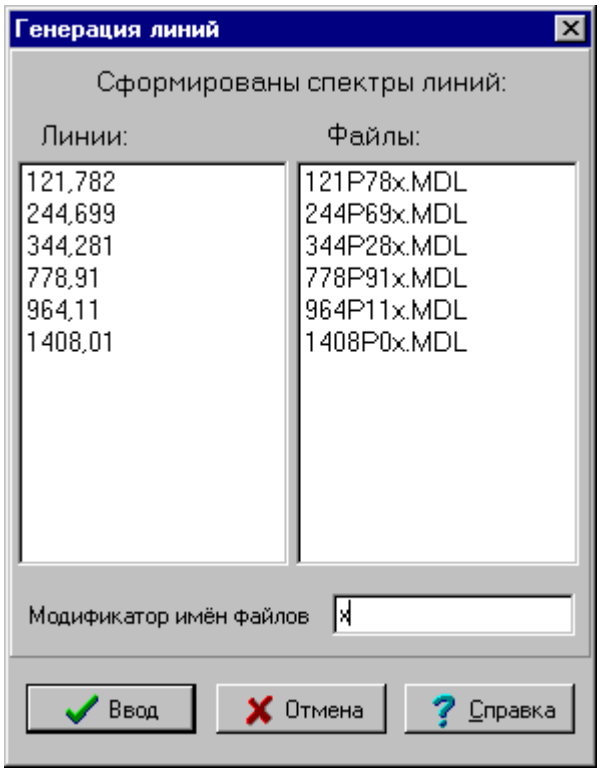
Оператор должен ввести значение активностей и погрешностей нуклидов, присутствующих в эталоне на дату аттестации. Для геометрий измерений в «тонких» и промежуточных слоях - общую активность нуклидов в эталоне в Беккерелях, для геометрии измерений в «толстом» слое - удельную активность нуклидов в Бк/кг.

Нажатие на клавишу «**Ввод**» запускает процедуру расчёта моделей пиков. При этом программа проверяет соответствие, рассчитанным по сформированным моделям пиков, значений эффективности регистрации существующей калибровке эффективности регистрации и, в том случае если они не совпадают, выдаёт предупреждающее сообщение. Например:



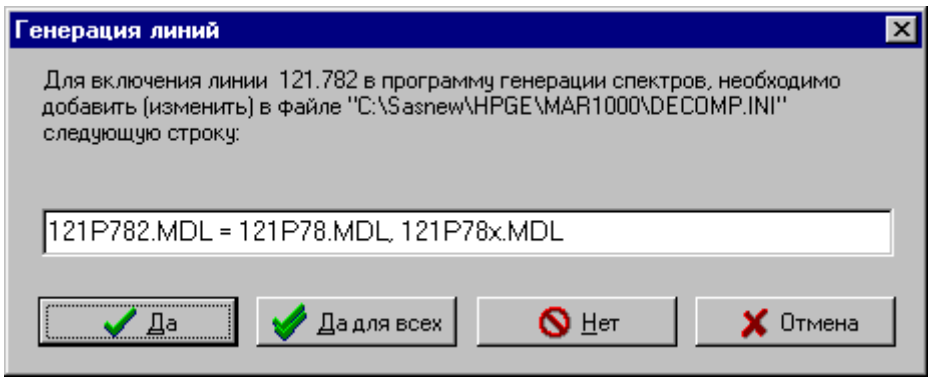
Такое несовпадение может быть вызвано тем, что в используемом пике учитываются не все формирующие его линии. И если энергии таких не учтённых линий отличаются от энергий учтённых линий в качестве модели линии мы получим отклик на несколько линий – ошибочную более широкую модель пика. Поэтому, только если мы уверены, что такое несовпадение вызвано не ошибочным определением формирующих пик линий, границ пика и аппроксимацией непрерывного рассеяния, пик можно использовать для расчёта модели пика.

По завершении расчёта, программа предлагает сохранить сформированные спектры моделей пиков в папке «**Elements**» и добавить необходимые строки в файле «**Decomp.ini**», для подключения рассчитанных спектров, соответствующих заданному в калибровочном спектре **параметру интерполяции** (плотности или «размеру» пробы), в программу обработки. Окно процедуры сохранения может иметь вид:



Названия файлов для сохранения спектров формируются из энергий линий и, при формировании одного и того же набора спектров моделей пиков для различных параметров интерполяции, для того чтобы вновь созданные файлы не переписали существующие модели пиков, а были включены отдельно для перерасчёта формы линий в зависимости от параметра интерполяции, в форме предусмотрено поле для ввода оператором **модификатора имён файлов**.

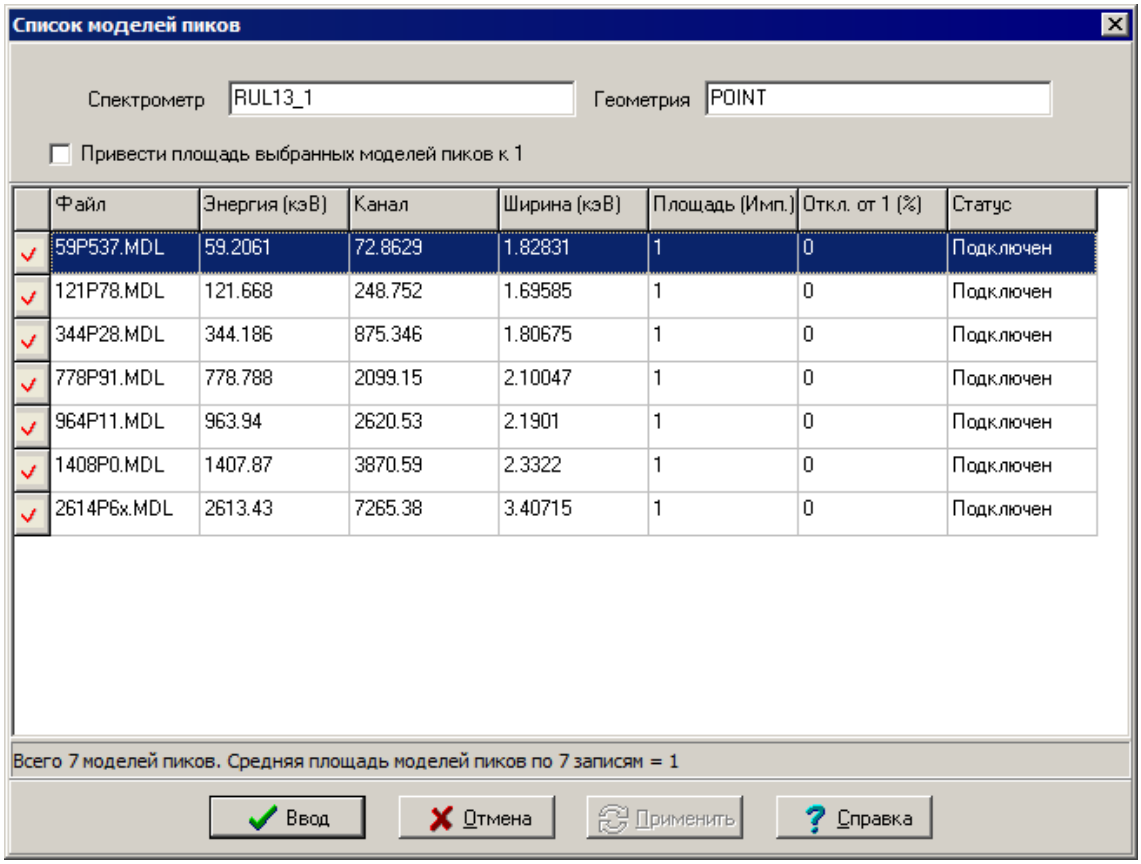
При сохранении спектров программа формирует окно с информацией о предлагаемой модификации соответствующей строки в файле «**Decomp.ini**». Например:



Оператор может согласиться с предложенной модификацией файла «**Decomp.ini**» или отредактировать строку самостоятельно.

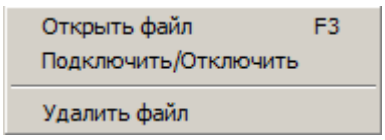
Рассчитанный пик полного поглощения излучения квантов одной энергии – модель пика для разрешённых спектров наиболее точно связывает положение линии на шкале каналов с энергией линии и ширина пика соответствует ширине одной линии. Поэтому после сохранения сформированных моделей программа предлагает оператору уточнить энергетическую калибровку спектрометра и калибровку ширины пиков. При уточнении калибровки по моделям пиков используются все сформированные модели, а не только те что сформированы настоящей процедурой. Поэтому если оператор предполагает провести расчёт моделей пиков и по другим эталонам, уточнение энергетической калибровки и калибровки ширины пиков можно отложить до завершающего расчёта моделей пиков. Такую калибровку можно провести в любое время после завершения расчёта моделей пиков, пользуясь пунктами главного меню: «***Калибровка\Энергетическая\По моделям пиков…***» и «***Калибровка\Ширины пиков\По моделям пиков…***».

Список рассчитанных моделей пиков можно посмотреть, щелкнув по пункту меню «***Калибровка / Список моделей пиков…***». Форма просмотра может иметь вид:



Файл	Энергия (кэВ)	Канал	Ширина (кэВ)	Площадь (Имп.)	Откл. от 1 (%)	Статус
59P537.MDL	59.2061	72.8629	1.82831	1	0	Подключен
121P78.MDL	121.668	248.752	1.69585	1	0	Подключен
344P28.MDL	344.186	875.346	1.80675	1	0	Подключен
778P91.MDL	778.788	2099.15	2.10047	1	0	Подключен
964P11.MDL	963.94	2620.53	2.1901	1	0	Подключен
1408P0.MDL	1407.87	3870.59	2.3322	1	0	Подключен
2614P6x.MDL	2613.43	7265.38	3.40715	1	0	Подключен

Площадь пиков должна быть раной единице. Если она, по каким либо причинам отличается от единицы, щелчок по кнопке «**Применить**» при установленной галочке «**Привести площадь выбранных моделей пиков к 1**» приводит площади моделей пиков к единице.

Пользуясь небольшим всплывающим меню 

оператор имеет возможность посмотреть файл, подключить его к процедурам обработки или отключить, удалить файл. Удалить файл можно только после его отключения.

Расчёт моделей линий

Спектр линии (или модель линии) для линейчатых спектров – полный отклик спектрометра на один квант излучения определённой энергии включающий для гамма квантов и спектр непрерывного рассеяния. То есть спектр линии является функцией эффективности регистрации излучения заданной энергии в каналах спектрометра (для разрешённых спектров используется интеграл такой функции по всем каналам спектрометра).

Расчёт спектров линий для обработки линейчатых спектров без поиска пиков необходим в том случае, если у нас нет возможности рассчитать элементарный спектр нуклида непосредственно из спектров эталонов. В этом случае пакет предоставляет пользователю возможность генерировать необходимые спектры по библиотеке нуклидов и имеющимся элементарным спектрам. При этом необходимо учитывать, что данная процедура дополнительно к всем тем погрешностям, которые вошли в рассчитанные элементарные спектры нуклидов, дополняет генерированные спектры погрешностями, связанными с неопределенностью библиотек нуклидов, особенностями формирования спектров на данном спектрометре (пики утечек, каскадные переходы и т.п.), погрешностями интерполяции - экстраполяции данных.

Суть метода заключается в расчете отклика на излучение определенной энергии ***e*** интерполяцией (экстраполяцией) по ближайшим из известных спектров откликов на опорные энергии $\boldsymbol{e_1}$ и $\boldsymbol{e_2}$.

$$f(e,i) = ((e_2 - e)\cdot f(e_1,k_1,i) + (e_1 - e)\cdot f(e_2,k_2,i))/(e_2 - e_1),\ldots k_1 = e/e_1,\ k_2 = e/e_2 \quad \textbf{(1)}$$

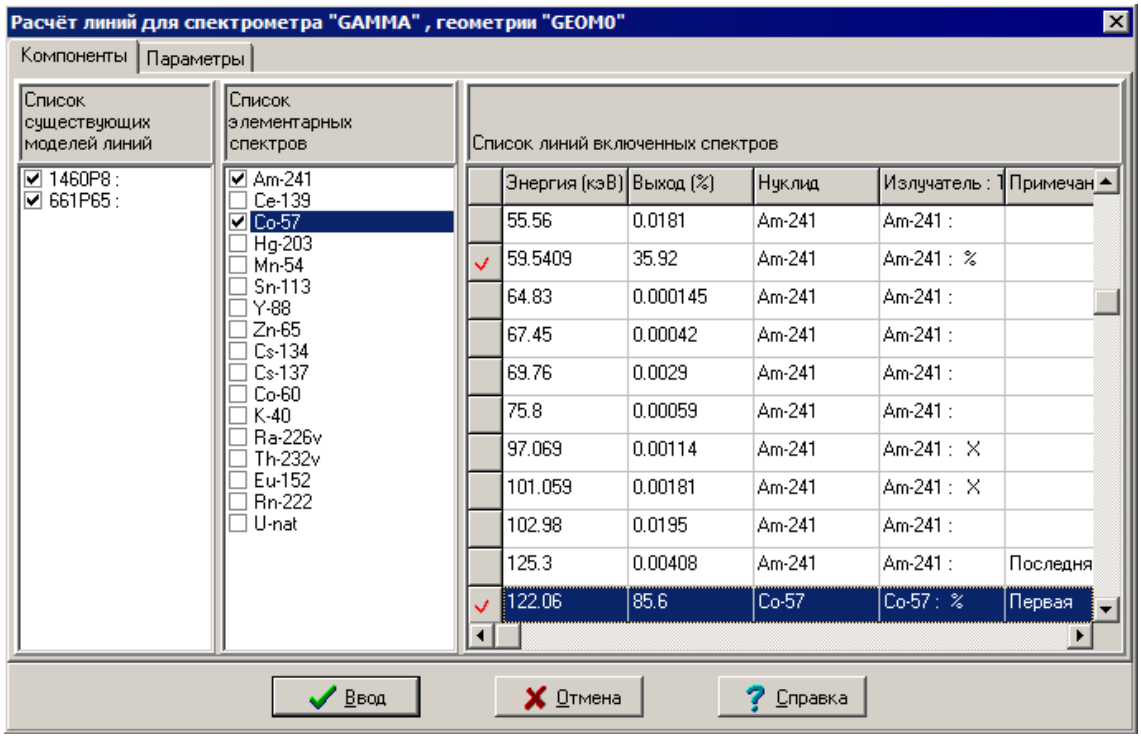
Спектр нуклида $F = \sum A_j \cdot f_j$ - сумма откликов с соответствующим квантовым выходом A_j всех линий данного нуклида.

Чем больше мы имеем опорных линий в рабочем диапазоне спектрометра, тем точнее будет интерполяция. К сожалению, например, для гамма спектрометрии практически нет нуклидов с единственной линией. Поэтому отклики на излучение гамма линий также рассчитываются из спектров эталонов с использованием того же предположения ***(1)***. Например: мы имеем в качестве эталона нуклид с двумя гамма линиями $\boldsymbol{e_1}$ и $\boldsymbol{e_2}$. Необходимо рассчитать отклик спектрометра на излучение $\boldsymbol{e_1}$. За счет комптоновского рассеяния спектры линий накладываются друг на друга и, в итоге, мы имеем ***n*** уравнений и ***2n*** неизвестных. Но, выразив по формуле ***(1)*** отклик от $\boldsymbol{e_2}$ через $\boldsymbol{e_1}$, мы получим как раз ***n*** неизвестных. Реальная процедура объединяет в общую систему уравнений до 10 спектров эталонов и, если необходимо, уже рассчитанных откликов на линии известных энергий. Для расчета спектров линий необходимо выбирать нуклиды имеющие одну сильную линию и небольшое количество слабых.

Спектр линии зависит и от плотности счётного образца и от геометрических параметров счётного образца или геометрии измерений (в том случае если используется геометрия с изменяемым геометрическим параметром) и от загрузки спектрометра - от **параметра пересчёта** (интерполяции), задаваемого в параметрах геометрии, поэтому для корректного расчёта спектров линий, соответствующих параметру интерполяции измеренного спектра рабочей пробы, расчёт спектров линий необходимо провести несколько раз с различными значениями **параметра пересчёта**.

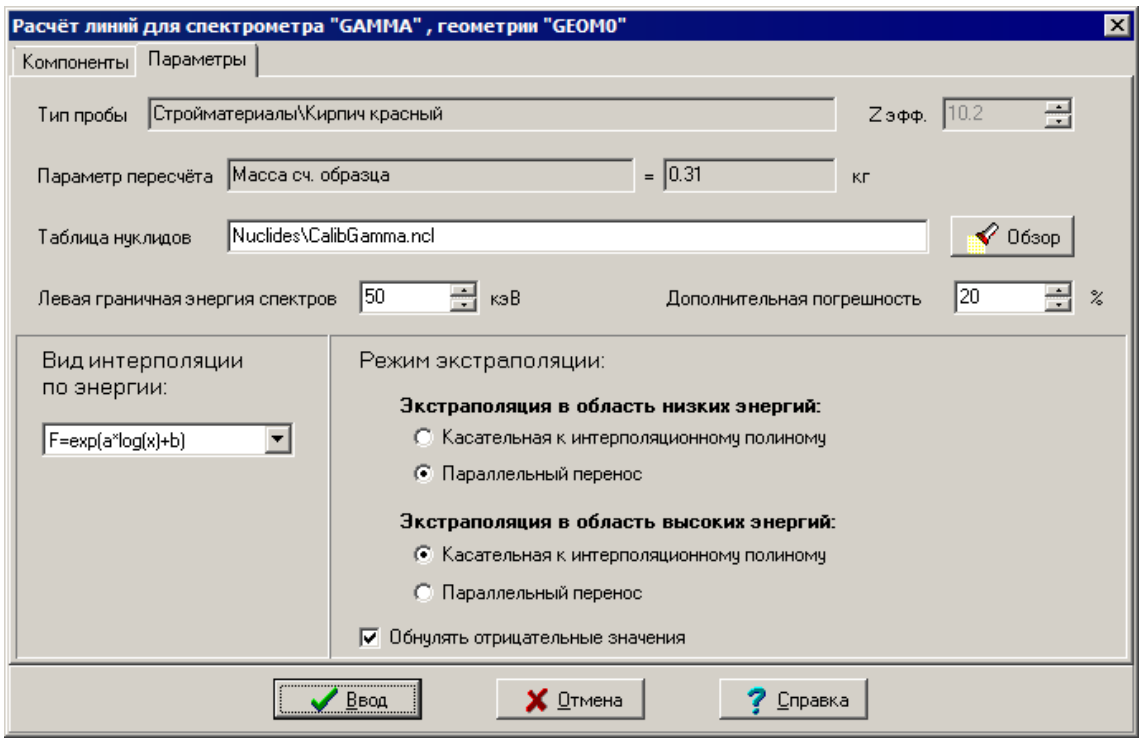
Процедура расчёта спектров линий использует уже сформированные элементарные спектры нуклидов и ранее рассчитанные спектры линий. Элементарные спектры и существующие модели линий предварительно рассчитываются в соответствии с параметром интерполяции, выбранного в главном окне программы спектра, и рассчитанный набор спектров используется для расчёта спектров линий с заданным **параметром пересчёта**. Точность расчёта зависит от характера элементарных спектров - чем меньше пиков, чем больше относительный выход рассчитываемой линии, тем больше точность расчёта. Рекомендуемый набор элементарных спектров для сцинтилляционной гамма спектрометрии: Am-241, Ce-139, Co-57, Cs-137, K-40.

Процедура генерации вызывается по пункту меню «***Калибровка / Расчёт спектров линий...***». Окно программы расчёта спектров линий имеет две страницы. Первая страница «**Компоненты**» может иметь следующий вид:



Оператор в столбце «**Список существующих моделей линий**», если список не пуст, должен отметить линии, которые будут использованы для расчёта дополнительно формируемых спектров линий, а в столбце «**Список элементарных спектров**» - элементарные спектры нуклидов, содержащие рассчитываемые линии.

В разделе «**Список линий включённых спектров**» оператор должен отметить нужные линии. Линии включаются (или исключаются из генерации) двойным щелчком по строке списка в области любого столбца кроме первого, выделенного серым цветом. Изменить состояние выбранной линии можно и нажатием на клавишу «**Insert**» клавиатуры компьютера. Включённые линии отмечаются красной «галочкой» в крайнем левом столбце. Оператор должен выбрать наиболее мощные линии нуклида. В том случае, если нет сформированных ранее моделей линий и в списке элементарных спектров нет нуклидов с одной только линией, оператор должен выбрать либо первые, либо последние линии в спектре каждого нуклида (см. «Математика», «Расчёт спектров линий для слабо разрешённых спектров»).



На второй страница «**Параметры**», оператор должен выбрать один их четырёх возможных режимов интерполяции моделей линий по энергии:

F=a*x+b

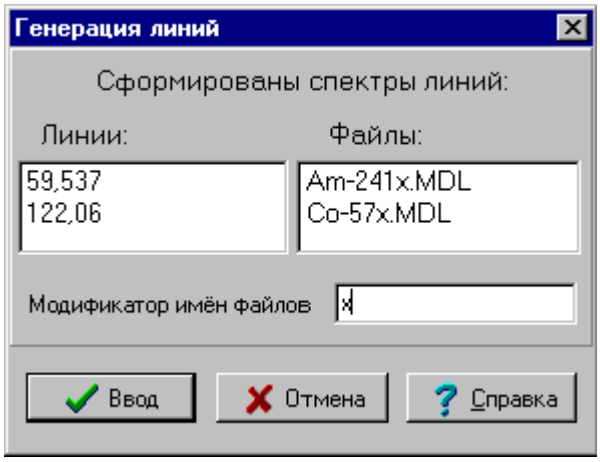
F=exp(a*x+b)

F=a*log(x)+b

F=exp(a*log(x)+b) Здесь: **F** – значение функции, **x** – энергия, **a** и **b** – параметры линейной интерполяции (используется кусочно-линейная интерполяция).

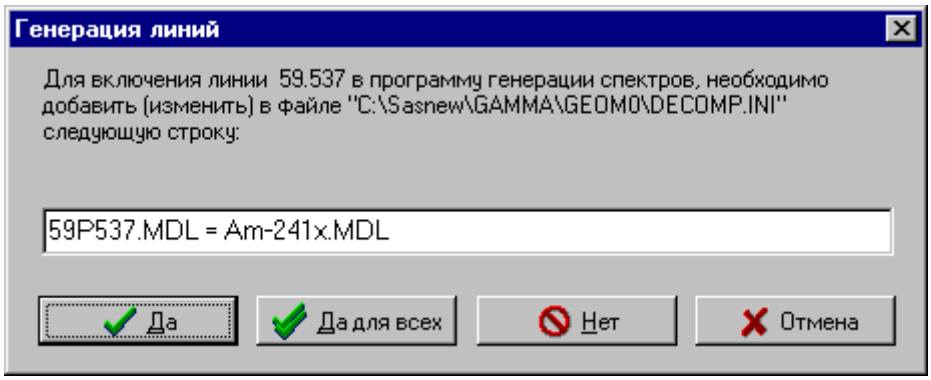
И задать режим экстраполяции в область низких и в область высоких энергий: либо **касательная к интерполяционному полиному**, либо **параллельный перенос**. При параллельном переносе используется только одна ближайшая модель линии сжатая или растянутая в соответствии с заданной энергией. Поскольку интерполируемые функции всегда положительны и определены для положительных значений абсцисс, рекомендуется использовать линейную интерполяцию в двойном логарифмическом масштабе (**F=exp(a*log(x)+b)**), **параллельный перенос** для экстраполяции в область низких и высоких энергий.

Нажатие на клавишу «**Ввод**» запускает процедуру расчёта спектров линий. По завершении расчёта, программа предлагает сохранить сформированные спектры линий в папке «**Elements**» и добавить необходимые строки в файле «**Decomp.ini**», для подключения рассчитанных спектров, соответствующих заданному **параметру пересчёта** (плотности или «размеру» пробы), в программу обработки. Окно процедуры сохранения может иметь вид:



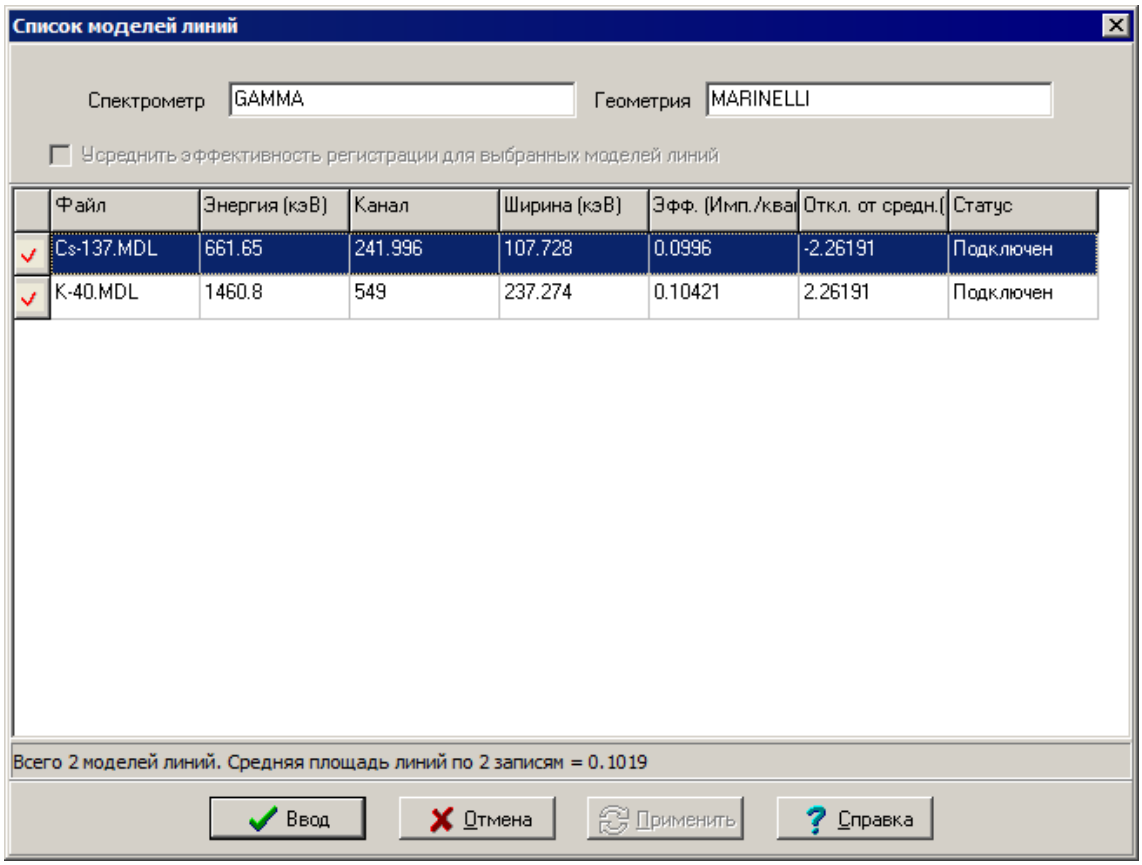
Названия файлов для сохранения спектров линий формируются из названий файлов использованных элементарных спектров и, при формировании одного и того же набора спектров линий для различных параметров интерполяции, для того чтобы вновь созданные файлы не переписали существующие модели линий, а были включены отдельно для перерасчёта линий в зависимости от параметра интерполяции, в форме предусмотрено поле для ввода оператором **модификатора имён файлов**.

При сохранении спектров программа формирует окно с информацией о предлагаемой модификации соответствующей строки в файле «**Decomp.ini**». Например:

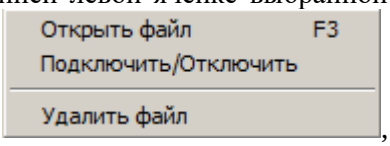


Оператор может согласиться с предложенной модификацией файла «**Decomp.ini**» или отредактировать строку самостоятельно.

По завершении процедуры расчёта программа выводит список всех сформированных моделей линий:



Оператор может отредактировать значение эффективности регистрации для линии, усреднить эффективность регистрации для выбранных линий (считается, что в альфа спектрометрии эффективность регистрации слабо зависит от энергии линий). Выбор записи осуществляется двойным щелчком мышки по крайней левой ячейке выбранной строки. Пользуясь небольшим всплывающим меню



, оператор может открыть файл выбранной модели или удалить файл. Удалить можно только файл модели линии, не подключённой к процедурам обработки спектров.

Расчёт моделей линий для альфа спектров

Альфа спектры обычно имеют разрешение лучше сцинтилляционных гамма спектров с детекторами NaI(Tl), но хуже разрешения гамма спектров с охлаждаемыми детекторами из особо чистого германия. Поэтому для них реализованы два варианта расчёта моделей линий: расчёт по элементарным спектрам для слабо разрешённых линейчатых спектров (и для спектров не имеющих линейчатой структуры) и расчёт по измеренному спектру эталона похожий на расчёт линий для разрешённых спектров. Выбор варианта расчёта определяется типом выбранного оператором спектра в главном окне программы: если выбран уже рассчитанный элементарный спектр – будет расчёт по элементарному спектру, если выбран измеренный спектр эталона – будет расчёт по спектру эталона.

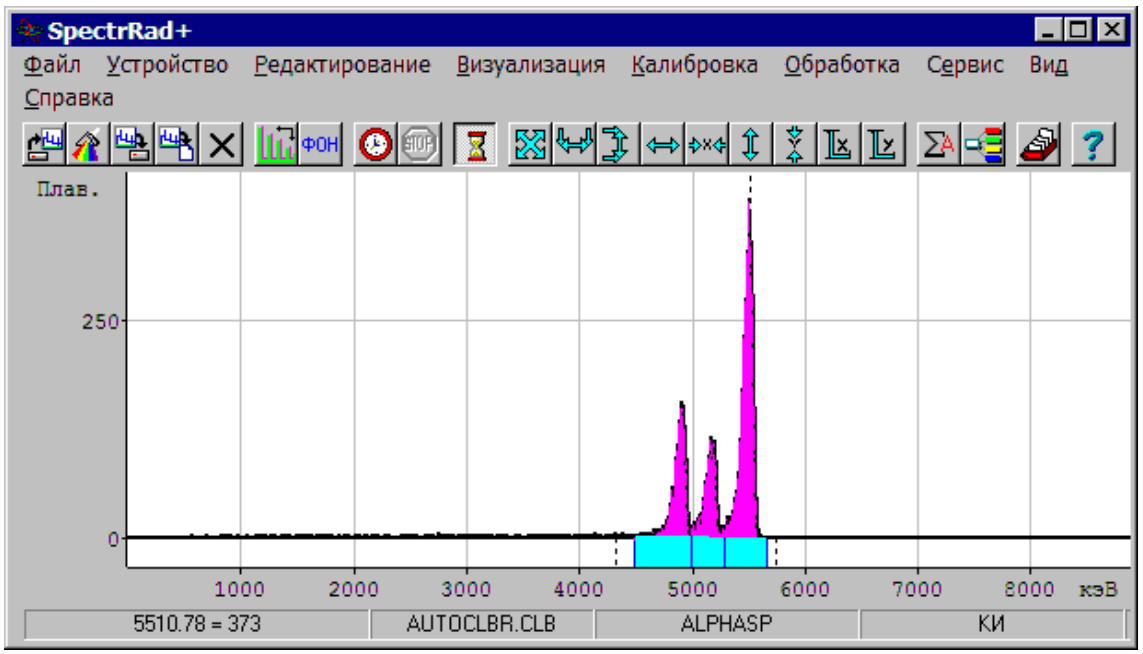
Деформация модели линии в зависимости от энергии линии полагается деформацией аффинного типа $\varphi(z) = \varphi(\frac{x-p}{w})$. Учёт более сложных изменений формы

в зависимости от энергии линии можно обеспечить набором моделей линий для различных энергий.

В качестве модели линии рассчитывается отклик спектрометра на один квант альфа излучения, то есть модель линии будет содержать и эффективность регистрации. Поскольку эффективность регистрации да и форма спектра линии зависит и от количества осаждённого на подложку материала и от геометрических параметров счётного образца или геометрии измерений и от загрузки спектрометра - от **параметра интерполяции**, задаваемого в параметрах геометрии, поэтому для корректного расчёта спектров линий, соответствующих параметру интерполяции измеренного спектра рабочей пробы, расчёт спектров линий рекомендуется провести несколько раз с использованием эталонов с различными значениями **параметра интерполяции**.

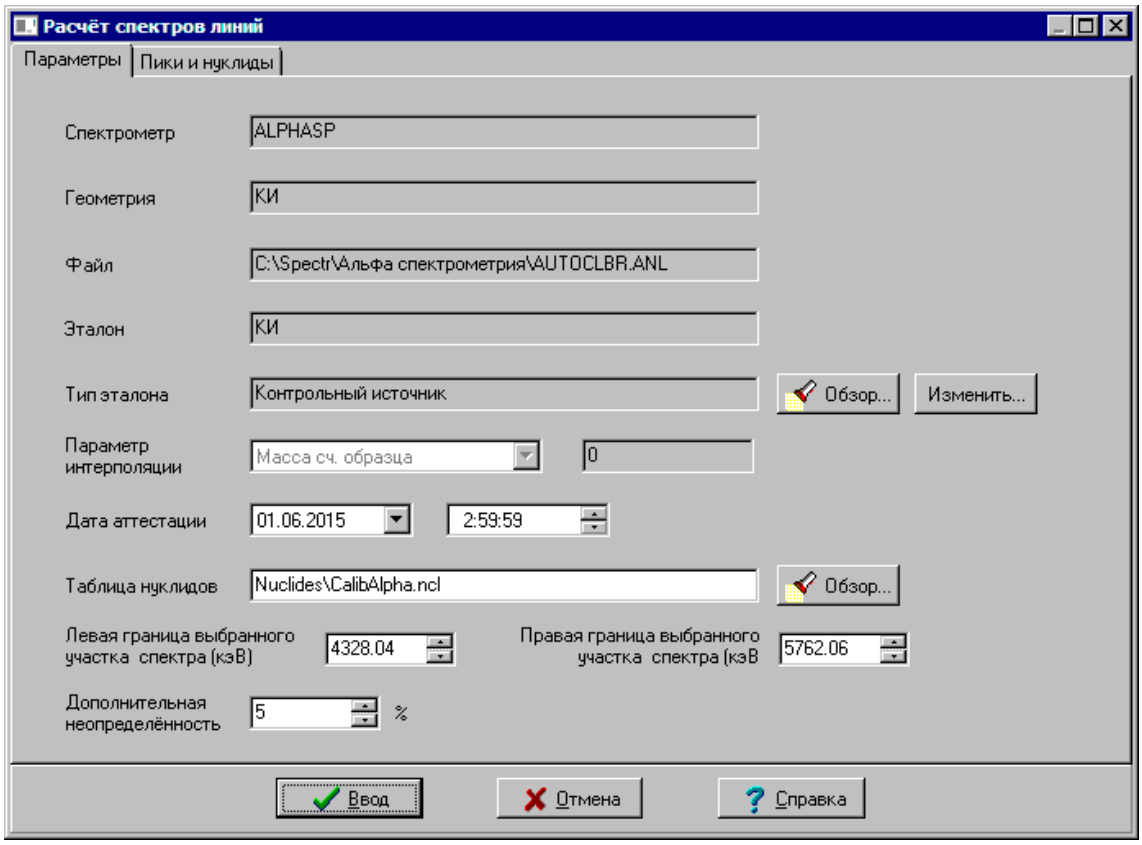
Предварительно требуется произвести автокалибровку спектрометра, измерить фон и установить параметры процедуры поиска пиков, если они ещё не установлены. Затем измерить образцовую меру активности нуклида или смеси нуклидов (эталон). В качестве примера расчёта спектров линий используем спектр плутониев: Pu-238, Pu-240 и Pu-242.

Оператор должен выделить маркерами используемый для расчёта модели линии мультиплет и установить маркер на наиболее мощный пик в мультиплете. Наиболее мощная альфа линия, формирующая этот пик, и будет рекомендована процедурой обработки для расчёта модели линии. Желательно, чтобы этот пик был крайним в мультиплете, поскольку матрица, формируемая процедурой расчёта, в этом случае будет иметь треугольный характер и будет более обусловленной, что в итоге скажется на точности расчёта. Спектр, в этом случае, может иметь вид:



Процедура расчёта вызывается по пункту меню «***Калибровка / Расчёт спектров линий...***». Окно процедуры расчёта имеет две страницы.

Первая страница «**Параметры**» может иметь следующий вид:



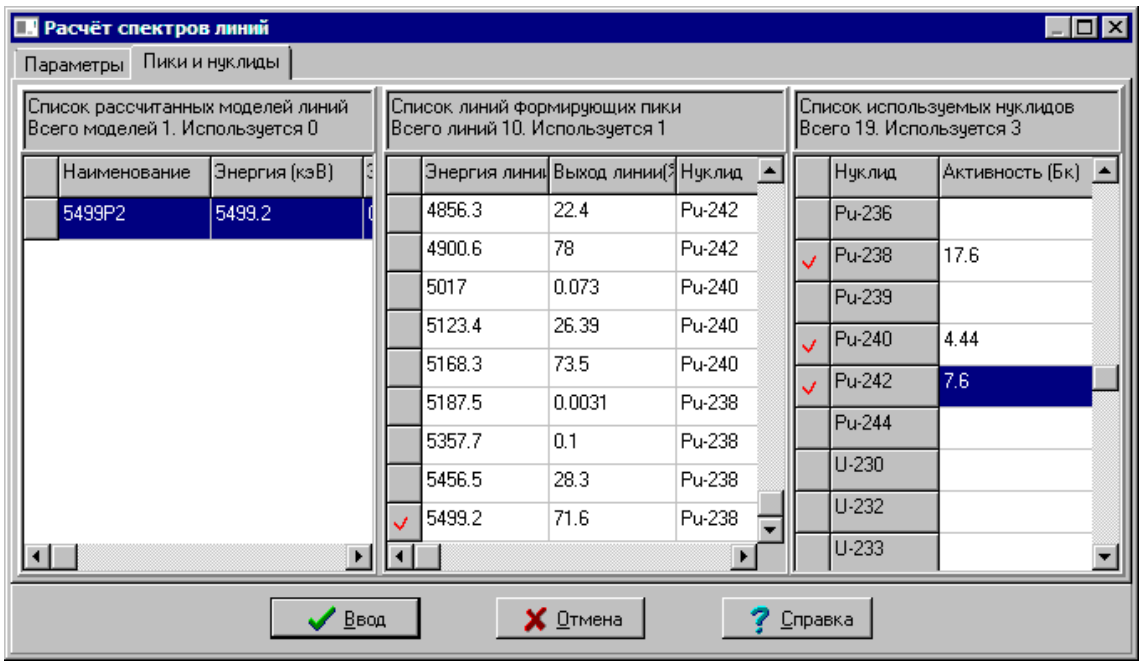
Оператор должен выбрать из предложенного списка или задать:

- **Дату аттестации** измеренного эталона (образцовой меры активности).
- Выбрать **таблицу нуклидов**, содержащую сведения о нуклидах эталона.
- Уточнить или задать границы выбранного участка спектра
- Задать значение **дополнительной неопределенности** для рассчитываемой модели линии.

Переключившись на вторую страницу «**Пики и нуклиды**», ввести информацию об используемых и рассчитанных ранее моделях линий, линиях и активностях нуклидов формирующих выбранный участок спектра.

Страница «**Пики и нуклиды**» имеет три графы: «**Список рассчитанных моделей линий**», «**Список линий формирующих пики**», и «**Список используемых нуклидов**». В примере использован эталон (образцовая мера активности) Pu-238, Pu-240 и Pu-242.

В первой графе оператор может отметить модели линий, которые уже рассчитаны и будут использоваться при расчете новой модели линии. При этом, если какая-либо из линий формирующих мультиплет расположена ближе к рассчитанной модели линии, её вклад будет вычтен из спектра. Это повысит обусловленность системы уравнений и точность расчёта линии. В примере повторно рассчитывается модель линии для энергии равной 5499.2 кэВ, поэтому использовать уже рассчитанную модель бесполезно – в этом случае она учитываться не будет.



Вторая графа содержит список линий выбранных нуклидов формирующих заданный участок спектра.

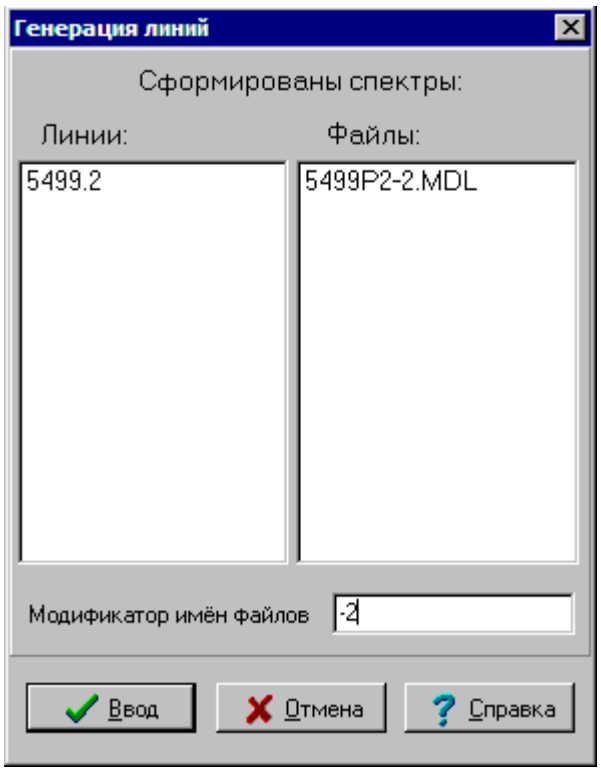
Оператор двойным щелчком мышки по строке с информацией о линии может выбрать линию, для которой будет рассчитана модель. Рекомендуется выбирать крайнюю линию с наиболее мощным выходом (с учётом активности нуклида). С помощью всплывающего меню оператор может удалить малозначащие, но мешающие, линии (п.меню «**Удалить линию**»), либо восстановить список линий («**Восстановить линии**»).

Третья графа содержит список нуклидов, формирующих выбранные линии.

Нуклиды, не нужные для калибровки, можно удалить, щелкнув правой кнопкой мышки по таблице нуклидов. Вызванное всплывающее меню содержит три пункта: «**Выделить все нуклиды**», «**Снять выделение у всех**» и «**Удалить не отмеченные нуклиды**». Выделение нуклидов производится двойным щелчком мышки по названию нуклида.

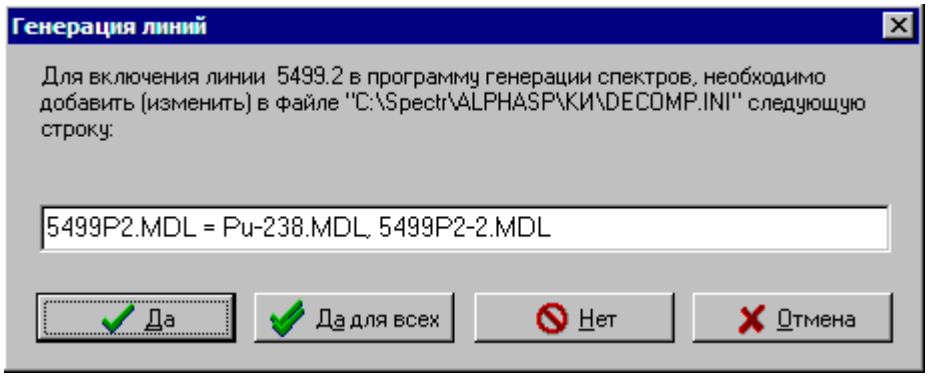
Оператор должен ввести значение активностей нуклидов, присутствующих в эталоне на дату аттестации. Для геометрий измерений в «тонких» и промежуточных слоях - общую активность нуклидов в эталоне в Беккерелях, для геометрии измерений в «толстом» слое - удельную активность нуклидов в Бк/кг.

Нажатие на клавишу «**Ввод**» запускает процедуру расчёта спектров линий. По завершении расчёта, программа предлагает сохранить сформированные спектры линий в папке «**Elements**» и добавить необходимые строки в файле «**Decomp.ini**», для подключения рассчитанных спектров, соответствующих заданному в калибровочном спектре **параметру интерполяции** (плотности или «размеру» пробы), в программу обработки. Окно процедуры сохранения может иметь вид:



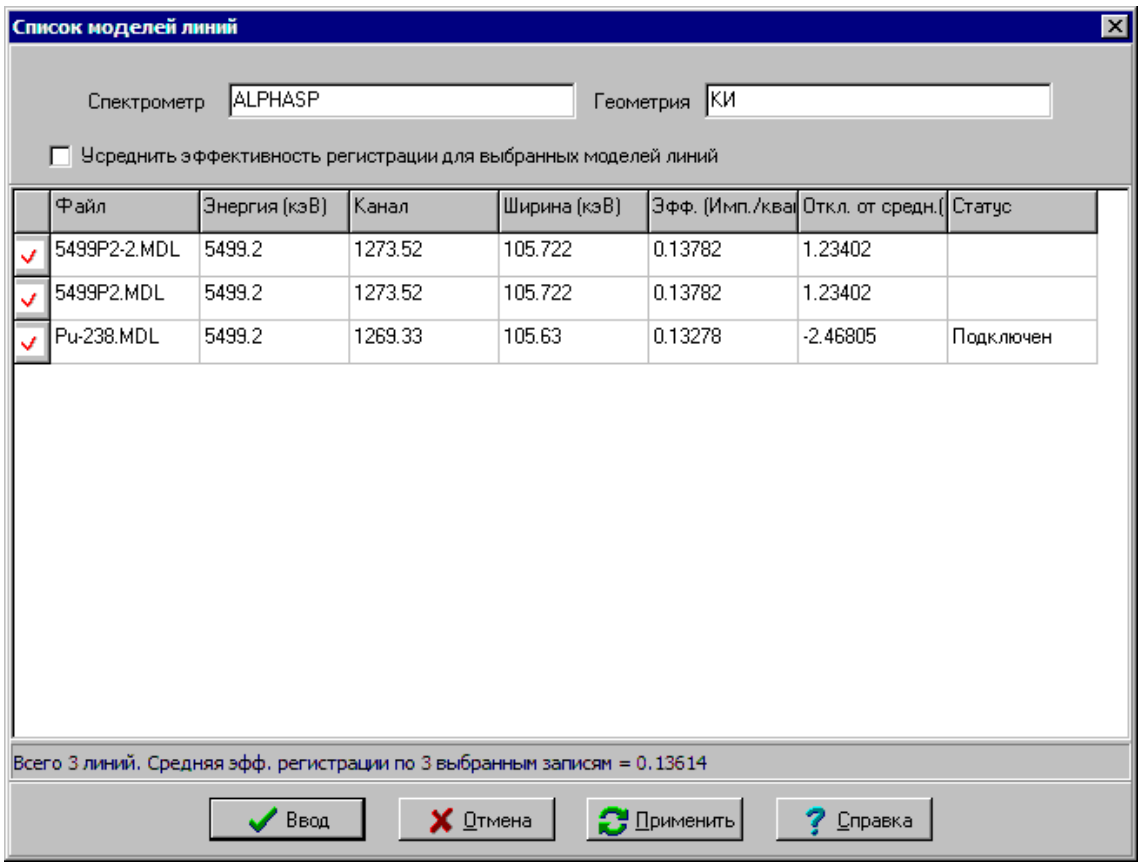
Название файла для сохранения спектра модели линии формируется из энергии линии. При формировании одной и той же модели линии для различных параметров интерполяции, для того чтобы вновь созданные файлы не переписали существующие, а были включены отдельно для перерасчёта формы линий в зависимости от параметра интерполяции, в форме предусмотрено поле для ввода оператором **модификатора имён файлов**.

При сохранении спектров программа формирует окно с информацией о предлагаемой модификации соответствующей строки в файле «**Decomp.ini**». Например:

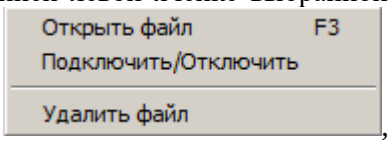


Оператор может согласиться с предложенной модификацией файла «**Decomp.ini**» или отредактировать строку самостоятельно.

По завершении процедуры расчёта программа выводит список всех сформированных моделей линий:



Оператор может отредактировать значение эффективности регистрации для линии, усреднить эффективность регистрации для выбранных линий (считается, что в альфа спектрометрии эффективность регистрации слабо зависит от энергии линий). Выбор записи осуществляется двойным щелчком мышки по крайней левой ячейке выбранной строки. Пользуясь небольшим всплывающим меню



, оператор может открыть файл выбранной модели или удалить файл. Удалить можно только файл модели линии не подключённой к процедурам обработки спектров.

Рассчитанная модель линии наиболее точно связывает положение линии на шкале каналов с энергией линии и ширина пика соответствует ширине одной линии. Поэтому после сохранения сформированных линий оператору рекомендуется уточнить энергетическую калибровку спектрометра и калибровку ширины пиков. При уточнении калибровки по моделям линий используются все сформированные модели, а не только те, что сформированы настоящей процедурой. Поэтому если оператор предполагает провести расчёт спектров линий и по другим эталонам, уточнение энергетической калибровки и калибровки ширины пиков можно отложить до завершающего расчёта моделей линий. Такую калибровку можно провести пользуясь пунктами главного меню: «***Калибровка\Энергетическая\По моделям пиков…***» и «***Калибровка\Ширины пиков\По моделям пиков***…».

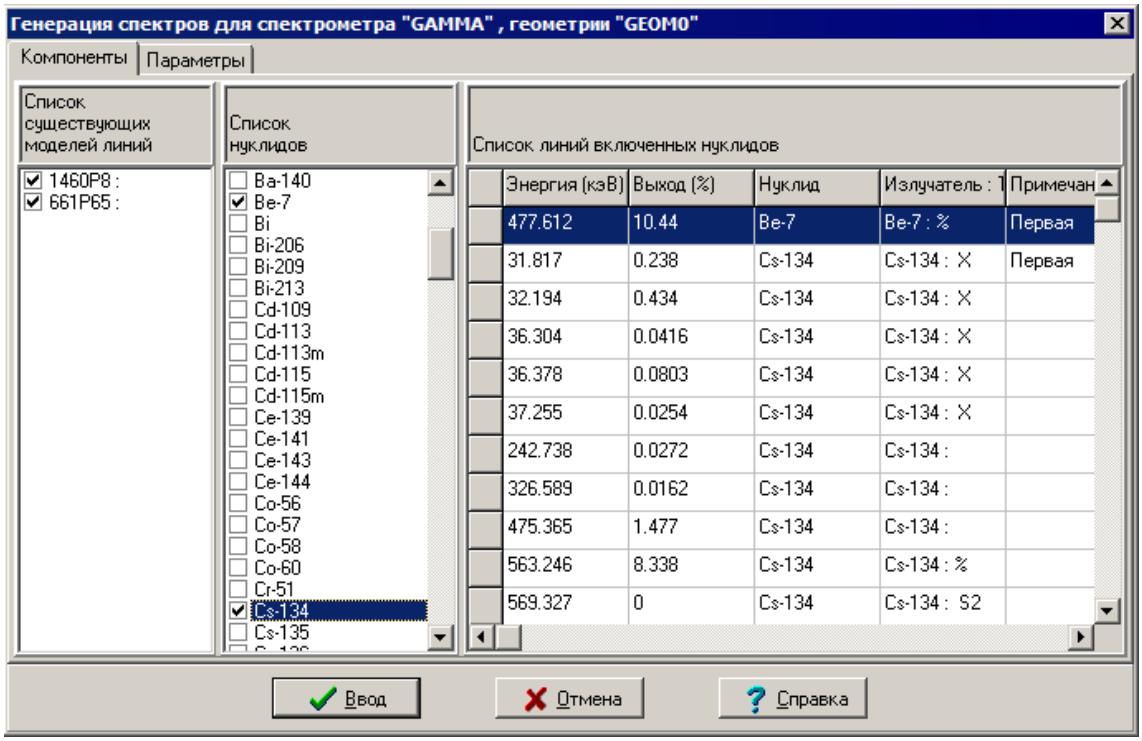
Расчёт элементарных спектров по таблице линий

Процедуры обработки спектров рассчитывают необходимые элементарные спектры автоматически. В том случае если существуют необходимые элементарные спектры, рассчитанные из эталонов, программа, в первую очередь, использует их, но если их нет, необходимые элементарные спектры нуклидов рассчитываются по таблицам линий и калибровкам спектрометра - «**генерируются**». Процедура предварительного расчёта

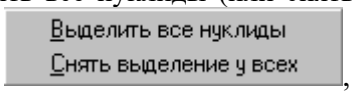
элементарных спектров по таблице линий позволяет сократить время обработки спектров и может быть рекомендована для спектрометров использующих компьютеры с ограниченным быстродействием и для расчёта часто используемых спектров нуклидов. Кроме того, при вызове процедуры расчёта элементарных спектров по таблице линий оператор устанавливает необходимые параметры расчёта, которые запоминаются в файле настройки и будут в дальнейшем использоваться при вызове процедуры автоматической генерации необходимых элементарных спектров. Поэтому можно и не генерировать никаких элементарных спектров, но рекомендуется вызвать процедуру расчёта элементарных спектров по таблице линий для установки параметров генерации спектров.

Генерация спектров возможна только после проведения всех калибровок, расчёта спектров линий и создания необходимых таблиц нуклидов. Обработка спектров с различными параметрами пересчёта (интерполяции) (см. «Установка геометрии») требует нескольких элементарных спектров для расчёта спектра, соответствующего параметру интерполяции (плотности или размеру счётного образца или загрузке спектрометра). Поэтому расчёт элементарных спектров по таблице линий рекомендуется провести столько раз, сколько у нас есть наборов калибровок, с теми значениями параметра пересчёта, что и у наборов эталонов. Например, у нас есть два набора эталонов: с плотностью 1 г/куб.см и 2 г/куб.см. В этом случае мы можем рассчитать два набора элементарных спектров, две функции эффективности регистрации, два набора моделей линий и, соответственно, можем рассчитать по двум наборам калибровок два набора дополнительных элементарных спектров.

Процедура генерации вызывается пунктом меню «***Калибровка / Элементарный спектр / Генерация по таблице линий / По моделям линий...***» для процедуры обработки спектров без предварительного вычитания спектра непрерывного рассеяния и пунктом меню «***Калибровка / Элементарный спектр / Генерация по таблице линий / По моделям пиков...***» для процедуры обработки гамма спектров с предварительным вычитанием спектра непрерывного рассеяния. Окно процедуры генерации имеет две страницы. Первая страница «**Компоненты**» может иметь вид:

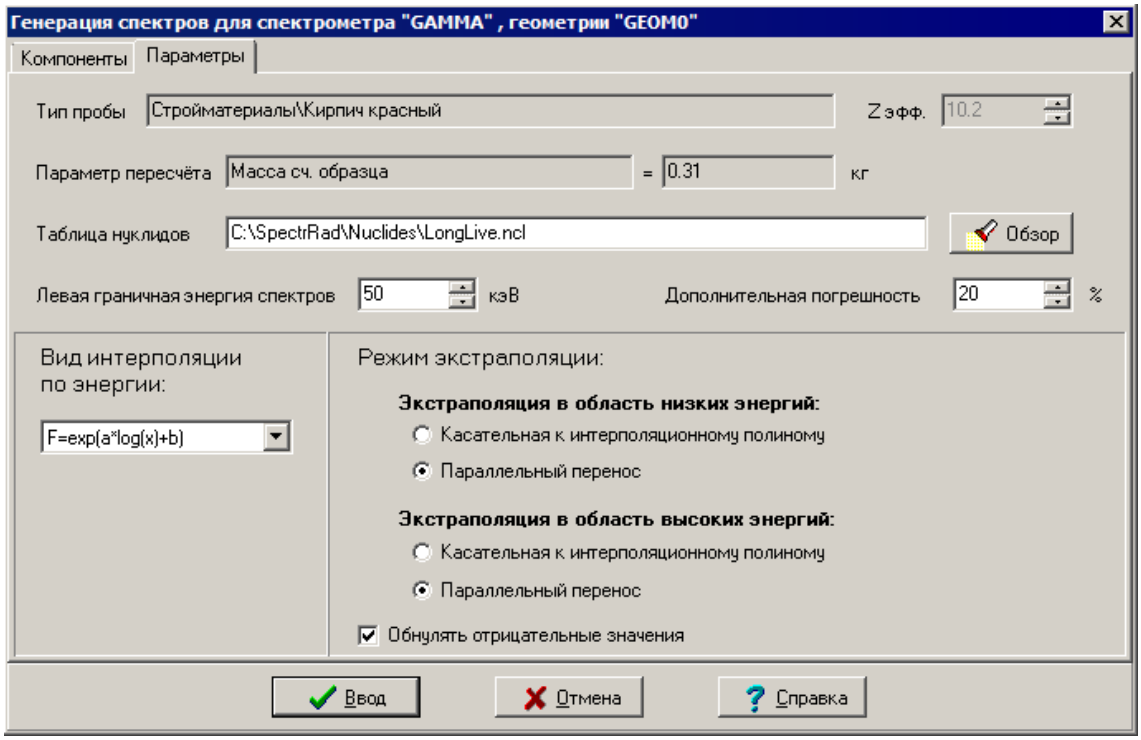


Оператор в столбце «**Список существующих моделей линий**» если список не пуст, должен отметить линии, которые будут использованы для генерации элементарных спектров нуклидов (рекомендуется использовать все линии). При расчёте спектров пиков столбец имеет название «**Список существующих моделей пиков**». В столбце «**Список**

нуклидов» - нуклиды, для которых будут рассчитываться элементарные спектры. Можно выделить все нуклиды (или снять выделение у всего списка), пользуясь всплывающим меню 

, которое вызывается нажатием на правую кнопку мышки.

Раздел «**Список линий включённых нуклидов**» имеет информативный характер. В нём выводится список линий спектров генерируемых нуклидов. В том случае если спектр нуклида имеет линии с энергиями, лежащими далеко от диапазона энергий моделей линий, генерация, для спектров, не имеющих выраженного линейчатого характера (сцинтилляционная спектрометрия), будет весьма приблизительной. Если не выделено ни одного нуклида, раздел отсутствует.



При расчёте спектров пиков учитывается и химический состав счётного образца заданный в графе «**Тип пробы**», в том случае, если он задан (**Z эфф.** > 0). В дальнейшем, при использовании в процедуре декомпозиции рассчитанных элементарных спектров будет учитываться только параметр пересчёта. Для корректного расчёта элементарных спектров, соответствующих параметру пересчёта счётного образца, рекомендуется рассчитать, по меньшей мере, два набора элементарных спектров с различными значениями параметра пересчёта.

На второй страница «**Параметры**», оператор должен выбрать один их четырёх возможных режимов интерполяции моделей линий:

F=a*x+b

F=exp(a*x+b)

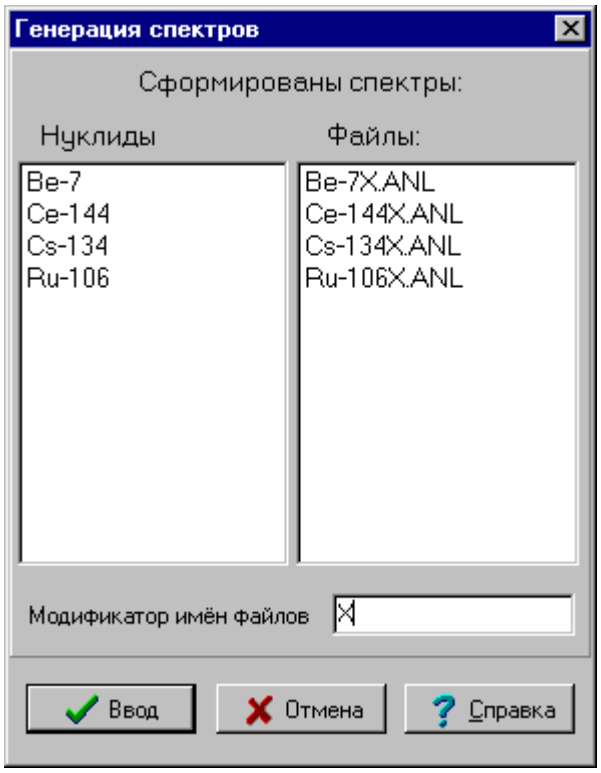
F=a*log(x)+b

F=exp(a*log(x)+b) Здесь: **F** – значение функции, **x** – энергия, **a** и **b** – параметры линейной интерполяции (используется кусочно-линейная интерполяция).

И задать режим экстраполяции в область низких и в область высоких энергий: либо **касательная к интерполяционному полиному**, либо **параллельный перенос**. При параллельном переносе используется только одна ближайшая модель линии сжатая или растянутая в соответствии с заданной энергией. Поскольку интерполируемые функции всегда положительны и определены для положительных значений абсцисс,

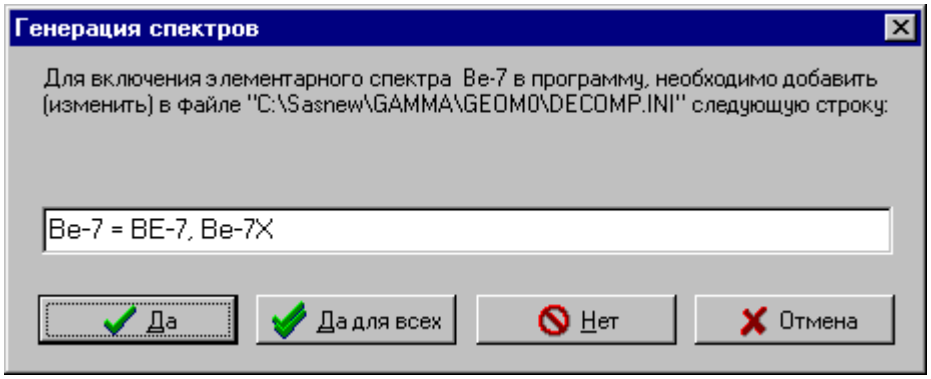
рекомендуется использовать линейную интерполяцию в двойном логарифмическом масштабе (**F=exp(a*log(x)+b)**).

Нажатие на клавишу «**Ввод**» запускает процедуру расчёта спектров нуклидов. По завершении расчёта, программа предлагает сохранить сформированные спектры в папке «**Elements**» и добавить необходимые строки в файле «**Decomp.ini**», для подключения рассчитанных спектров, соответствующих заданному **параметру пересчёта** (плотности или «размеру» пробы), в программу обработки. Окно процедуры сохранения может иметь вид:



Названия файлов для сохранения спектров нуклидов формируются из названий нуклидов и, при формировании одного и того же набора спектров нуклидов для различных параметров интерполяции, для того чтобы вновь созданные файлы не переписали существующие спектры, а были включены отдельно для перерасчёта спектров в зависимости от параметра интерполяции, в форме предусмотрено поле для ввода оператором **модификатора имён файлов**.

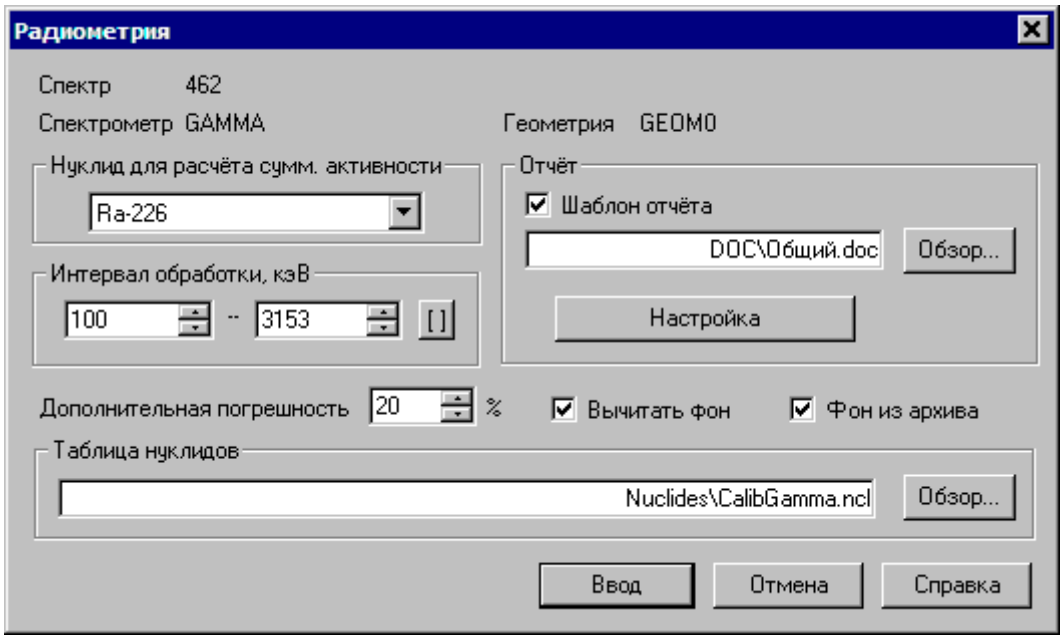
При сохранении спектров программа формирует окно с информацией о предлагаемой модификации соответствующей строки в файле «**Decomp.ini**». Например:



Оператор может согласиться с предложенной модификацией файла «**Decomp.ini**» или отредактировать строку самостоятельно.

Радиометрия. Установка параметров

Пункт меню «***Обработка / Радиометрия / Настройка...***» позволяет оператору установить необходимые параметры для процедуры вычисления «суммарной» активности пробы. При этом на экран выводится окно следующего вида:



Оператору требуется выбрать **нуклид для расчёта суммарной активности** в заданном энергетическом **интервале обработки**. «Кнопка» [ ] служит для подстановки положений маркеров в качестве границ обработки.

Выбрать **таблицу нуклидов,** содержащую данные по выбранному нуклиду. Кнопка Обзор... позволяет найти файл таблицы нуклидов на компьютере.

Оператор должен задать **дополнительную** к статистической **погрешность** (в процентах). Установить режим вычитания фона (флажок «**Вычитать фон**»), указать какой фон использовать: сохранённый **фон из архива** или текущий фон.

И сформировать форму отчета о результатах вычислений. Флажок «**Шаблон отчета**» и кнопка Обзор... позволяют задать файл шаблона отчета. Файл должен содержать текст шаблона, сохранённый в виде документа Word или в формате RTF. Для указания места вставки параметров пробы, условий измерения и результатов обработки спектра в текст шаблона используются специальные метки – определённые слова, заключённые в фигурные скобки (см. «Создание шаблонов декомпозиции»). Текст, связанный с соответствующей меткой, при формировании отчета замещает текст метки, наследуя стиль и шрифт текста метки. Пример шаблона отчёта приведен в приложении 2.

Кнопка Настройка позволяет сформировать содержимое отчета. При этом на экран выводится таблица следующего вида:

Форма отчета

Параметры | Содержание

Общие параметры

Отступ слева для текста отчета 5 точек. Запрет переноса слов МДА = 2 с.к.о.

Параметры данного отчета

Форматирование текста табуляцией

Нормировать на величину пробы

Пересчитать результаты на дату отбора пробы

Использовать при пересчёте период полураспада материнского нуклида

Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования

Заменять отрицательные значения активностей нулевыми

Приводить верхнюю границу max(МДА или Акт+Погр) для активностей меньше МДА

Рассчитать эфф. активность по сумме норм. активностей

Рассчитать эфф. активность по мощности излучения

В качестве погрешности величин приводить: Полную погрешность / Случайную составляющую погрешности

Допустимая невязка 1

Допустимый энерг. дрейф (тек./общ.) 10 / 100 %

Допустимый дрейф разрешения 50 %

Округлить результаты при выводе в отчёт до 100 % от погрешности

Округлять переменные калькулятора

Единица измерения мощности мкВт

Точность представления результатов Авт. цифр

Единица измерения активности Бк

Шаблон отчета

Включить Обзор...

Ввод Отмена Справка

Форма имеет две страницы: «**Параметры**» и «**Содержание**». На странице «**Параметры**» две группы:

Общие параметры - параметры, используемые при формировании отчетов радиометрии и декомпозиции:

- **Отступ слева для текста отчета** - отступ от левой границы формы до текста отчёта. Величина задается в точках. Параметр используется в том случае, если отчет не включается в шаблон отчёта (в этом случае его положение определяется положением метки **{Report}** или **{Table}**).
- **Запрет переноса слов** - установка или запрет режима автоматического переноса слов в абзаце.
- **МДА =** - установка значения минимально детектируемой активности в величинах среднеквадратичных отклонений.

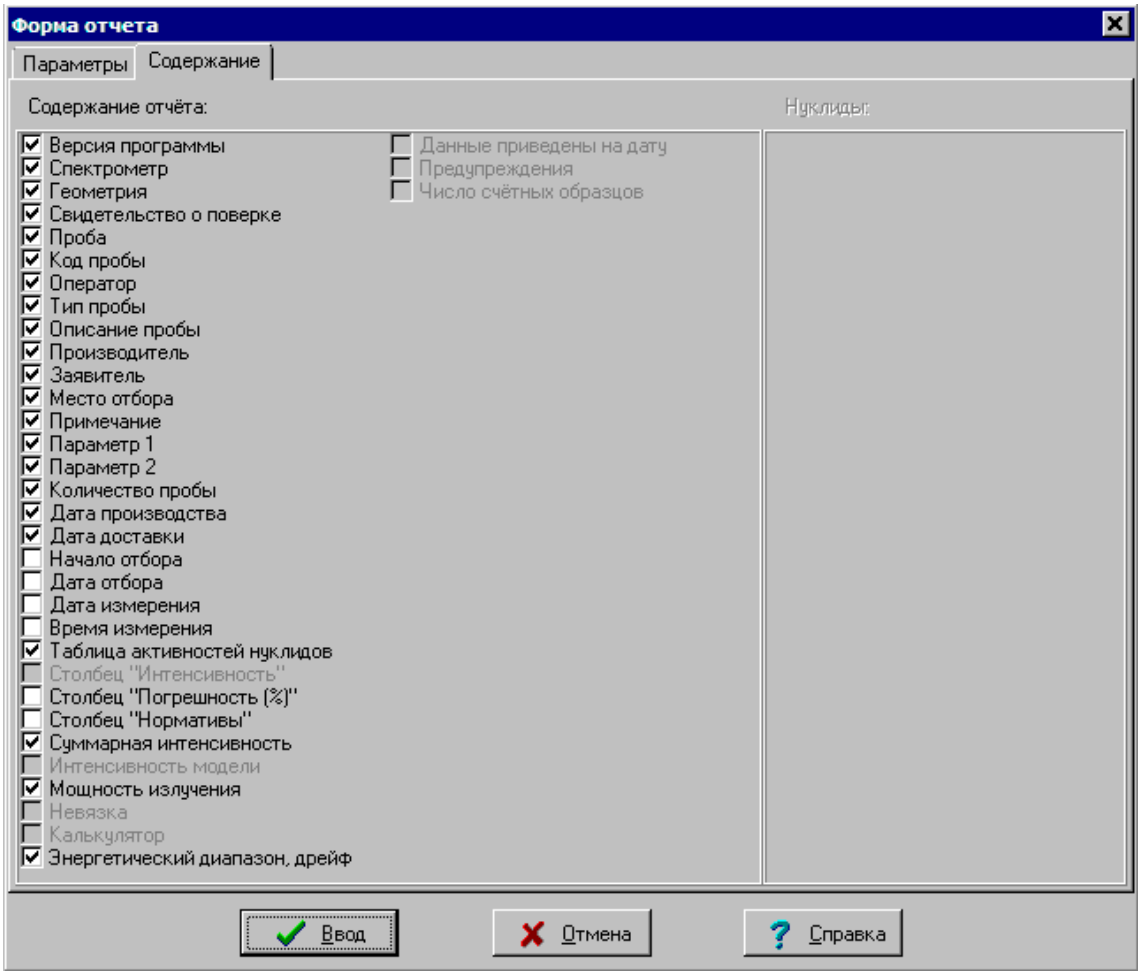
Параметры данного отчёта – параметры, используемые при формирования отчетов по радиометрии для данного спектрометра и заданной геометрии измерений:

- **Форматирование текста табуляцией** – при установке флажка процедура формирования отчёта перед каждым новым абзацем текста содержащего описания пробы, спектрометра, условий измерения будет включать символ табуляции для выравнивания текста по первой позиции табуляции (положения «красной» строки).
- **Нормировать на величину пробы** - вывод значений удельной или общей активности пробы. Для обычного типа геометрии (тонкого или промежуточного слоя) нормировка на величину пробы означает деление оценённой активности счётного образца на массу счётного образца – то есть расчёт удельной активности счётного образца. Для геометрии «толстого» слоя нормировка на величину пробы

означает умножение оценённой удельной активности счётного образца на массу счётного образца, то есть определение общей активности счётного образца. При одновременной установке флажков «**Нормировать на величину пробы**» и «**Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования»** в отчёт в любом случае выводится оценённая удельная активность исходного материала пробы.

- **Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования –** вывод активностей нуклидов исходного материала пробы (при отмеченном пункте) или активностей нуклидов в веществе счётного образца.
- **Заменять отрицательные значения активностей нулевыми** – при установленной «галочке» отрицательные значения активностей в отчёте будут заменены нулевыми значениями.
- **В отчёте приводить верхнюю границу max(МДА или Акт+Погр) для активностей меньше МДА**. При установке «галочки» в отчете будет приводиться верхняя граница значений для величин имеющих оценки активностей меньше минимально детектируемых в соответствии с рекомендациями ISO и IEC. Для таких величин в отчёте приводится или **МДА** или **Активность+Погрешность** со знаком “<“ или словом «менее» в зависимости от того, какая величина больше. Значение МДА в единицах средне-квадратичных отклонений задается в параметрах настройки архива.
- **Расчитать эфф. активность по мощности излучения.** При установке «галочки» в отчете будет приведена суммарная эффективная активность пробы по выбранному нуклиду. В качестве эффективной принимается активность нуклидов эквивалентная по энергетическому выходу активности выбранного нуклида (для гамма излучения в качестве нуклида сравнения принято использовать Ra-226).
- **В качестве погрешности величин приводить «Полную погрешность»** или **«Случайную составляющую погрешности»** - оператору предоставляется выбор одного из двух вариантов представления погрешности в отчёте. При выборе случайной составляющей погрешности таблица активностей в отчёте будет выведена шрифтом синего цвета.
- **Округлить результаты при выводе в отчёт до nn %** от погрешности – установка режима и формы округления результатов измерений в отчёте. При установке 100% округления, значения активностей и погрешностей в отчёте будут приведены в соответствии с требованиями МИ 2453-2000.
- **Точность представления результатов** – выбор количества цифр для представления результатов в отчёте. Значение «**Авт.**» - соответствует автоматическому определению необходимой точности представления результатов. При этом незначащие нули не выводятся.
- **Единица измерения мощности** – выбор единицы измерения рассчитываемой процедурой мощности излучения от пробы (кэВ/с, Мэв/с, мкВт или Вт) в которых будет приведена мощность в отчёте. Мощность излучения рассчитывается в пределах выбранного энергетического диапазона.
- **Единица измерения активности** – выбор единицы измерения (Беккерель или Кюри) в которых будет приведена активность нуклидов в отчёте.

На странице «**Содержание**» оператор может задать строки и столбцы формы вывода результатов радиометрии, которые будут приведены в отчете:



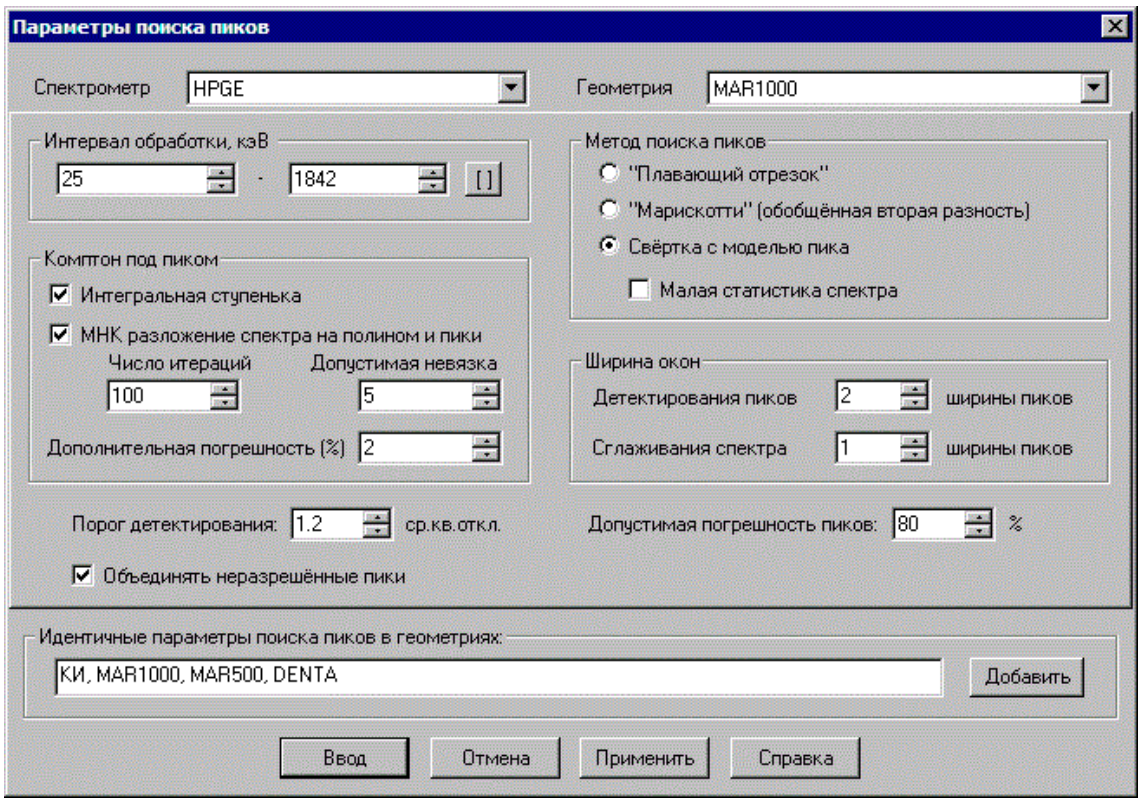
Настройка процедуры поиска пиков

Разложение спектров полученных при измерениях проб на спектрометре с установленным в параметрах спектрометра **линейчатым типом спектров** производится с предварительным вычитанием из спектра пробы непрерывного спектра[18], на котором находятся резонансные участки спектра - пики. Разложение спектра на компоненты (декомпозиция) проводится для спектра пиков[19].

Перед проведением обработки линейчатых спектров, требуется установить необходимые параметры поиска пиков для выбранного **спектрометра** и **геометрии** измерений. Для этого, выбрав пункт меню «***Обработка / Поиск пиков / Настройка...***», необходимо заполнить поля таблички «**Параметры поиска пиков**»:

[18] Для гамма спектров непрерывный спектр – спектр комптоновского рассеяния гамма квантов и тормозного рентгеновского бета частиц. В области пиков спектр непрерывного рассеяния аппроксимируется интегральной ступенькой Филипотта, полиномом или суммой интегральной ступеньки и полинома.

[19] Процедура предварительного вычитания спектра непрерывного рассеяния значительно повышает обусловленность матрицы разложения и существенно облегчает задачу генерации спектров, но применима только в том случае, если есть возможность выделять пики или группы пиков в спектре пробы.



Интервал обработки - предельно допустимые границы обработки спектра при поиске пиков. При обработке по выбранному шаблону используется общая область интервала обработки заданного в параметрах поиска пиков и в шаблоне декомпозиции. «Кнопка» [ ] служит для подстановки положений маркеров в качестве границ обработки.

Метод поиска пиков - оператор имеет возможность выбрать один из трёх методов поиска пиков:

- **«Плавающий отрезок»** - суть метода в вычислении отношения площади спектра над отрезком прямой, перемещаемым по спектру к погрешности его определения.
- **«Марискотти» (обобщённая вторая разность)** – поиск пиков по второй производной. Численная реализация метода предложена Марискотти в 60-х годах прошлого века.
- **Свёртка с моделью пика** - свёртка участка спектра в пределах заданного окна с моделью линии.

Считается, что третий метод более чувствителен и надёжен, поскольку анализируется форма пика. Это так, но только для одиночных пиков, поскольку свёртка спектра производится с моделью пика для одиночной линии. В случае мультиплета анализ формы может только запутать ситуацию. В принципе, можно сконструировать мультиплет сколь угодно сложной формы, на котором обломает зубы любой метод поиска пиков (таким мультиплетом является спектр любой пробы грунта, измеренный на сцинтилляционном гамма спектрометре). При очень сложных мультиплетах можно рекомендовать метод обработки спектров без поиска пиков и для разрешённых линейчатых спектров.

Комптон под пиком - оператор может выбрать один из четырёх методов построения спектра непрерывного рассеяния под пиком:

- Установлена галочка **«Интегральная ступенька»** – комптоновский спектр под областью пиков аппроксимируется интегральной ступенькой Филипотта.
- Установлена галочка **«Полином»** – аппроксимация полиномом. При аппроксимации полиномом участок спектра, содержащий пики раскладывается методом наименьших квадратов на сумму спектров пиков и полином

комптоновского спектра. При этом оператор должен задать **число итераций** и величину **допустимой невязки**. В случае если невязка разложения превышает допустимую, комптоновский спектр под пиком аппроксимируется интегральной ступенькой или линейной функцией.

- Если установлены обе галочки, фон под пиками аппроксимируется суммой интегральной ступеньки и полинома.
- Если ни одна из галочек не установлена фон под пиками аппроксимируется линейной функцией.

Дополнительная погрешность (%) – дополнительная к статистической погрешность площади комптоновского рассеяния под пиками (и, соответственно, площади пиков) связанная с неопределённостью построения спектра непрерывного рассеяния. Трудно оценить заранее эту величину, поскольку она сильно зависит от разрешения спектрометра и от сложности спектра. Реальная величина определяется при эксплуатации спектрометра.

Ширина окон - оператор должен задать ширину двух окон (в единицах ширины пиков на половине высоты), используемых при поиске пиков:

- **Детектирования пиков** - при методе свёртки ширина окна определяет диапазон свёртки спектра с моделью линии, для метода обобщённой второй разности – ширину функции «Марискотти», а для метода «плавающего отрезка» - длину отрезка. Рекомендуемое значение ~2.5 для методов «плавающего отрезка» и свёртки с моделью пика и ~2.2 – для метода «Марискотти».
- **Сглаживания спектра** - ширина окна определяет число точек, по которым производится усреднение значений счёта в каналах спектра для процедуры сглаживания спектра. Рекомендуемое значение ~1.0 для методов «плавающего отрезка», свёртки с моделью пика и для метода «Марискотти».

Порог детектирования - уровень значения функции детектирования пиков[20] нормированный на погрешность её вычисления (среднеквадратичное отклонение) при превышении которого процедура поиска будет регистрировать наличие пика в спектре. При малых значениях порога детектирования процедура поиска может включать в список найденных пиков ложные пики, при больших – пропускать слабые пики. Рекомендуемое значение: от 1 до 3.

Допустимая погрешность пиков – значение погрешности определения площади пиков в процентах, при превышении которой пики не будут включаться в список найденных пиков.

Объединять неразрешённые пики – флажок, позволяющий установить режим объединения неразрешённых пиков. Неразрешёнными пиками в данном случае считаются пики формирующие мультиплет без провала между вершинами пиков. Такого рода пики формируются процедурой обработки в режиме разложения спектра на модели линий и полином комптоновского рассеяния. Погрешность определения площадей таких неразрешенных пиков значительно выше погрешности определения площади суммарного пика. Поэтому, для процедур, где важна точность оценки площадей пиков (например, калибровка эффективности регистрации), рекомендуется установить флажок.

Параметры поиска пиков могут устанавливаться отдельно для каждой геометрии измерений в спектрометрах с линейчатым характером спектров. Группа параметров «**Идентичные параметры поиска пиков в геометриях**», включающая строку со списком геометрий и кнопку «**Добавить**» позволяет задать идентичные параметры поиска пиков для нескольких геометрий. Нажатие на кнопку «**Добавить**» добавляет текущую геометрию в список геометрий с идентичными параметрами поиска пиков.

[20] Функция детектирования – в зависимости от настройки, либо площадь пика над отрезком прямой, перемещаемой по спектру и длиной равной ширине пика, либо свёртка спектра в пределах ширины пика с моделью пика, либо усреднённая вторая разность (функция «Марискотти»).

Создание шаблонов декомпозиции

Общие понятия

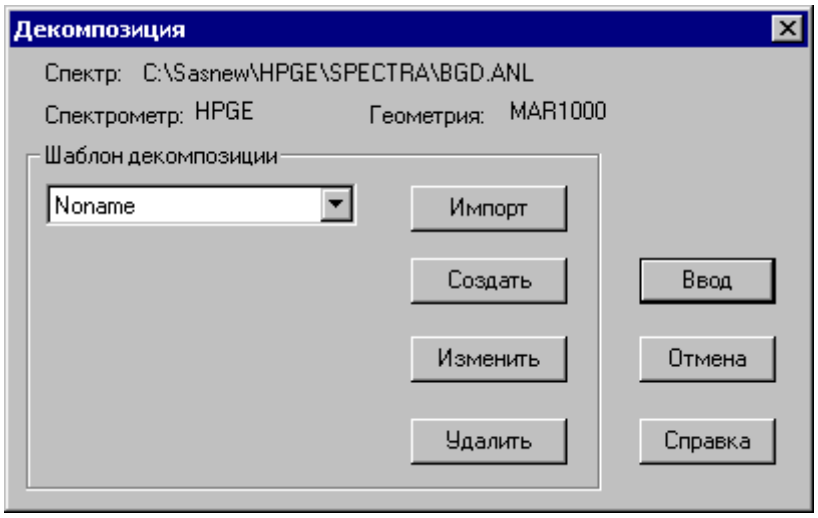
Декомпозиция – разложение измеренного спектра на спектры излучения отдельных нуклидов или равновесных цепочек нуклидов (спектры компонентов). При этом программа оценивает вклад каждой компоненты в спектр, и если компоненты разложения нормированы на единицу активности нуклида (материнского нуклида для цепочки нуклидов) оценкой вклада будет активность нуклида.

Шаблон декомпозиции - запомненный в файле **Decomp.par** список компонентов разложения, набор параметров обработки, формы отчета и программа дополнительной обработки полученных результатов для данного спектрометра и выбранной геометрии измерений.

Предварительное создание необходимых шаблонов обработки позволяет оператору не тратить время на установку параметров обработки при каждом вызове процедуры декомпозиции, а просто выбрать один из существующих шаблонов.

Вызов процедуры создания шаблона

При щелчке по кнопке (выбору пункта меню «***Обработка / Декомпозиция***») на экран выводится окно следующего вида:



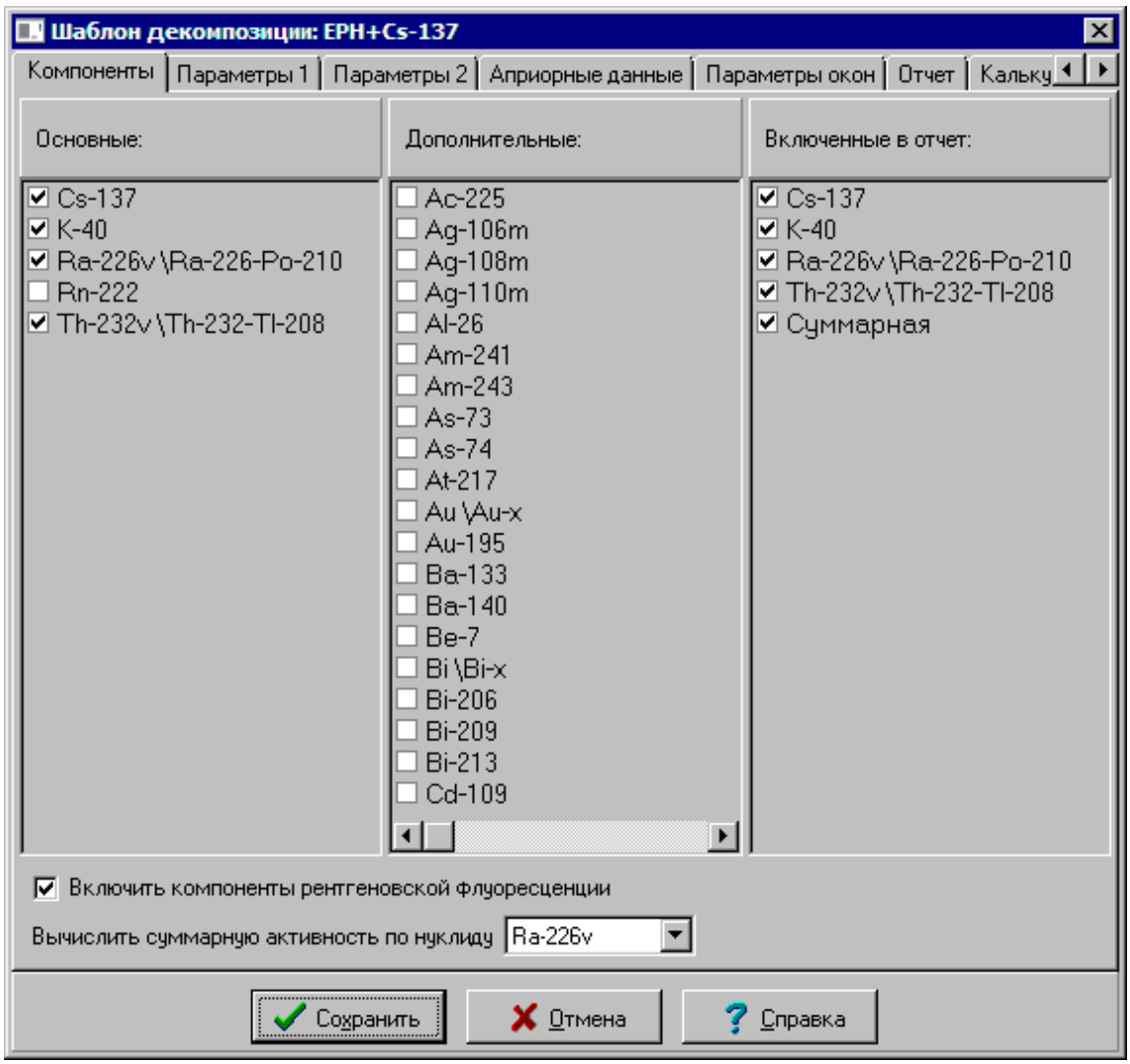
При установке спектрометра список шаблонов декомпозиции содержит только один элемент «**Noname**» содержащий параметры обработки установленные по умолчанию. Оператор может либо отредактировать существующий шаблон, щелкнув по клавише «**Изменить**», либо создать новый, щелкнув по клавише «**Создать**». Не нужный шаблон можно удалить, щелкнув по клавише «**Удалить**».

Клавиша «**Импорт**» позволяет импортировать в данный набор шаблонов шаблоны обработки из выбранного оператором файла **Decomp.par**.

Щелчок по клавише «**Создать**» или «**Изменить**» выводит на экран форму для создания или редактирования шаблонов декомпозиции. Форма содержит 7 страниц: «**Компоненты**», «**Параметры 1**», «**Параметры 2**», «**Априорные данные**», «**Параметры окон**», «**Отчет**» и «**Калькулятор**».

Выбор компонентов разложения

На первой странице формы оператор должен выбрать компоненты, которые будут участвовать в процедуре декомпозиции.



Страница содержит три списка элементарных спектров нуклидов (цепочек нуклидов):

- **Основные** – предварительно рассчитанные для данного спектрометра и геометрии элементарные спектры нуклидов (в примере список для сцинтилляционного гамма спектрометра). Элементарные спектры могут быть рассчитаны из спектров эталонов или сгенерированы по калибровкам спектрометра и таблицам нуклидов. Как правило, этот список содержит элементарные спектры рассчитанные из спектров эталонов. Для хорошо разрешённых гамма спектров при использовании метода обработки с предварительным вычитанием спектра непрерывного рассеяния (комптоновское рассеяние гамма квантов и тормозное рентгеновское бета частиц) нет необходимости предварительно рассчитывать элементарные спектры, поэтому этот список может быть пустым. Список может включать до 500 компонентов.
- **Дополнительные** - список всех нуклидов, включённых в используемую в данном шаблоне обработки таблицу нуклидов. Элементарные спектры нуклидов, отмеченных оператором в этом списке, будут рассчитываться программой генерации по таблице линий. Список может включать неограниченное количество компонентов. При методе обработки с аппроксимацией спектра непрерывного

рассеяния сплайном (см. «Параметры декомпозиции»), основной список будет включать полные отклики спектрометра (включающие и спектр непрерывного рассеяния) на излучение нуклидов, а при выборе нуклида из списка дополнительных для него будет рассчитываться спектр пиков (без спектра непрерывного рассеяния). Таким образом, оператор имеет возможность выбора отклика спектрометра на излучение нуклида и в процедуре декомпозиции могут участвовать оба вида элементарных спектров.

- **Включённые в отчёт** - список нуклидов из отмеченных в двух первых списках, которые будут включаться в отчет декомпозиции.
- **Включить компоненты рентгеновской флуоресценции** – при установленной «галочке» список нуклидов будет дополнен компонентами рентгеновской флуоресценции материала счётного образца. Расчёт компонентов рентгеновской флуоресценции возможен, если задан химический состав вещества счётного образца и используемая таблица нуклидов содержит список линий рентгеновской флуоресценции. Такой расчёт необходим, если материал пробы содержит тяжёлые элементы и активность пробы достаточна для значимой рентгеновской флуоресценции.
- **Вычислить суммарную активность** - расчёт «суммарной активности» пробы в соответствии с коэффициентом, рассчитываемым по эффективности регистрации излучения в установленном энергетическом диапазоне. Для разрешенных линейчатых спектров для расчёта "суммарной активности" используется калибровка эффективности регистрации излучения, а для слабо разрешенных спектров и для спектров не имеющих линейчатой структуры, оператор должен задать нуклид, элементарный спектр и квантовый выход которого будет использоваться для расчёта "суммарной активности". В качестве такого нуклида рекомендуется использовать «виртуальный» нуклид. «Виртуальный» нуклид не участвует в процедурах автоматического определения нуклидного состава и предназначен, прежде всего, для целей сравнения.
- Установка флажка «**Учитывать энергию излучения**» задаёт режим оценки средней энергии излучения счётного образца по медиане спектра при вычислении суммарной активности пробы и соответствующий перерасчёт эффективности регистрации. Для альфа излучения расчёт производится только в том случае, если в параметрах спектра не задана энергия излучения.

Оператор должен пометить галочками элементарные спектры, которые будут использованы при декомпозиции (можно включить до 100 спектров из двух списков) и отметить в списке **включенных в отчет** нуклиды, которые будут включаться в отчет декомпозиции.

При задании режима автоматического анализа состава спектра процедура обработки может дополнить список определяемых нуклидов. При этом компоненты, включённые оператором, в отличие от компонентов, включённых процедурой анализа состава, программа обработки не имеет права удалять из списка компонентов разложения и, если компонент не присутствует в спектре, то для него будет рассчитана величина минимально детектируемой активности (МДА).

Расчёт суммарной активности

В соответствии с действующим законодательством (СанПиН 2.1.4.559-96 и СП 2.6.1 758-99 "Нормы радиационной безопасности (НРБ-99)"), пресные природные воды хозяйственно-питьевого назначения в России среди прочих показателей должны контролироваться и по «суммарной альфа активности» – 0.2 Бк/л и «суммарной бета активности» – 1 Бк/л. Под «суммарной активностью» понимается количество частиц излучения образующихся в пробе в результате радиоактивного распада в единицу времени: для суммарной альфа активности – число альфа частиц, для суммарной бета – число бета частиц. Под единицей измерения - Беккерелем «суммарной активности» понимается не распад в секунду, а частица в секунду. Соответственно определяются

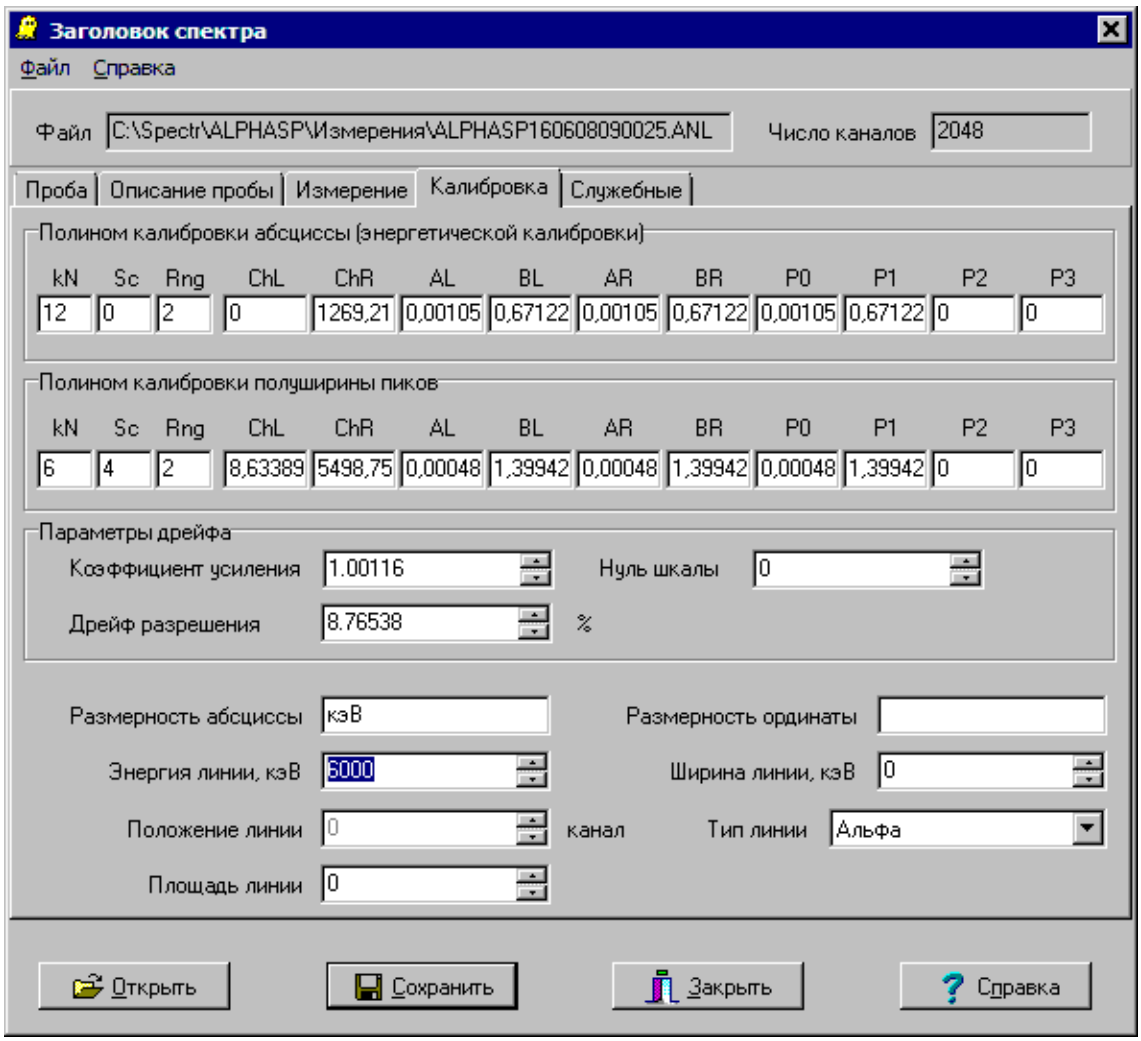
понятия удельной суммарной активности. По аналогии можно определить и понятие «суммарной гамма активности» - число гамма квантов в единицу времени.

Понятие «суммарной активности» весьма условное, поскольку, если альфа излучение существующие альфа радиометры могут регистрировать для всего возможного энергетического диапазона, то мягкое бета излучение бета радиометрами просто не регистрируется. Можно говорить о надёжном определении суммарной бета активности пробы только в предположении, что и в пробе и в эталоне, использованном для калибровки, идентичные бета излучатели. Надо учитывать и то, что требуемая для достижения нужной «точности» пробоподготовка воды, отправляет в вентиляцию и растворенные в воде радиоактивные газы и присутствующие в воде радиоактивные изотопы водорода.

Флажок «**Вычислить суммарную активность**» позволяет рассчитывать «суммарную активность» пробы в соответствии с коэффициентом, рассчитываемым по эффективности регистрации излучения в установленном энергетическом диапазоне. Для разрешенных линейчатых спектров для расчёта «суммарной активности» используется калибровка эффективности регистрации излучения в пиках. Для слабо разрешенных спектров и для спектров, не имеющих линейчатой структуры, оператор должен задать нуклид, элементарный спектр и квантовый выход которого будет использоваться для расчёта «суммарной активности». Поскольку элементарные спектры нормированы на распад нуклида, а не на квант излучения, для корректного перерасчёта требуется в параметрах декомпозиции задать таблицу нуклидов соответствующую выбранному элементарному спектру. Например, если мы указали в качестве нуклида для расчёта суммарной активности Sr-90, а элементарный спектр Sr-90 содержит суммарный отклик Sr-90 и Y-90, в используемой таблице нуклидов Sr-90 должен быть представлен в виде равновесной цепочки Sr90+Y90. Из таблицы линий для выбранного нуклида должны быть удалены не регистрируемые мягкие линии – например, электроны с энергией 2.66 кэВ для K-40. Для расчёта «суммарной бета активности» в качестве эталона рекомендуется использовать K-40.

И альфа и бета излучение значимо ослабляется веществом счётного образца. Поглощение излучения в веществе счётного образца определяется физическими свойствами вещества (плотность, средний эффективный атомный номер и средняя эффективная атомная масса вещества) и энергией излучения (см. «Нормативы и константы»). При калибровке спектрометра параметры эталона (физические константы и средняя энергия излучения) сохраняются в файле эталонного спектра. Для вещества счётного образца физические константы берутся из файлов нормативов и констант связанных с **типом пробы**. Эти данные должны быть сформированы либо предварительно, либо на этапе ввода параметров пробы.

Для альфа спектров оператор может задать, если это известно, и среднюю энергию альфа излучения пробы в параметре «**Энергия линии, кэВ**» параметров спектра (п. меню «***Сервис / Параметры спектра…***».



Если энергия альфа излучения таким образом устанавливается для параметров спектрометра, она будет действовать для всех проб измеренных после этого на спектрометре до новой установки другого значения.

Усреднённая энергия излучения эталона рассчитывается и сохраняется в параметре «**Энергия линии, кэВ**» при калибровке спектрометра (расчёте элементарного спектра). Для корректного расчёта средней энергии излучения из таблицы линий используемой при калибровке спектрометра для нуклидов эталона должны быть удалены не регистрируемые мягкие линии.

Энергия излучения пробы может быть рассчитана по медианам спектров пробы и эталона, в случае если в параметрах шаблона декомпозиции установлен флажок «**Учитывать энергию излучения**». Для альфа излучения расчёт производится только в том случае, если энергия излучения не задана в параметрах спектра пробы.

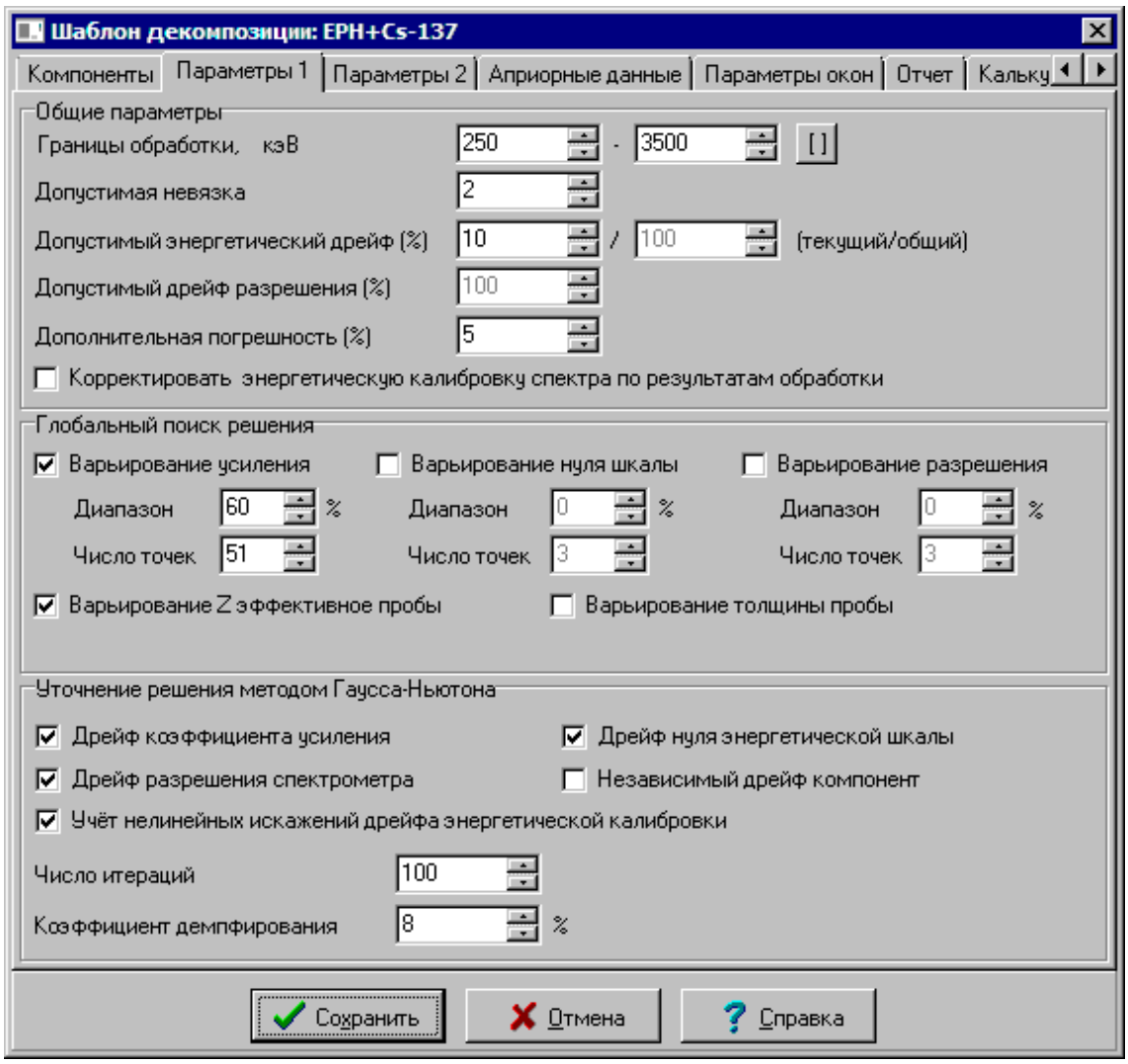
Перерасчёт поглощения излучения в веществе счётного образца производится в том случае, если заданы физические константы вещества и счётного образца и эталона (средний эффективный атомный номер и средняя эффективная атомная масса вещества). Если физические константы вещества счётного образца не заданы, они полагаются такими же как у эталона. Если энергия излучения не задана или не установлен флажок «**Учитывать энергию излучения**» - перерасчёт по энергии излучения не производится и усреднённая энергия излучения счётного образца полагается равной усреднённой энергии излучения эталона.

Интеграл элементарного спектра рассчитывается по заданному в шаблоне обработки энергетическому диапазону, энергетический диапазон интеграла для спектра пробы умножается на коэффициент растяжения-сжатия, рассчитываемый по квартилям спектров

пробы и эталона. Для уменьшения дополнительных погрешностей связанных с перерасчётом энергетического диапазона для пробы, оператор для расчёта суммарной активности должен выбрать нуклид, имеющий энергию излучения близкую к предполагаемой энергии регистрируемого излучения.

Параметры декомпозиции

Параметры процедуры обработки занимают четыре страницы: «**Параметры 1**», «**Параметры 2**», «**Априорные данные**» и «**Параметры окон**». Страница «**Параметры 1**» может иметь вид:



В первой группе оператор должен установить **общие параметры** декомпозиции:

- **Границы обработки** - левая и правая энергетические границы области декомпозиции спектра. «Кнопка» [ ] служит для подстановки положений маркеров в качестве границ обработки.
- **Допустимая невязка** - максимально допустимое значение невязки[21], при котором декомпозиция считается успешной.
- **Допустимый дрейф (текущий/общий)** - максимальное значение (в процентах) энергетического дрейфа (суммарного изменения коэффициента усиления и нуля

[21] **Невязка** - нормированное на предполагаемую величину среднеквадратичное отклонение рассчитанной модели от измеренного спектра $G = \sqrt{\sum((X_i - X_m)^2 / G_i^2)/(n-m)}$.

шкалы спектрометра), при превышении которого декомпозиция будет считаться неудачной, и программа не будет уточнять калибровку спектра по результатам обработки спектра. **Текущий дрейф** – дрейф за время прошедшее с последней калибровки спектра (спектрометра). **Общий дрейф** - дрейф за время прошедшее с начальной калибровки спектрометра. Значение общего дрейфа имеет справочный характер (не редактируется). Устанавливается в параметрах автокалибровки.

- **Допустимый дрейф разрешения** - максимальное значение (в процентах) изменения разрешения спектрометра, при превышении которого программа не будет уточнять калибровку спектрометра по результатам обработки спектра. Значение допустимого дрейфа разрешения имеет справочный характер (не редактируется). Устанавливается в параметрах автокалибровки.
- **Дополнительная погрешность** - устанавливаемая оператором, дополнительная к рассчитываемой программой погрешности измерений, ошибка, связанная с погрешностями определения параметров пробы: вес, объём пробы, нарушения геометрии и т.п.
- **Корректировать дрейф по результатам обработки** - флажок разрешающий изменять параметры энергетической калибровки спектра (спектрометра) по результатам обработки.

Вторая группа позволяет включить в процедуру декомпозиции режим **глобального поиска решения** и задать параметры глобального поиска[22]:

- **Варьирование усиления** – программа проведёт разложение спектра на компоненты для заданного **числа точек** равномерно распределенных в заданном **диапазоне изменения** коэффициента усиления спектрометра. Диапазон изменения понимается в мультипликативном смысле, то есть, например, 100 процентный диапазон означает варьирование от 0.5 до 2-х кратного значения коэффициента усиления. Число точек всегда округляется до нечётного значения, для того чтобы начальное значение попало в середину диапазона варьирования.
- **Варьирование нуля шкалы** – аналогичная процедура для варьирования нуля энергетической шкалы спектрометра. Диапазон изменения понимается в аддитивном смысле в процентах от диапазона обработки.
- **Варьирование разрешения** – аналогичная процедура для варьирования разрешения спектрометра. Диапазон изменения понимается в аддитивном смысле в процентах от текущего разрешения.
- **Варьирование Z эффективное, варьирование толщины пробы** – процедура разрешённая только для шаблонов обработки гамма спектров. При варьировании Z эффективное и толщины пробы учёт фотопоглощения и комптоновского рассеяния гамма квантов рассчитывается для различных значений Z эффективное и/или эффективной толщины счётного образца, и выбираются значения обеспечивающее минимальную невязку разложения спектра. Толщина счётного образца варьируется в пределах от 50% до 200% заданной при установке геометрии средней толщины счётного образца. Необходимым условием варьирования Z эффективное и толщины пробы является присутствие в спектрах компонентов линий с различными энергиями.

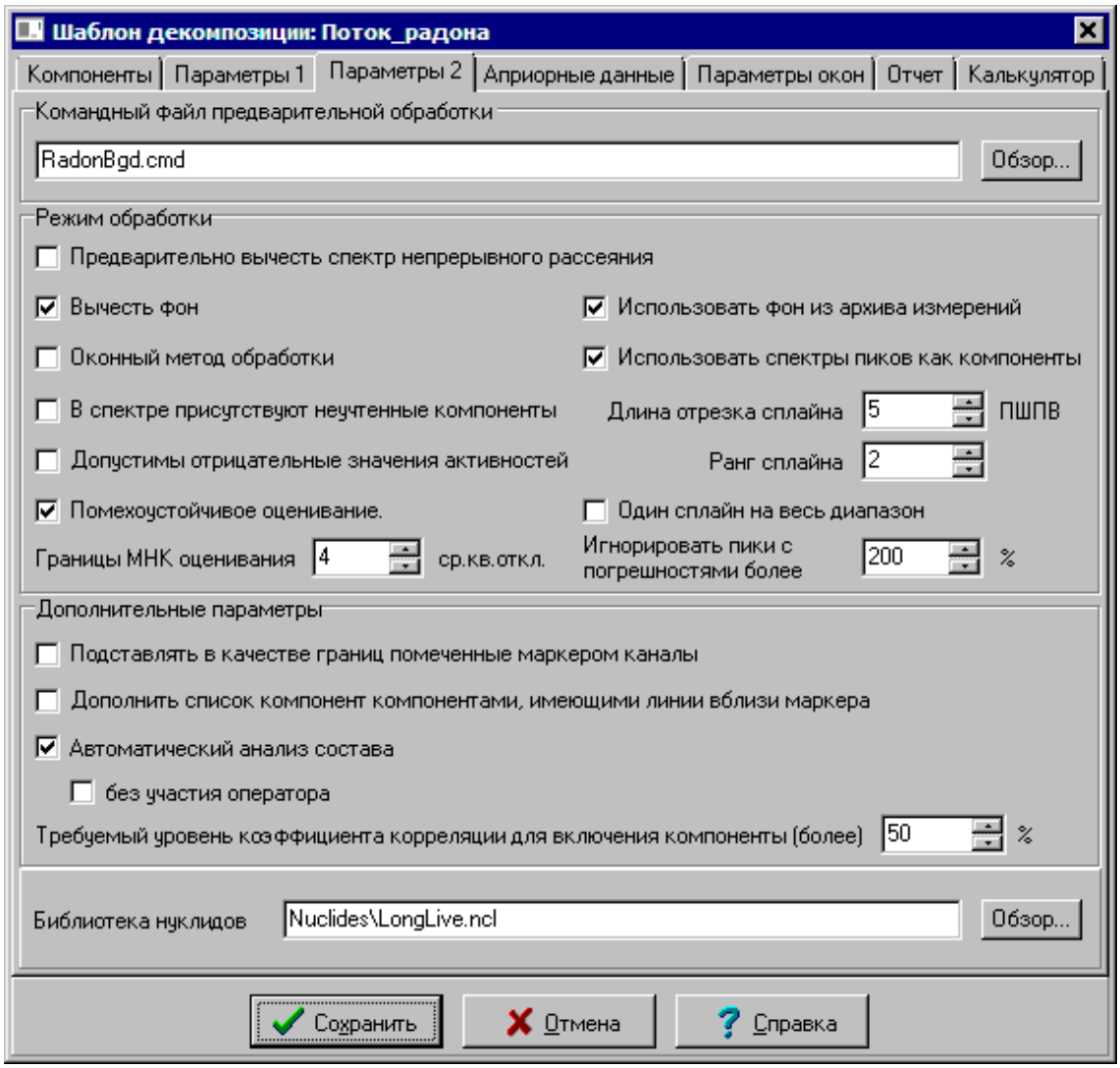
Третья группа служит для установки режимов и параметров процедуры **уточнения решения методом Гаусса-Ньютона**. Оператор может установить различные режимы обработки**,** пометив «галочками» включенные процедуры обработки:

- **Дрейф коэффициента усиления** - процедура оценки и коррекции дрейфа коэффициента усиления спектрометра.

[22] Глобальный поиск решения и уточнение решения методом Гаусса-Ньютона необходимы для коррекции параметров спектрометрического тракта (прежде всего – энергетического дрейфа). Глобальный поиск находит параметры начального приближения для процедуры уточнение решения методом Гаусса-Ньютона.

- **Дрейф нуля энергетической шкалы** - оценка и коррекция дрейфа нуля энергетической шкалы спектрометра.
- **Дрейф разрешения спектрометра** - оценка и коррекция дрейфа разрешения спектрометра.
- **Учёт нелинейных искажений дрейфа энергетической калибровки.** При значительной загрузке спектрометрического тракта энергетический дрейф приобретает нелинейный характер. Нелинейность энергетической шкалы спектрометра учитывается и в базовой энергетической калибровке спектрометра, но при значительном изменении загрузки изменяется и характер нелинейных искажений калибровки. Установка данного флажка включает процедуру оценки такого искажения.
- **Независимый дрейф компонентов** - режим обработки, при котором оценивается независимый дрейф компонентов. Изменяются (дрейфуют), разумеется, параметры тракта спектрометра, но, в том случае, если мы не уверены, что все элементарные спектры (включая фон) - компоненты декомпозиции, находятся в единой энергетической шкале, значения параметров дрейфа для них могут быть различными и в этом случае разумно использовать данный режим обработки. Такая неопределенность может возникнуть при несоблюдении методики измерения эталонов. В данном режиме обработки существенно снижается устойчивость процедуры декомпозиции и, поэтому, её применение оправдано либо для спектров с хорошим разрешением линий, либо при небольшом количестве компонентов разложения. Побочным эффектом данного режима обработки является то, что при этом в папке «Comp» формируются спектры компонентов, приведенные к единой энергетической шкале (шкале спектра пробы). Оператор может использовать их как уточнённые элементарные спектры, переместив в папку «Elements».
- **Число итераций** - максимально разрешенное количество итераций для уточнения оценок разложения в процедуре коррекции энергетического дрейфа методом Гаусса-Ньютона. Программа заканчивает процедуру при отсутствии значимых изменений в оценках определяемых параметров, либо по превышению заданного числа итераций. Ограничение итераций имеет смысл для компьютеров с небольшим быстродействием.
- **Коэффициент демпфирования** - константа (задается в процентах), повышающая устойчивость процедуры декомпозиции. Значение коэффициента демпфирования должно быть тем больше, чем меньше обусловленность решаемой системы уравнений (большое число компонентов разложения, схожая форма компонентов, слабое изменение формы спектров при больших изменениях параметров дрейфа или почти идентичное изменение формы спектров при изменениях различных параметров дрейфа). При установке флажка «**Независимый дрейф компонентов**», коэффициент демпфирования рекомендуется устанавливать не менее 10 %.

Страница «**Параметры 2**» может иметь вид:



В том случае если указан **командный файл предварительной обработки**, программа обработки вызовет внешнюю процедуру, указанную в командном файле, после расчёта спектров компонентов декомпозиции, но до начала самой процедуры разложения спектра на компоненты и подождёт окончания работы внешней процедуры.

Командный файл может управлять работой внешнего оборудования, например, запустить автоматический сменщик проб или запустить программу производящую предварительную обработку спектров.

В стандартный вариант поставки программного пакета «SPECTRRAD» входит два командных файла **RadonBgd.cmd** и **CtrlBgd.cmd**, которые служат для расчёта спектра фона при измерении радона на угольных адсорберах и контроле остаточного радона в активированном угле (см. «Измерение радона, предварительная обработка спектра фона»).

Во второй группе оператор может задать различные **режимы обработки,** установив соответствующие «галочки»:

- **Предварительно вычесть спектр непрерывного рассеяния** – для гамма спектров, при установленной галочке, из измеренного спектра предварительно вычитается спектр непрерывного рассеяния (спектр комптоновского рассеяния гамма квантов и спектр тормозного рентгеновского излучения бета частиц). Разложения спектра пиков производится на спектры пиков компонентов. Для разрешённых линейчатых спектров – режим по умолчанию.

- **Вычесть фон** – при установленной галочке список компонент разложения будет дополнен спектром фона. При этом спектр фона рассматривается как компонента разложения с известной интенсивностью, но с неизвестными параметрами энергетического дрейфа (если установлен режим оценки параметров энергетического дрейфа).
- **Использовать фон из архива измерений** – при установленной галочке при обработке спектров сохранённых в архиве используется и фон, сохранённый для данного спектра в архиве. Фон для данной пробы сохраняется в архиве при первой обработке спектра пробы. Поскольку фон для некоторых видов измерений (например, при измерении радона на угольных адсорберах) может сильно различаться, использование текущего фона при повторной обработке проб измеренных ранее может привести к некорректным результатам. При снятой галочке будет использоваться текущий фон (накопленный в последнее время).
- **Оконный метод обработки** - разложение спектра не поканальное, а с предварительным интегрированием спектров в заданных энергетических окнах. При режиме обработки спектров с поиском пиков, окна формируются автоматически в соответствии с определёнными в спектре нуклидами и используемой таблицей нуклидов. Для обработки непрерывных, или плохо разрешённых спектров окна должны быть заданы на странице «**Параметры окон**». Метод хорошо работает при обработке разрешённых линейчатых спектров. Для сцинтилляционной гамма спектрометрии его можно рекомендовать при использовании в качестве компонентов разложения спектров генерированных по таблице линий (в интегральных окнах скрадываются огрехи генерации). В принципе для сцинтилляционной спектрометрии метод не рекомендуется, поскольку не даёт преимуществ, а потери в эффективности оценок очевидны - предварительное интегрирование нарушает условие теоремы Гаусса - Маркова об эффективных оценках.
- **Использовать спектры пиков как компоненты** – режим для гамма спектров, когда трудно или невозможно корректно отделить в обрабатываемом спектре спектр пиков от спектра непрерывного рассеяния. При установленной галочке программа в качестве компонентов разложения рассчитывает спектры пиков для нуклидов, отмеченных в списке «**Дополнительные:**» на странице «**Компоненты**» (элементарные спектры без спектра непрерывного рассеяния). И раскладывает измеренный спектр на элементарные спектры нуклидов, отмеченные в списке «**Основные:**», включающие и спектр непрерывного рассеяния, и спектры пиков для нуклидов, отмеченных во втором списке, спектр фона и сплайн, аппроксимирующий спектр непрерывного рассеяния. Спектры пиков значительно легче рассчитать с учётом поглощения гамма квантов в материале счётного образца, среде, защите и контейнере. Расчёт спектров пиков возможен, если проведена калибровка спектрометра по эффективности регистрации. Метод можно использовать и для хорошо разрешённых гамма спектров.
- **Длина отрезка сплайна ПШПВ** – дополнительный параметр для режимов учёта неизвестных компонентов и использовании для разложения спектров элементарных спектров пиков как компонентов разложения (в этом случае неизвестной компонентой будет спектр непрерывного рассеяния). Значение задаётся в полуширинах пиков (точнее – в значениях полной ширины пиков на половине высоты -ПШПВ). Чем короче отрезок сплайна, тем более гибок и менее устойчив сплайн. При задании длины отрезка сплайна превышающей длину обрабатываемого участка спектра, сплайн вырождается в полином.
- **Ранг сплайна** – параметр, связанный со степенью полиномов в сплайне и процедурой последующей обработки сплайна. При задании ранга равным нулю, единице или двойке производится кусочно-линейная аппроксимация. Поскольку при этом функция получается не гладкой, после построения при ранге большем

нуля, она сглаживается по числу точек соответствующим полуширине пика (ранг установлен равным единице) или аппроксимируется кубическим сплайном (при ранге равном двойке). При задании ранга равном тройке строится параболический сплайн, при ранге равном четвёрке – кубический сплайн. Чем выше степень полинома, тем более гибок сплайн и тем менее обусловлена система уравнений.

- **Один сплайн на весь диапазон** – при установке флажка весь диапазон обработки спектра будет одним энергетическим окном и будет аппроксимироваться одним непрерывным сплайном, в противном случае рядом сплайнов аппроксимирующими участки, не разделённые неиспользуемыми энергетическими окнами. Оценка активностей и расчёт невязок в этом случае производится с использованием всего энергетического интервала без учёта энергетических окон, которые визуализируется только в информационных целях.
- **Игнорировать пики с погрешностями определения площади более nnn %** – параметр, который используется при разложении спектра на спектры пиков (установлен флажок «**Предварительно вычесть спектр непрерывного рассеяния»** или «**Использовать спектры пиков как компоненты»**). В этом случае процедура обработки будет игнорировать линии, которые формируют пики с относительными погрешностями определения площади более заданного уровня. Уровень задаётся в процентах. В итоге более корректно производится разметка спектра на «значимые» и «незначимые» окна, поскольку большое количество используемых линий затрудняет такую разметку. Такая фильтрация линий производится после начальной оценки активностей нуклидов, поскольку вклад линии в спектр можно оценить, только зная активность нуклида.
- **В спектре присутствуют неучтенные компоненты** - режим, при котором программа, при уровне невязки превышающем заданный порог, пытается минимизировать расстояние между спектром пробы и формируемой моделью из спектров компонентов дополнением модели сплайном и подавлением отрицательных невязок (полагается, что отрицательных активностей не может быть), в том случае если не установлен флажок «**Допустимы отрицательные значения активностей**». Наиболее оптимальный режим обработки при заранее известной ситуации о присутствии в спектре нуклидов, отсутствующих в списке компонентов.
- **Допустимы отрицательные значения активностей** - в обычном режиме (флаг не установлен) программа подавляет отрицательные значения активностей. Но для проверки корректности оценок величин активностей программой для проб с известным нуклидным составом, либо при использовании не ортогонального набора компонентов (компоненты содержат, в каких-то соотношениях, друг друга), требуется разрешить использование отрицательных значений активностей - установить флажок.
- **Помехоустойчивое оценивание** – установка галочки включает режим помехоустойчивого оценивания Хуберовского типа (Huber estimation). **Границы МНК оценивания** в величинах среднеквадратичных отклонений определяют диапазон МНК оценивания. За границами диапазона производится оценивание по методу наименьших модулей. При снятой галочке для оценивания параметров используется метод наименьших квадратов (МНК оценивание).

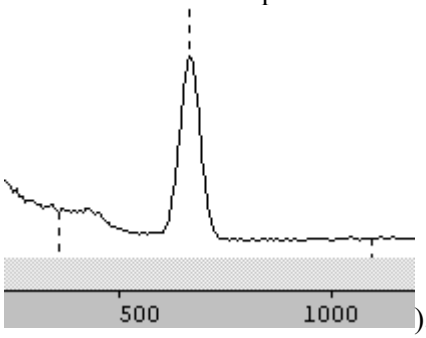
Различные сочетания включенных процедур и режимов обработки формируют различные методы обработки. Например:

- ***Линейная оценка*** (не включена ни одна из процедур) - линейная оценка вкладов компонентов разложения в спектр пробы. Наиболее устойчивая процедура декомпозиции. Применяется при плохой обусловленности матрицы элементарных спектров (большое количество слабо разрешенных сцинтилляционных гамма спектров, разложение бета спектров без априорных данных).

- ***Коррекция дрейфа*** (установлены флажки коррекции коэффициента усиления и/или нуля шкалы, разрешения спектрометра и/или нелинейных искажений энергетического дрейфа) - дополнительно к оценкам интенсивностей компонентов, программа определяет параметры энергетического дрейфа спектрометрического тракта. Коррекция энергетического дрейфа прекрасно работает при декомпозиции гамма и альфа спектров. Для бета спектров рекомендуется использовать коррекцию дрейфа при включении в процесс обработки априорных данных.
- ***Коррекция дрейфа+Неучтённые компоненты*** (включены процедуры коррекции дрейфа и оценки неучтенных компонентов) - режим, при котором программа, при неуспехе линейной декомпозиции, пытается исправить ситуацию попыткой ***коррекции энергетического дрейфа***, а в случае неудачи - включением метода «***Неучтенные компоненты»***.

Дополнительные параметры:

- Флажок «**Подставлять в качестве границ помеченные маркером каналы**» позволяет, не изменяя шаблона, менять область обработки спектра. Оператор при установленном флажке должен перед запуском процедуры декомпозиции пометить область обработки спектра (например, так как на рисунке

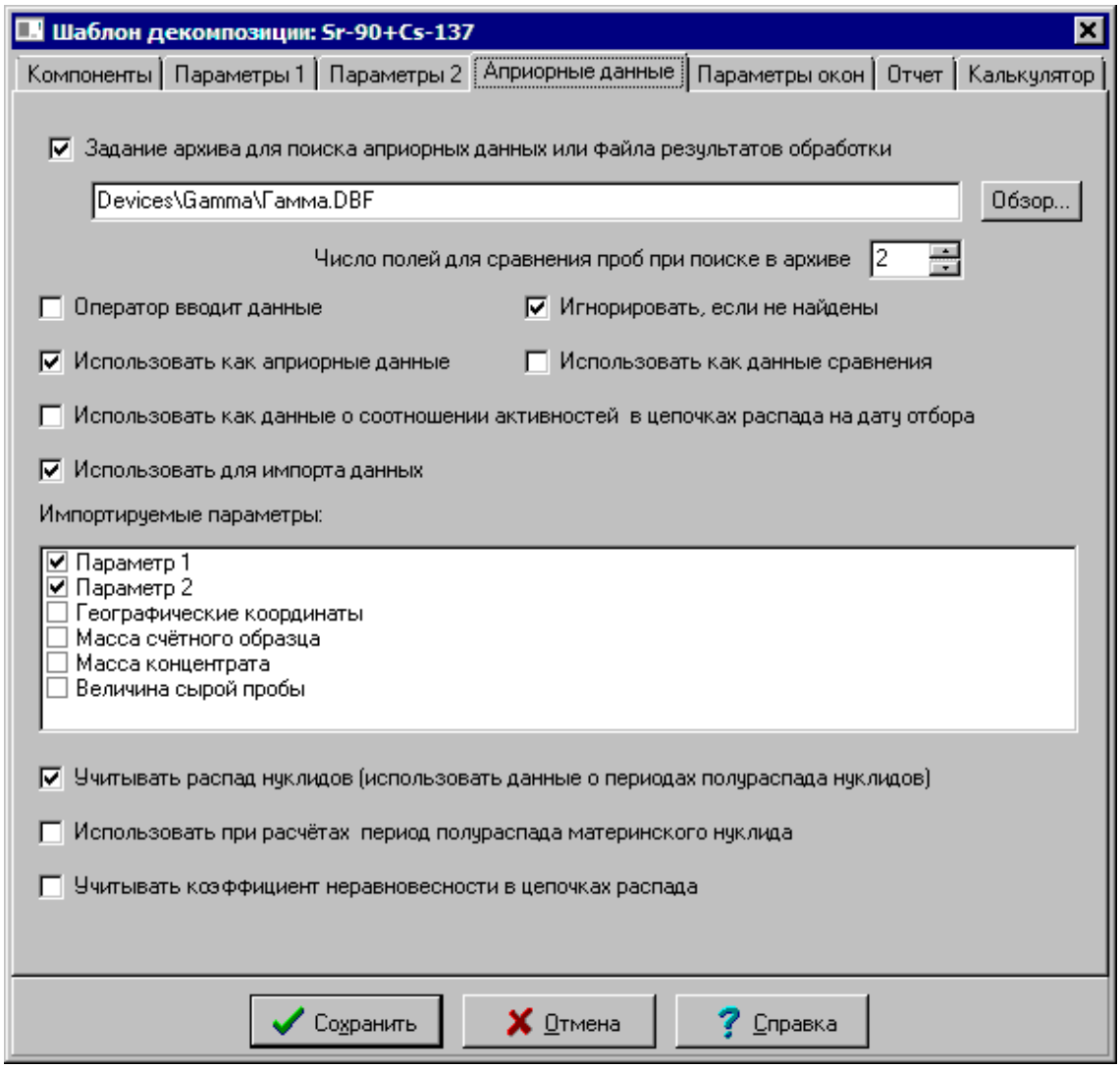


). Параметры «**Границы обработки**» в этом случае служат крайними значениями возможного диапазона области обработки.
- Флажок «**Дополнить список компонентов компонентами, имеющими линии вблизи маркера**» позволяет включить в список компонентов нуклиды, которые имеют линии в области маркера. При установке флажка программа производит поиск в таблице линий и дополняет список компонентов нуклидами, имеющими значимые линии (линии помеченные атрибутами «Значимая линия») в области энергий Em-FWHM(Em) < E < Em+FWHM(Em) (здесь: Em - энергия маркера, FWHM(Em) - ширина пика для энергии Em). Предварительно оператор должен установить маркер на анализируемый пик. Режим разрешен, если проведена калибровка ширины пиков.
- Флажок «**Автоматический анализ состава**» рекомендуется устанавливать только для линейчатых спектров (при установке спектрометра указан линейчатый тип спектров). При установке флажка программа дополняет список компонентов заданный оператором дополнительным списком нуклидов из заданной **библиотеки нуклидов** имеющими линии, попадающие в области пиков спектра.
- При установленном режиме «**Автоматический анализ состава**» оператор может установить дополнительный флажок «**без участия оператора**». В этом случае программа не будет предлагать оператору откорректировать список подозреваемых нуклидов, а сразу перейдёт к процедуре разложения спектра на спектры подозреваемых компонентов.
- **Требуемый уровень коэффициента корреляции для включения компоненты (более) nnn %** - при установленном режиме автоматического анализа состава и режиме дополнения списка компонент нуклидами, имеющими "значимые" линии, определяет уровень коэффициента корреляции (**Test1)**, используемый для отбраковки нуклидов. Нуклиды со значением **Test1** меньше заданного уровня будут исключены из списка "подозреваемых" нуклидов.

Библиотека нуклидов - используемая в данном режиме обработки таблица нуклидов. Библиотека нуклидов определяет набор дополнительных нуклидов на странице «**Компоненты**». Клавиша Обзор... - обзор существующих таблиц нуклидов

Режим использования **априорных данных** позволяет учитывать результаты обработки спектров проб из одного материала, измеренных на различных спектрометрах или в разное время (учет результатов обработки гамма спектров при обработке бета спектров, результатов обработки «жесткой» области спектра при обработке «мягкой» и т.п.).

Страница «**Априорные данные**» может иметь вид:



При установке флажков «**Использовать как априорные данные**», «**Использовать как данные сравнения**», «**Использовать как данные соотношения активностей в цепочке распада на дату отбора**» и (или) «**Использовать для импорта данных**» программа либо запросит у оператора, либо найдёт самостоятельно в архиве измерений данные, которые будут использованы при обработке спектра.

При установленном флажке «**Использовать как априорные данные**», данные будут использованы при расчёте активностей определяемых нуклидов в соответствии с методом Байесовского оценивания.

Данные сравнения используются при формировании протоколов поверки и создании контрольных карт Шухарта.

Данные о соотношении активностей в цепочках распада на дату отбора проба используются, если в компонентах декомпозиции присутствуют нуклиды, входящие в цепочку распада. Учёт соотношений активностей нуклидов в цепочках распада отличается в зависимости от того, производится совместная обработка группы спектров или обрабатывается один спектр. При обработке группы спектров, данные о таком соотношении пересчитываются на дату измерения каждого спектра группы, список компонент разложения не изменяется. При обработке одного спектра для каждой цепочки нуклидов рассчитывается только один элементарный спектр материнского нуклида включающий излучение всех дочерних в соответствие с соотношением активностей, установившихся в цепочке на дату измерения пробы. Дочерние нуклиды цепочек из списка компонент исключаются (их излучение включено в материнский нуклид), что позволяет существенно увеличить эффективность оценивания.

При установленном флажке «**Использовать для импорта данных**», выбранные данные файла априорных результатов из списка **импортируемых параметров** будут переданы в процедуру обработки до начала обработки (до начала расчёта компонентов разложения), поскольку такой параметр как масса счётного образца влияет на поглощение излучения и должен учитываться при расчёте компонентов разложения. А в таких устройствах, например, как гамма регистраторы керна плотность керна определяется на отдельном канале спектрометра и её нужно учитывать до начала обработки спектра пробы измеренного на основном канале регистратора.

Априорные данные, **данные сравнения** и **импортируемые данные** доступны через предопределённые переменные программируемого калькулятора.

Априорные результаты (данные сравнения, данные для импорта, данные соотношения активностей в цепочке распада на дату отбора») оператор может выбрать из архива измерений, заданного файла или ввести во время обработки спектра вручную (при установке флажка «**Оператор вводит данные**»).

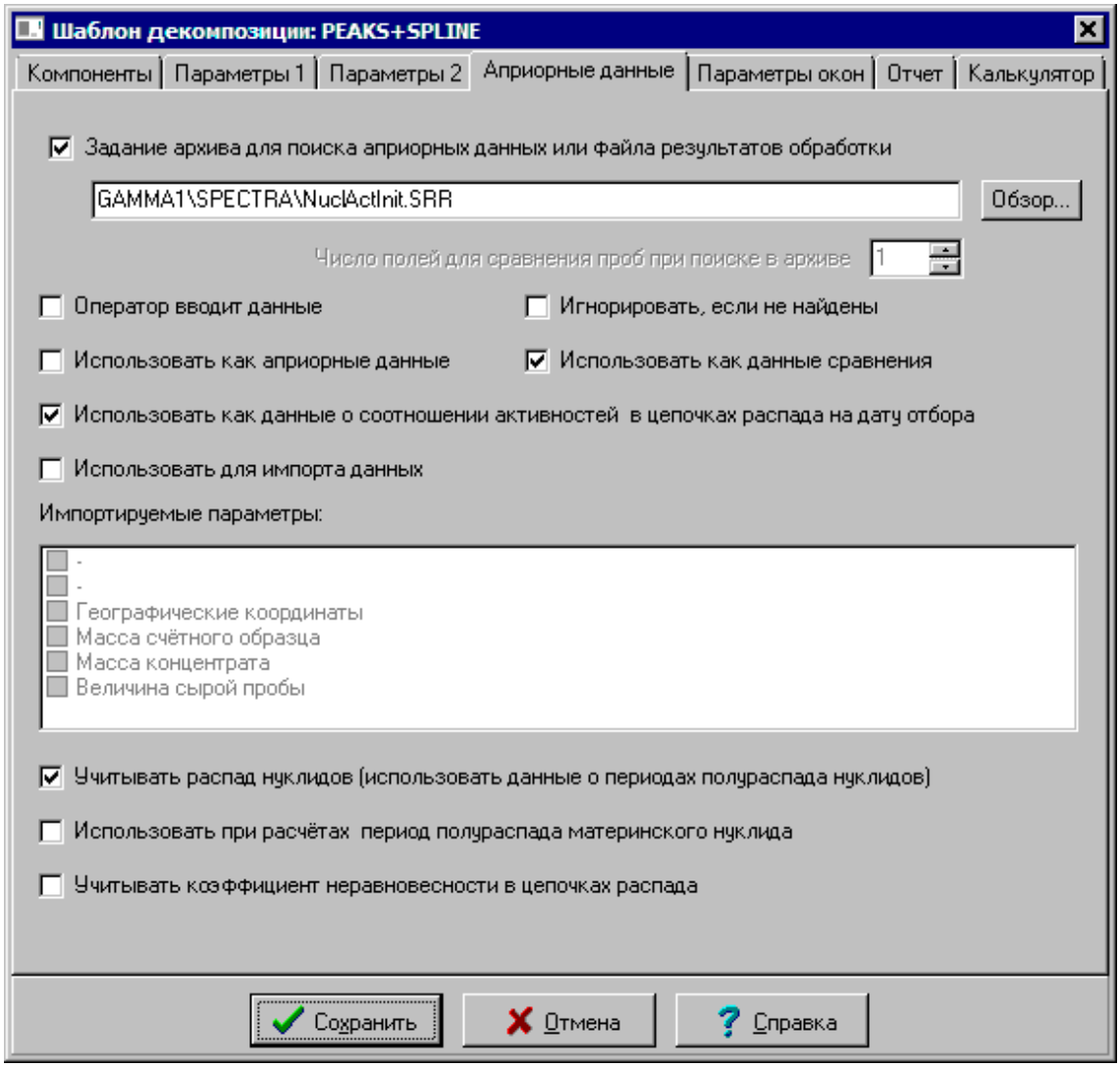
Программа может самостоятельно искать необходимые данные в архиве измерений. Для этого требуется установить флажок «**Задание архива для поиска априорных данных или файла результатов обработки**», указать полный путь к нужному архиву измерений для поиска записей и установить **число полей для сравнения проб при поиске в архиве**. При поиске данных в архиве программа производит поиск с конца заданного архива и в качестве априорных данных использует первые найденные результаты обработки, имеющие совпадающие с обрабатываемым спектром данные по типу пробы и по заданному числу полей из семи полей описания пробы: «Код пробы», «Наименование пробы», «Описание пробы», «Производитель», «Заявитель», «Место отбора» и «Примечание» (указаны начальные названия колонок архива). Сравнение по полю «Тип пробы» производится в любом случае.

Данные о скорости распада нуклидов позволяют пересчитывать активности нуклидов на заданную дату, повышают эффективность оценок активностей при задании начальных соотношений активностей на дату отбора и при совместной обработке группы спектров. Режим учёта задаётся установкой «галочки» в пункте «**Учитывать распад нуклидов (использовать данные о периодах полураспада нуклидов)**». В том случае, если в компонентах декомпозиции используются только одиночные нуклиды и равновесные цепочки нуклидов рекомендуется установить галочку в пункте «**Использовать при расчётах период полураспада материнского нуклида**» - это позволяет уменьшить объём вычислений и, соответственно, увеличить скорость обработки.

Установка флажка «**Учитывать коэффициент неравновесности в цепочках распада**» позволяет учитывать нарушения равновесности в цепочке распада не учитываемые при расчёте равновесных цепочек (эманация, вымывание нуклидов и т.п.), в том случае если активность нуклида определяется по излучению другого нуклида равновесной цепочки. При этом активность нуклида рассчитывается с учётом коэффициента неравновесности. Коэффициент неравновесности связан с типом пробы и задаётся как «**Kneq.(Норматив 5)**» при формировании нормативов и констант для

выбранного типа пробы и конкретного нуклида (п. меню «***Сервис/Нормативы и константы…***»).

Если приходится регулярно использовать одни и те же данные сравнения или априорные данные или данные для импорта, например при поверке спектрометра, можно сохранить введённые при запуске измерений априорные данные сохранив их под каким-либо именем (п. меню «**Файл\Сохранить как…**»), в шаблоне обработки установить флажок «**Задание архива для поиска или файла результатов обработки**» и указать полный путь к сохранённому файлу с априорными данными (тип файла априорных данных совпадает с типом файлов результатов обработки – «**.SRR**»). В этом случае форма может иметь вид:



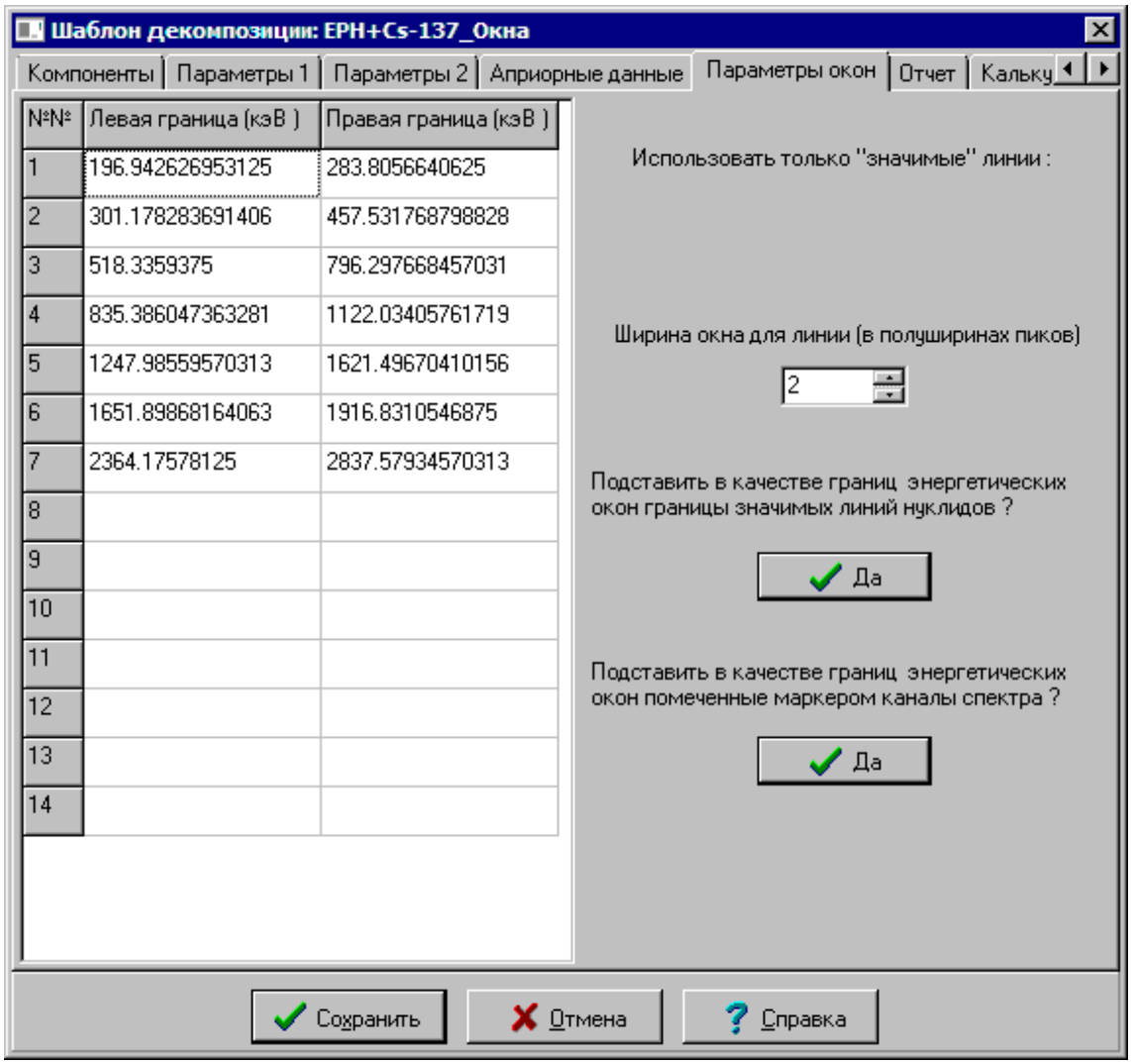
Клавиша «**Обзор...**» позволяет найти необходимый файл архива или результатов обработки спектра.

В том случае, если в режиме поиска априорных данных они не будут найдены, или не задан файл архива для поиска априорных данных, программа предложит оператору найти их самостоятельно или ввести вручную, если не установлен флажок «**Игнорировать, если не найдены**».

Необходимо учитывать, что программа пересчитывает значения активностей на величину исходного материала пробы. Это позволяет использовать результаты измерений нативных проб при обработке счётных образцов из концентрированного вещества, но может служить источником ошибок, в том случае, если оператор забыл указать, что какая

то из проб является концентрированной или в результате концентрирования изменился нуклидный состав пробы.

Страница «**Параметры окон**» при обработке непрерывных или плохо разрешенных спектров используется в режиме **оконного метода обработки** для задания энергетических окон.

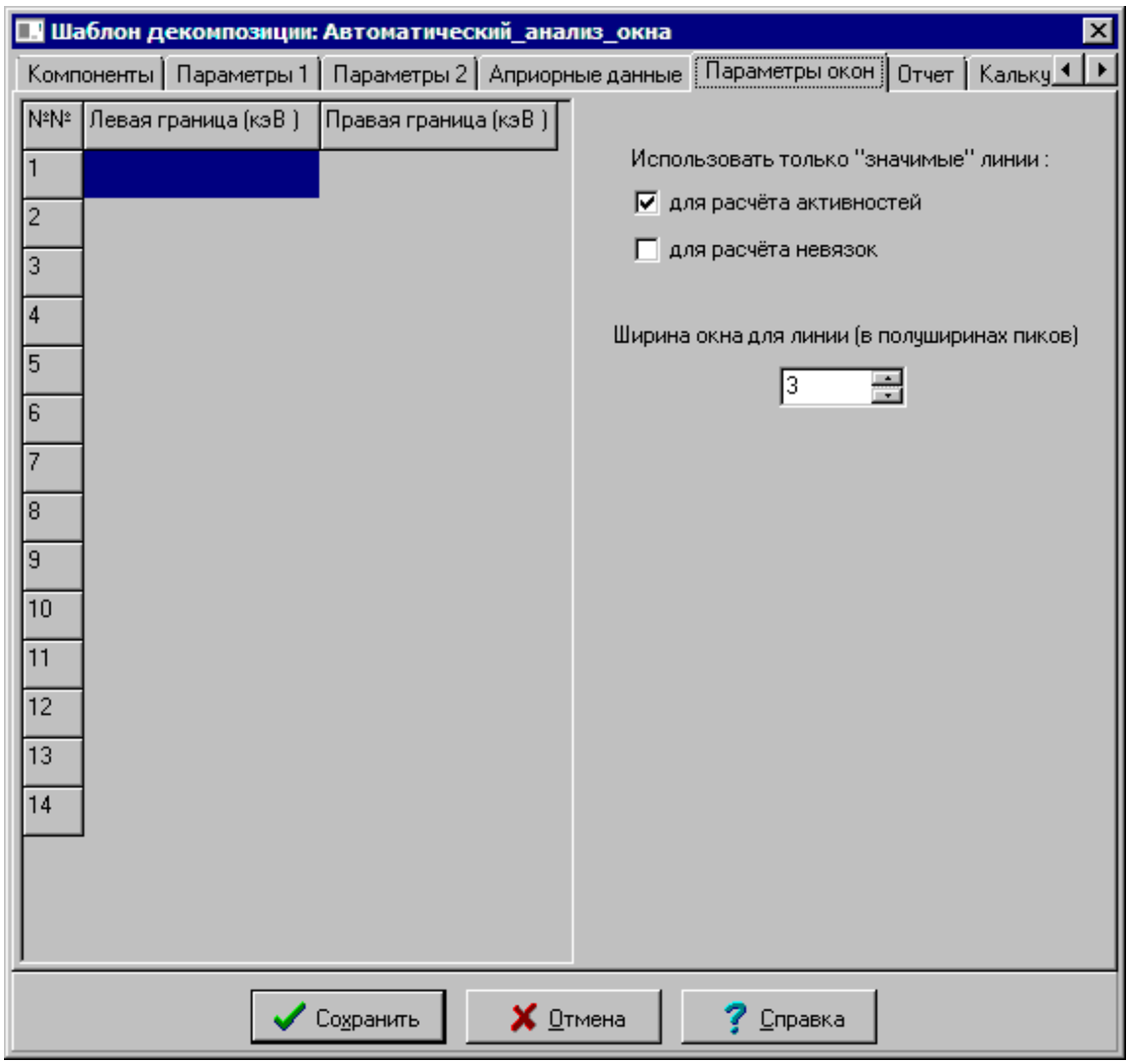


Оператор имеет возможность задать энергетические границы окон или подставить в качестве таких границ энергетические границы значимых линий нуклидов используемых компонентов разложения (для гамма и альфа спектров), либо помеченные каналы спектра, щелкнув по соответствующей клавише Да. При определении границ окон по линиям нуклидов, оператор должен задать **ширину окна для линии** в значениях ширины пиков на половине высоты (**в полуширинах пиков**). Всего можно определить 14 окон. Границы окон должны последовательно возрастать. Правая граница окна может совпадать с левой границей следующего окна. Нужно учитывать, что число окон не может быть меньше числа определяемых компонентов. В качестве окон используются наиболее характерные области в спектрах компонентов.

Щелчок правой кнопкой мышки по номеру окна вызывает всплывающее меню: Удалить окно / Вставить окно позволяющее либо удалить выбранное энергетическое окно, либо вставить на место текущего окна новое, сместив окна в таблице вниз.

При разложении линейчатых спектров на спектры пиков окна формируются автоматически в соответствии с предполагаемым нуклидным составом спектра, и

страница используется для задания параметров режима формирования окон, в том случае если оператор не задал режим одного энергетического окна (**Один сплайн на весь диапазон**).



Оператор должен задать ширину окон в значениях ширин пиков - параметр «**Ширина окна для линии в полуширинах пиков**» (используется термин «**полуширина**» - ширина пика на половине высоты) и указать все линии нуклидов или только отмеченные как «**значимые**» будут использоваться для формирования окон и, соответственно для расчёта активностей нуклидов и парциальных невязок при установке соответствующих галочек.

Измерение радона, предварительная обработка спектра фона

При измерении объёмной концентрации радона-222 в воздухе или потоков радона с использованием методик основанных на адсорбции радона на активированном угле проводят измерения активированного угля из нескольких адсорберов (контейнеров с углём). Измерение радона может проводиться для различного количества адсорберов с активированным углём (различного количества активированного угля). При этом требуется перерасчёт на количество угля и элементарных спектров радона и фона. Перерасчёт фона требуется поскольку уголь (свежий или после регенерации) до начала измерений содержит остаточный радон-222 и может содержать некоторое количество цезия-137 и калия-40. И если элементарный спектр Rn-222 остаётся неизменным, то фон меняется и из-за ухудшения характеристик угля, и вследствие своей изменчивости по ряду причин.

Спектр фона должен бы, при стандартной процедуре расчёта спектра фона, измеряться отдельно для каждого используемого количества адсорберов, что привело бы к существенному увеличению времени анализа.

В составе пакета «SPECTRRAD» есть программа **RadBgd.exe,** позволяющая рассчитывать спектр фона для конкретного числа адсорберов. Расчёт производится следующим образом:

- из спектра фона измеренного для заданного (максимального) числа адсорберов вычитается «чистый» спектр фона;
- остаток нормируется на заданное (максимальное) число адсорберов;
- умножается на число адсорберов в спектре пробы;
- дополняется «чистым» спектром фона (спектр фона без адсорберов с углём).

Таким образом формируется спектр фона для заданного числа адсорберов с активированным углём.

Программа при вызове должна содержать пять параметров: **RadBgd “Back0” “BackAdsElem” “BackAdsComp” nAdsSample nAsdsBgd**.

Здесь:

Back0 – адрес файла фона без угля. Путь к файлу может не содержать путь к папке спектрометра. Например: “ **КИ\ELEMENTS\backgr.anl”**

BackAdsElem - путь к файлу фона с углём. Например: **“ИК-63\COMP\backgr.anl”**

BackAdsComp - путь к файлу рассчитанного спектра фона в папке «Comp» (в папке «Comp» содержатся файлы используемые при обработке спектров).

Например: **“ИК-63\COMP\backgr.anl”**

nAdsSample - число адсорберов в измеренной пробе.

nAdsBgd - число адсорберов для фона с углём.

Вызов программы расчёта спектра фона из процедуры обработки может быть осуществлён либо включением строки вызова программы с необходимыми параметрами в **командный файл предварительной обработки** в параметрах шаблона декомпозиции, либо включением командного файла (текстовый файл с расширением «**cmd**») содержащего вызов программы **RadBgd.exe** с требуемыми параметрами.

При работе пакета «SPECTRRAD» «рабочей» папкой (папкой в которой ищутся файлы данных и программ, если в адресе файла не задан полный путь) является головная папка программного пакета «SPECTRRAD», но для командного файла предварительной обработки «рабочей» папкой назначается папка соответствующего спектрометра. Поэтому командные файлы предварительной обработки рекомендуется размещать в папках спектрометров.

При вызове программы **RadBgd.exe** из процедуры декомпозиции ряд параметров строки вызова может быть опущен:

BackAdsComp – если опущен адрес результата расчёта спектра фона, рассчитанный спектр фона будет записан в папку «**Comp**», предназначенную для сохранения всех спектров используемых при обработке.

nAdsSample – если нет параметра числа адсорберов (количества угля) в спектре пробы, он будет взят из параметра «**Размер пробы**» («**Size**») спектра пробы.

nAsdsBgd – если отсутствует число адсорберов (количество угля) в спектре фона адсорберов с углём, он будет взят из параметра «**Размер пробы**» («**Size**») спектра фона адсорберов с углём.

В стандартном варианте поставки программный пакет «SPECTRRAD» содержит два командных файла:

- **RadonBgd.cmd**, который содержит строку
  «**RadBgd “КИ\ELEMENTS\backgr.anl” “ИК-63\COMP\backgr.anl”**».
  Командный файл **RadonBgd.cmd** служит для расчёта спектра фона при обработке спектров активированного угля после экспозиции (для расчёта объёмной активности радона в воздухе или потоков радона). Запись расшифровывается следующим образом: чистый фон (без угля) **backgr.anl** берётся из папки **ELEMENTS** геометрии **КИ**, фон с углём **backgr.anl** берётся из папки **COMP** геометрии **ИК-63**, число

адсорберов не задано, значит оно берётся из параметра **SIZE** спектров пробы и фона с углём. Спектр фона в папке **ИК-63\COMP** до начала работы процедуры является либо копией спектра фона в папке **ИК-63\ELEMENTS** (файл текущего спектра фона с углём)**,** либо копией спектра фона с углём из архива измерений, если в параметрах декомпозиции задан режим «**Использовать фон из архива измерений**».

- **CtrlBgd.cmd** – содержит строку «**RadBgd “КИ\ELEMENTS\backgr.anl” “ИК-63\COMP\backgr.anl" "ИК-63\COMP\backgr.anl” 0»**. Командный файл **CtrlBgd.cmd** используется при расчёте спектра фона для процедуры контроля качества активированного угля. Поскольку в качестве количества активированного угля в спектре задано значение «0» - будет рассчитан «чистый» спектр фона.

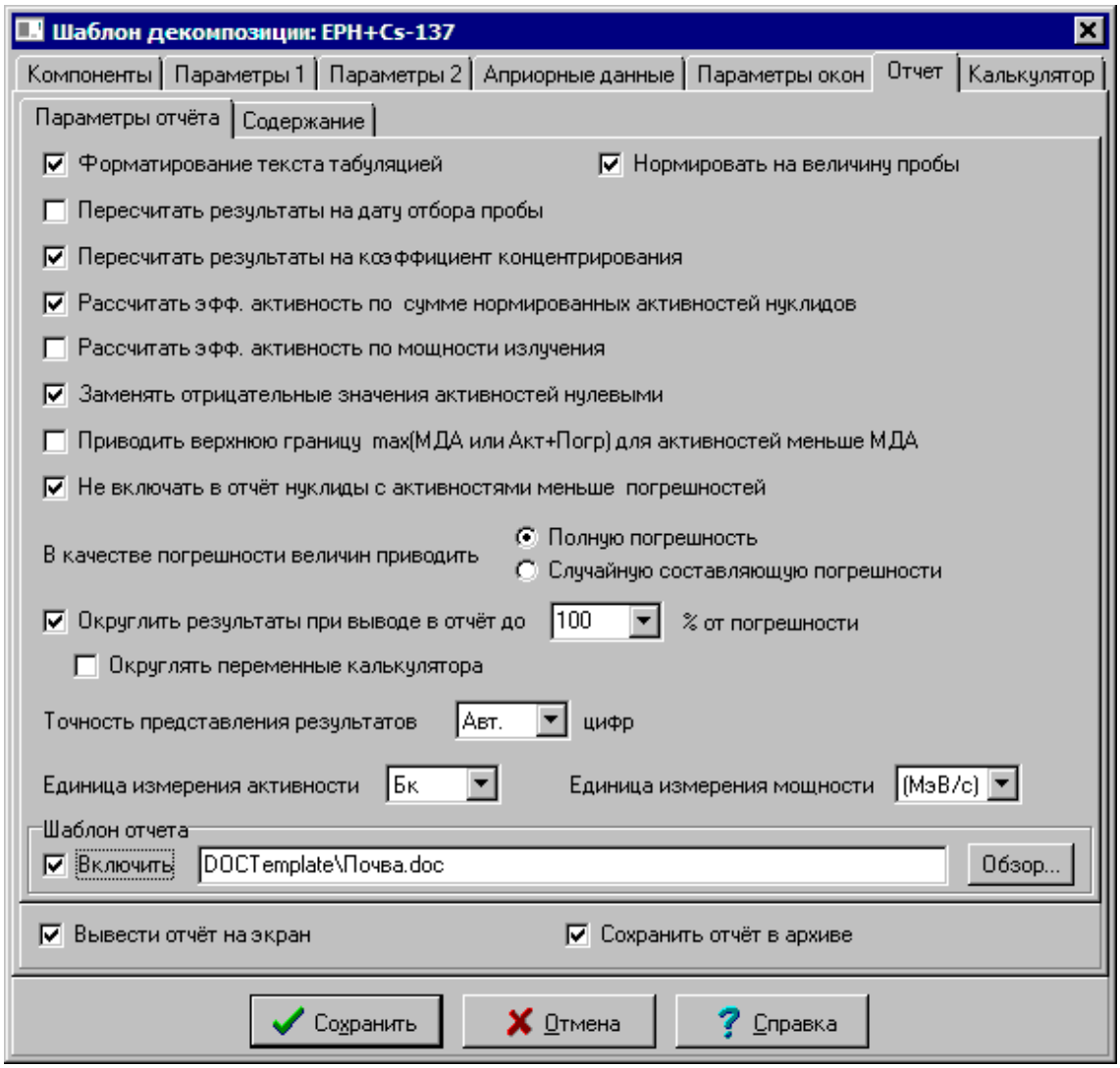
Для использования поставленных командных файлов оператору необходимо их отредактировать в соответствии с действительными адресами спектров фона без угля и с углём (требуется заменить в строках вызова названия геометрий (**КИ**, **ИК-63**) на реальные).

Формирование отчёта

В пакете «SpectrRad» оператор имеет возможность создавать любые формы отчётов результатов измерений. Принцип формирования отчёта заключается в том, что данные о результатах обработки, пробе, средстве измерений, нормативной документации и т.п. могут включаться в предварительно сформированный документ (**шаблон отчёта**). Выбор нужного шаблона отчёта может производиться программой калькулятора в зависимости от группы, к которой принадлежит тип пробы (например, для группы «Продукты» одна форма шаблона, а для группы «Грунты» другая), и от результата обработки спектра (соответствие или не соответствие каким-либо нормативам) (см. «Калькулятор»).

Для ленивого пользователя отчёт может формироваться и без шаблона отчёта, но, тем не менее, и в этом случае остаётся возможность задания его содержания и формы.

Страница «**Отчет**» содержит две закладки: «**Параметры отчёта**» и «**Содержание**».



На первой закладке ряд параметров определяющих форму отчёта:

- **Форматирование текста табуляцией** – при установке флажка процедура формирования отчёта перед каждым новым абзацем текста содержащего описания пробы, спектрометра, условий измерения будет включать символ табуляции для выравнивания текста по первой позиции табуляции (положения «красной» строки).
- Флажок **«Нормировать на величину пробы»** определяет вид представления активности нуклидов в отчете. Вид представления зависит от типа геометрии. Для геометрий измерений в «тонком» и промежуточном слоях общая активность - флажок не установлен, удельная - флажок установлен. Для геометрий измерений в

«толстом» слое обратная зависимость: флажок не установлен - удельная активность, флажок установлен - общая активность нуклидов в счётном образце.

- **Пересчитать результаты на дату отбора пробы** – при установленной «галочке» активности нуклидов будут пересчитаны на дату отбора пробы, в противном случае – на дату начала измерений.
- Флажок «**Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования**» позволяет приводить в отчете активности нуклидов в сыром материале, рассчитанные из активностей нуклидов в концентрированных (или разбавленных) счётных образцах.
- **Расчитать эфф. активность по сумме нормированных активностей нуклидов.** При установке "галочки" в отчете будет приведена суммарная эффективная гамма активность пробы. В качестве эффективной принято считать активность нуклидов эквивалентную активности Ra-226. Данные о коэффициентах эквивалентности для нуклидов программа расчета берет из рабочей библиотеки нуклидов и, в том случае, если коэффициент гамма эквивалента Ra-226 для нуклида отличен от нуля, вклад нуклида в суммарную эффективную активность пробы будет учтён. Надо учитывать, что такой расчёт эффективной активности для стандартного набора коэффициентов (три коэффициента: 1 – для Ra-226, 1.3 – для Th-232 и 0.09 – для K-40) будет корректен только в случае, если в пробе присутствуют только K-40, Ra-226 и Th-232 находящиеся в состоянии радиоактивного равновесия с дочерними нуклидами.
- **Расчитать эфф. активность по мощности излучения** – при установленной «галочке» программа производит расчёт суммарной эффективной активности по мощности альфа, бета или гамма излучения в сравнении с мощностью выбранного вида излучения 1 Бк указанного нуклида сравнения.
- **Заменять отрицательные значения активностей нулевыми** – в том случае, если при обработке спектра разрешены отрицательные значения активностей, при установке «галочки» отрицательные значения активностей в отчёте будут заменены нулевыми. Надо понимать, что запрет отрицательных значений при обработке спектра совсем не равнозначен замене отрицательных значений активностей нулевыми - запрет отрицательных значений при обработке спектра предохраняет от грубых промахов при неполной или неверной модели спектра, но не позволяет проводить полноценную статистическую обработку результатов измерений.
- Флажок «**В отчёте приводить верхнюю границу max(МДА или Акт+Погр) для активностей меньше МДА**» задает форму вывода результатов в отчете для величин имеющих оценки активностей меньше минимально детектируемых в соответствии с рекомендациями ISO и IEC. Для таких величин в отчёте приводится или **МДА** или **Активность+Погрешность** со знаком “<“ или словом «менее» в зависимости от того, какая величина больше. Значение МДА в единицах средне-квадратичных отклонений задается при настройке архива (см. «Архив результатов измерений». «Настройка архива»).
- При установке флажка «**Не включать в отчёт нуклиды с активностями меньше погрешностей**» в отчёте будут приведены записи только для нуклидов с относительной погрешностью определения активности менее 100 %.
- **В качестве погрешности величин приводить «Полную погрешность»** или **«Случайную составляющую погрешности»** - оператору предоставляется выбор одного из двух вариантов представления погрешности в отчёте. При выборе случайной составляющей погрешности таблица активностей в отчёте будет выведена шрифтом синего цвета.
- **Округлить результаты при выводе в отчёт до nn % от погрешности** – установка режима и формы округления оценок активностей нуклидов в отчёте. При установке 100% округления, значения активностей и погрешностей в отчёте будут приведены в соответствии с требованиями МИ 2453-2000. В том случае

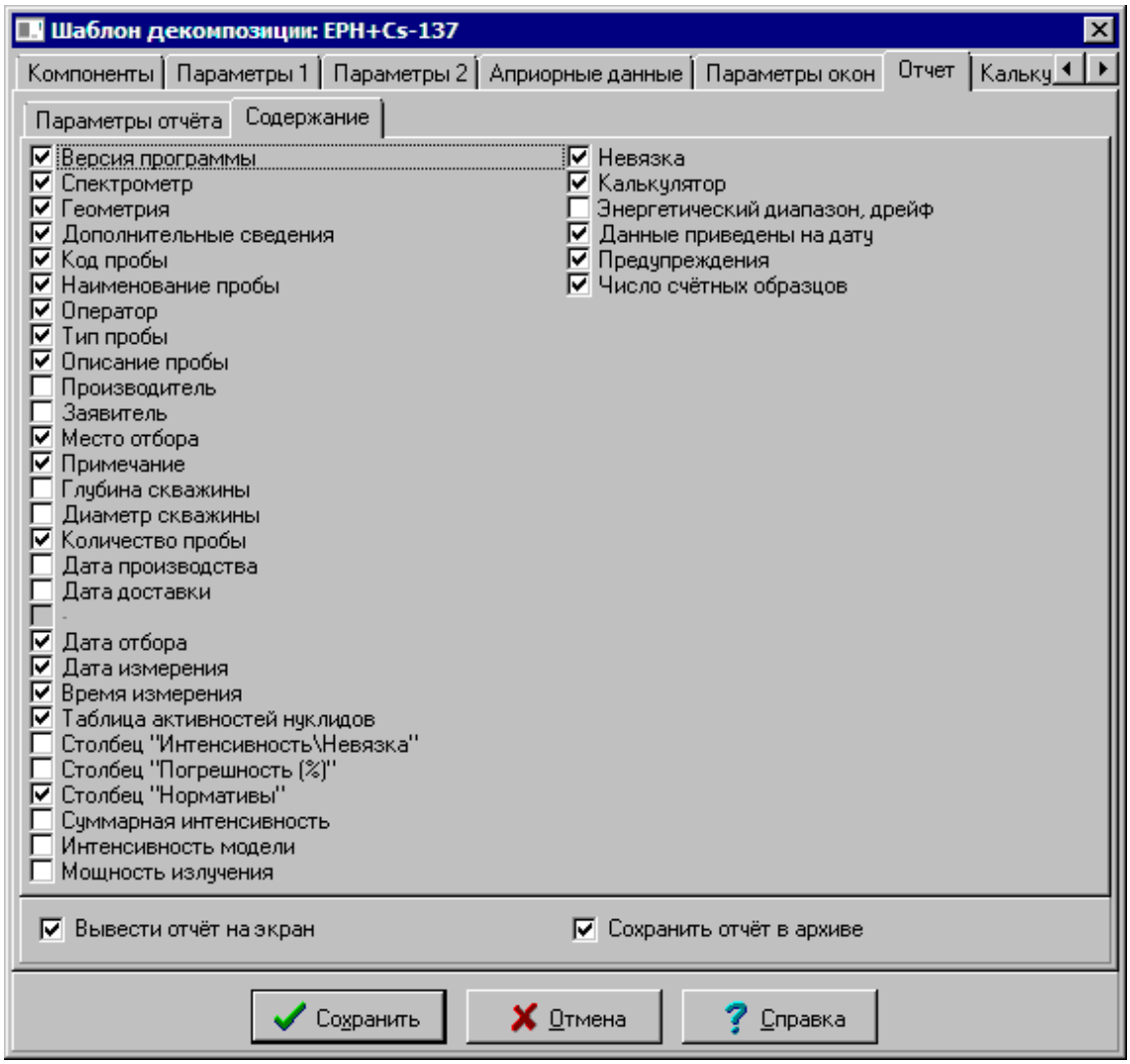
если список определяемых нуклидов формируется процедурами автоматического определения состава, включение / выключение режима округление результатов и точность округления влияют также и на список нуклидов которые будут приведены в отчёте. При выключенном режиме округления приводится весь список нуклидов, при включённом - только те нуклиды, из добавленных процедурами автоматического определения состава, относительная погрешность определения активности которых, меньше определённого уровня связанного с точностью округления.

- **Округлять переменные калькулятора** – при установке флажка будут округляться при выводе в отчёт и переменные программируемого калькулятора. Поскольку процедура округления в данном случае не имеет сведений о погрешности округляемой величины, значение величины будет округлено с относительной точностью 10% от заданной точности округления. Например, если задано 100% округление и значение величины равно **353.265**, то в отчёте эта величина будет округлена до 10% точности и представлена как **350**. Для корректного округления рассчитываемых в калькуляторе величин необходимо пользоваться существующими в калькуляторе функциями округления.
- **Точность представления результатов** – выбор количества цифр для представления результатов в отчёте. Значение «**Авт.**» - соответствует автоматическому определению необходимой точности представления результатов. При этом незначащие нули не выводятся.
- **Единица измерения активности** – выбор единицы измерения активности (Беккерель или Кюри) или содержания (граммы) в которых будет приведена в отчёте активность (содержание) нуклидов в пробе.
- **Единица измерения мощности** – выбор единицы измерения рассчитываемой процедурой мощности излучения от пробы (кэВ/с, Мэв/с, мкВт или Вт) в которых будет приведена мощность в отчёте. Мощность излучения рассчитывается в пределах выбранного энергетического диапазона.

Шаблон отчета - оператор, при желании, может указать файл шаблона отчёта. Файл должен содержать текст шаблона, сохранённый в формате RTF или в виде документа Word (DOC). Шаблон отчёта в виде документа Word имеет намного больше возможностей по форматированию. Недостатком такого шаблона является то, что отчёт создаётся в программе «Word» и программа «SpectrRad» не может отследить за всеми действиями оператора в другой программе. Шаблон в формате RTF может содержать форматированный текст, включающий рисунки но, разумеется, далеко не все возможности Microsoft Word поддерживаются (не поддерживается «Обрамление», вставка кадра, колонки и т.д. и т.п.).

Пример шаблона отчёта приведен в приложении. Кнопка Обзор... - обзор существующих шаблонов отчётов.

Таблица «**Содержание**» позволяет задать строки и столбцы формы вывода результатов обработки спектров, которые будут приведены в отчете.



При установке флажка “**Вывести отчёт на экран**” в обычном режиме обработки спектра окно отчёта визуализируется на экране дисплея. В режиме обработки спектров в процессе наблюдения за набором отчёт выводится в правый верхний угол главного окна программы «SPECTRRAD» независимо от установки флажка.

Флажок в графе «**Сохранить отчёт в архиве**» позволяет сохранить отчёт в архиве по окончании процедуры обработки спектра. При циклических измерениях спектр вместе с результатами обработки, если обработка спектра заказана, сохраняется в архиве по окончании каждого цикла независимо от установки флажка.

Метки шаблона отчёта

Формирование отчёта в виде документа MsWord в пакете «SPECTRRAD» основывается на том, что в предварительно подготовленном документе MSWord - шаблоне отчёта, часть текста замещается на определённый текст. Таким замещаемым тестом являются:

- Определённые слова, заключённые в фигурные скобки – метки шаблона отчёта, например **{Act[Cs-137]}**. Метки шаблона отчёта служат для вставки параметров пробы, условий измерения и результатов обработки спектра в текст шаблона
- Арифметическое выражение состоящее из чисел и меток, замещаемых численными значениями, связанными символами арифметических операций и

функций в соответствии с синтаксисом и орфографией встроенного программируемого калькулятора, заключённое в операторные скобки “~<” и “>~”, например **~<2*({Act[Cs-137]}+{Err[Cs-137]})+100>~**

Шаблон отчёта может состоять из двух частей: общей и повторяемой (повторяемая часть шаблона может отсутствовать). Повторяемая часть шаблона отчёта заключается в двойные угловые скобки, например **<<{Nucl} {Act} {Err}>>**. И общая и повторяемая части шаблона отчёта могут содержать произвольный текст, включающий метки.

Формирование отчёта происходит следующим образом:

- Все метки шаблона отчёта замещаются данными результатов обработки. Если шаблон отчёта содержит повторяемую часть, метки повторяемой части замещаются данными для первого нуклида из таблицы результатов обработки.
- Повторяемая часть, если она присутствует, копируется, и метки повторяемой части замещаются данными для второго нуклида таблицы.
- Процесс повторяется до окончания записей в таблице результатов.
- Арифметические выражения замещаются вычисленными значениями.
- Метки содержащие орфографические ошибки удаляются из текста.

Использование шаблонов отчётов включающих повторяемую часть полезно в том случае, если заранее неизвестно количество нуклидов, которые будут определены в пробе. Такая ситуация случится при использовании шаблонов обработки включающих процедуры автоматического определения нуклидного состава.

Ряд меток имеет смысл только в том случае, если они включены в повторяемую часть шаблона отчёта:

Метка	***Описание***
{SN}	Номер записи в таблице.
{Nucl}	Наименование нуклида для текущей записи.
{Act} **{Activ}**	Активность нуклида
{SAct}	Активность нуклида. Отличие от метки {Act} в том, что метка {Act} может быть замещена либо активностью нуклида, либо значением Акт.+Погр. в зависимости от настройки отчёта, а метка {SAct} всегда замещается активностью нуклида.
{StErr}	Статистическая неопределённость оценки активности заданного нуклида в единицах активности.
{TotErr}	Полная погрешность оценки активности заданного нуклида в единицах активности. Полная погрешность включает статистическую неопределённость, погрешность средства измерения и метода измерения.
{Err} **{AbsErr}**	Погрешность (неопределённость) оценки активности нуклида в единицах активности. Погрешность либо полная, либо статистическая, либо отсутствует, в зависимости от настройки формы отчёта.
{SErr}	Погрешность оценки активности заданного нуклида в единицах активности. Погрешность либо полная, либо статистическая в зависимости от настройки формы отчёта Отличие от метки {Err} такое же, как для метки {Sact}.
{Act&Err}	Активность и погрешность оценки активности нуклида в форме: Act±Err (например 125±15).
{RelErr}	Относительная погрешность оценки активности нуклида

	в процентах.
{Mass}	Масса нуклида в счётном образце. Для геометрии «тонкого» слоя масса приводится в килограммах, для геометрии «толстого» слоя в относительных долях массы счётного образца.
{MassErr}	Погрешность оценки массы заданного нуклида в единицах массы.
{Norm1}-{Norm5}	Пять нормативов для нуклида текущей записи.

Метки общей части шаблона отчёта:

Метка	***Описание***
{Image}	Изображение главного окна программы декомпозиции спектра.
{File}	Наименование файла отчёта.
{Date}	Дата создания отчёта.
{Program}	Версия программы.
{DecTemplate}	Наименование использованного шаблона обработки.
{NuclidesTable}	Использованная при обработке таблица нуклидов.
{Analyser}	Наименование и описание спектрометра. Текст копируется из описания спектрометра, введённого при его установке.
{AnalNick}	Краткое наименование спектрометра.
{Geometry}	Наименование и описание геометрии измерений. Текст копируется из описания геометрии, введённого при установке геометрии.
{GeomNick}	Краткое наименование геометрии измерений.
{Info}	Сведения о поверке спектрометре. Текст копируется из графы "Свидетельство о поверке" описания спектрометра, введённого при его установке.
{AddNote}	Сведения о поверке спектрометре. Текст копируется из графы "Свидетельство о поверке" описания спектрометра, введённого при его установке.
{SampleCode}	Код пробы.
{Sample}	Наименование пробы.
{Operator}	Оператор - данные оператора (лаборанта) проводившего измерения.
{SampleType}	Тип пробы и информация о нормативах и константах, связанная с данным типом пробы. Информация о нормативе копируется из графы «Комментарий» соответствующего норматива.
{SampleNote}	Описание пробы.
{Producer}	Производитель.
{ProductionDate}	Дата производства.
{Declarant}	Заявитель – организация или частное лицо подавшее

	заявку на исследование пробы.
{DeliveryDate}	Дата доставки.
{SampleArea}	Место отбора.
{Comment}	Примечание.
{Size}	Параметр 1.
{SParam}	Параметр 2.
{RawValue}	Количество исходного материала, использованного при концентрировании пробы.
{ConcMass}	Масса концентрата полученного при концентрировании исходного материала.
{ChemYield}	Выход выделяемого вещества (%) при химическом концентрировании.
{SampleMass}	Масса счётного образца.
{Weight}	Масса счётного образца или количество исходного материала использованного при концентрировании пробы, в зависимости от того, как представлены значения удельной активности в результатах обработки.
{ExposeDate}	Дата начала отбора (экспозиции) пробы.
{SampleDate}	Дата окончания отбора (экспозиции) пробы.
{MeasDate}	Дата начала измерения.
{MeasEndDate}	Дата окончания измерения.
{ActualDate}	Дата, на которую приведены значения активностей нуклидов и интенсивностей излучения. Дата значения активностей может совпадать либо с датой начала измерений, либо с датой отбора.
{MeasTime}	Продолжительность измерения в секундах.
{Report}	Результаты обработки. Метка {Report} замещается полным текстом отчета, включающим и таблицу активностей нуклидов, и информацию о пробе, средствах измерения и т.п.
{Table}	Таблица активностей нуклидов. В таблицу активностей включается кроме непосредственно активностей и результаты выполнения программы калькулятора и дополнительная информация: интенсивность модели, фона, невязка, энергетический диапазон, число образцов, предупреждения о превышении заданных контрольных параметров.
{Calculator}	Результаты выполнения программы калькулятора.
{Calc1}, {ErCalc1}... {Calc8}, {ErCalc8}	Значения сохраняемых переменных программы калькулятора.
{Calc&Err1},... {Calc&Err8}	Значения сохраняемых переменных программы калькулятора в форме: Calc±ErCalc (например 125±15).
{AUnit}	Размерность активности нуклидов.
{Nucl[i]}	Наименование (синоним) i-ого нуклида или в

{Nucl[Name]}	альтернативной форме - синоним нуклида **Name**. i – порядковый номер записи о нуклиде в таблице активностей. Нумерация начинается с единицы. Например **{Nucl[1]}** для списка нуклидов начинающихся с Cs-137 будет замещён синонимом нуклида **Cs-137**, а **{Nucl[SumAct-G]}** – текстом «Суммарная гамма».
{Act[i]} **{Act[Name]}** **{Activ[i]}** **{Activ[Name]}**	Активность i –ого нуклида (например **{Act[1]}**) или в альтернативной форме - активность нуклида **Name** (например **{Act[Cs-137]}**). Для суммарной активности зарезервированы наименования условных нуклидов: **SumAct-A**, **SumAct-B** и **SumAct-G** – суммарная по альфа, бета и гамма.
{SAct[i]} **{SAct[Name]}**	Активность нуклида. Отличие от метки {Act[]} в том, что в отчёте метка {Act[]} может быть замещена либо активностью нуклида, либо значением Акт.+Погр. в зависимости от настройки отчёта, а метка {Sact[]} всегда замещается активностью нуклида.
{StErr[i]} **{StErr[Name]}**	Статистическая неопределённость оценки активности заданного нуклида в единицах активности.
{TotErr[i]} **{TotErr[Name]}**	Полная погрешность оценки активности заданного нуклида в единицах активности. Полная погрешность включает статистическую неопределённость, погрешность средства измерения и метода измерения.
{Err[i]} **{Err[Name]}** **{AbsErr[i]}** **{AbsErr[Name]}**	Погрешность (неопределённость) оценки активности нуклида в единицах активности. Погрешность либо полная, либо статистическая, либо отсутствует, в зависимости от настройки формы отчёта.
{SErr[i]} **{SErr[Name]}**	Погрешность оценки активности заданного нуклида в единицах активности. Отличие от метки {Err[]} такое же как для метки {Sact[]}.
{Act&Err[i]} **{Act&Err[Name]}**	Активность и погрешность оценки активности нуклида в форме: Act±Err (например 125±15).
{RelErr[i]} **{RelErr[Name]}**	Относительная погрешность оценки активности нуклида в процентах.
{Mass[i]} **{Mass[Name]}**	Масса i –ого нуклида в счётном образце или в альтернативной форме - масса нуклида **Name** (например **{Mass[Cs-137]}**). Для геометрии «тонкого» слоя масса приводится в килограммах, для геометрии «толстого» слоя в относительных долях массы счётного образца.
{MassErr[i]} **{MassErr[Name]}**	Погрешность оценки массы заданного нуклида в единицах массы.
{Norm1[i]}-{Norm5[i]} **{Norm1[Name]}-** **-{Norm5[Name]}**	Пять нормативов для заданного нуклида.
{AEff}	Суммарная эффективная активность нуклидов в пробе рассчитанная в соответствии с заданными в использованной при обработке таблице нуклидов значениями гамма эквивалента излучения нуклида по Ra-

	226. В качестве AEff может использоваться либо непосредственно значение AEff, либо верхний порог (AEff+AeffAbsErr), в зависимости от установки параметров отчёта.
{SAEff}	Суммарная эффективная активность нуклидов в пробе. В качестве SAEff всегда используется непосредственно значение AEff.
{AEffErr} **{AEffAbsErr}**	Погрешность оценки AEff в единицах активности.
{SAEffErr}	Погрешность оценки AEff в единицах активности. В качестве SAEffErr всегда используется непосредственно значение погрешности AEff.
{AEff &Err}	Активность и погрешность оценки суммарной эффективной активности нуклидов в форме: Act±Err (например 125±15).
{AEffRelErr}	Относительная погрешность оценки AEff в процентах.
{InputRate}	Суммарная интенсивность зарегистрированного спектрометром излучения в имп./с.
{SumIntens}	Суммарная интенсивность зарегистрированного излучения от счётного образца и фона в заданном энергетическом диапазоне в имп./с.
{BgdIntens}	Интенсивность фонового излучения в заданном энергетическом диапазоне.
{ModelIntens}	Интенсивность излучения от нуклидов сформированной модели в заданном энергетическом диапазоне.
{ComptonIntens}	Интенсивность спектра непрерывного рассеяния в заданном энергетическом диапазоне.
{RadPower}	Мощность излучения от пробы.
{Residuals}	Невязка декомпозиции.
{GlbResiduals}	Общая невязка.
{EnergyPar}	Использованный при обработке энергетический диапазон.
{Drift}	Параметры энергетического дрейфа.
{Zeff}	Оценённое значение Z - эффективное счётного образца.
{NumberOfSamples}	Число счётных образцов, результаты измерений которых использовались для формирования отчёта.
{Warnings}	Текст сообщений формируемых процедурой обработки при превышении заданных допустимых уровней невязки, энергетического дрейфа и ухудшения разрешения спектрометра.
{Note}	Текст информационных сообщений формируемых процедурой обработки.

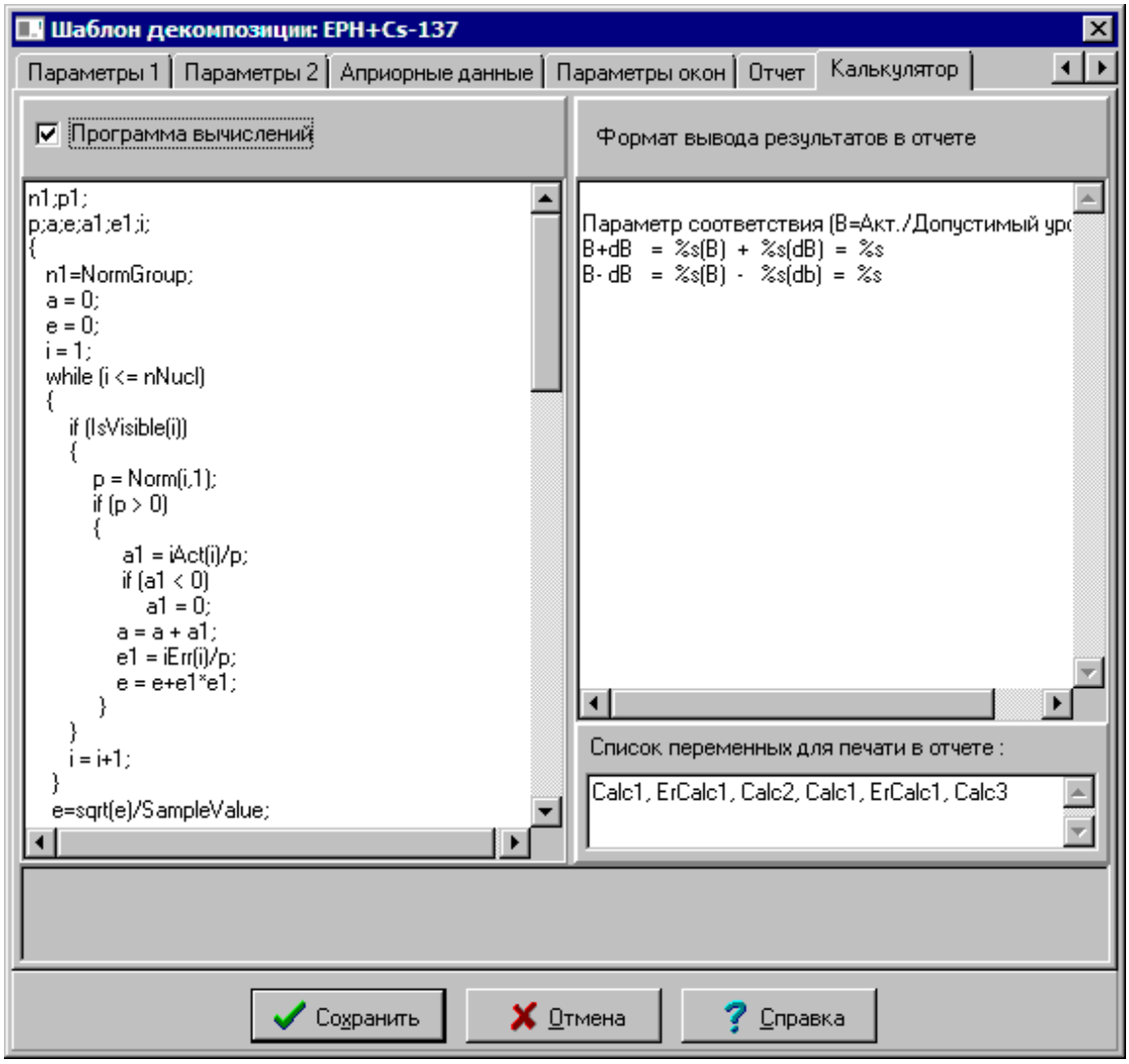
Текст, связанный с соответствующей меткой, при формировании отчета замещает текст метки, наследуя стиль и шрифт текста метки. Поскольку названия граф («Спектрометр», «Геометрия», «Код пробы» и т.д.) в программном пакете

«SPECTRRAD» могут изменяться, для меток, от метки {Analyser} до метки {MeasTime}, существуют дополнительные метки вида {lbxxxx}, которые замещаются текущим наименованием соответствующей графы. Например: метка {lbAnalyser} будет замещена текстом «Спектрометр» или «Анализатор», а метка {lbSize} текстом «Размер пробы», «Глубина скважины» или «Число адсорберов» в зависимости от настройки архива измерений. Отчёт о результатах обработки спектра, замещающий метку {Report}, также может содержать все графы связанные с параметрами пробы и условиями измерений, поэтому, для того чтобы не было дублирования информации, шаблон отчёта и настройка таблицы «Содержание» страницы «Отчёт» должны быть согласованы друг с другом.

Программа калькулятора

Оператор имеет возможность рассчитать дополнительные вычисляемые параметры из рассчитанных значений активностей и дополнительных переменных, управлять выбором шаблона отчёта, управлять внешними процессами и длительностью процедуры измерений, используя возможности встроенного калькулятора (см. «Калькулятор»).

Страница «**Калькулятор**» имеет вид:



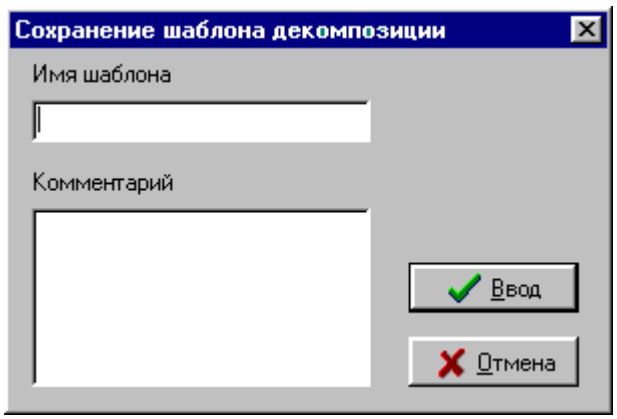
Для записи программы оператор должен установить флажок «**Программа вычислений**».

Текст программы калькулятора записывается в левом окне формы (в примере приведена программа формирования отчёта в зависимости от величины эффективной активности пробы). Правое окно - «**Формат вывода результатов в отчёте**» для записи формата вывода текста и рассчитанных параметров, указанных в **списке переменных**

для печати в отчете. Нижняя панель служит для вывода сообщений об ошибках при компиляции программы.

Сохранение шаблона

Установленные оператором параметры обработки можно сохранить как ***шаблон декомпозиции***, щелкнув по клавише «**Сохранить**». При этом на экран выводится окно



Оператор должен ввести **имя шаблона** (пробелы в имени шаблона недопустимы) и произвольный **комментарий**.

Калькулятор

Назначение

Встроенный программируемый калькулятор предоставляет пользователю ряд дополнительных возможностей:

- Возможность создавать программы для расчета необходимых дополнительных параметров по результатам обработки проб. Например, расчёт параметра соответствия количества содержания радионуклидов в пробе нормам СанПиН, объёмную активность радона в воздухе по активности продуктов распада радона в угольных фильтрах, активность нуклидов в исследуемом материале по результатам анализа проб после радиохимического выделения и т.д. и т.п.
- Обработка спектров в процессе циклических измерений или во время наблюдения за набором предоставляет пользователю возможность управлять процессом измерений - останавливать измерения при выполнении необходимых условий, сохранять или не сохранять результаты измерений в архиве.
- Вызов внешней процедуры из программы калькулятора позволяет управлять внешними процессами, которые могут быть зависимы от результатов анализа измеренных спектров (например - включение сирены и т.п.).

Возможность самостоятельно создавать и редактировать такие программы, в том числе и формировать нужные формы вывода результатов позволяет автоматизировать большую часть необходимых дополнительных вычислений, организовать печать результатов в удобной для пользователя форме.

Включение результатов расчетов по программе калькулятора в базу данных позволяет использовать их в более мощных программах обслуживания баз данных (Excel, Foxpro и т.п.).

Термины

Переменная	Число в формате с плавающей точкой, из программы калькулятора доступно через уникальное в контексте программы имя. Все используемые переменные должны быть перечислены (объявлены) в начале программы.
Выражение	Последовательность математических операций, записанная по определенным правилам (см. «Синтаксис программы калькулятора»).
Присваивающее выражение	Выражение типа **A = выражение,** где **A** - имя переменной.

Структура программы калькулятора

Программа калькулятора состоит из двух частей: ***секции инициализации*** и ***секции вычислений***.

Секция инициализации расположена в начале текста программы и предназначена для объявления и инициализации переменных. Здесь должны быть объявлены все переменные, кроме предопределенных, которые используются в секции вычислений. Для объявления переменной вводится имя и, дополнительно, инициализирующее выражение. В инициализирующем выражении можно использовать любые арифметические действия и функции но нельзя использовать имена переменных, в том числе предопределенных.

Примеры:

A;B;C=10;Pi=3.141596;E=exp(1);

Объявляются 4 переменные **A, B, C, Pi; C, Pi** и **E** инициализируются константными выражениями, значения переменных **A** и **B** не определены.

A=pow(2,10)*5;

B=sin(3.14/2);

Объявляются и инициализируются переменные **A**, **B**;

Инициализация вида

A = 10;

B = A/100;

не разрешается, так как **A** - переменная и в момент инициализации ее значение может быть не определено.

Секция инициализации может отсутствовать. Признак конца инициализации и начала секции вычислений - символ «{». ***Секция вычислений*** продолжается от первой «{» до последней «}». ***Секция вычислений*** состоит из последовательности присваивающих выражений, условных операторов **if** и **else**., операторов цикла **while**, операторов ввода-вывода, процедур и функций.

Предопределенные переменные

При вводе программы автоматически объявляются следующие переменные:

nNucl	Число нуклидов в таблице результатов обработки спектра (включая условные нуклиды суммарной активности).
iNucl(I)	Наименование нуклида с порядковым номером **I** в таблице результатов. Нумерация нуклидов начинается с единицы. Альтернативный вариант доступа к значениям таблицы результатов удобен при просмотре результатов измерений в операторе цикла **while**
iElement(I)	Наименование элемента, в котором содержится нуклид с указанным значением распространённости для нуклида с порядковым номером **I** в таблице результатов. Нумерация нуклидов начинается с единицы.
Act(Nucl)	Активность нуклида **Nucl** на дату значений активности (предопределенная переменная **Dact**) в Беккерелях для геометрий «тонкого слоя» и в Бк/кг для геометрий «толстого слоя». **Nucl** - название нуклида (например, Act(Cs-137) - активность цезия-137).
AprAct(Nucl)	Активность нуклида **Nucl** в априорных данных (данных сравнения) на дату **Dact** в Беккерелях для геометрий «тонкого слоя» и в Бк/кг для геометрий «толстого слоя».
iAct(I)	Активность нуклида с порядковым номером **I** в таблице результатов на дату значений активности. Нумерация нуклидов начинается с единицы.
iAct0(I)	Активность нуклида с порядковым номером **I** в таблице результатов на дату начала набора спектра.
iAprAct(I)	Активность нуклида в априорных данных (данных сравнения) с порядковым номером **I** в таблице результатов на дату значений активности.
Err(Nucl)	Погрешность (неопределённость) оценки активности нуклида **Nucl** в тех же единицах на ту же дату **Dact**. В качестве погрешности программа возвращает значение либо случайной составляющей неопределённости, либо полную неопределённость в зависимости от настройки отчёта. Флажок, определяющий тип погрешности, можно менять и непосредственно в программе калькулятора (функция **SetRandomError(flag)**).
AprErr(Nucl)	Погрешность (неопределённость) оценки активности нуклида **Nucl** в априорных данных (данных сравнения) на дату **Dact**. В качестве погрешности программа возвращает значение случайной составляющей неопределённости. Если погрешность меньше или равна нулю - априорных данных нет.
iErr(I)	Погрешность оценки активности **I**-ого нуклида в таблице результатов на дату значений активности.

iErr0(I)	Погрешность оценки активности **I**-ого нуклида в таблице результатов на дату начала набора спектра.
iAprErr(I)	Случайная составляющая погрешности оценки активности **I**-ого нуклида априорных данных (данных сравнения) в таблице результатов. Если погрешность меньше или равна нулю - априорных данных нет.
IsVisible(I)	Флаг присутствия **I**-ого нуклида в отчёте: 1 - нуклид представлен в отчёте, 0 - нуклид отсутствует.
EffAct	Удельная эффективная активность пробы на дату значений активности в Беккерелях на единицу измерения величины пробы (например в Бк/кг, если величиной пробы является масса.
ErrEffAct	Погрешность оценки удельной эффективной активности в тех же единицах.
SumAct (N)	Удельная суммарная активность пробы на дату начала измерений в Беккерелях на единицу измерения величины пробы (например, в Бк/кг, если величиной пробы является масса. **N** = 1 - суммарная альфа активность. **N** = 2 - суммарная бета активность. **N** = 3 - суммарная гамма активность. **N** = 0 - вид суммарной активности (альфа, бета или гамма) определяется типом излучения спектра пробы
ErrSumAct(N)	Погрешность оценки суммарной активности в тех же единицах.
NuclMass (Nucl)	Масса нуклида **Nucl** на дату значений активности (предопределенная переменная **Dact**) в килограммах для геометрий «тонкого слоя» и в относительной доле массы для геометрий «толстого слоя».
iNuclMass (I)	Масса нуклида с порядковым номером **I** в таблице нуклидов (нумерация нуклидов начинается с единицы) на дату значений активности.
ErrNuclMass (Nucl)	Погрешность оценки массы нуклида **Nucl** в тех же единицах на ту же дату **Dact**.
iErrNuclMass (I)	Погрешность оценки массы нуклида с порядковым номером **I** в таблице нуклидов в тех же единицах на ту же дату **Dact**.
NormGroup	Номер группы нормативов связанных с заданным типом пробы.
Norm1(Nucl) - **- Norm5(Nucl)**	Пять нормативов (СанПиН, НРБ и тп.) для заданного типа пробы для нуклида **Nucl**.
Norm(I, J)	**J** -ый норматив из пяти нормативов для **I**-ого нуклида в таблице результатов. Нумерация нуклидов и нормативов начинается с единицы.
NormSumAct(N,I)	**I** -ый норматив из пяти нормативов для удельной суммарной активности **N (N -** вид суммарной активности). Нумерация вида суммарной активности (альфа, бета, гамма) и нормативов начинается с единицы.
NormEffAct(I)	**I** -ый норматив из четырёх нормативов для удельной эффективной гамма активности. Нумерация нормативов начинается с единицы.
HalfLife(Nucl)	Период полураспада в секундах нуклида **Nucl**.
iHalfLife(I)	Период полураспада в секундах нуклида с порядковым номером **I** в таблице нуклидов (нумерация нуклидов начинается с единицы).
ActSection(Nucl)	Сечение активации в барнах стабильного нуклида **Nucl**.
AtomMass(Nucl)	Атомный вес нуклида **Nucl** (цепочки нуклидов, образуемых нуклидом **Nucl).**
Abundance(Nucl)	Распространенность нуклида **Nucl** в соответствующем элементе (для естественно радиоактивных нуклидов) в процентах.

iAbundance(I)	Распространенность нуклида с порядковым номером **I** в таблице нуклидов (нумерация нуклидов начинается с единицы) в соответствующем элементе (для естественно радиоактивных нуклидов) в процентах.
GEquRa(Nucl)	Гамма эквивалент радия для нуклида **Nucl**.
iGEquRa(I)	Гамма эквивалент радия для нуклида с порядковым номером **I** в таблице нуклидов (нумерация нуклидов начинается с единицы).
SampleMass	Масса счётного образца в килограммах.
ConcMass	Масса полученного концентрата (или всей пробы) в килограммах.
RawValue	Величина (масса, объём или площадь) исходного материала, соответствующая массе счётного образца.
SampleValue	В **SampleValue** передается либо значение **SampleMass**, либо значение **RawValue**, в зависимости от установки параметра «*Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования*» в шаблоне обработки или положения соответствующей кнопки ( ) в форме отчёта.
Size	«Параметр 1» пробы.
SParam	«Параметр 2» пробы.
GeomVolume	Объём геометрии измерений в литрах.
Tmeas	Живое время измерения в миллисекундах.
TmeasReal	Реальное время измерения в миллисекундах.
Dexpose	Дата начала отбора (экспозиции) пробы. Все даты в формате TDateTime принятом в Windows – число дней с 12/30/1899. Дробная часть – время дня.
Dsample	Дата окончания отбора (экспозиции) пробы.
Dmeas	Дата начала измерений (цикла измерений).
DFirstCycle	Дата начала циклических измерений (первого цикла измерений).
DAprMeas	Дата измерения априорных данных. Если дата равна нулю – априорных данных нет.
Dact	Дата значений активности. Дата значений активности совпадает либо с датой начала измерений (**Dmeas**), либо с датой отбора пробы (**Dsample**) в зависимости от установки параметров обработки.
UseMHL	Значение флага режима пересчёта активностей на заданную дату, определённую в настройках отчёта: если **UseMHL** отлично от нуля – при расчёте используются значение периода полураспада материнского нуклида (если он присутствует в спектре), в противном случае используется период полураспада нуклида, для которого выполняется расчёт.
VRound	Уровень округления результатов заданный в параметрах отчёта. Величина задаётся в относительных единицах: 0 – округление не задано, 1 – 100 процентное округление).
InputRate	Усреднённая за время набора спектра загрузка спектрометра в импульсах в секунду.
RateWarnLevel	Установленный для спектрометрического тракта «порог предупреждения» в импульсах в секунду. При загрузке спектрометра превышающей данный порог загорается жёлтый индикатор и включается звуковая схема «Предупреждение».
RateAlarmLevel	Установленный для спектрометрического тракта «порог тревоги» в импульсах в секунду. При загрузке спектрометра превышающей данный порог загорается красный индикатор и включается звуковая схема «Тревога».

DTWarnLevel	Установленный для спектрометрического тракта «порог предупреждения» в процентах «мёртвого времени» спектрометра. Схема оповещения о превышении порогов включается при превышении любого из уровней: «мёртвого времени» или интенсивности регистрируемых импульсов.
DTAlarmLevel	Установленный для спектрометрического тракта «порог тревоги» в процентах «мёртвого времени» спектрометра.
TotalInt	Интенсивность импульсов (имп./с), зарегистрированных в энергетическом окне использованном для обработки спектра. Для разрешённых линейчатых спектров - интенсивность импульсов, зарегистрированных в пиках.
GlobalResiduals	Общая невязка (отклонение спектра от модели). Невязка приводится в среднеквадратичных отклонениях.
NormalResiduals	Невязка декомпозиции.
ResAlarmLevel	Максимально допустимый уровень невязки.
Drift	Энергетический дрейф спектрометра в процентах, оценённый по результатам декомпозиции
DriftAlarmLevel	Максимально допустимый уровень дрейфа.
ADrift	Параметр «А» линейного дрейфа (A*X+B) энергетической калибровки - дрейф коэффициента усиления.
BDrift	Параметр «В» линейного дрейфа - дрейф нуля шкалы.
Calc1-Calc8, ErCalc1-ErCalc8	Вычисляемые переменные, которые будут запоминаться в архиве результатов измерений. Переменные **ErCalc1-ErCalc8** рекомендуется использовать для значений погрешностей величин **Calc1-Calc8.**

Синтаксис программы

Программа калькулятора может состоять из следующих элементов:

Элемент	**Описание**
{	Начало секции вычислений, блока **if**, блока **else**, блока **while**.
}	Конец секции вычислений, блока **if**, блока **else**, блока **while**.
=	Присваивание.
;	Конец выражения.
*** /**	Умножение, деление,
+ -	сложение, вычитание.
( )	Скобки, задают порядок вычислений, выражение в скобках вычисляется первым.
> <	Логические операции «больше», «меньше»,
>= <=	«больше или равно», «меньше или равно»,
== !=	«равно», «не равно»,
& |	логическое 'И', логическое 'ИЛИ'. Логические операции должны использоваться вместе с условным оператором **if/else** и оператором цикла **while**. Результат логических операций равен 1, если условие выполняется (истинно), либо 0, если условие не выполняется (ложно). Следует избегать использования '==' для сравнения переменных из-за ограниченной точности вычислений. Допустимо сравнивать переменную с константой.
Имя переменной	Последовательность букв и цифр, должно начинаться с буквы.
Число	Допускается ввод чисел в диапазоне -1.e-38, +1.e38 в форме с плавающей точкой или экспоненциальной.
Предопределенные переменные, операторы,	В калькуляторе определен ряд математических функций, предопределенных переменных, логический оператор **if/else,** оператор цикла **while** и операторы для ввода/вывода значений

функции и процедуры.	переменных и ряд операторов процедур для управления процессом измерений и внешними процессами.
Разделитель	Символы пробела и новой строки считаются разделителями элементов выражения. Разделители игнорируются при вычислениях и могут встречаться в любом месте выражения
//	Две наклонных черты подряд обозначают начало комментария. Текст комментария игнорируется при вычислениях и может быть произвольным, комментарий продолжается до конца строки.

Последовательность выполнения операций

1.	Выражение в скобках ( ), функция.	Высший приоритет.
2.	*, /	умножение, деление.
3.	+, -	сложение, вычитание.
4.	>=, >, <, <=, ==, !=	операции сравнения.
5.	&, |	логические операции «И», «ИЛИ».

В пределах скобок последовательность выполнения операций в выражении такая же, как указана.

Условный оператор

Предназначен для ветвления программы калькулятора в зависимости от текущего значения некоторого выражения, которое называется **«условие»**:

Условный оператор имеет четыре формы записи:

1.

if(условие) <выражение>;

<выражение> вычисляется, если **условие** истинно;

2.

```
if(условие)
{
 <выражение_1>;
 ...
 <выражение_n>;
 }
```

<выражение_1> - <выражение_n> вычисляются, если **условие** истинно;

3.

if(условие) <выражение1>;
else <выражение2>;
<выражение1> вычисляется, если **<условие>** истинно**,**
<выражение2> вычисляется, если **<условие>** ложно;

4.

```
if(условие)
{
<выражение_1>;
 ...
<выражение_n>;
}
else
{
<else_выражение_1>;
...
<else_выражение_n>;
}
```

<выражение_1> - <выражение_n> вычисляются, если **условие** истинно,
<else_выражение_1> - <else_выражение_n> вычисляются, если **условие** ложно.

Оператор цикла

Предназначен для повторения части программы калькулятора заданное количество раз в зависимости от текущего значения некоторого выражения, которое называется **«условие»**:

```
while(условие)
{
 <выражение_1>;
 ...
 <выражение_n>;
 }
```

<выражение_1> - <выражение_n> вычисляются, если **условие** истинно и вычисления будут повторяться до тех пор, пока **условие** не станет ложным.

Функции

Функция	Описание
lg(X)	Десятичный логарифм X, X>0;
ln(X)	Натуральный логарифм X, X>0;
pow(X, Y)	X в степени Y;
exp(X)	**e** в степени X, где **e** – натуральное число;
sqrt(X)	Квадратный корень от X, X>=0;
abs(X)	Абсолютная величина X;
sin(X)	Синус X, X задается в радианах, 180° = 3.141596 радиан;
cos(X)	Косинус X, X задается в радианах;
tg(X)	Тангенс X, X задается в радианах;
asin(X)	Арксинус X;
acos(X)	Арккосинус X;
atg(X)	Арктангенс X;
mod(X, Y)	Остаток от деления X на Y;
round(X)	Наибольшее целое число, не превышающее X.
fround(Val, Err)	Округлённое с точностью Err значение Val.
NuclNameCmp(“Name”,Var)	Сравнение значения переменной **Var** с текстовой строкой **“Name”**. В калькуляторе все переменные имеют длину 8 байт. Данная функция интерпретирует переменную как строку символов длиной до 8 байт. Сравнение производится без учёта регистра и используется для сравнения названий нуклидов. Функция возвращает отличное от нуля значение, если строки идентичны.
SetRandomError(Flag)	Установка флага определяющего расчёт неопределённостей (погрешностей). Если значение переменной **Flag** отлично от нуля, погрешность будет включать только случайную составляющую, в противном случае – полную неопределённость. Функция возвращает значение флага, которое было установлено в программе до его переопределения.
SetNuclDecayFlag(Flag)	Установка флага определяющего значения активностей передаваемых программе калькулятора. Если значение переменной **Flag** отлично от нуля, значение активностей будут соответствовать заданной дате **Dact**, в противном случае – усреднённой за время измерения.

	Функция возвращает значение флага, которое было установлено в программе до его переопределения.
SetEffSumActMode(Flag)	Установка флага определяющего расчёт суммарной активности. Если значение переменной **Flag** отлично от нуля, производится расчёт суммарной эффективной активности, в противном случае – обычной суммарной активности. Функция возвращает значение флага, которое было установлено в программе до его переопределения.
SetMassActUnit(Flag)	Установка флага определяющего вывод в отчёте активности нуклидов в единицах активности или содержания нуклидов в граммах. Если значение переменной **Flag** отлично от нуля, вывод значений производится в граммах, в противном случае – в единицах измерения активности (Бк или Ки). Функция возвращает значение флага, которое было установлено в программе до его переопределения.
RecalcAct(Date)	Пересчёт значений активностей и погрешностей на заданную дату **Date.** Формат даты принятый в калькуляторе: TDateTime – число дней с 12/30/1899. Дробная часть – время дня. Функция возвращает отличное от нуля значения, если пересчёт выполнен успешно. Если значение **Date** равно нулю пересчёт проводится на дату отбора или дату измерения в зависимости от настройки отчёта.

Процедуры

Процедуры отличаются от функций тем что не производят вычислений, а выполняют определённые действия связанные с результатами вычислений и, кроме того, выполняются только при запуске калькулятора из программы обработки спектра (вся программа калькулятора за исключением процедур выполняется каждый раз при открытии отчёта, а не только при обработке спектра).

Процедура	**Описание**
Print(“format”, X1, …Xn)	Печать значений **X1,…Xn** в соответствие со строкой формата **“format”**. Список переменных может отсутствовать. Произвольный текст, занесенный в строку **“format”**, будет включен в отчет. При этом специальные комбинации из двух символов **%c** , **%s** или **%d** указывают место в тексте, где будет напечатана очередная переменная из списка переменных для печати **X1, …Xn**. Комбинация **%c** заменяется текстовым значением выражения (наименование нуклида), Комбинация **%s** заменяется численным значением выражения. Комбинация **%d** интерпретирует значение как дату. Символы **%u** при формировании отчёта замещаются сокращенным обозначением единицы измерения активности пробы («Бк», «Ки», «Бк/кг», «Ки/г», «Бк/куб.м», «Бк/л», «Ки/кв.км» и т.д.)
SetMass(Val, Unit)	Установка массы счётного образца в значение **Val**. **Unit** – размерность: 1 – кг, 2 – г, 3 – мг.
SetSize(Val)	Установка параметра Size (Parameter1) в значение **Val**.
SetSParam(Val)	Установка параметра SParam (Parameter2) в значение **Val**.
SetAutoSaveFlag()	Установка флага автоматического сохранения результатов

обработки спектра в архиве. Процедура предоставляет пользователю решить вопрос сохранять результаты измерений в архиве или нет после анализа измеренного спектра без участия оператора. Для этого флаг сохранения результатов измерений в архиве при запуске измерений должен быть снят и снят флаг автоматического сохранения результатов обработки в шаблоне декомпозиции. В шаблон обработки, выполняемый по окончании измерений, должна быть включена программа калькулятора, где и будет решаться вопрос о необходимости сохранения результатов измерений и обработки спектра – выполнение процедуры приведёт к сохранению спектра и результатов обработки в архиве без вывода результатов на дисплей компьютера.

ClearAutoSaveFlag() Обнуление флага автоматического сохранения результатов обработки спектра в архиве. Процедура служит для той же цели, что и предыдущая. Она снимает флаг автоматического сохранения результатов в шаблоне декомпозиции, если он установлен и позволяет оператору решить вопрос о сохранении данных.

StopMeas() Вызов процедуры завершения измерений, если измерения включены, для тракта на котором был измерен обрабатываемый спектр.

PlaySound(«SoundFile») Запуск воспроизведения звукового файла **SoundFile** типа **Wave (**файлы с расширением **.wav)**. Название файла «**SoundFile»** может не содержать полного пути к файлу. В этом случае программа ищет его в папке соответствующего обрабатываемому спектру спектрометра, и если не находит, в головной папке пакета «SPECTRRAD». Файл будет воспроизводиться либо до вмешательства оператора, либо до закрытия отчёта об обработке спектра. Процедура **PlaySound** позволяет формировать требуемую звуковую схему сопровождения событий по результатам обработки спектров.

MessageBox («Message») Вывод сообщения **Message** на экран. **MessageBox** позволяет информировать оператора о каких либо требующих внимания оператора значениях активностей в измеренной пробе. При закрытии окна процедуры **MessageBox** прекращается воспроизведение звукового файла, если он был запущен ранее процедурой **PlaySound**.

Procedure(«Command») Вызов внешней программы. **Command** – командная строка включающая полный путь к вызываемой программе и необходимые аргументы. Внешняя программа может управлять оборудованием, например, включением сирены и т.п.

IgnoreCalc() Процедура устанавливает флажок аннулирующий результаты выполнения программы калькулятора: переменные калькулятора не будут сохранены в архиве измерений и не выведены в отчёт о результатах обработки спектра.

Ввод, вывод

Выражение вида **X=input(«PROMPT»)** позволяет оператору вводить необходимые значения переменных в процессе вычислений по программе калькулятора. Здесь: **X** - имя

произвольной переменной, а **PROMPT** подсказка, которая будет выведена в виде заголовка окна формируемого оператором **input.**

Оператор **inputdate(«PROMPT»)** служит для ввода дат. При вводе значение даты преобразуется в количество дней прошедших от 12.30.1899 12:00:00. Поэтому, например, выражение **Duration=(Dsamle-inputdate(«Дата начала экспозиции»))*24** будет количеством часов от начала экспозиции до отбора пробы.

Оператор **Report(«FILE»)** позволяет задать шаблон отчета в который будет включен отчет о результатах измерений и результатах вычислений по программе калькулятора. Переменная **FILE** название файла шаблона отчета. Если в названии файла не указан путь к файлу или расширение, то путь к файлу и расширение берётся из файла заданного в шаблоне декомпозиции. Например, если в шаблоне декомпозиции был задан шаблон отчёта **«C:\SpectrRad\Doc\Грунт.doc»**, то оператор **Report(«Стройматериалы»)** заменит шаблона отчета на **«C:\SpectrRad\Doc\Стройматериалы.doc»**. Если расширение нигде явно не указано, по умолчанию для расширения имени файла используется **«.RTF»**.

Для печати значений переменных и текста, которые необходимо включить в отчет, можно использовать оператор **Print** (см. «**Процедуры**»). Оператор **Print** можно использовать и в операторе цикла. Оператор **Print** доступен для 8-ой версии пакета и выше.

Для совместимости со старыми версиями пакета оставлен и старый режим печати. Переменные, которые необходимо включить в отчёт по окончании работы калькулятора должны быть перечислены в графе «***Список переменных для печати в отчете***». Включить можно до 16-ти переменных. При перечислении переменные должны отделяться друг от друга запятыми или пробелами. Формат вывода задается в графе «***Формат вывода результатов в отчете***». Произвольный текст, занесенный в данную графу, будет включен в отчет. При этом специальные комбинации из двух символов **%c**, **%s** или **%d** указывают место в тексте, где будет напечатана очередная переменная из списка переменных для печати. Комбинация **%c** заменяется текстовым значением выражения (наименование нуклида). Комбинация **%s** заменяется численным значением выражения. Комбинация **%d** интерпретирует значение как дату. Для того чтобы включить в текст символ **%**, необходимо напечатать его дважды **%%**. Символы **%u** при формировании отчёта замещаются сокращенным обозначением единицы измерения активности пробы («Бк», «Ки», «Бк/кг», «Ки/г», «Бк/куб.м», «Бк/л», «Ки/кв.км» и т.д.).

Сообщения об ошибках

Неопределенное имя переменной	Имя переменной не указано в секции инициализации и не является именем предопределенной переменной.
Имя уже определено	Повторное объявление переменной или объявление предопределенной переменной.
Операция присваивания предопределенной переменной	Попытка изменить значение предопределенной переменной в программе калькулятора.
Неверный синтаксис Ошибка в выражении	Калькулятор не может интерпретировать выражение.
Должна быть левая скобка Должна быть правая скобка	По контексту выражения ожидается скобка.
Деление на 0	В процессе вычислений возникла ошибочная ситуация деления

	на 0.
Значение выражения вне допустимого диапазона	Аргумент функции вне области определения функции (логарифм отрицательного или нулевого числа, квадратный корень отрицательного числа).
Неверное число	Допустимый диапазон чисел: -1.e38, +1.e38.
Должна быть '{' `	Ожидается скобка, начинающая секцию вычислений.
Лишняя '{'`	Число открывающих скобок '{' должно быть равно числу закрывающих '}'.
Слишком много переменных	В программе объявляется слишком много переменных, в текущей версии предел - 512.
Неверное окончание, Должна быть `}`	Ожидается '{'.
Слишком длинное имя переменной	Допустимая длина имени – 32 символа.
Должно быть имя переменной	По контексту программы ожидается имя переменной.
Должна быть `;`(точка с запятой)	Выражение должно заканчиваться точкой с запятой.
Должно быть `=`(присваивание)	В начале выражения после имени переменной, как правило, следует '='.
Должна быть константа	Попытка инициализировать переменную выражением, содержащим ссылки на переменные.
Должна быть `,`(запятая)	Аргументы функции должны разделяться запятой.
Слишком длинная программа	Объем текста программы превышает допустимый.

Пример программы

Программа вычислений

```
// Секция инициализации
    p;a;e;a1;e1;i;
// Секция вычислений
    a = 0;
    e = 0;
    i = 1;
    while (i <= nNucl)
    {
      if (IsVisible(i))
      {
         p = Norm(i,1);
         if (p > 0)
         {
            a1 = iAct(i)/p;
            if (a1 < 0)
              a1 = 0;
            a = a + a1;
            e1 = iErr(i)/p;
            e = e+e1*e1;
         }
      }
      i = i+1;
    }
    e=sqrt(e)/SampleValue;
    a = a/SampleValue;
    e1 = VRound*e;
    ErCalc1 = fround(e, e1);
    Calc1 = fround(a, e1);
    Calc2=Calc1+ErCalc1;
    Calc3=Calc1-ErCalc1;
```

Формат вывода результатов в отчете

```
---------------------------------------------------
Параметр соотв.:    %s(Акт.) + %s(Погр.) = %s
---------------------------------------------------
```

Список переменных для печати в отчете

```
Calc1, ErCalc1, Calc2
```

Нормативы и константы

Оформление результатов измерений проб в виде законченного документа требует доступа к нормам радиационной безопасности, санитарно-гигиеническим нормативам, внутриотраслевым нормам и т.д. и т.п. Все эти нормы связаны с **типом исследуемой пробы.**

Корректный учёт поглощения в веществе счётного образца требует знания и задания элементного состава пробы и связанных с ним сечений реакций взаимодействия излучения с веществом. Поскольку различные типы проб, связанные с радиационными нормами, имеют и различный химический состав, в программном пакете «SPECTRRAD» эти данные задаются в одной процедуре и хранятся в одной структуре.

Пункт меню «***Сервис / Нормативы и константы***», задание не существующего в папке «**Все типы проб**» типа пробы при запуске измерений вызывает программу формирования и редактирования структуры (дерева) нормативов (норм СанПиН, НРБ и т.п.), химического состава и плотности вещества счётного образца.

Структура

В пакете «SPECTRRAD» данные о радиационных нормах и константах материала вещества пробы, среды и защиты хранятся в файлах **Norms.nrm** и **Norms.txt** (в **Norms.txt** - комментарий к типу пробы и таблице нормативов **Norms.nrm**, который включается в графу «**Тип пробы**» отчета о результатах обработки спектра пробы). Путь к файлу норматива определяется типом пробы следующим образом - тип пробы это часть полного пути к файлу норматива, начиная (но не включая) папку «**Все типы проб**». Соответственно тип пробы должен иметь форму пути к файлу и на текст типа пробы накладываются все ограничения пути к файлу.

Папка «**Все типы проб**» должна находиться в головной папке пакета и, если не существует, создается при первом запуске программы.

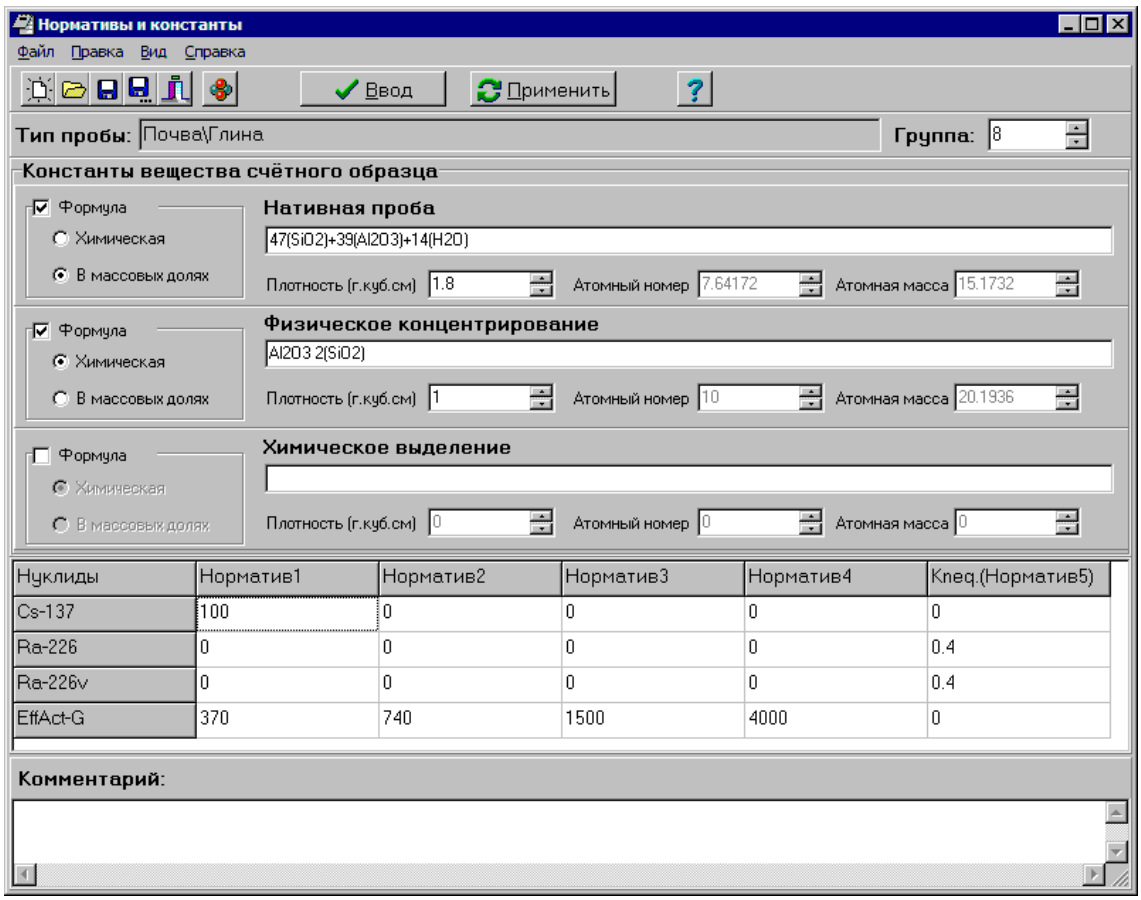
Например:

C:\SpectrRad\Все типы проб\6.Продукты\1.Мясопродукты\1.Мясо\1.Кости\Norms.nrm - файл норматива для проб типа **6.Продукты\1.Мясопродукты\1.Мясо\1.Кости** (головная папка пакета - **C:\SpectrRad**).

Доступ к данным нормативов обеспечивается через предопределенные переменные **Norm1(N) -- Norm5(N)** (**N** - название нуклида) в программе калькулятора (см. «Калькулятор»).

Главное окно

Окно программы формирования нормативов и констант, в зависимости от типа пробы рабочего спектра, может выглядеть следующим, например, образом:



В верхней части формы - меню и кнопки панели инструментов. Ниже панель «**Тип пробы**», панель «**Константы вещества счётного образца**», панель нормативов и комментария к нормативам. Размеры формы может изменяться оператором (при нажатой левой кнопке мышки можно перетаскивать границы формы, меняя её размер). Настраивается и высота панели нормативов перемещением границы между панелями нормативов и комментариев. Кроме того, можно визуализировать либо только панель констант, либо только панель нормативов, либо обе панели с помощью меню «***Вид / Панель констант***» и «***Вид / Панель нормативов***».

Ряд однородных типов проб объединяется в **группу,** например, группа 1 «**Продовольственное сырье и пищевые продукты**». Номер группы доступен пользователю в программируемом калькуляторе и позволяет, например, менять форму отчёта в зависимости от его значения.

Комментарий к нормативам может включаться в отчёт результатов обработки спектров, при соответствующей настройке параметров декомпозиции.

Оператор имеет возможность ввести или изменить значения номера группы, пяти значений нормативов для выбранного типа пробы, задать формулы элементного состава вещества пробы для трёх видов счётных образцов, ввести произвольный комментарий и сохранить введенные данные, нажав на клавишу «**Ввод**» или воспользовавшись пунктом меню «***Файл / Сохранить***».

Меню

Меню и панель кнопок предоставляют оператору возможность создать файлы нормативов и констант для нового типа проб или открыть и отредактировать существующие.

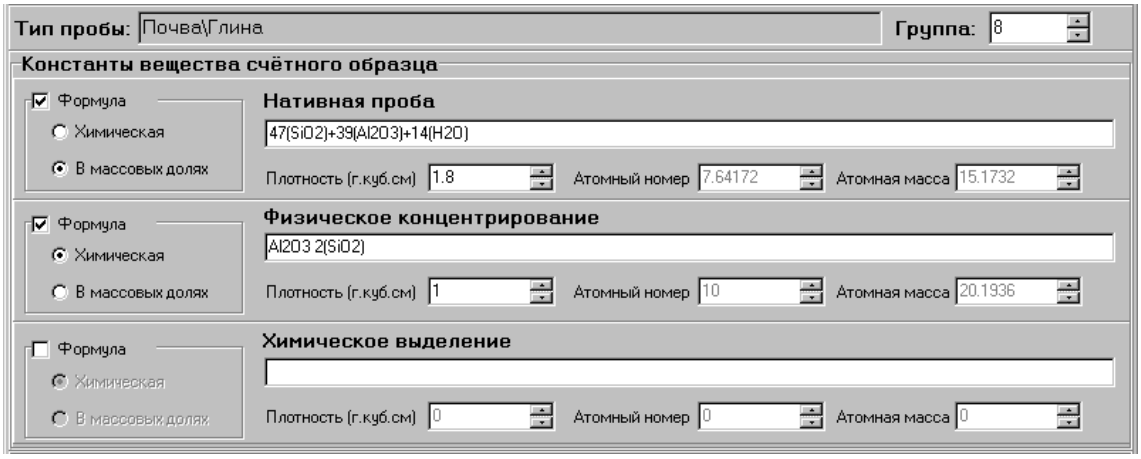
Пункт меню	*Действие*
Файл:	
Создать	Создать новый норматив.
Открыть	Открыть один из существующих нормативов.
Сохранить	Сохранить норматив.
Сохранить как	Сохранить норматив для нового типа пробы.
Удалить	Удалить норматив.
Выход	Закрыть окно «Нормативы».
Правка:	
Сечение реакций	
Рассчитать…	Рассчитать по заданным формулам таблицы сечений реакций взаимодействия излучения с веществом..
Редактировать…	Редактировать таблицы сечений реакций взаимодействия излучения с веществом.
Добавить /Удалить нуклиды	Изменить список нуклидов для таблицы нормативов.
Редактировать группу	Изменить значение номера группы для всей выбранной группы нормативов.
Импортировать	
Нормативы…	Импорт данных о нормативах из выбранного типа пробы.
Константы…	Импорт данных о химическом составе вещества выбранного типа пробы.
Вид:	
Панель констант	Визуализация панели констант.
Панель нормативов	Визуализация панели нормативов.

Справка **F1** Описание программы

Ввод формул химического состава пробы

Корректный учёт поглощения альфа, бета и гамма излучения в веществе пробы, среды или защиты требует знания химического состава вещества и его плотности.

Панель «**Константы вещества счётного образца**»,



позволяет оператору ввести эти данные, введя формулу химического состава вещества пробы, для трёх видов счётных образцов: «**Нативная проба**», «**Физическое концентрирование**» и «**Химическое выделение**». Для материала среды и защиты используется только первая формула – нативной пробы.

Формула химического состава вещества может вводиться в двух вариантах:

Химическая - в виде количества атомов и молекул.

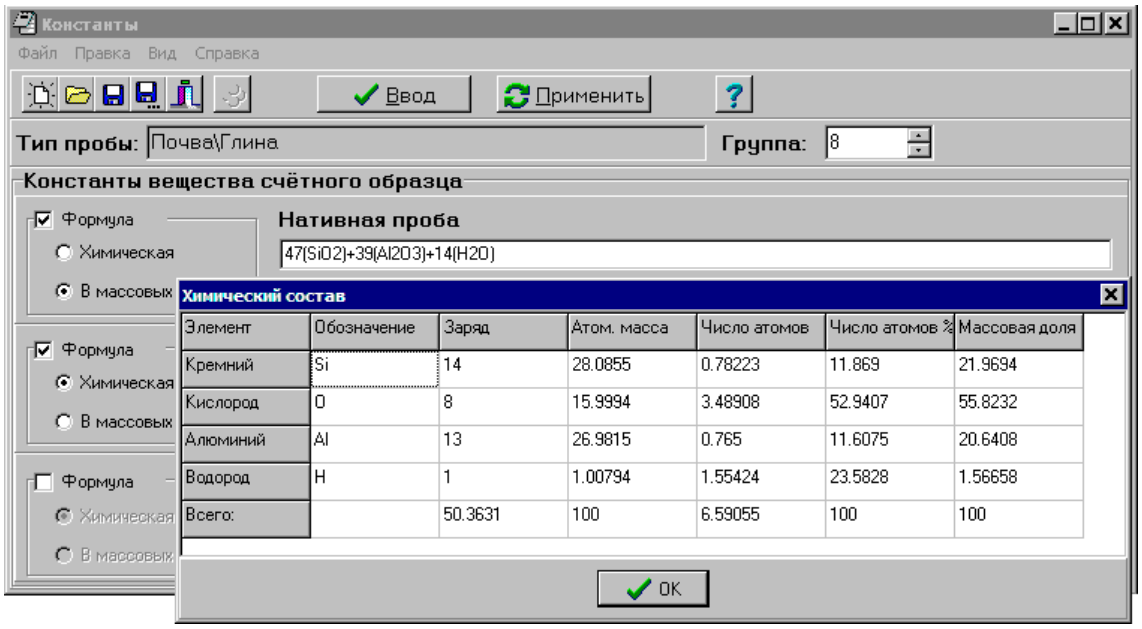
В массовых долях – состав молекулы (молекулой может быть и один химический элемент) в виде химической формулы, а количество молекул в массовых долях. Молекулы должны быть заключены в круглые скобки, и массовая доля молекул указывается в виде числа перед формулой молекулы. Например: **2(H) 1(O)** ,будет интерпретироваться как две массовые доли водорода и одна кислорода, что, конечно, водой не является, а **1(H2O)** - как одна массовая доля воды.

Формула химического состава молекулы вводится в соответствии с принятыми правилами записи химических формул за исключением того, что процедура не позволяет вводить цифры в форме нижнего индекса. Формула воды **H_2O** будет выглядеть как **H2O**. Такое ограничение несколько снижает однозначность записей, поэтому рекомендуется не стесняться в использовании скобок при записи формул.

Допустимыми символами при записи формул являются принятые обозначения химических элементов, цифры, круглые скобки, пробелы и знак плюс (+). Например: **2(K3(Fe(CN)6))+5(H2O)** или **2(K3(Fe(CN)6)) 5(H2O)**. В зависимости от выбора вида формулы (химическая или в массовых долях), запись будет интерпретироваться либо как две молекулы ферроцианида калия **K3(Fe(CN)6)** и пять молекул воды (**H2O**) – **химическая** формула, либо как две седьмых по массе молекул ферроцианида калия **K3(Fe(CN)6)** и пять седьмых по массе молекул воды (**H2O**). Количество молекул в химической формуле может быть только целым числом, массовая доля может быть и дробным числом.

При вводе формулы программа рассчитывает число химических элементов и эффективный атомный номер и эффективную атомную массу вещества в соответствии с заданной формулой.

Двойной щелчок мышкой по формуле вещества выводит таблицу химического состава пробы:



Элемент	Обозначение	Заряд	Атом. масса	Число атомов	Число атомов %	Массовая доля
Кремний	Si	14	28.0855	0.78223	11.869	21.9694
Кислород	O	8	15.9994	3.48908	52.9407	55.8232
Алюминий	Al	13	26.9815	0.765	11.6075	20.6408
Водород	H	1	1.00794	1.55424	23.5828	1.56658
Всего:		50.3631	100	6.59055	100	100

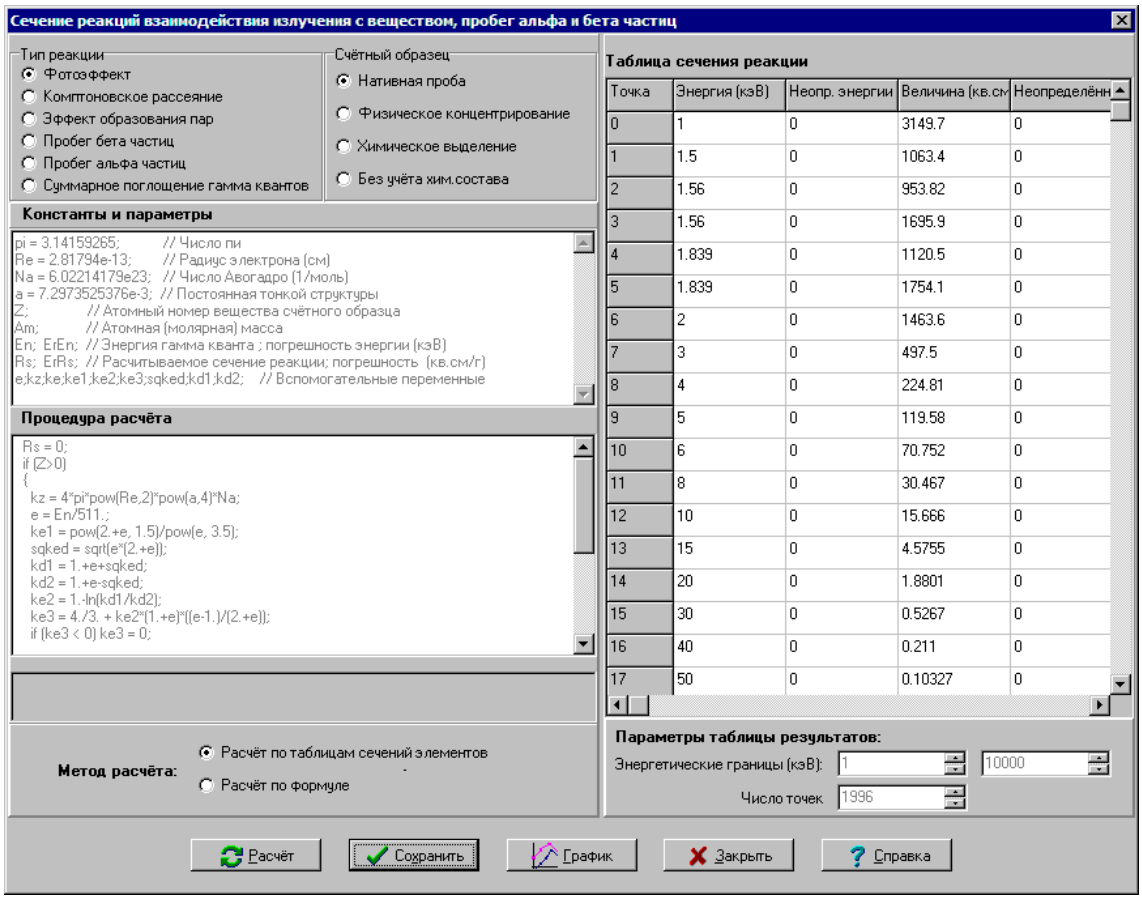
В строках с названием элемента в колонке «**Заряд**» приводится заряд атомов элемента, в колонке «**Атом. масса**» - атомная масса атомов элемента. «**Число атомов**», в зависимости от типа формулы, содержит либо число атомов элемента в молекуле вещества (**химическая формула**), либо число атомов в условной весовой единице (**формула в массовых долях**). Колонки «**Число атомов %**» и «**Массовая доля**» содержат процентные значения соответствующих величин.

В строке «**Всего:**» приводятся суммарные значения:

- в колонке «**Заряд**» $\sum Z_i \cdot n_i$, где Z_i – заряд атома элемента, n_i – число атомов элемента;
- в колонке «**Атом. масса**» $\sum Am_i \cdot n_i$, где Am_i – атомная масса элемента;
- в колонке «**Число атомов**» $\sum n_i$, «**Число атомов %**» - всегда равно 100 %.
- Суммарная «**Массовая доля**» также всегда равна 100%.

Расчёт сечения реакций

Пункты меню «***Сечение реакций / Рассчитать…***» и «***Сечение реакций / Редактировать…***» позволяют оператору создать или изменить формулы для расчёта сечений реакций взаимодействия гамма излучения с веществом (массовых коэффициентов ослабления гамма излучения в веществе в кв.см/г), пробег бета и альфа частиц в веществе (г/кв.см) или таблицы таких сечений и величин пробега для выбранного типа пробы. Вызов процедуры по пункту меню «***Сечение реакций / Редактировать…***» не позволяет менять программу расчёта сечений и рассчитывать сечение реакций, вызов процедуры по пункту меню «***Сечение реакций / Рассчитать…***» разрешает все операции. При этом на экран выводится форма процедуры расчёта и редактирования сечения реакций взаимодействия гамма излучения с веществом, пробега альфа и бета частиц:



Оператор имеет возможность рассчитать таблицы сечений для трёх типов реакций взаимодействия излучения с веществом и пробег альфа и бета частиц:

- **Фотоэффект** – поглощение гамма кванта в результате фотоэффекта в веществе счётного образца;
- **Комптоновское рассеяние** – рассеяние гамма квантов на электронах атомов;
- **Эффект образования пар** – образование гамма квантами пар электрон+позитрон в веществе счётного образца;
- **Пробег бета частиц** – экстраполированный пробег бета частиц в веществе счётного образца;
- **Пробег альфа частиц** – средний пробег альфа частиц в веществе счётного образца.
- **Суммарное поглощение гамма квантов** – сумма сечений фотоэффекта, комптоновского рассеяния и эффекта образования пар.

Поскольку различные способы приготовления счётных образцов меняют его химический состав, таблицы сечений рассчитываются или создаются другим способом для трёх видов приготовления счётного образа: **нативная проба**, **физическое концентрирование** и **химическое выделение**. Поскольку комптоновское рассеяние и пробег бета частиц слабо зависят от химического состава счётного образца для них можно создать таблицы сечений **без учёта химического состава**.

Процедура обеспечивает два основных метода расчёта: **расчёт по таблицам сечений элементов** и **расчёт по формуле**.

Расчёт по таблицам сечений для элементов производится по таблицам опубликованным на сайте https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html.

Если по каким-либо причинам оператор не доверяет данным этого сайта, он может либо вручную ввести любые таблицы сечений, либо рассчитать их по заданной формуле.

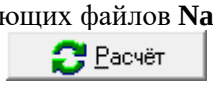
Расчёт по формуле происходит по **процедуре расчёта** заданной оператором. При первом вызове формы процедуры расчёта будут содержать формулы используемые программой «SPECTRRAD» по умолчанию. Оператор может создать собственную процедуру расчёта и сохранить её нажав на клавишу

. При этом в папке «**Все типы проб**» сохраняются три файла соответствующие выбранной реакции взаимодействия излучения с веществом: **Name.h**, **Name.c** и **Name.obj**. Наименование **Name** определяется типом реакции:

Тип реакции	Название файлов
Фотоэффект	RsPhoto
Комптоновское рассеяние	RsCompton
Эффект образования пар	RsPair
Пробег бета частиц	RsBeta
Пробег альфа частиц	RsAlpha

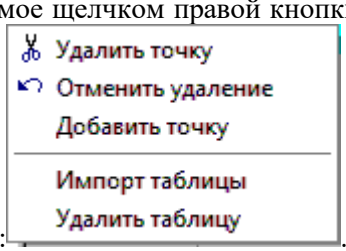
Файл **Name.h** содержит список используемых при расчёте переменных загружаемых в поле «**Константы и параметры**», файл **Name.c** – текст процедуры расчёта на языке встроенного программируемого калькулятора программы «SPECTRRAD» и **Name.obj** – скомпилированный модуль процедуры расчёта сечения, который будет использоваться программой при расчёте поглощения излучения в веществе счётного образца.

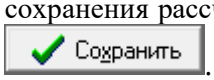
При последующих вызовах формы расчёта сечений реакций в поля формы «**Константы и параметры**» и «**Процедура расчёта**» будет загружаться текст из соответствующих файлов **Name.h** и **Name.c**.

Кнопка 

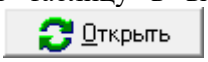
запускает процедуру расчёта по сформированным формулам таблицы сечений выбранных реакций для заданного типа процедуры приготовления **счётных образцов: нативная проба, физическое концентрирование** и **химическое выделение** или **без учёта химического состава**. Расчёт производится для выбранного типа пробы с заданным химическим составом счётного образца в **заданных энергетических границах** с заданным **числом точек** таблицы.

Такая таблица хранится в папке соответствующего типа пробы. Таблицу можно отредактировать, импортировать из таблиц сечений скачанных с сайта https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html или просто ввести вручную, если нам известны данные таких сечений для выбранного материала (типа пробы). Для редактирования, импорта, создания или удаления таблицы служит небольшое меню,

вызываемое щелчком правой кнопки мышки по крайней левой ячейке выбранной строки таблицы: 

. Переход в режим редактирования данных в ячейке таблицы осуществляется щелчком левой кнопки мышки по выбранной ячейке. Для сохранения рассчитанной или отредактированной таблицы требуется нажать на клавишу 

. Кнопка

позволяет просматривать таблицу в виде графика. Открыть сохранённую таблицу можно нажав на кнопку 

(в режиме вызова процедуры редактирования таблицы «***Сечение реакций / Редактировать…***»).

Таблица сечения реакций для заданного материала пробы может наиболее корректно отображать реальные значения таких сечений (формула, даже весьма сложная, вряд ли будет отображать резонансные участки присутствующих в реальных функциях зависимости сечений от энергии излучения). Поэтому в пакете «SPECTRRAD» процедура расчёта ослабления излучения в веществе счётного образца, прежде всего, ищет в папке заданного типа пробы (материала пробы) таблицу сечения для требуемой реакции. Если не находит, использует формулу расчёта созданную оператором (файл **Name.obj** в папке «**Все типы проб**»). И в случае, если формула оператором не задана, использует встроенные формулы для расчёта сечений и величин пробега. Для комптоновского рассеяния и пробега бета частиц, если программа не нашла таблицу сечений в папке заданного типа пробы, она пытается найти таблицу сечений общую для всех материалов (без учёта химического состава) в папке «**Все типы проб**». И только в том случае если отсутствует и общая таблица сечений (пробега) производит расчёт по формулам.

Нормативы

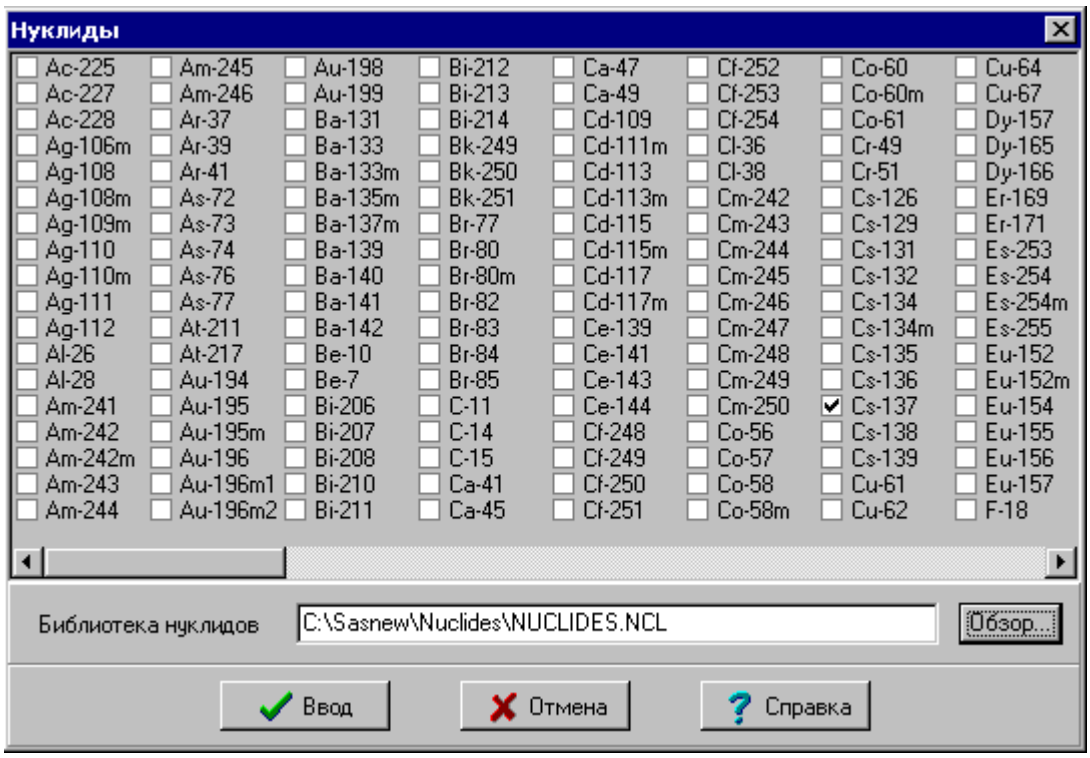
Четыре константы (**Норматив 1 - Норматив 4**) для выбранного набора нуклидов задают граничные значения для определения класса материала пробы по уровню радиационной безопасности. Значения всех четырех уровней доступны только через программируемый калькулятор. Значение первого уровня (**Норматив 1)** используется процедурами формирования отчёта как допустимый уровень для всех типов проб (нормативы СанПин, нормативы Технического регламента таможенного соглашения и т.п.).

Норматив 5 – используется процедурой формирования отчёта как коэффициент неравновесности **Kneq**. В том случае, если активность нуклида A_{N1} в равновесной цепочке определяется через активность другого нуклида A_{N2}, коэффициент неравновесности N2 относительно N1 определяется как $K_{neq} = \frac{A_{N1} - A_{N2}}{A_{N1}}$. В этом случае активность нуклида N1 рассчитывается по формуле $A_{N1} = A_{N2} / (1 - K_{ntq})$ (1). Коэффициент неравновесности определяется процессами, не учитываемыми процедурами расчёта отклика спектрометра на излучение равновесной цепочки нуклидов: эманация газообразных продуктов распада из пробы, различная растворяемость нуклидов в растворителях и т.п. Известный пример – определение активности Ra-226 экспресс методом (без 20 дневной выдержки в герметичном сосуде) по излучению дочерних Rn-222. В этом случае коэффициент неравновесности будет в основном определяться коэффициентом эманации Rn-222 из счётного образца. Расчёт по формуле (1)

производится только в том случае, если в параметрах формирования отчёта установлен флажок «**Учитывать коэффициент неравновесности**».

Изменение списка нуклидов

Пункт меню «***Добавить/Удалить нуклиды***», кнопка позволяют оператору изменить список нуклидов для выбранного типа пробы. При этом на экран выводится окно с таблицей рабочей библиотеки нуклидов:

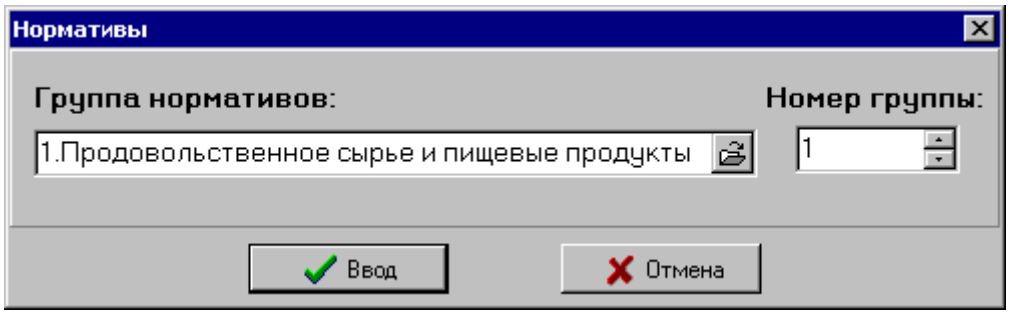


Для задания норм суммарной и эффективной активности, список нуклидов рабочей библиотеки дополняется четырьмя условными «нуклидами»: **SumAct-A**, **SumAct-B, SumAct-G** и **EffAct-G**, соответствующим трём видам суммарной активности (альфа, бета и гамма) и эффективной (приведённой по ионизационному эффекту к излучению Ra-226) гамма активности.

Оператор должен пометить необходимые нуклиды «галочками» для включения их в список.

Редактирование группы нормативов

Пункт меню «***Редактировать группу***», позволяет оператору изменить номер группы для выбранной группы типов пробы. При этом на экран выводится окно следующего вида:



Оператор имеет возможность выбрать группу нормативов и задать её номер. При нажатии на клавишу «Ввод» номер группы для всех нормативов входящих в выбранную группу будет изменён на заданный.

Значение группы нормативов используется в программируемом калькуляторе. В шаблонах обработки, поставляемых в установочном пакете, номер группы используется для выбора шаблона отчёта. При этом используются следующие значения номеров групп:

0 - группа не определена, отчёт в виде документа MSWord не формируется.
1 - продовольственное сырьё и пищевые продукты.
2 - не используется.
3 - продукты детского питания.
4 - продукция лесного хозяйства.
5 - изделия из керамики.
6 - стройматериалы.
7 - материалы с повышенным содержанием ЕРН.
8 - грунт, почва.
9 - вода.
10 - снег.

Таблицы нуклидов

Назначение

В спектрометрических комплексах, предназначенных для измерения радионуклидного состава проб, таблицы нуклидов необходимы и при калибровке спектрометров и при обработке спектров рабочих проб. Учёт распада нуклидов за время от отбора пробы или аттестации меры активности до момента измерения, распад нуклидов во время измерения, распад контрольных источников во время эксплуатации, генерация спектров по таблицам линий всё это требует данных о нуклидах, которые хранятся в таблицах нуклидов.

Таких таблиц требуется несколько, поскольку различные виды проб, способы отбора, способы пробоподготовки по разному формируют равновесные радиоактивные цепочки нуклидов в пробах. Например: определять активность Th-232 в пробах грунта на гамма спектрометре разумно по всем дочерним нуклидам цепочки распада, поскольку в грунтах Th-232 находится, как правило, в состоянии радиоактивного равновесия, в воде, с большой долей вероятности, равновесие нарушено, а где-нибудь в лаборатории по производству радиоизотопов этот торий может быть совсем без дочерних.

В программном пакете «**SPECTRRAD**» пункт меню «***Сервис / Библиотека нуклидов***» вызывает программу «***Таблица нуклидов***»[23] (исполняемый файл «**Nuclides.exe**») - программу просмотра, создания и редактирования таблиц нуклидов.

Для создания таблиц нуклидов можно использовать данные доступные в интернете - ***http://www.nndc.bnl.gov/***.

Структура таблиц

В пакете «**SPECTRRAD**» информация о нуклидах (атомный вес, период полураспада, гамма эквивалент радия, распространенность, энергии и квантовый выход линий) хранится в пяти файлах, связанных между собой общим именем. В файле с расширением «**ncl**» записаны сведения об атомных весах, периодах полураспада, распространенности, гамма эквиваленте радия и схеме распада нуклидов. В файле с расширением «**gml**» сведения о рентгеновских и гамма линиях нуклида, в файле с расширением «**btl**» сведения о бета линиях нуклида, в файле с расширением «**aln**» сведения об альфа линиях нуклида, а в текстовом файле с расширением «**txt**» - описание таблицы.

Каждая запись таблицы изотопов (файл с расширением «**ncl**») имеет следующую структуру:

Название поля	Длина (байт)	Описание
Нуклид	**8**	Сокращённое наименование нуклида.
Синоним	**40**	Наименование нуклида.
Вес	**4**	Атомный вес нуклида.
Период полураспада	**8**	Значение и сокращенное наименование размерности для периода полураспада нуклида.
Элемент	**2**	Наименование элемента для естественно радиоактивных нуклидов в состав которого входит нуклид.
Распространенность	**4**	Количество естественно радиоактивного нуклида в элементе в процентах.

[23] В пакете "СПЕКТР" программа создания и редактирования таблиц нуклидов называется "***Таблица нуклидов***", сами таблицы нуклидов состоят из данных о нуклидах - таблиц нуклидов, и данных об альфа, гамма и бета линиях этих нуклидов - таблиц линий. Чтобы избежать путаницы, название программы будем выделять ***курсивом***, а таблицу данных о нуклидах называть таблицей изотопов, набор таблиц нуклидов - библиотекой нуклидов.

Гамма-экв. Ra-226	**4**	Гамма-эквивалент Ra-226 - коэффициент гамма выхода нуклида относительно выхода Ra-226. Если коэффициент отличен от нуля, вклад нуклида будет учитываться процедурой расчёта суммарной эффективной активности пробы.
Атрибуты	**4**	Четыре символа определяющие некоторые характеристики нуклида. Значения атрибутов приводятся в следующей таблице.
1-ый дочерний	**12**	Имя 1-ого дочернего нуклида и коэффициент ветвления в процентах.
2-ой дочерний	**12**	Имя 2-ого дочернего нуклида и коэффициент ветвления.
3-ий дочерний	**12**	Имя 3-его дочернего нуклида и соответствующий коэффициент ветвления.

Атрибут	**Значение**	**Описание**
Атрибут 1	**Пробел**	Нуклид включён в список действующих.
	@	Нуклид исключён. Нуклид присутствует в списке изотопов, но не учитывается программами обработки спектров и процедурами формирования равновесных цепочек. Оператор имеет возможность включить нуклид, изменив его атрибут.
Атрибут 2	**0-9**	Ранг нуклида - цифра от нуля до девяти. Чем больше цифра, тем выше ранг нуклида. Программа обработки использует ранг нуклида при необходимости удаления нуклида из списка определяемых в случае вырожденности решаемой системы уравнений (нуклиды имеют совпадающие линии). Удаляется нуклид с меньшим рангом. Если нуклиды имеют равный ранг, программа предоставит выбор оператору.
Атрибут 3	**Пробел**	Одиночный нуклид.
	P	Нуклид формирует равновесную цепочку распада.
	C	Нуклид включен в равновесную цепочку (все линии нуклида включены в список линий, образующего цепочку нуклида).
	p	Нуклид формирует копию части равновесной цепочки распада включённую в другую равновесную цепочку. Поскольку отдельные нуклиды и части равновесных цепочек могут использоваться при формировании других равновесных цепочек, программа при необходимости формирует копии таких нуклидов или частей цепочек.
	n	Нуклид является копией нуклида включённого в равновесную цепочку.
	V	«Виртуальный» нуклид. Виртуальным нуклидом может быть как одиночный нуклид, так и сформированная цепочка нуклидов. Виртуальный нуклид не имеет родственных связей и не участвует в процедурах автоматического определения нуклидного состава спектра.
Атрибут 4		Число нуклидов включённых в равновесную цепочку.

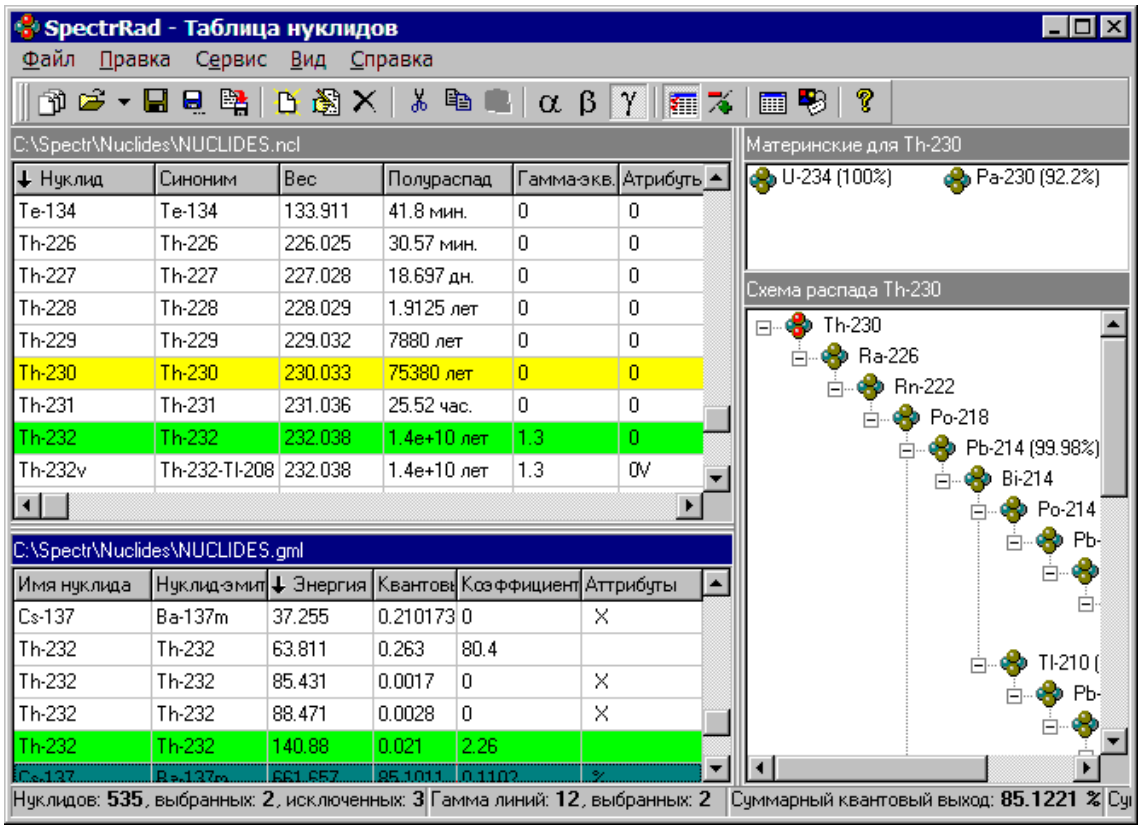
Записи таблицы линий (файлы с расширением «**aln**», «**btl**» и «**gml**») имеют следующую структуру:

№№	Вид излучения	Название поля	Длина (байт)	Описание
1	**Все виды**	**Имя нуклида**	**8**	Наименование одиночного нуклида или нуклида образующего равновесную цепочку.
2	**Все виды**	**Нуклид эмитент**	**8**	Имя нуклида излучателя для данной линии. В случае цепочки имя нуклида эмитента может отличаться от имени нуклида.
3	**Альфа**	**Энергия альфа линии**	**4**	Энергия альфа линии.
	Бета	**Граничная энергия линии**	**4**	Граничная энергия бета линии.
	Гамма	**Энергия главного перехода**	**4**	Энергия гамма линии.
4	**Все виды**	**Погрешность энергии**	**4**	Погрешность значения энергии в тех же единицах, что и энергия. Погрешность энергии для калибровочных линий используется процедурами калибровки как энергетический диапазон, в котором будет производиться поиск пика соответствующий данной линии.
5	**Все виды**	**Квантовый выход на распад**	**4**	Квантовый выход линии в процентах. Для гамма линий утечки указывается выход материнской линии. Для гамма линии сложения каскадных – выход первой линии в каскаде.
6	**Все виды**	**Погрешность выхода**	**4**	Неопределённость квантового выхода.
7	**Альфа**			Не используется
	Бета	**Средняя энергия линии**	**4**	Средняя энергия бета линии.
	Гамма	**Коэффициент внутренней конверсии**	**4**	Коэффициент внутренней конверсии равен отношению числа электронов внутренней конверсии к числу гамма квантов при переходе ядра из одного возбуждённого состояния в другое.
8	**Альфа**			Не используется
	Бета			Не используется
	Гамма	**Список каскадных переходов**	**4**	Указатель на список каскадных переходов.
9	**Все виды**	**Атрибуты**	**4**	Четыре символа определяющие некоторые характеристики линии. Значения атрибутов приводятся в следующей таблице.

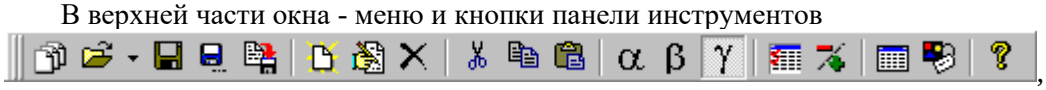
Атрибут	Значение	Описание
Атрибут 1	**Пробел**	Линия включена в список действующих. Для гамма линий
	0-9	число от **0** до **9** - номер из списка ядерных реакций образовавших гамма линию.
	@	Линия исключена. Линия присутствует в списке линий, но не учитывается программами обработки спектров и процедурами формирования равновесных цепочек. Оператор имеет возможность включить линию, изменив её атрибут.
Атрибут 2	**Пробел**	Обычная линия.
	%	«Значимая» линия. Оператор имеет возможность при создании шаблона обработки использовать для оценки активностей нуклидов только «значимые» линии. Только «значимые» линии используются при создании списка нуклидов формирующих неизвестный пик в сцинтилляционной гамма спектрометрии.
	!	«Калибровочная» линия. «Калибровочная» линия является также и «значимой». Калибровочные линии используются при автоматической энергетической калибровке спектрометров.
	?	Линия с неизвестным или недостоверным квантовым выходом. Не используется при оценке активностей
Атрибут 3-4	**Пробелы**	Обычная гамма или альфа линия.
	0-9	Гамма линия. Цифры от «**0**» до «**9** - уровень перехода используются вместо пробела для того, чтобы пометить как разные гамма линии с одинаковыми энергиями, но относящиеся к различным схемам распада. Такие совпадающие по энергии линии могут иметь различные каскадные переходы и поэтому их нельзя объединять.
	X	Рентгеновская линия.
	A	Аннигиляционная линия.
	E1	Линия утечки (одиночного вылета).
	E2	Линия двойного вылета.
	S2	Линия сложения для двух каскадных переходов.
	S3	Линия сложения для трёх каскадных переходов.
	B+	Бета позитрон.
	B-	Бета электрон.
	e	Электрон.

Программа «Таблица нуклидов». Главное окно

Окно программы зависит от настроек программы и может, например, иметь вид:



В верхней части окна - меню и кнопки панели инструментов



, обеспечивающие более удобный доступ к основным пунктам меню

В верхней левой части окна находится таблица изотопов открытой таблицы нуклидов (C:\Spectr\Nuclides\Nuclides.ncl), в нижней левой - таблица линий нуклидов, в правой части окна: вверху - список материнских для выбранного нуклида, внизу - схема распада выбранного нуклида. Внизу строка информации о количестве нуклидов и линий в таблице и количестве выбранных записей.

В таблице изотопов и линий одна из записей (строчек таблицы) является рабочей (или активной). Такая запись отмечается желтым цветом (в том случае, если текущая запись является одной из группы выбранных записей, её цвет меняется на синий). Список материнских и схема распада нуклидов в правой части окна относятся к нуклиду рабочей записи таблицы нуклидов. Клавиши перемещения курсора вверх и вниз клавиатуры компьютера соответственно перемещают рабочую запись. Нажатие на клавиши «**Home**» и «**End**» делают активной, соответственно первую или последнюю запись таблицы. Щелчок мышкой по записи делает её активной.

Оператор может выбрать группу записей (одна запись - частный случай группы), отмечая их мышкой при нажатой клавише «**Ctrl**» Можно пометить группу, щелкнув мышкой по последней записи в группе при нажатой клавише «**Shift**» - будет помечена группа от текущей записи до последней. Перемещение курсора вверх или вниз по таблице при нажатой клавише «**Shift**» или нажатие клавиши «**Insert**» изменяет выделение записей. Выбранные записи помечаются зеленым цветом и участвуют в групповых операциях редактирования записей, копирования или вырезки в буфер обмена.

В таблице линий выводятся альфа, бета или гамма линии либо всех, либо выбранных нуклидов таблицы изотопов, в зависимости от положения переключателя (пункт

меню «***Вид / Все линии***»). Тип излучения определяется переключателем α β γ (пункты меню: «***Вид / Альфа линии / Бета линии / Гамма линии***»). В случае если установлен режим вывода линий выбранных нуклидов, а выбранных нуклидов нет, выводятся линии нуклида рабочей записи, если есть выбранные нуклиды, линии нуклида рабочей записи не включаются в список линий.

Ширина колонок (полей) таблицы может регулироваться оператором. Для этого необходимо установить указатель мышки на границу между полями, при этом указатель мыши примет вид и, удерживая левую кнопку мыши нажатой, перетащить границу в необходимое положение.

Записи таблицы можно отсортировать по значениям любой колонки таблицы - достаточно щелкнуть мышкой по кнопке с названием колонки. Направление сортировки указывается стрелкой слева от названия колонки.

Правая кнопка мыши вызывает меню, содержание которого меняется в зависимости от положения указателя мышки и момента вызова. Часть пунктов меню дублирует функции главного меню.

Двойной щелчок по какой-либо записи таблицы нуклидов или линий вызывает процедуру редактирования либо выбранных нуклидов или линий, либо линии или нуклида данной записи, если нет выбранных записей.

Щелчок мышкой по пиктограмме нуклида в списке материнских нуклидов или схемы распада делает активной в таблице изотопов запись этого нуклида. При этом нарушается тот принцип, что список материнских и схема распада относятся к активной записи таблицы изотопов - в этом случае ни список материнских, ни схема распада не изменяются. Это сделано специально для того, чтобы оператор мог просматривать информацию о нуклидах схемы распада или списка материнских. Схема распада и список материнских будет сформирован для активной записи только в случае, если она будет выбрана оператором непосредственно в окне таблицы изотопов.

При формировании схемы распада используются два вида пиктограмм: значок используется для обозначения отдельного нуклида, а значок для обозначения равновесной цепочки нуклидов[24]. Нуклоны нестабильных ядер рисуются двумя разными цветами, нуклоны стабильных - одним цветом. Пиктограмма выбранного нуклида выделяется более яркими красками - . Справа от пиктограммы нуклида выводится его название (название образующего цепочку нуклида для цепочек) и в скобках коэффициент ветвления в процентах, в случае если он не равен 100%. Слева – значок указывающий раскрыта или свёрнута схема распада данного нуклида. Знак перед пиктограммой нуклида указывает на то, что схема не раскрыта. Для её раскрытия щелкните мышкой по значку . Двойной щелчок по пиктограмме нуклида либо раскрывает схему распада, если она свёрнута, либо свертывает, если схема раскрыта.

Строка информации в нижней части окна программы содержит сведения о количестве нуклидов и линий в таблице, количестве выбранных и исключённых записей: Нуклидов: **497**, выбранных: **2**, исключенных: **1**, Гамма линий: **7**, выбранных: **2**, исключенных: **1** и суммарном квантовом и энергетическом выходе выбранных линий Суммарный энергетический выход: **563.316**. Энергетический выход линии - произведение энергии линии на её интенсивность.

[24] Равновесная цепочка - цепочка нуклидов в состоянии радиоактивного равновесия (активность дочерних находится в динамическом равновесии с активностью материнского нуклида). В равновесной цепочке излучение дочерних нуклидов включается в список линий материнского в соответствии с квантовым выходом дочерних линий, коэффициентом ветвления в цепочке распада и соотношением периодов полураспада в предположении радиоактивного равновесия между материнским нуклидом и дочерними нуклидами.

Меню

Пункт меню	***Действие***
Файл:	
Создать	Создать новую таблицу нуклидов.
Открыть **Ctrl+O**	Открыть существующую таблицу нуклидов. Щелчок по правой части кнопки выводит список ранее открывавшихся таблиц нуклидов.
Сохранить **Ctrl+S**	Сохранить изменения в таблице нуклидов.
Сохранить как...	Сохранить таблицу под новым названием.
Выход	Закрыть программу.
Правка:	
Сохранить выделенные **Shift+Ctrl+S**	Сохранить выделенные нуклиды в новой таблице нуклидов.
Новый нуклид (Новая линия) **Ctrl+N**	Создать новую запись в таблице изотопов или линий.
Изменить **Ctrl+E**	Редактирование записей. Если нет выбранных записей, редактируется рабочая (активная). Если есть выбранные, редактируются выбранные. В том случае если выбрано несколько записей, для редактирования доступны только поля таблицы, которые могут быть одинаковыми для группы записей.
Переименовать нуклид **Ctrl+R**	Переименовать нуклид. Синоним нуклида не меняется.
Сохранить нуклид как виртуальный…	Создать на основе выбранного нуклида или сформированной цепочки нуклидов «виртуальный» нуклид. Виртуальный нуклид в отличие от обычного не имеет родственных связей и не участвует в процедурах автоматического анализа нуклидного состава спектров. Может использоваться как нуклид сравнения в процедуре расчёта суммарной эффективной активности.
Удалить **Shift+Del**	Удалить выбранные записи.
Вырезать **Ctrl+X**	Переместить выделенную часть записей в буфер обмена.
Копировать **Ctrl+C**	Копировать выделенную часть записей в буфер обмена.
Вставить	Вставить записи из буфера обмена. Нельзя вставить записи о нуклидах в таблицу линий и записи линий в таблицу

[25] Операции сохранения, операции с буфером обмена и операции удаления для таблицы изотопов включают и операции с альфа, бета и гамма линиями соответствующих нуклидов.

Ctrl+V	изотопов. Нельзя гамма линии вставить в таблицу альфа или бета линий. Линии определённого типа можно вставить только в таблицу линий того же типа. Поэтому перед вставкой необходимо переключиться на требуемую таблицу изотопов или линий.
Поиск:	
1-й дочерний	Найти 1-ый дочерний для выбранного нуклида. Перейти на дочерний можно и щелкнув по дочернему нуклиду в схеме распада, но для исключённых нуклидов поиск работает, а схема распада отсутствует
2-й дочерний	Найти 2-ый дочерний для выбранного нуклида.
3-й дочерний	Найти 3-ый дочерний для выбранного нуклида.
Линии сироты	Найти линии, относящиеся к нуклидам отсутствующим в таблице изотопов. Такие линии могут сформироваться при не корректных операциях вставки линий и являются балластом, поскольку в операциях обработки спектров участвовать не будут.
Выделение:	
Выделить все Ctrl+A	Выделить все записи.
Цепочку распада	Выделить цепочку распада выбранного нуклида.
Инвертировать выделение Ctrl+I	Инвертировать выделение записей.
Отменить выделение Del	Отменить выделение
Сервис:	
Активность нуклида	Рассчитать активность нуклидов выбранной ветви схемы распада на заданную дату.
Равновесная цепочка:	
Сформировать	Сформировать равновесную цепочку из схемы распада нуклида.
Расформировать	Расформировать равновесную цепочку нуклида в схему распада.
Расформировать все цепочки	Расформировать все сформированные в таблице равновесные цепочки нуклидов.
Смесь нуклидов	Сформировать условный нуклид являющийся смесью из выбранных оператором двух или трёх нуклидов в заданном соотношении.
Линии утечки:	
Включить в таблицу…	Включить в таблицу гамма линий линии одиночного и двойного вылета для всех гамма линий с энергией

превышающий заданный порог

Исключить из таблицы — Удалить из таблицы линии одиночного и двойного вылета.

Линии сложения каскадных:

Включить в таблицу — Включить в таблицу гамма линий линии соответствующие пикам суммирования двух и трёх каскадных переходов.

Исключить из таблицы — Удалить из таблицы линии сложения каскадных переходов.

Аттестат эталона… — Создание или редактирование «аттестата эталона» – процедура позволяющая дополнить таблицу нуклидов данными об активностях и погрешностях активностей нуклидов таблицы. «Аттестат эталона» делает более удобной процедуры калибровки спектрометра.

Текстовая таблица… — Сформировать текстовую таблицу для выбранных нуклидов или линий для печати или передачи в WORD или EXCEL.

Настройки… — Настройка вида таблиц нуклидов и линий.

Лицензия… — Просмотр текущей лицензии.

Вид:

Альфа линии — Переключиться на таблицу альфа линий. Форма программы позволяет показывать только одну из трёх таблиц линий таблицы нуклидов. Нажатое состояние клавиши означает, что в таблице линий выводятся альфа линии нуклидов.

Бета линии — Переключиться на таблицу бета линий

Гамма линии — Переключиться на таблицу гамма линий

Все линии **Ctrl+M** — В таблице линий выводятся либо линии выбранных нуклидов таблицы изотопов, либо линии всех нуклидов. Нажатое состояние клавиши соответствует выводу всех линий.

Схема распада — Показывать схему распада нуклидов.

Показывать исключённые — Включение или выключение режима вывода записей помеченных как «исключённые». При включенном режиме «исключённые» записи выводятся со значком ⊗ или ⊗в колонке «Атрибуты».
Значок ⊗ означает, что нуклид исключён оператором.
Значок ⊗ означает, что нуклид включён в цепочку распада

Справка:

Содержание **F1** Описание программы.

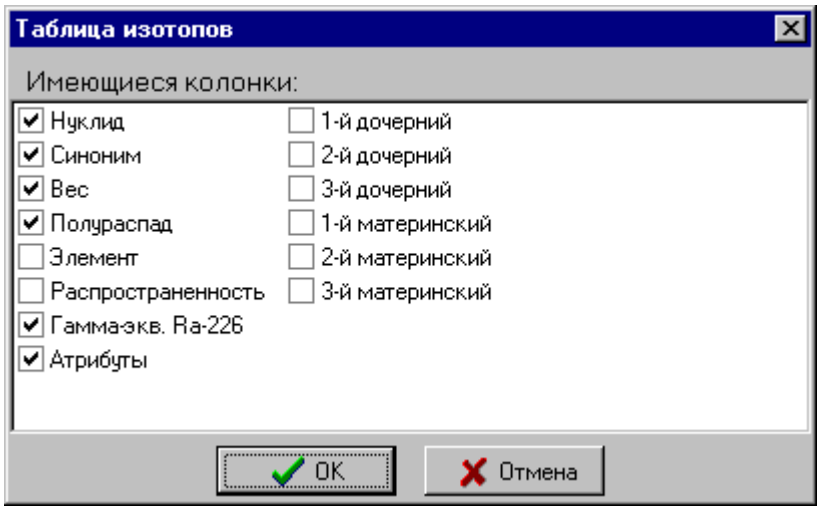
О таблице нуклидов... Описание таблицы нуклидов.

О программе... Краткая информация о программе.

Настройка программы

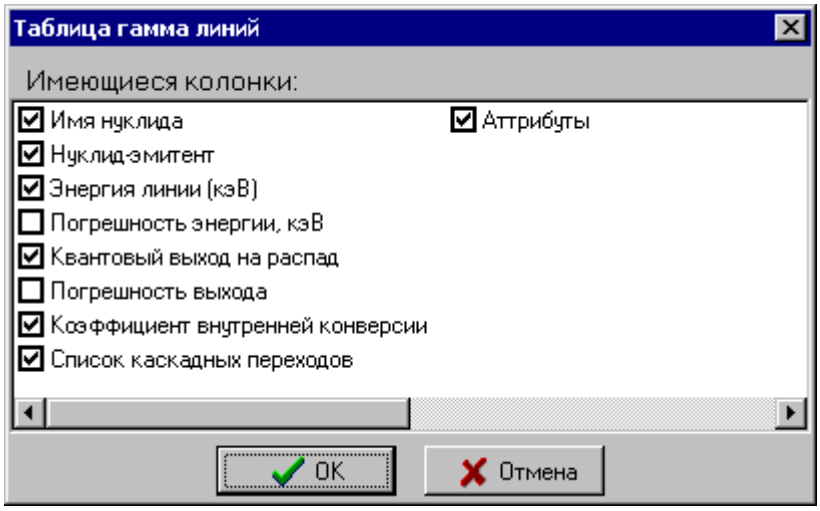
Количество визуализируемых колонок и их названия в списках изотопов и линий задаются оператором в процедуре настройки программы. Процедура вызывается щелчком мышки по пункту меню «***Сервис / Настройки...***» или по кнопке «***Настройка колонок***» - . В зависимости от того какая таблица является активной (активная таблица выделяется цветом заголовка), вызывается либо процедура настройки таблицы изотопов, либо таблиц линий.

Окно процедуры настройки таблицы изотопов может иметь вид:



Щелчок левой кнопкой мышки по квадрату слева от названия колонки устанавливает или снимает флажок отображения колонки в таблице. Двойной щелчок по названию колонки разрешает редактирование названия. Оператор может назвать колонку как угодно, но её назначение останется прежним. Начальные наименования колонок восстанавливаются при вводе “пустого” названия.

Вид окна для настройки таблиц линий зависит от типа излучения (альфа, бета или гамма). Для гамма линий окно может иметь вид:

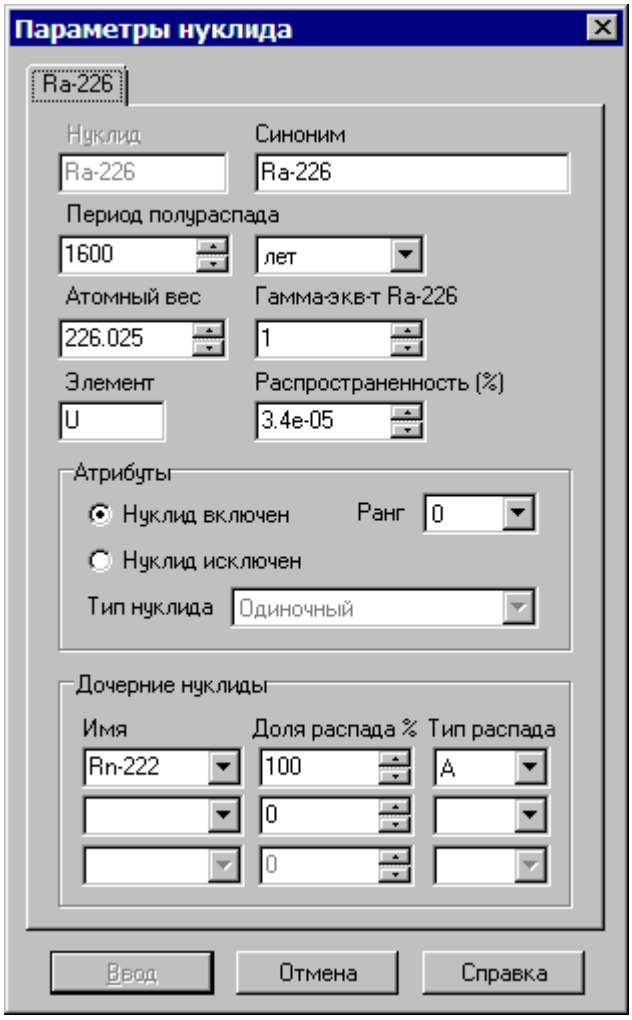


Процедура настройки идентична для всех таблиц.

Редактирование записей

Пункт меню «***Правка / Изменить...***» или щелчок мышки по кнопке «***Редактировать выбранный нуклид (линию)***» вызывает программу редактирования записей таблицы. Если в таблице есть выбранные записи, редактируются выбранные. В том случае если выбрано несколько записей, для редактирования доступны только поля таблицы, которые могут быть одинаковыми для группы записей. Если нет выбранных записей, редактируется рабочая (активная) запись таблицы. В зависимости от того какая таблица является активной (активная таблица выделяется цветом заголовка), вызывается либо процедура редактирования таблицы изотопов, либо таблиц линий.

Окно процедуры редактирования для одиночной записи таблицы изотопов может иметь вид:



Структура и назначение параметров нуклида описаны в главе «Структура таблиц». Тип нуклида: одиночный, формирует цепочку распада или включён в цепочку распада, формируется процедурой формирования равновесных цепочек, и изменять его вручную не рекомендуется.

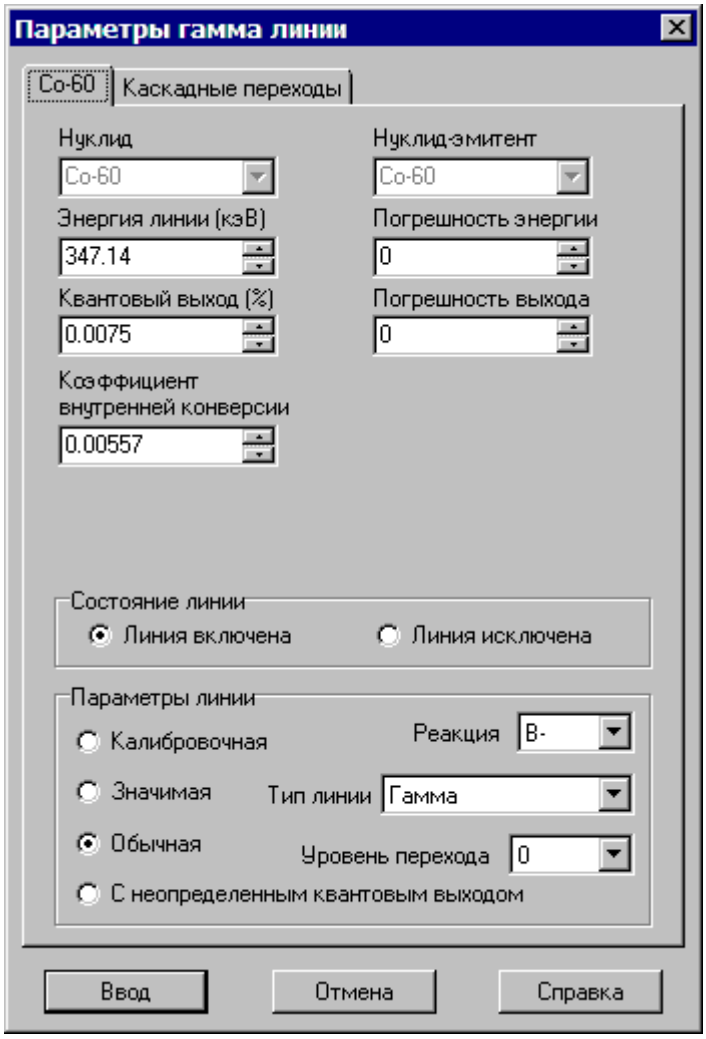
Тип распада имеет следующие значения:

Обозначение	Тип распада
	не определён
A	альфа распад
B-	бета распад

B+	позитронный бета распад
EC	электронный захват
EC+B+	электронный захват + позитронный бета распад
IT	изомерный переход
SF	спонтанное деление
p	протонный распад
n	нейтронный распад

Дочерний нуклид должен присутствовать в таблице, тип распада и имя дочернего нуклида процедура редактирования не контролирует.

Вид окна для редактирования записей таблиц линий зависит от типа излучения (альфа, бета или гамма). Для гамма линий окно может иметь вид:



Структура и назначение параметров линий описаны в главе «Структура таблиц». Выпадающий список “**Реакция**” включает условные обозначения ядерных реакций, при которых образуется данная гамма линия:

Номер реакции	**Обозначение**	**Ядерная реакция**
		не определена
0	A	альфа распад
1	B-	бета распад
2	B+	позитронный бета распад

3	EC	электронный захват
4	EC+B+	электронный захват + позитронный бета распад
5	IT	изомерный переход
6	SF	спонтанное деление
7	p	протонный распад
8	n	нейтронный распад

При групповом редактировании (выбрано несколько записей) доступны только поля таблицы, которые могут быть одинаковыми для группы записей. Параметры линии создаваемые процедурами формирования линий утечки или сложения каскадных изменять запрещено.

При редактировании гамма линии форма имеет вторую страницу «Каскадные переходы»:

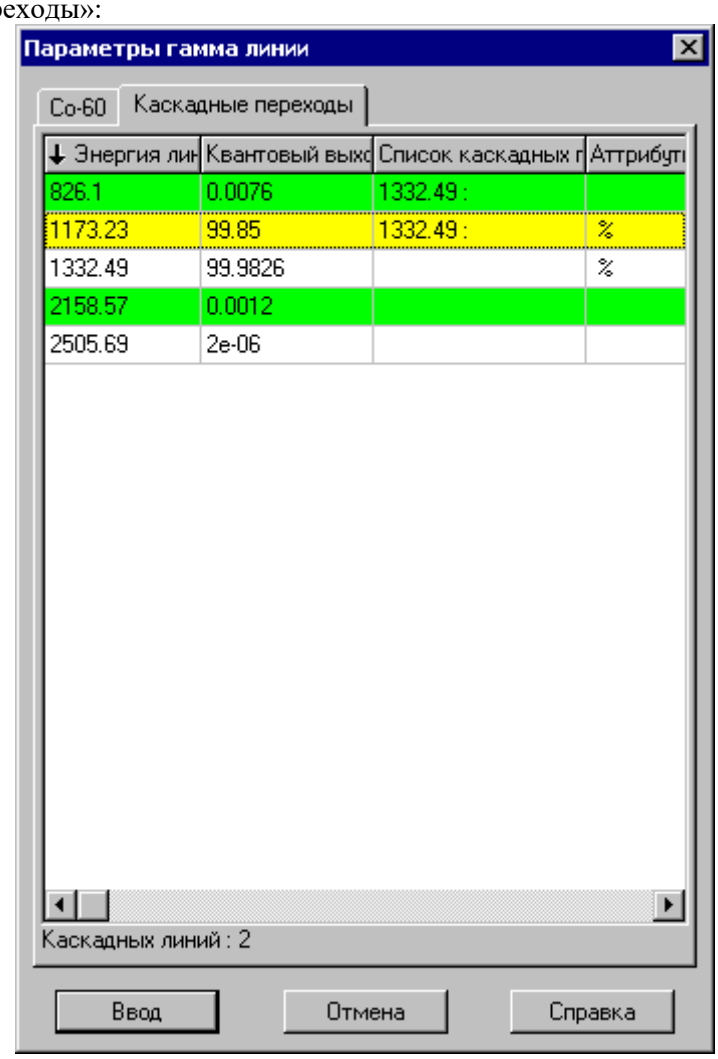
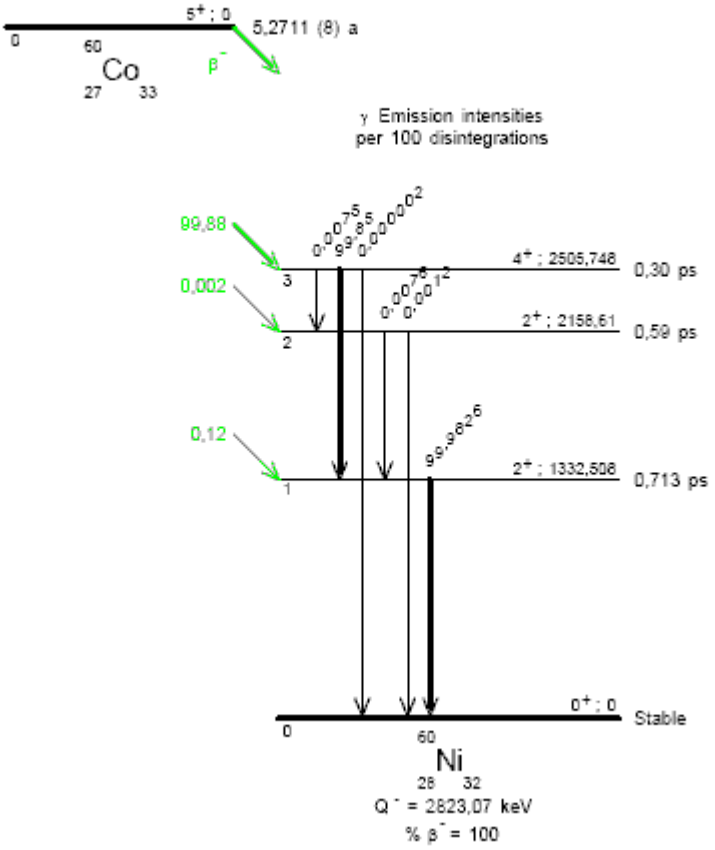


Таблица содержит список всех линий нуклида за исключением редактируемой. Линии, формирующие непосредственный каскад с редактируемой линией, выделяются зелёным или синим цветом. Оператор может включить линию в список каскадных или исключить из него двойным щелчком по линии или с помощью всплывающего меню.

Необходимо помнить, что требуется помечать как каскадные только линии, формирующие непосредственный каскад с редактируемой. Например, в схеме распада Co-60:



для линии формируемым переходом с 3-его уровня на 2-ой (Q=0.0075), требуется указать как каскадные линии, образуемые переходом нуклида с 2-ого уровня на первый (Q=0.0076) и со второго на нулевой (Q=0.0012).

Процедура формирования новой записи в таблице изотопов или линий использует форму процедуры редактирования записей. Отличие только в том, что в форме для создания записи о новом нуклиде доступно для изменения и поле «**Нуклид**», для ввода названия нового нуклида.

Формирование равновесных цепочек

Теория оценивания справедливо утверждает, что эффективные оценки результатов измерений (оценки с минимальной неопределённостью) мы получим тогда, когда сведём к минимуму количество определяемых неизвестных и используем по максимуму всю имеющуюся достоверную информацию. Поэтому пренебрегать информацией об установившихся на момент измерения соотношениями между активностями нуклидов в цепочках распада материнских нуклидов значит жертвовать эффективностью оценок.

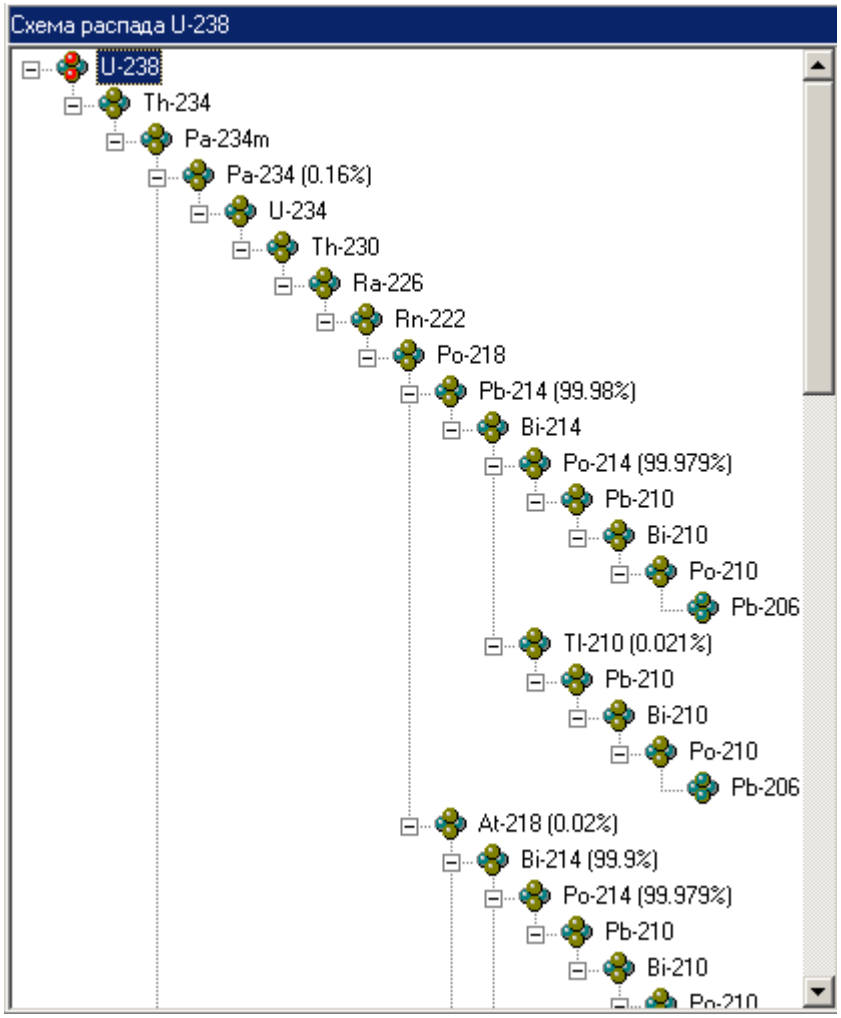
Равновесная цепочка - цепочка нуклидов в состоянии радиоактивного равновесия (активность дочерних находится в динамическом равновесии с активностью материнского нуклида). В равновесной цепочке излучение дочерних нуклидов включается в список линий материнского в соответствии с квантовым выходом дочерних линий и значениями активностей дочерних нуклидов в предположении радиоактивного равновесия между материнским нуклидом и дочерними нуклидами. Нуклид образующий равновесную цепочку может не иметь собственных линий альфа, бета или гамма излучения пригодных для оценки его активности и для определения активности используется излучение дочерних нуклидов. Например, в гамма спектрометрии

активность Cs-137 определяется по гамма излучению дочернего Ba-137m, с которым Cs-137 практически всегда находится в состоянии радиоактивного равновесия.

Различные виды проб, способы отбора, способы пробоподготовки по разному формируют равновесные радиоактивные цепочки нуклидов в пробах. Например: определять активность Th-232 в пробах грунта на гамма спектрометре разумно по всем дочерним нуклидам цепочки распада, поскольку в грунтах Th-232 находится, как правило, в состоянии радиоактивного равновесия, в воде, с большой долей вероятности, равновесие нарушено, а где-нибудь в лаборатории по производству радиоизотопов этот торий может быть совсем без дочерних нуклидов.

Поэтому возможность создавать рабочие таблицы нуклидов с различными равновесными цепочками обязательна для программы создания и редактирования таблиц нуклидов. В программе «***Таблица нуклидов***» пункт меню «***Сервис / Равновесная цепочка / Сформировать...***» вызывает процедуру формирования равновесной или неравновесной цепочки из схемы распада нуклида. Процедура формирования равновесной цепочки производится либо для всех нуклидов **раскрытого дерева** схемы распада, либо только для выбранной ветви в зависимости от выбранного нуклида схемы. В том случае если выбран материнский нуклид дерева распада, производится расчёт квантового выхода для всех нуклидов во всех ветвях раскрытого дерева схемы распада и квантовый выход идентичных нуклидов в различных ветвях распада суммируется. Если выбран один из нуклидов в какой-нибудь ветви схемы распада, производится формирование равновесной цепочки для нуклидов выбранной части (от выбранного до материнского) данной ветви схемы распада. Стабильные нуклиды не включаются в равновесные цепочки. Поэтому если ветвь распада заканчивается стабильным нуклидом, нужно выбрать нуклид предшествующий стабильному.

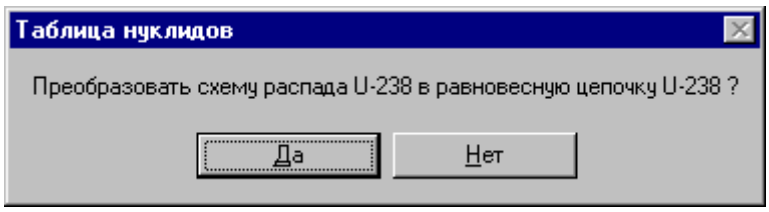
Рассмотрим процесс формирования равновесных цепочек на примере создания таких цепочек из схемы распада U-238.



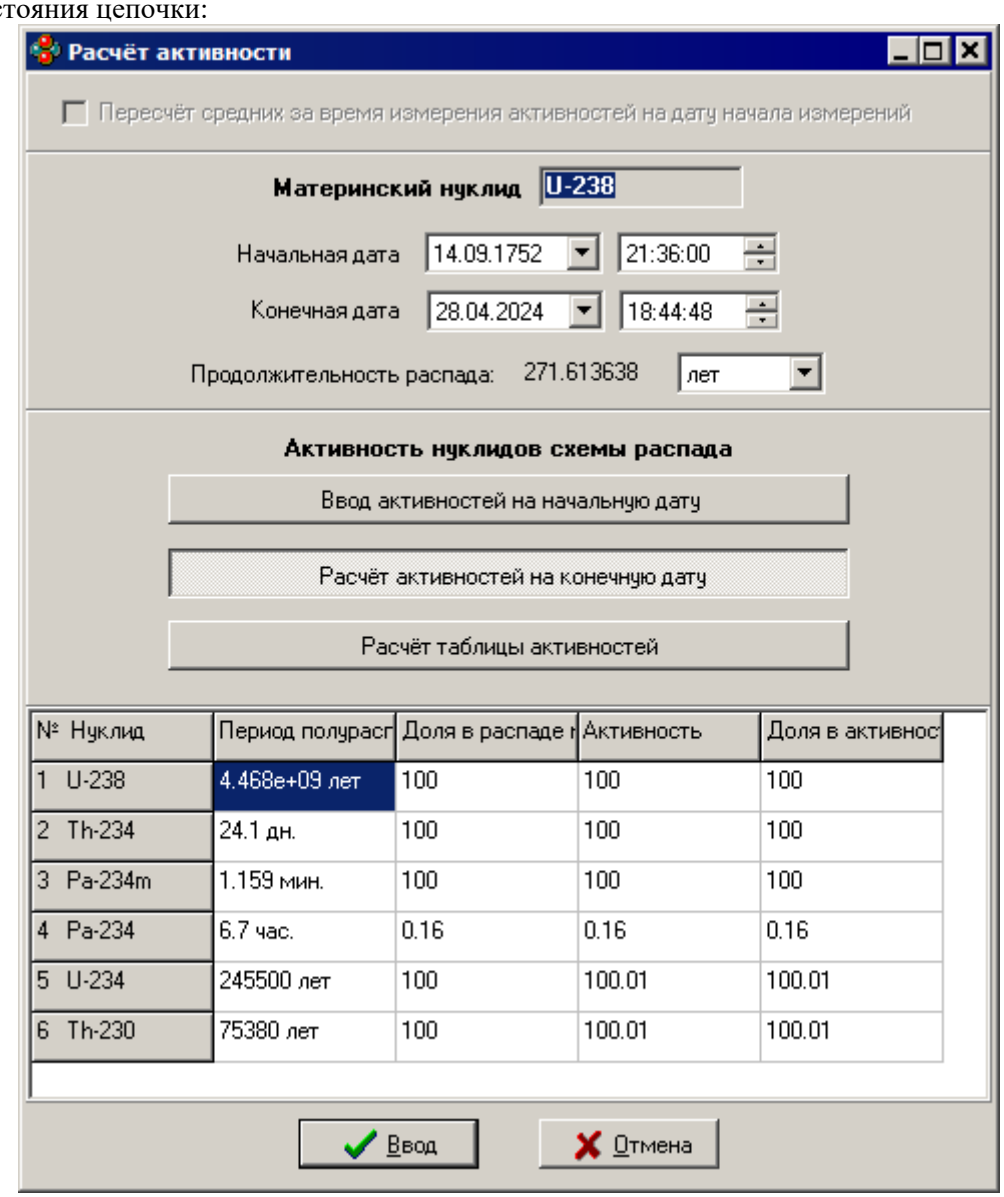
Радиоактивное равновесие между U-238 и Ra-226 часто бывает нарушено. Поэтому в первую цепочку мы включим U-238, Th-234, Pa-234m, Pa-234, U-234 и Th-230. Для этого свернём схему распада ниже Th-230, щелкнув левой кнопкой мышки по значку ⊟ слева от пиктограммы Th-230. В итоге схема примет вид:

Процедура формирования цепочек не включает в цепочки нуклиды, не отображаемые в схеме распада. Поэтому, то, что мы свернули схему распада для Th-230, приведёт к тому, что в равновесную цепочку U-238 ,будут включены только Th-234, Pa-234m, Pa-234, U-234 и Th-230.

Запустим процедуру формирования равновесной цепочки из основного меню или вызвав всплывающее меню щелчком правой кнопки мышки по пиктограмме U-238. При этом программа попросит подтвердить серьёзность наших намерений.



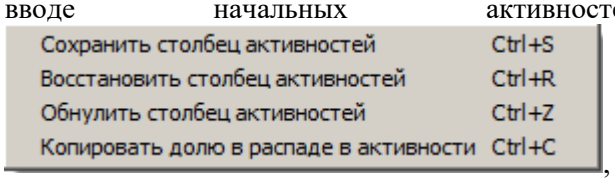
Ответ «**Да**» запускает процедуру формирования цепочки и выводит на экран окно расчёта активности нуклидов выбранной части схемы распада на текущую дату с начальной датой, соответствующей требованию необходимой продолжительности распада для формирования равновесного состояния цепочки:



В соответствии со значениями последней колонки таблицы «**Доля в активности материнского %**» рассчитываются квантовые выходы для линий нуклидов, включённых в равновесную цепочку. Можно отметить, что активность U-234 и Th-230 в нашем примере несколько выше 100% (доли в распаде) - это происходит всегда по истечении некоторого времени требуемого для формирования равновесности в цепочке за счёт некоторого преобладания процесса накопления дочерних нуклидов в цепочке над процессом распада. Абсолютной равновесности не бывает. В случае если период полураспада материнского нуклида в цепочке более чем в десять раз больше периода полураспада самого долгоживущего из дочерних нуклидов, считается что требование

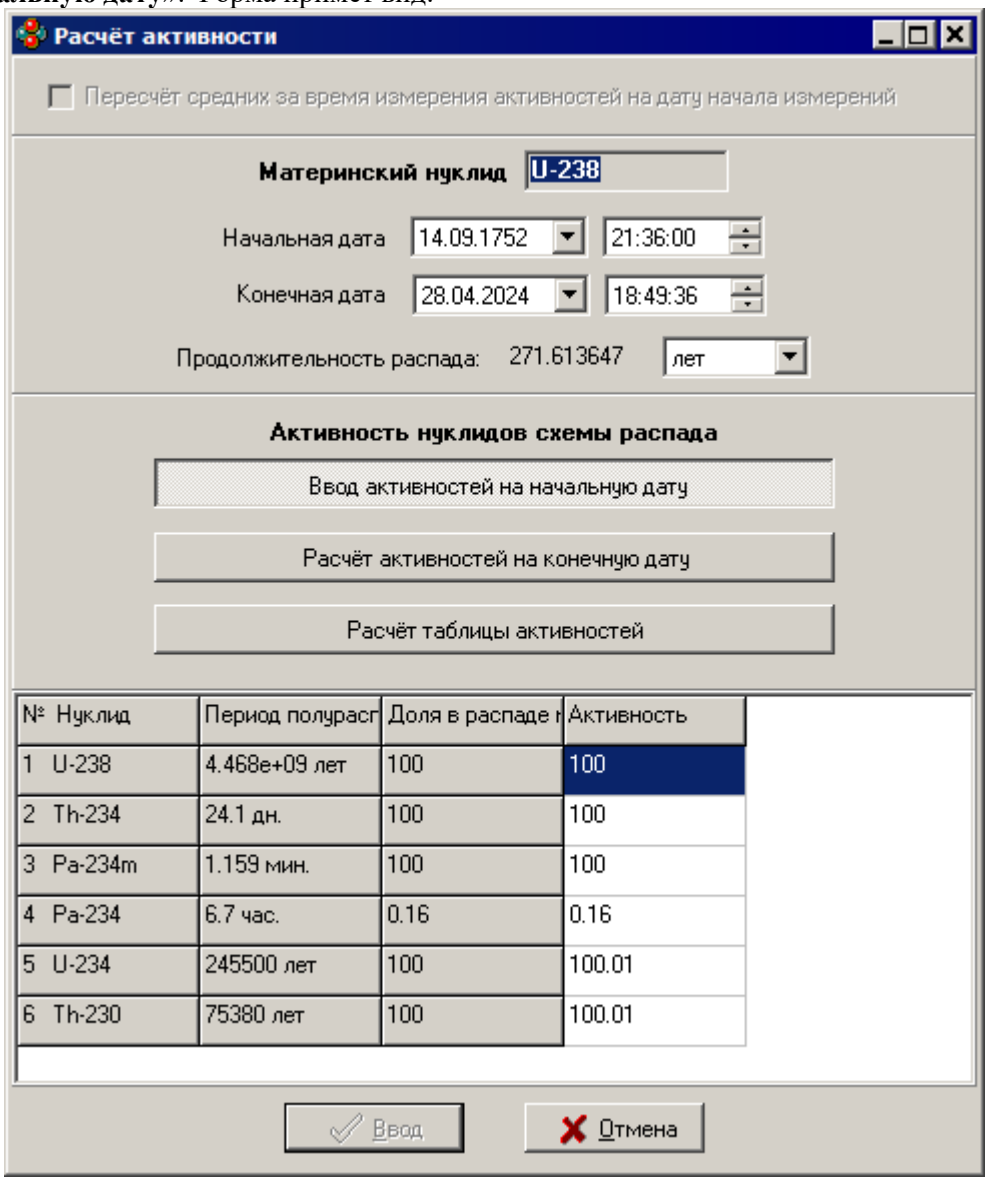
необходимое для формирования радиоактивного равновесия в цепочке выполняется. В противном случае программа сообщит, что радиоактивное равновесие в цепочке никогда не наступит и предложит оператору самому задать требуемую продолжительность распада и, соответственно, состояние соотношения активностей нуклидов в цепочке.

Форма имеет небольшое меню, связанное с таблицей нуклидов, и доступное при вводе начальных активностей цепочки нуклидов



, которое помогает производить манипуляции со столбцом начальной активности цепочки нуклидов, необходимое при расчёте неравновесных цепочек. Пункт меню «**Восстановить столбец активностей**» восстанавливает значения начальных активностей, сохранённые по вызову пункта меня «**Сохранить столбец активностей**».

В случае если мы не согласны с расчётом, или нам требуется формирование неравновесной цепочки, мы можем задать другие даты начала и окончания распада и начальные активности на начало распада, нажав на клавишу «**Ввод активностей на начальную дату**». Форма примет вид:

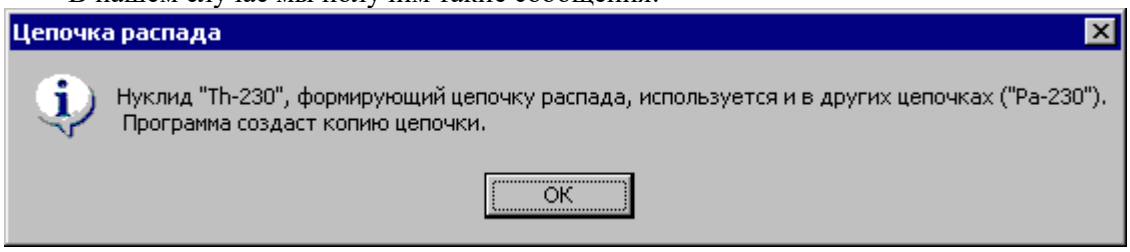


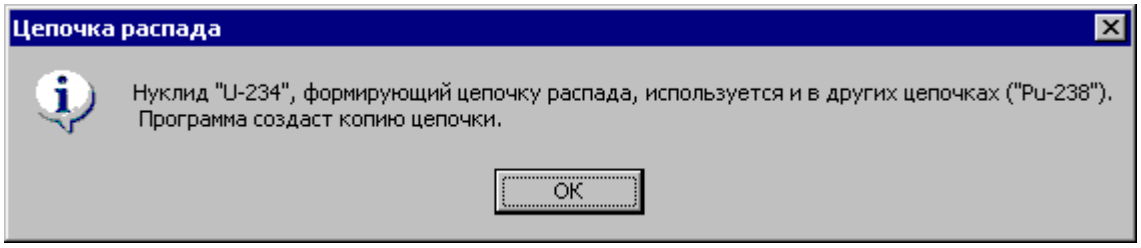
После ввода начальных значений активностей и дат начала и окончания распада необходимо нажать на клавишу «**Расчёт активностей на конечную дату**». Программа пересчитает значения активностей на заданную конечную дату и разрешит формирование цепочки. При необходимости можно предварительно посмотреть графики распада, нажав на клавишу «**Расчёт таблицы активностей**», и выбрать требуемую конечную дату.

В случае формирования равновесной цепочки все необходимые данные уже подставлены в таблицу и редактировать их нет необходимости.

Нажатие на клавишу «**Ввод**» запускает процесс формирования цепочки. В процессе формирования цепочки программа выясняет, что какие-то нуклиды или цепочки нуклидов входят в схемы распада других нуклидов и, в этом случае, формирует их копии.

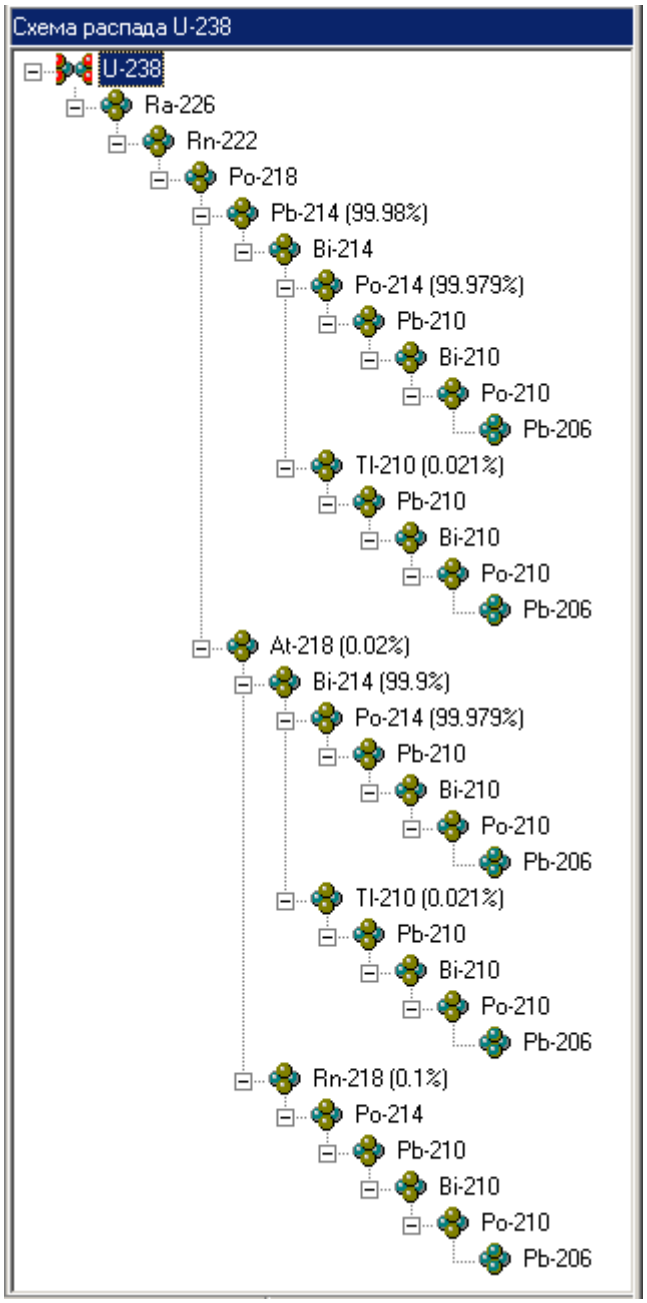
В нашем случае мы получим такие сообщения:



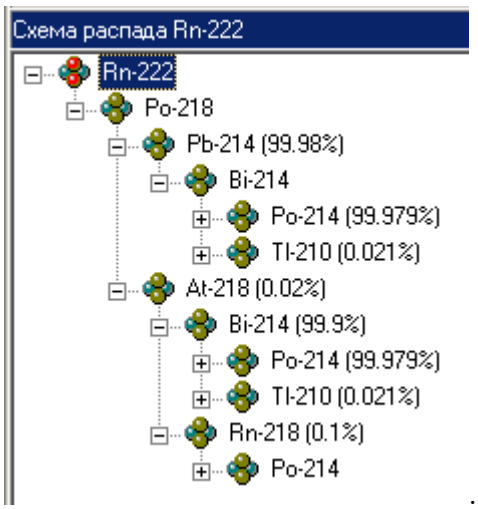


Нуклиды, входящие в копии цепочек, могут потребоваться для формирования других равновесных цепочек. При создании «копии цепочки» в действительности создаётся не копия нуклидов цепочки, а меняются атрибуты нуклидов таким образом, что нуклид приобретает статус «копия нуклида», вместо статуса «включён в равновесную цепочку». Это надо учитывать при желании самостоятельно удалить или отредактировать нуклид.

По завершению процесса получим следующую схему распада для U-238:



Все линии Th-234, Pa-234m, Pa-234, U-234 и Th-230 включены в соответствии с квантовых выходом и долей в активности материнского U-238. Цепочка Rn-222 - Po-214 также может быть объединена в равновесную. Для этого мы переключимся в таблице изотопов на Rn-222 и свернём схему распада ниже Po-214 и Tl-210. Получим следующую схему распада:



. Вызвав процедуру формирования равновесной цепочки для Rn-222, получим в итоге схему распада U-238

, включающего две равновесные цепочки U-238-Th-230 и Rn-222 -Po-214.

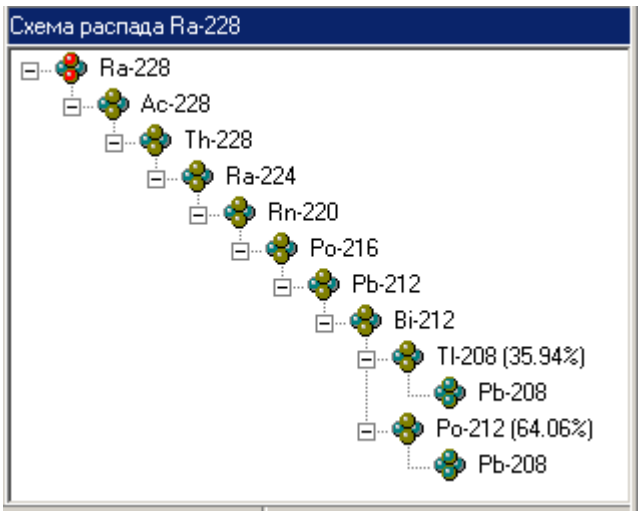
Сформированная равновесная цепочка легко преобразуется обратно в набор отдельных нуклидов вызовом пункта меню «***Сервис / Равновесная цепочка / Расформировать...***».

Формирование неравновесных цепочек

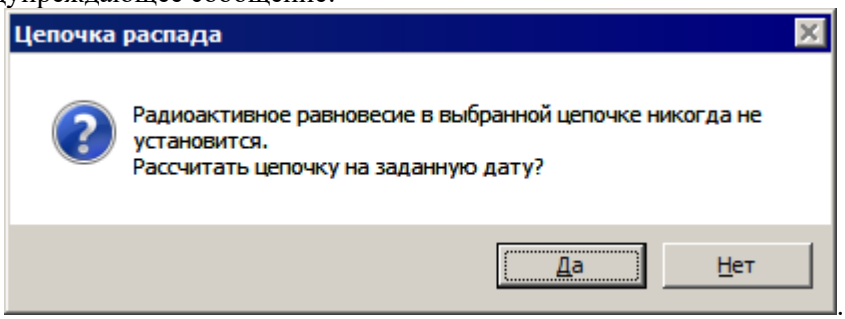
Нередко нам требуется рассчитать компонент разложения на основе цепочки распада радиоактивное равновесие в которой не установилось или, в принципе, не может установиться. Например, после химического выделения нуклидов или прокаливания пробы для удаления радиоактивных газов и т.п. В этом случае рассчитывается состояние цепочки на заданную продолжительность распада из начального состояния.

Рассмотрим процесс формирования неравновесной цепочки на примере цепочки распада Ra-228 после химического выделения радия из пробы. Данная процедура используется в центрах гигиены и эпидемиологии для контроля содержания радия в воде. Нормы СанПиН по радию весьма жёсткие (0.49 Бк/л для Ra-226 и 0.2 Бк/л для Ra-228), поэтому для получения требуемой точности приходится выделять радий из большого объёма воды и полученный материал анализировать на содержание Ra-226 и Ra-228. А для этого необходимо рассчитать элементарные спектры (отклики спектрометра на 1 распад нуклида) для цепочек распада Ra-226 и Ra-228 на заданную дату.

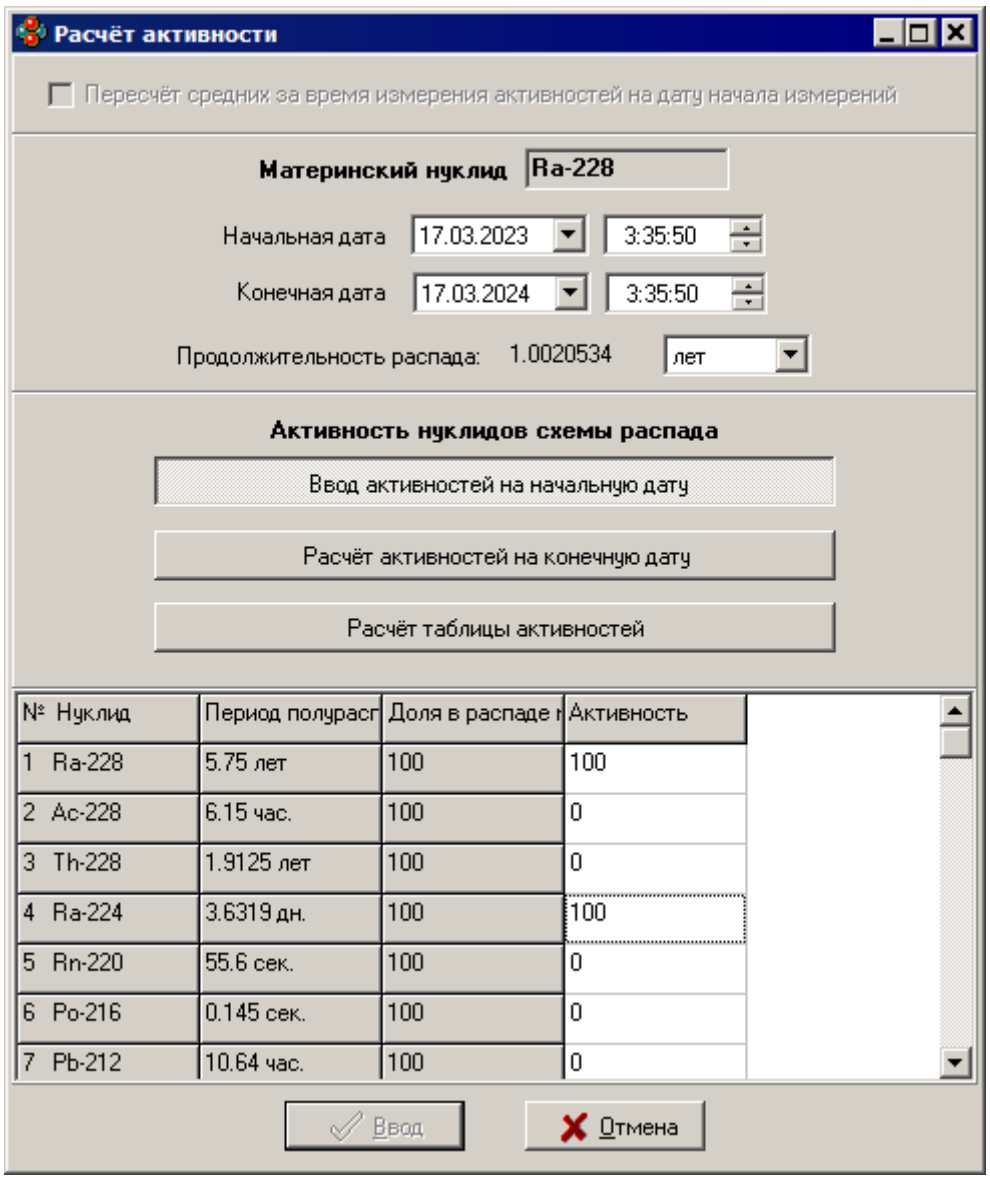
Вот так выглядит дерево распада Ra-228:



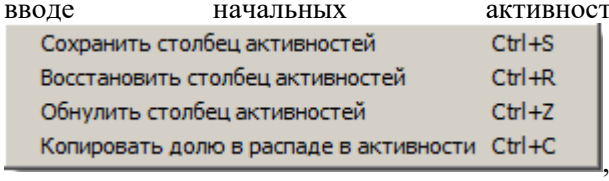
Запустим процедуру формирования цепочки из основного меню (пункт меню «***Сервис / Равновесная цепочка / Сформировать...***») или вызвав всплывающее меню щелчком правой кнопки мышки по пиктограмме Ra-228. Программа выдаст нам предупреждающее сообщение:



. Щёлкаем по кнопке «**Да**» и вводим начальные значения Ra-228 и Ra-224 после химического выделения радия в открывшейся форме. Абсолютные значения нам не требуются, требуется соотношение активностей нуклидов в цепочке распада Ra-228 в воде:



Форма имеет небольшое меню, связанное с таблицей нуклидов, и доступное при вводе начальных активностей цепочки нуклидов



, которое помогает производить манипуляции со столбцом начальной активности цепочки нуклидов, необходимое при расчёте неравновесных цепочек. Пункт меню «**Восстановить столбец активностей**» восстанавливает значения начальных активностей, сохранённые по вызову пункта меня «**Сохранить столбец активностей**». В данном случае нам пригодится пункт меню «**Обнулить столбец активностей**».

Нам требуется определить дату измерения пробы так, чтобы Rn-222 от Ra-226 успел накопиться и все короткоживущие в дереве распада Ra-228 имели минимальную скорость изменения активности (наступило состояние квазиравновесности). Для этого рассчитаем таблицу активностей, щёлкнув по соответствующей клавише:

Таблица активностей

Начальная дата 17.03.2023 3:35:50

Конечная дата 17.03.2024 3:35:50

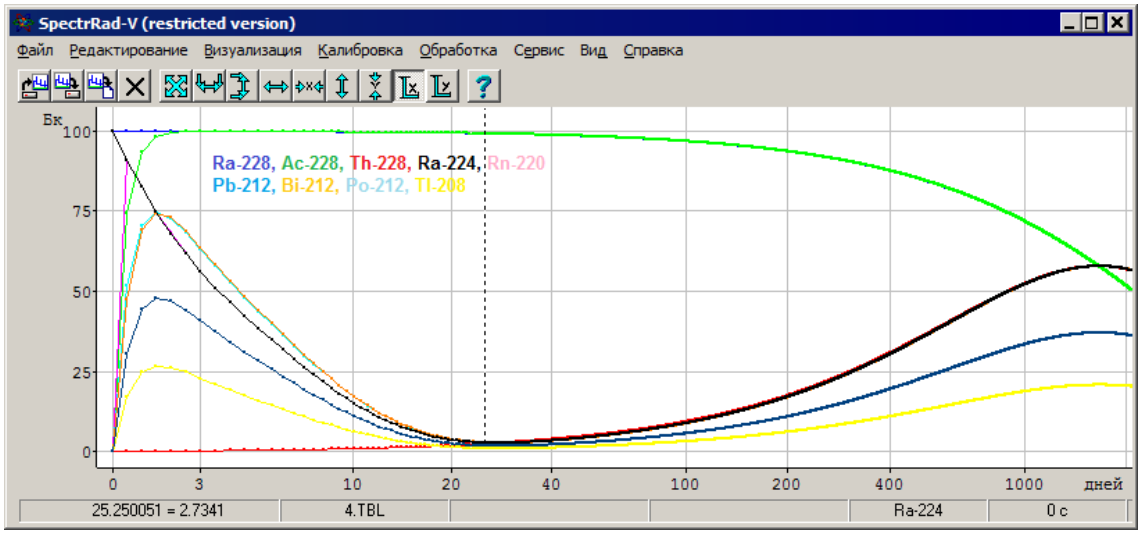
Продолжительность распада: 366 дн. 0 час. 0 мин. 1 сек.

Число точек 4097

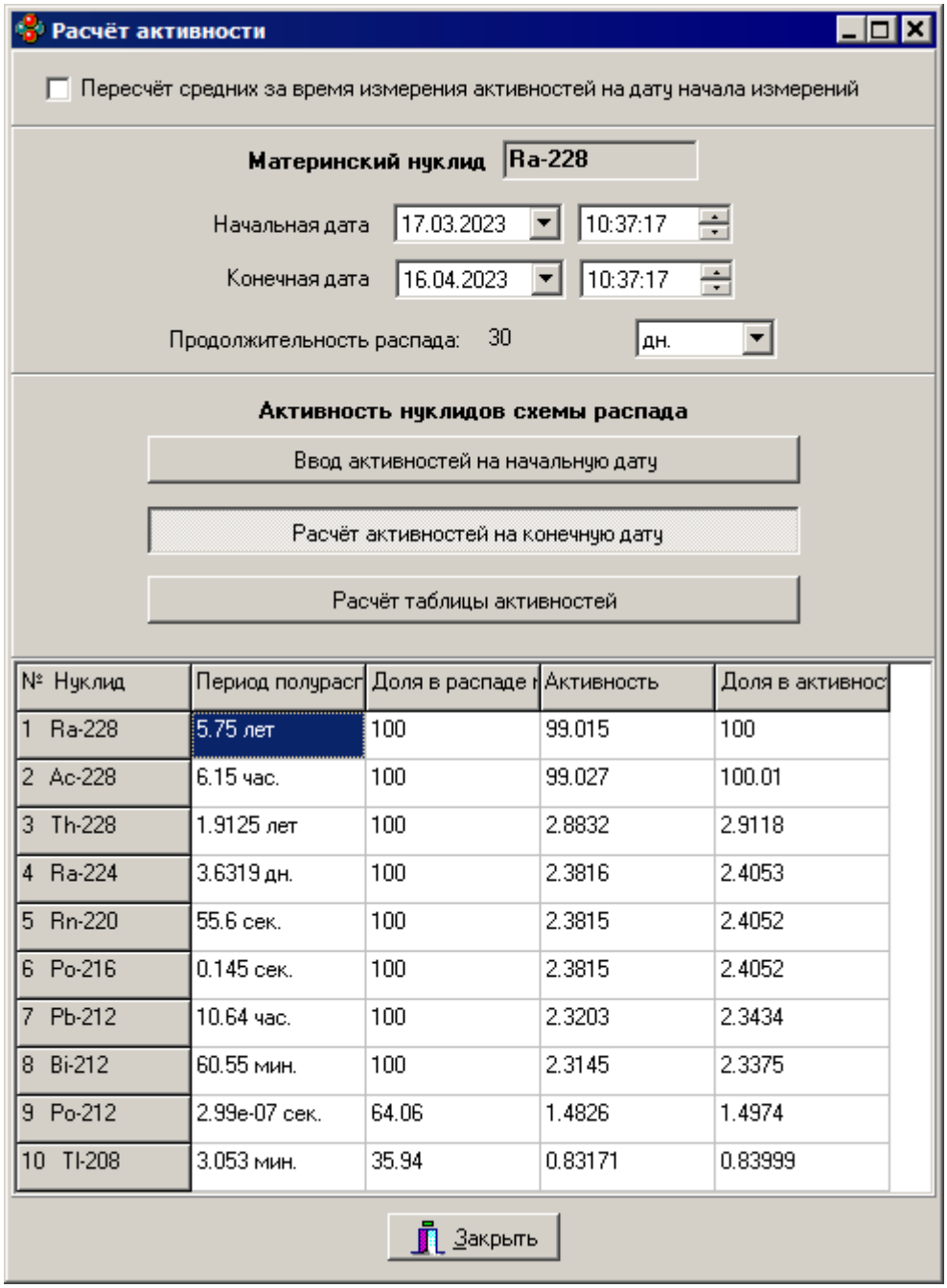
Дата\Активность	1 Ra-228	2 Ac-228	3 Th-228	4 Ra-224	5 Rn-220
17.03.2023 3:35:50	100	0	0	100	0
17.03.2023 5:44:30	99.997	21.471	0.00099014	98.309	98.327
17.03.2023 7:53:10	99.994	38.331	0.0036712	96.647	96.664
17.03.2023 10:01:51	99.991	51.57	0.0076799	95.013	95.03
17.03.2023 12:10:31	99.988	61.966	0.012731	93.406	93.423
17.03.2023 14:19:11	99.985	70.13	0.0186	91.827	91.844
17.03.2023 16:27:52	99.982	76.54	0.025112	90.275	90.291
17.03.2023 18:36:32	99.979	81.573	0.032128	88.749	88.765
17.03.2023 20:45:12	99.976	85.525	0.03954	87.249	87.264
17.03.2023 22:53:52	99.973	88.627	0.047262	85.774	85.79
18.03.2023 1:02:33	99.971	91.063	0.055228	84.325	84.34
18.03.2023 3:11:13	99.968	92.975	0.063385	82.9	82.915
18.03.2023 5:19:53	99.965	94.476	0.071692	81.499	81.514
18.03.2023 7:28:34	99.962	95.654	0.080117	80.123	80.137
18.03.2023 9:37:14	99.959	96.579	0.088633	78.769	78.783
18.03.2023 11:45:54	99.956	97.304	0.097221	77.439	77.453

Расчёт | Excel | График | Закрыть

Посмотрим на графики распада Ra-228 и дочерних щёлкнув по клавише «**График**»:



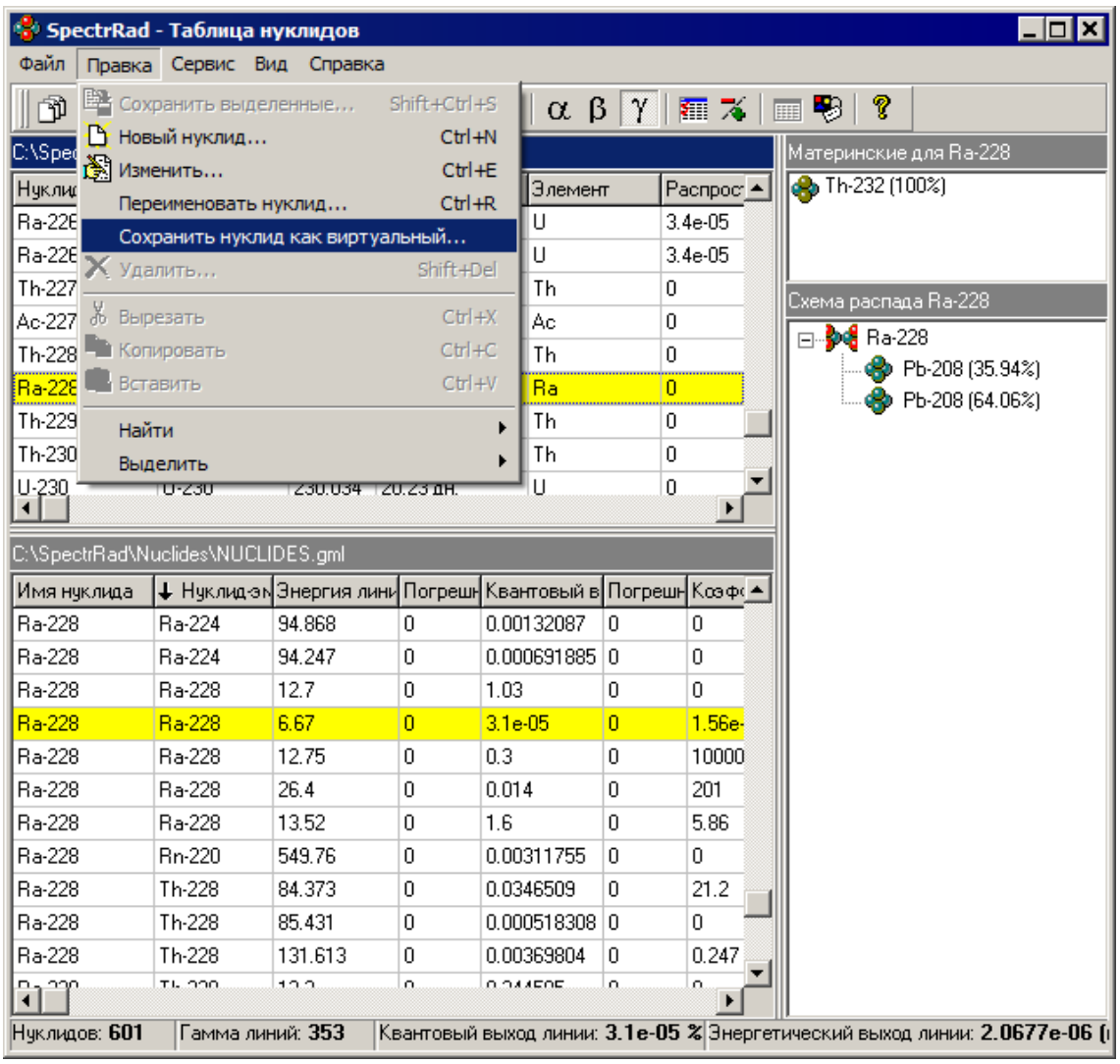
Квазиравновесное состояние наступает дней через 25 после выделения радия – минимальная скорость изменения активностей нуклидов цепочки распада наступает через это время. Поэтому, вернувшись к табличке с вводом начальных активностей, введём продолжительность распада равную 30 дням (несущественно какая продолжительность в диапазоне от 25 до 35 дней) и рассчитаем активности нуклидов на заданную продолжительность распада.



№	Нуклид	Период полураспа	Доля в распаде н	Активность	Доля в активнос
1	Ra-228	5.75 лет	100	99.015	100
2	Ac-228	6.15 час.	100	99.027	100.01
3	Th-228	1.9125 лет	100	2.8832	2.9118
4	Ra-224	3.6319 дн.	100	2.3816	2.4053
5	Rn-220	55.6 сек.	100	2.3815	2.4052
6	Po-216	0.145 сек.	100	2.3815	2.4052
7	Pb-212	10.64 час.	100	2.3203	2.3434
8	Bi-212	60.55 мин.	100	2.3145	2.3375
9	Po-212	2.99e-07 сек.	64.06	1.4826	1.4974
10	Tl-208	3.053 мин.	35.94	0.83171	0.83999

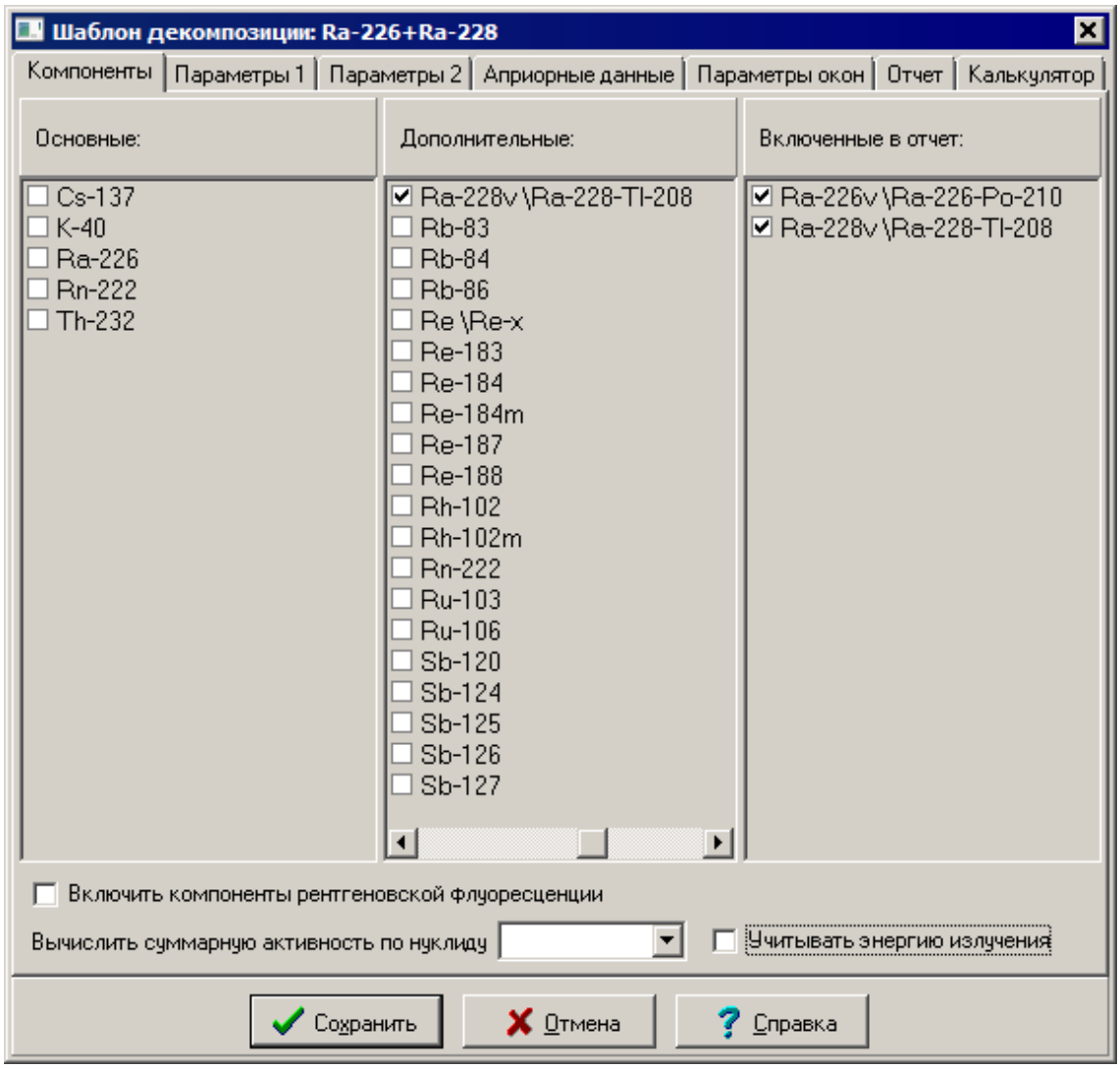
В итоге получаем неравновесную цепочку Ra-228, в котором выходы линий дочерних нуклидов через 30 дней после начала распада материнского включены в список линий материнского.

Рекомендуется сохранить нуклид как виртуальный (виртуальные нуклиды исключаются из автоматического поиска нуклидов в спектре пробы).



В итоге мы можем включить сформированный виртуальный нуклид в качестве компонента разложения спектра пробы, предварительно скопировав его в рабочую таблицу нуклидов, и не забыв включить линии утечки аннигиляционных гамма квантов и линии суммирования каскадных переходов.

И можем указать его в качестве компонент разложения при создании шаблона обработки спектров на Ra-226 и Ra-228:

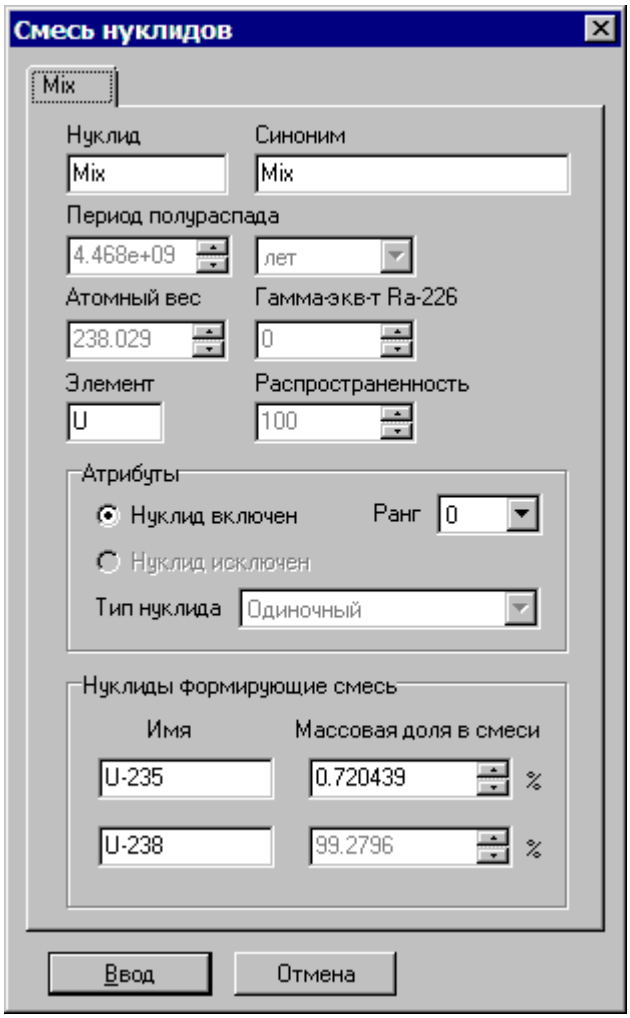


При этом мы не должны забывать, что, рассчитанный по сформированным данным неравновесной цепочки Ra-228, элементарный спектр соответствует действительности только на 30 день химически выделенного Ra-228. Поскольку скорость изменения активностей всех нуклидов в цепочке в это время минимальна, отличия в активностях в течение ± 5 дней будут не существенны.

Создание смеси нуклидов

Пункт меню «***Сервис / Смесь нуклидов...***» вызывает программу формирования условного нуклида являющегося смесью выбранных оператором двух или трёх нуклидов.

Окно процедуры создания смеси нуклидов практически идентично окну процедуры редактирования данных для нуклидов:



Отличие окна в том, что часть пунктов запрещена для редактирования и на месте нижней группы, вместо указания дочерних, приводятся помеченные оператором нуклиды для формирования смеси. Оператор должен задать имя нуклида для формируемой смеси и указать долю нуклидов (масса атомов в процентах) в смеси. Поскольку сумма долей должна быть равной 100 %, для двух нуклидов разрешается изменять долю первого нуклида (доля второго автоматически рассчитывается), для трёх – менять долю первого и второго нуклидов. По умолчанию, если указан процент распространённости нуклида, он подставляется в качестве доли в смеси. В результате процедурой формируется условно равновесная цепочка нуклидов, в которой создаётся нуклид смеси, имеющий максимальное время распада, с включёнными в цепочку дочерними нуклидами, формирующими смесь.

Поскольку формируемая цепочка не является равновесной, доля в распаде для дочерних нуклидов пересчитывается в соответствии с соотношением периодов полураспада. Рассчитанная таким образом доля, естественно, изменяется со временем и поэтому при формировании смесей относительно короткоживущих нуклидов это надо учитывать.

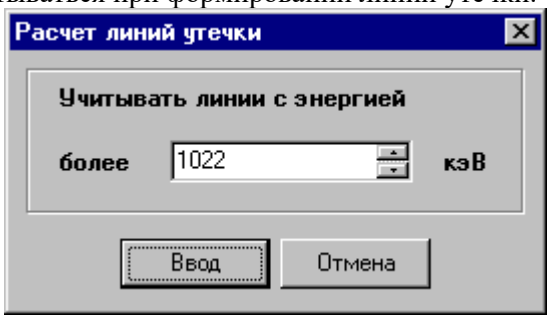
В отличие от равновесной цепочки, где активностью цепочки считается активность материнского нуклида, активностью смеси считается суммарная активность входящих в смесь нуклидов.

Формирование смесей повышает обусловленность решаемой системы и соответственно увеличивает эффективность оценок. Скажем, доля U-238 и U-235 в естественном (не обогащённом) уране за редкими исключениями постоянна. Поэтому, например, решая задачу определения урана в почвах, разумно не разделять ураны, а определять непосредственно смесь уранов.

Учёт линий утечки и сложения каскадных

Эффекты, связанные с формированием аннигиляционного пика и пиков утечки для гамма линий с энергией превышающей энергию образования электронно-позитронных пар, и появления пиков суммирования для линий каскадных переходов необходимо учитывать в процедурах обработки гамма спектров. В программном пакете «**SPECTRRAD**» для уменьшения времени обработки спектров информация об энергиях линий утечки и линий суммирования каскадных переходов формируется заранее, а эффекты, связанные с перераспределением гамма квантов, окончательно рассчитываются в процедуре обработки спектров.

Пункт меню «***Сервис/ Линии утечки/ Включить в таблицу...»*** вызывает программу дополняющую таблицу гамма линий нуклидов линиями одиночного и двойного вылета. При этом программа предлагает ввести граничную энергию для линий, которые будут учитываться при формировании линий утечки.



Пункт меню «***Сервис/ Линии сложение каскадных/ Включить в таблицу***» используется для включения в таблицу линий с энергиями соответствующими энергиям суммирования двух и трёх линий каскадных переходов. Информация о каскадных переходах должна быть указана в записях гамма линий.

Процедура формирования сложения каскадных линий рассчитывает условные квантовые выходы второго и третьего каскада (вероятности выхода гамма квантов при втором и третьем каскаде при условии выхода гамма кванта в первом каскадном переходе) для всех возможных вариантов каскадных переходов.

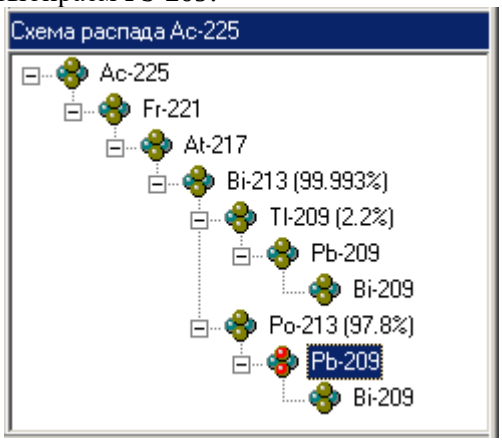
Сформированные линии включаются в таблицу с соответствующими атрибутами: «аннигиляционная», «линия утечки» или «сложения каскадных».

Пункт меню ***«.../ Исключить из таблицы***» удаляет ранее сформированные линии утечки или каскадные из таблицы линий.

Включение в таблицу линий утечки и сложения каскадных необходимо производить после формирования равновесных цепочек и смесей нуклидов, поскольку только в этом случае будут корректно рассчитаны квантовые выходы включаемых линий. Если мы переформировали таблицу: создали новые равновесные цепочки или расформировали старые, необходимо удалить из таблицы старые линии утечки и сложения каскадных и включить их снова.

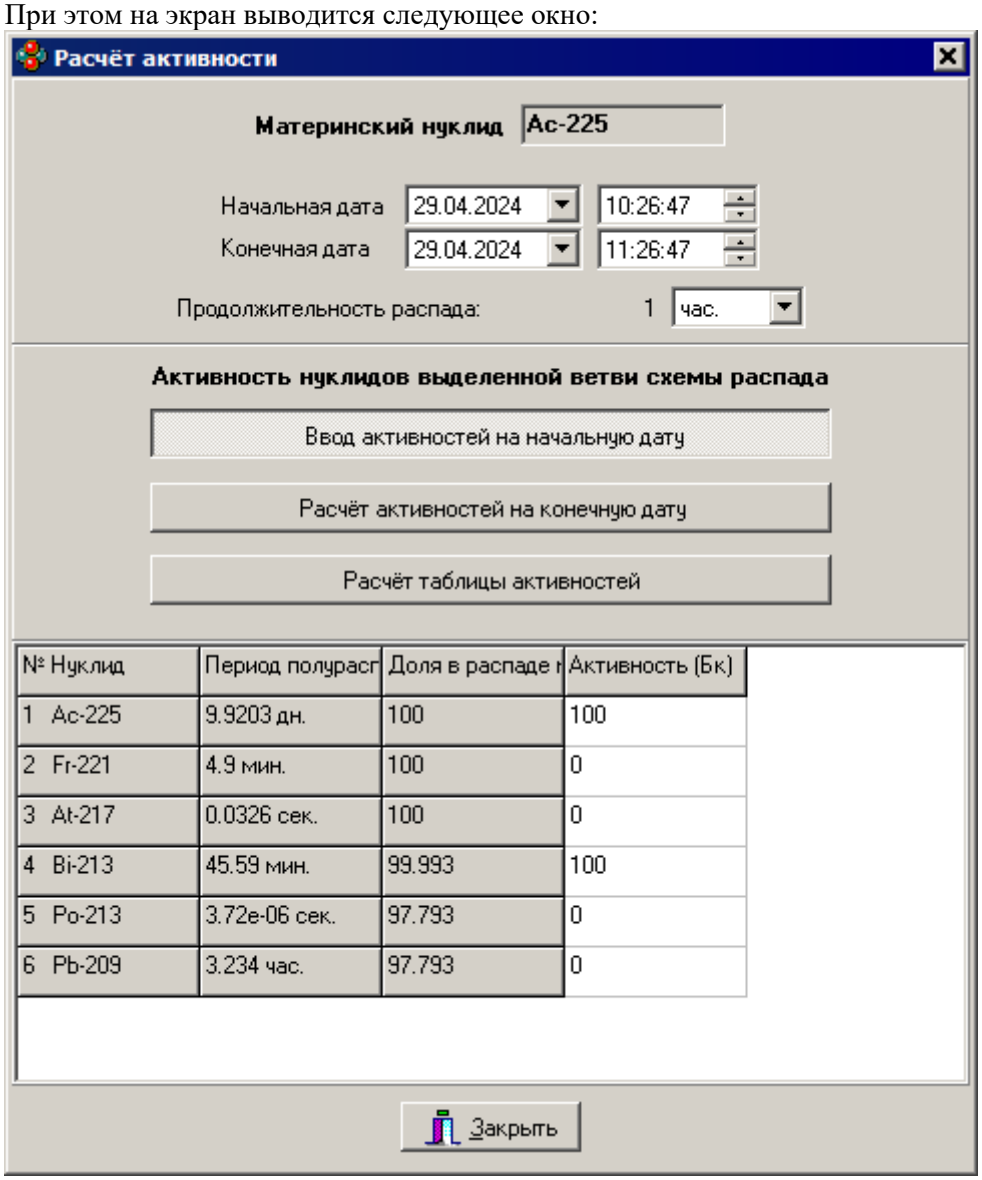
Расчёт активности нуклидов схемы распада

Пункт меню «***Сервис / Активность нуклида...***» вызывает процедуру расчёта активности нуклидов схемы распада на заданную дату. Расчёт производится либо для всех нуклидов схемы, либо только для выбранной ветви в зависимости от выбранного нуклида схемы. В том случае если выбран материнский нуклид дерева распада, производится расчёт активностей для всех нуклидов во всех ветвях распада и активности идентичных нуклидов в различных ветвях распада суммируются в итоговой таблице. Если выбран один из нуклидов в какой-нибудь ветви схемы распада, производится расчёт активности нуклидов выбранной части (от материнского до выбранного) выбранной ветви схемы распада. Например, в схеме распада Ac-225 в качестве последнего нуклида мы выбираем Pb-209:



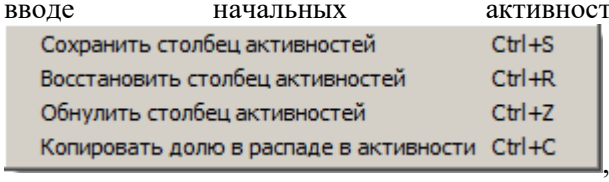
В этом случае расчёт активностей будет выполняться для цепочки Ac-225 →Fr-221 →At-217 →Bi-213 →Po-213 →Pb-209.

При этом на экран выводится следующее окно:



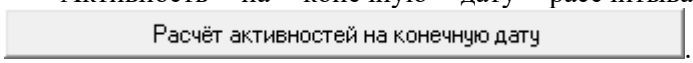
Оператор должен задать начальную и конечную дату распада и активность нуклидов схемы распада (или нуклидов выбранной ветви) на начальную дату (в примере заданы случайные значения).

Форма имеет небольшое меню, связанное с таблицей нуклидов, и доступное при вводе начальных активностей цепочки нуклидов

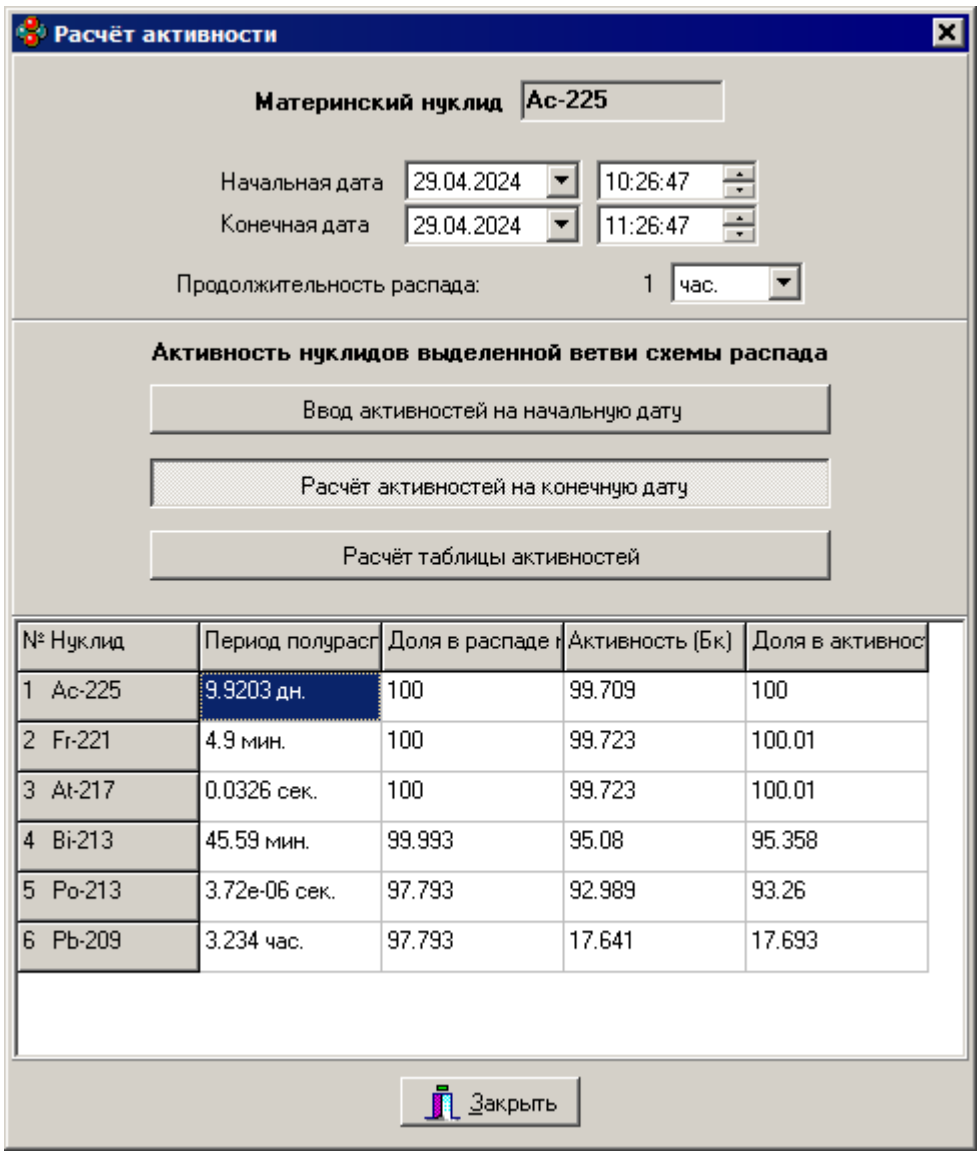


, которое помогает производить манипуляции со столбцом начальной активности цепочки нуклидов. Пункт меню «**Восстановить столбец активностей**» восстанавливает значения начальных активностей, сохранённые по вызову пункта меня «**Сохранить столбец активностей**».

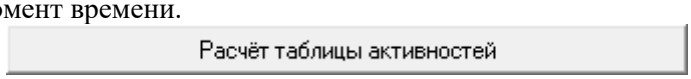
Активность на конечную дату рассчитывается по нажатию на кнопку



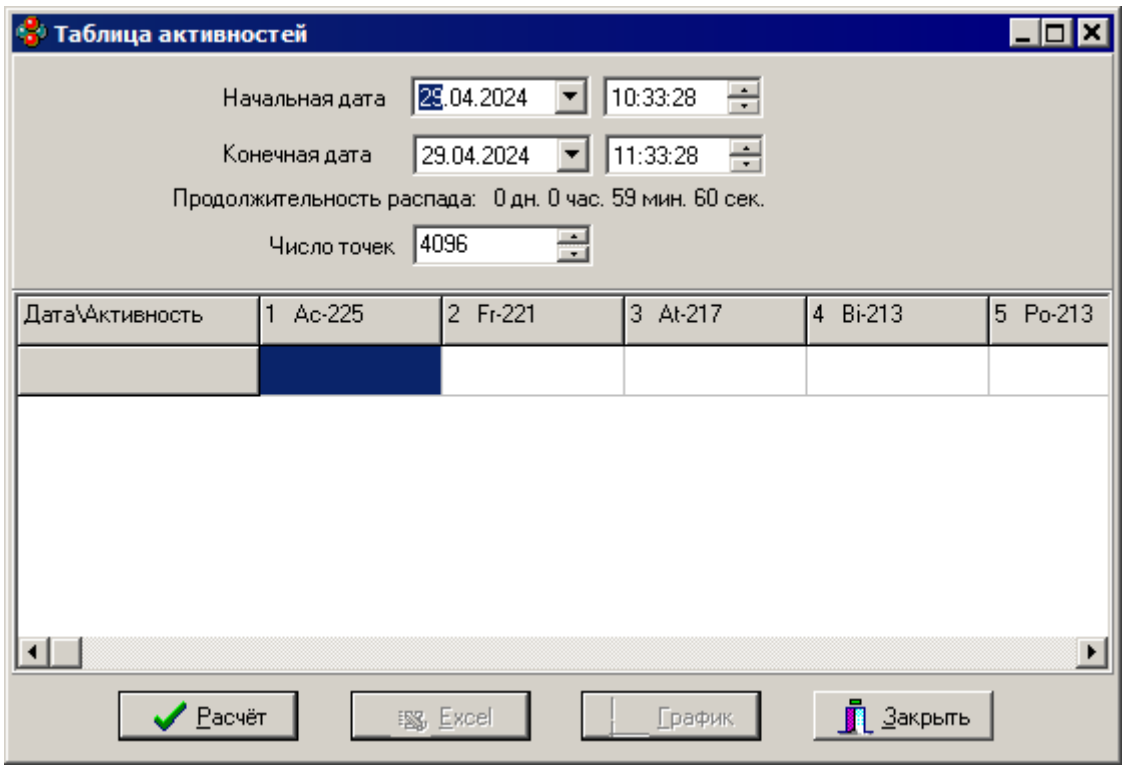
. Форма процедуры расчёта активностей при этом принимает следующий, например, вид:

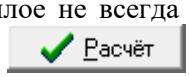


Графа «**Активность (Бк)**» содержит активность конкретного нуклида в цепочке нуклидов на конечную дату. Графа «**Доля в активности материнского (%)**» показывает относительную активность нуклида (по отношению к активности материнского) на заданный момент времени.

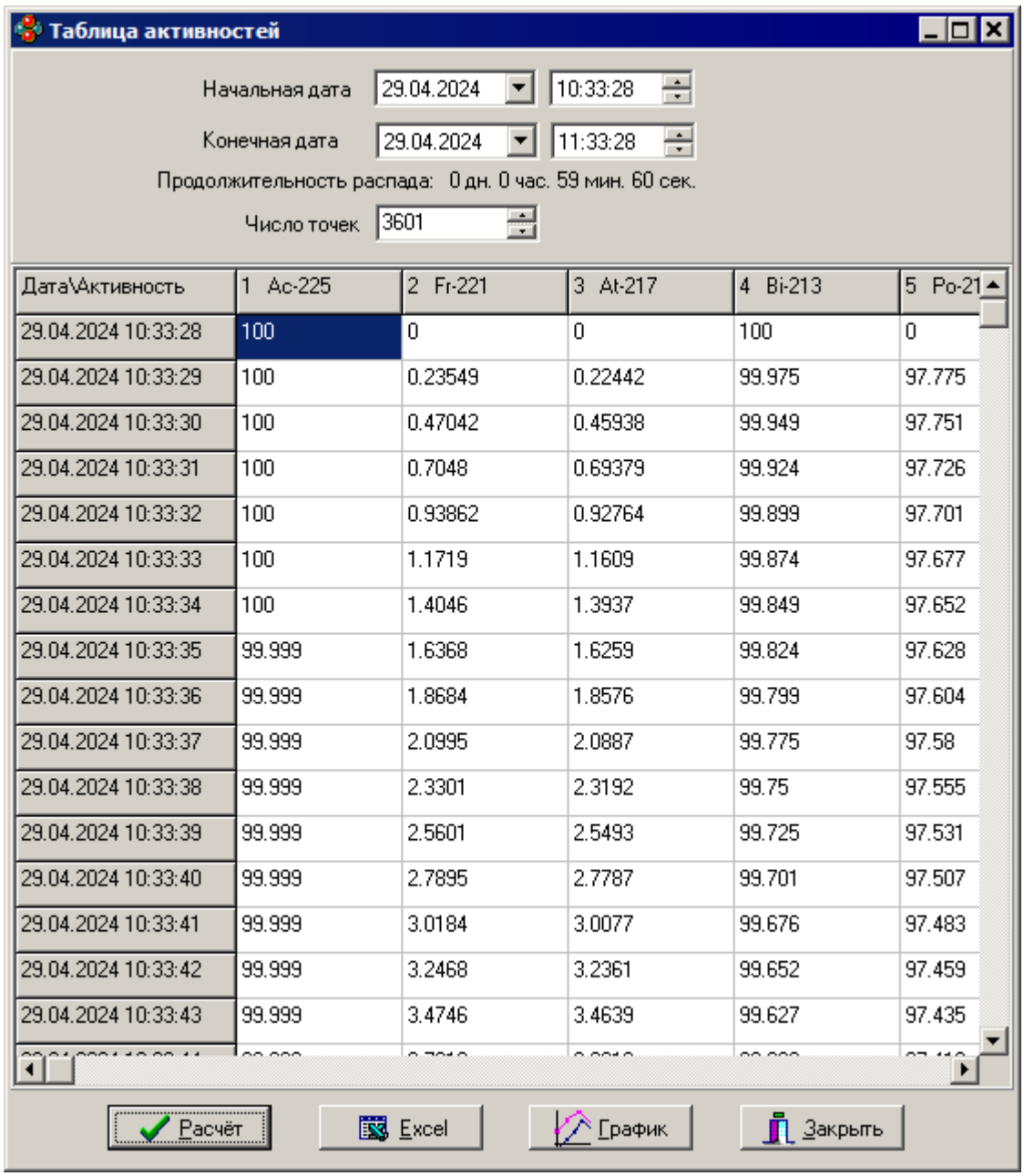
Кнопка 

позволяет рассчитать таблицу активностей для заданного интервала времени с заданным числом точек. На экране при нажатии на кнопку появляется следующая форма:



Оператор может изменить диапазон дат (допускаются и отрицательные значения времени распада, но расчёт в прошлое не всегда реализуем) и задать требуемое число точек таблицы. Нажатие на кнопку 

запускает процедуру расчёта и по её завершении форма примет следующий вид:

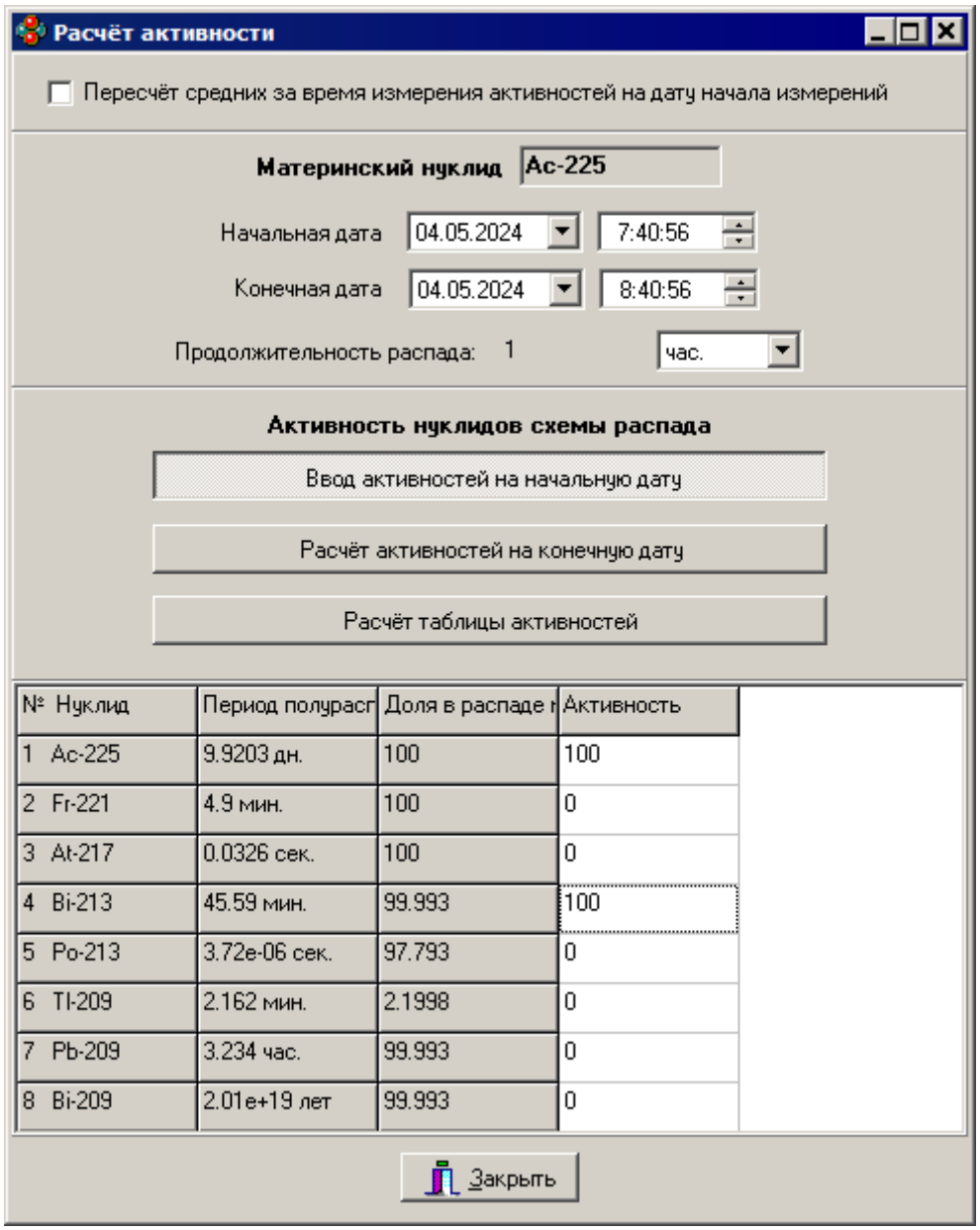


Дата\Активность	1 Ac-225	2 Fr-221	3 At-217	4 Bi-213	5 Po-21
29.04.2024 10:33:28	100	0	0	100	0
29.04.2024 10:33:29	100	0.23549	0.22442	99.975	97.775
29.04.2024 10:33:30	100	0.47042	0.45938	99.949	97.751
29.04.2024 10:33:31	100	0.7048	0.69379	99.924	97.726
29.04.2024 10:33:32	100	0.93862	0.92764	99.899	97.701
29.04.2024 10:33:33	100	1.1719	1.1609	99.874	97.677
29.04.2024 10:33:34	100	1.4046	1.3937	99.849	97.652
29.04.2024 10:33:35	99.999	1.6368	1.6259	99.824	97.628
29.04.2024 10:33:36	99.999	1.8684	1.8576	99.799	97.604
29.04.2024 10:33:37	99.999	2.0995	2.0887	99.775	97.58
29.04.2024 10:33:38	99.999	2.3301	2.3192	99.75	97.555
29.04.2024 10:33:39	99.999	2.5601	2.5493	99.725	97.531
29.04.2024 10:33:40	99.999	2.7895	2.7787	99.701	97.507
29.04.2024 10:33:41	99.999	3.0184	3.0077	99.676	97.483
29.04.2024 10:33:42	99.999	3.2468	3.2361	99.652	97.459
29.04.2024 10:33:43	99.999	3.4746	3.4639	99.627	97.435

Нажатие на кнопку Excel экспортирует содержимое таблицы в Excel, а кнопка График позволяет просматривать таблицы распада нуклидов в виде графиков.

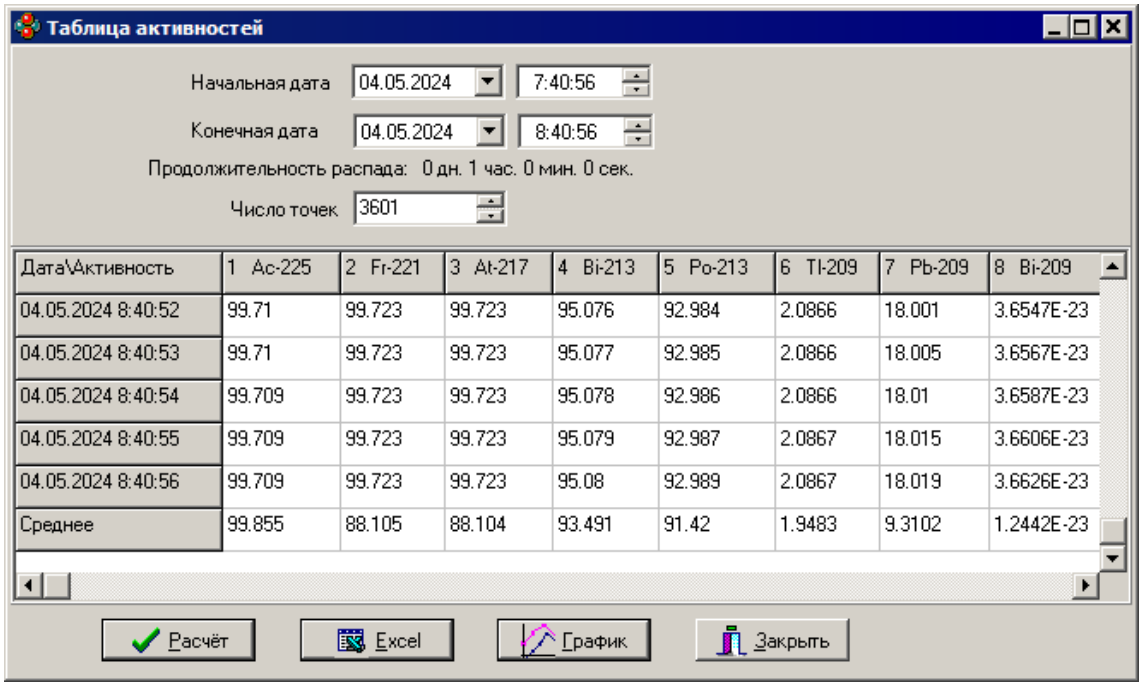
Оператор может изменить даты начала и окончания распада и пересчитать результаты, щелкнув по клавише Расчёт.

Форма для расчёта активностей всех нуклидов схемы распада выглядит следующим образом:



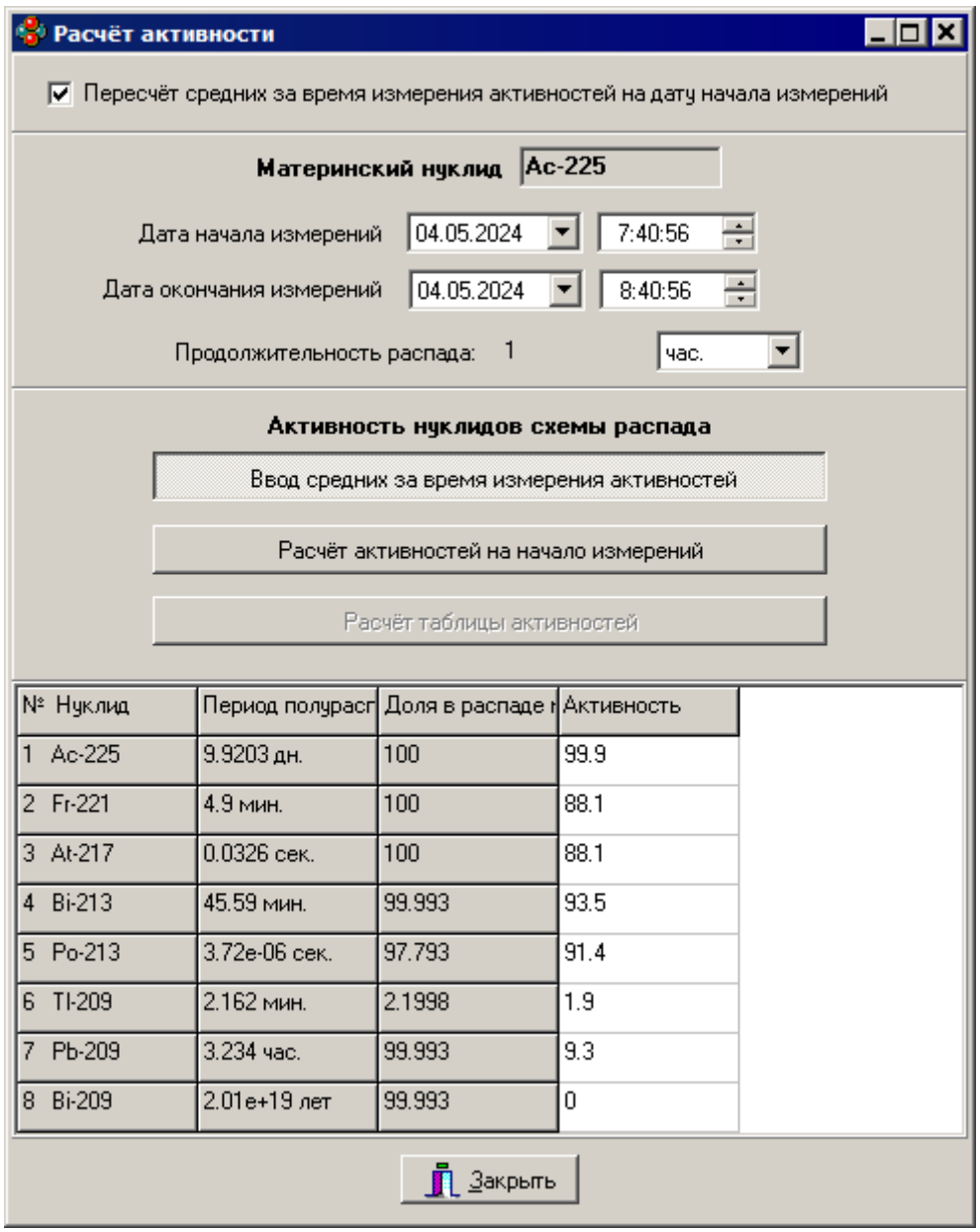
Форма отличается заголовком панели кнопок управления – вместо заголовка «**Активность нуклидов выделенной ветви схемы распада**» выводится заголовок «**Активность нуклидов схемы распада**» и, соответственно, таблица нуклидов будет содержать все нуклиды схемы распада, а не только выделенной ветви. Кроме этого процедура позволяет рассчитать активность нуклидов схемы распада на начало измерений по средним за время измерения значениям активностей. Для этого требуется установить «галочку» в пункте «**Пересчёт средних за время измерения активностей на дату начала измерений**», ввести, рассчитанные программой обработки спектров, усреднённые за время измерения активности и нажать на кнопку «**Расчёт активностей на начало измерений**». Такой расчёт с учётом процессов накопления и распада нуклидов в цепочке за время измерения в общем случае невозможен непосредственно в процедуре обработки спектров, поскольку обработка, например, спектра гамма излучения не позволяет оценить активность нуклидов цепочки не имеющих гамма линий, а для корректного расчёта требуется знание активностей всех нуклидов схемы распада.

Процедура расчёта таблицы активностей рассчитывает и средние значения активностей за время распада. При наших начальных условиях (100 Бк Ac-225 и Bi-213) средние за час распада (распад во время измерения пробы) будут иметь следующие значения:



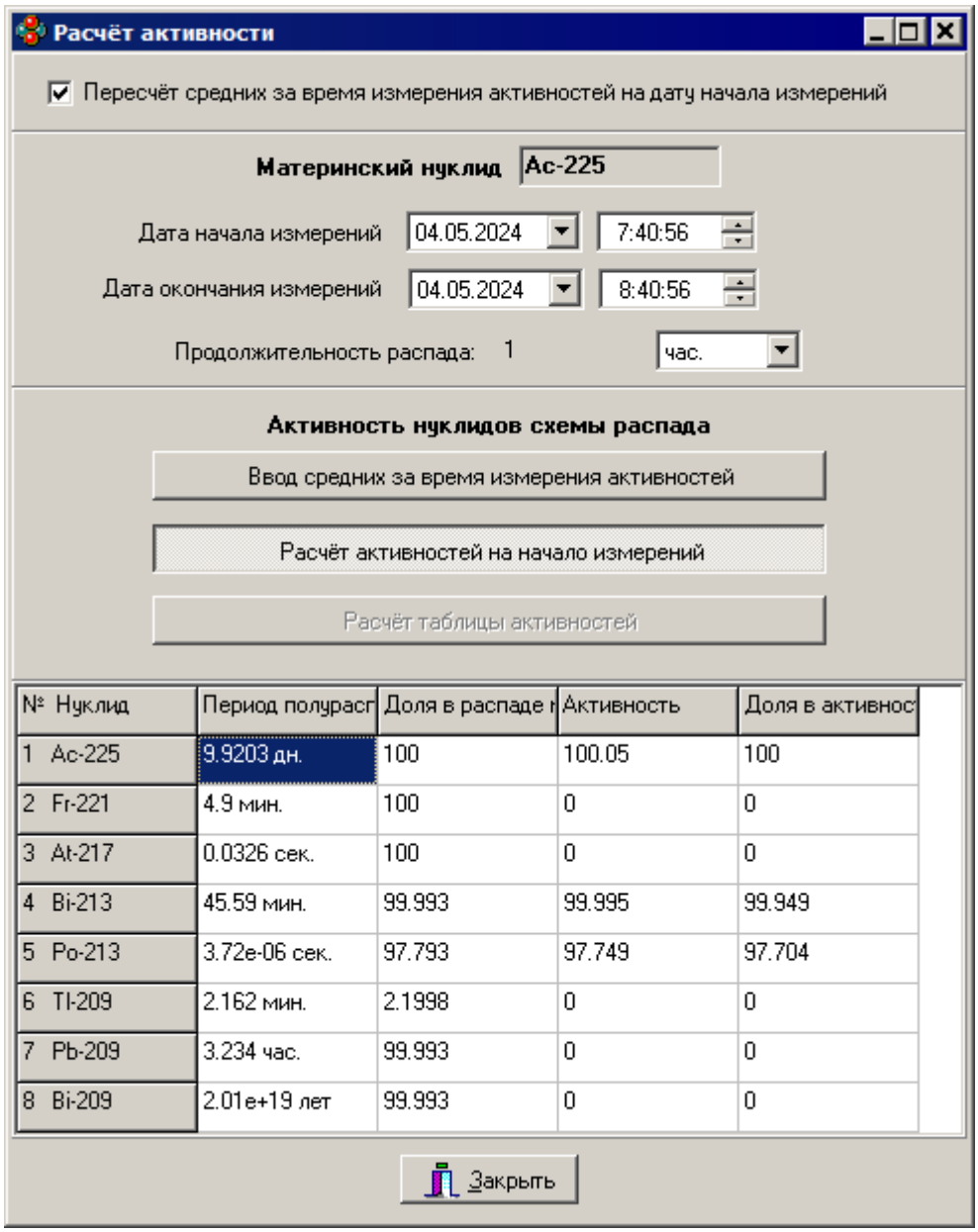
Дата\Активность	1 Ac-225	2 Fr-221	3 At-217	4 Bi-213	5 Po-213	6 Tl-209	7 Pb-209	8 Bi-209
04.05.2024 8:40:52	99.71	99.723	99.723	95.076	92.984	2.0866	18.001	3.6547E-23
04.05.2024 8:40:53	99.71	99.723	99.723	95.077	92.985	2.0866	18.005	3.6567E-23
04.05.2024 8:40:54	99.709	99.723	99.723	95.078	92.986	2.0866	18.01	3.6587E-23
04.05.2024 8:40:55	99.709	99.723	99.723	95.079	92.987	2.0867	18.015	3.6606E-23
04.05.2024 8:40:56	99.709	99.723	99.723	95.08	92.989	2.0867	18.019	3.6626E-23
Среднее	99.855	88.105	88.104	93.491	91.42	1.9483	9.3102	1.2442E-23

Введём эти значения в таблицу расчёта активностей, установим галочку «**Пересчёт средних за время измерения активностей на дату начала измерений**»:



И рассчитаем активности на начало измерений, щёлкнув по клавише Расчёт активностей на начало измерений.

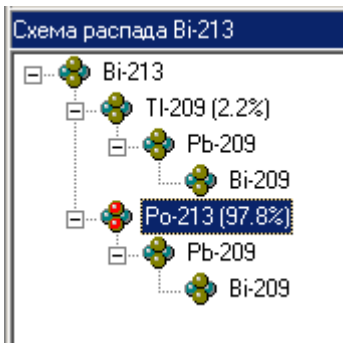
Получим результат:



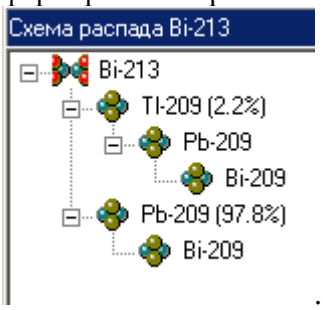
№	Нуклид	Период полураспа	Доля в распаде	Активность	Доля в активнос
1	Ac-225	9.9203 дн.	100	100.05	100
2	Fr-221	4.9 мин.	100	0	0
3	At-217	0.0326 сек.	100	0	0
4	Bi-213	45.59 мин.	99.993	99.995	99.949
5	Po-213	3.72e-06 сек.	97.793	97.749	97.704
6	Tl-209	2.162 мин.	2.1998	0	0
7	Pb-209	3.234 час.	99.993	0	0
8	Bi-209	2.01e+19 лет	99.993	0	0

Обусловленность матрицы системы интегральных уравнений, которые необходимо решить при расчёте может быть невысока и результаты расчётов могут иметь существенные неопределённости. В приведённом примере средние активности рассчитаны из значения активности на начальную дату Ac-225 и активности Bi-213 равной 100 Бк при нулевых активностях других дочерних. Обратный расчёт дал начальное значение активности Po-213 равное 97.7 Бк, что, конечно, существенно отличается от начального нуля, но период полураспада Po-213 равен всего лишь 3.72 микросекунды, поэтому внесённых погрешностей средних за время измерения значений вполне достаточно для того, чтобы получить такие начальные значения. Начальные условия были заданы некорректно для демонстрационных целей (в реальности Po-213 всегда в равновесии с Bi-213). Но на практике надо учитывать, что в решении обратной задачи будут сказываться неопределённости результатов измерений.

Поправим исходные данные так, чтобы задача была корректной – прежде всего, сформируем равновесную цепочку B-213-Po-213.

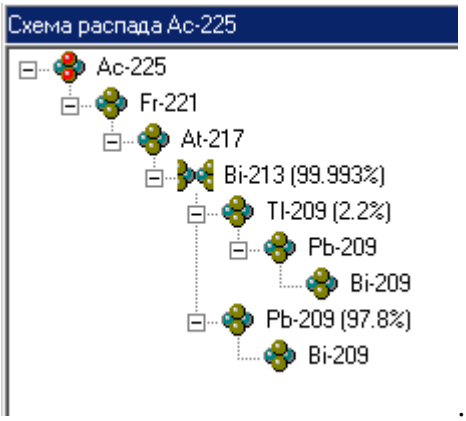


В данном случае необходимо сформировать равновесную цепочку из одной ветви распада Bi-213. Поэтому выделим Po-213 и запустим процедуру формирования равновесной цепочки. Получим следующую схему распада Bi-213



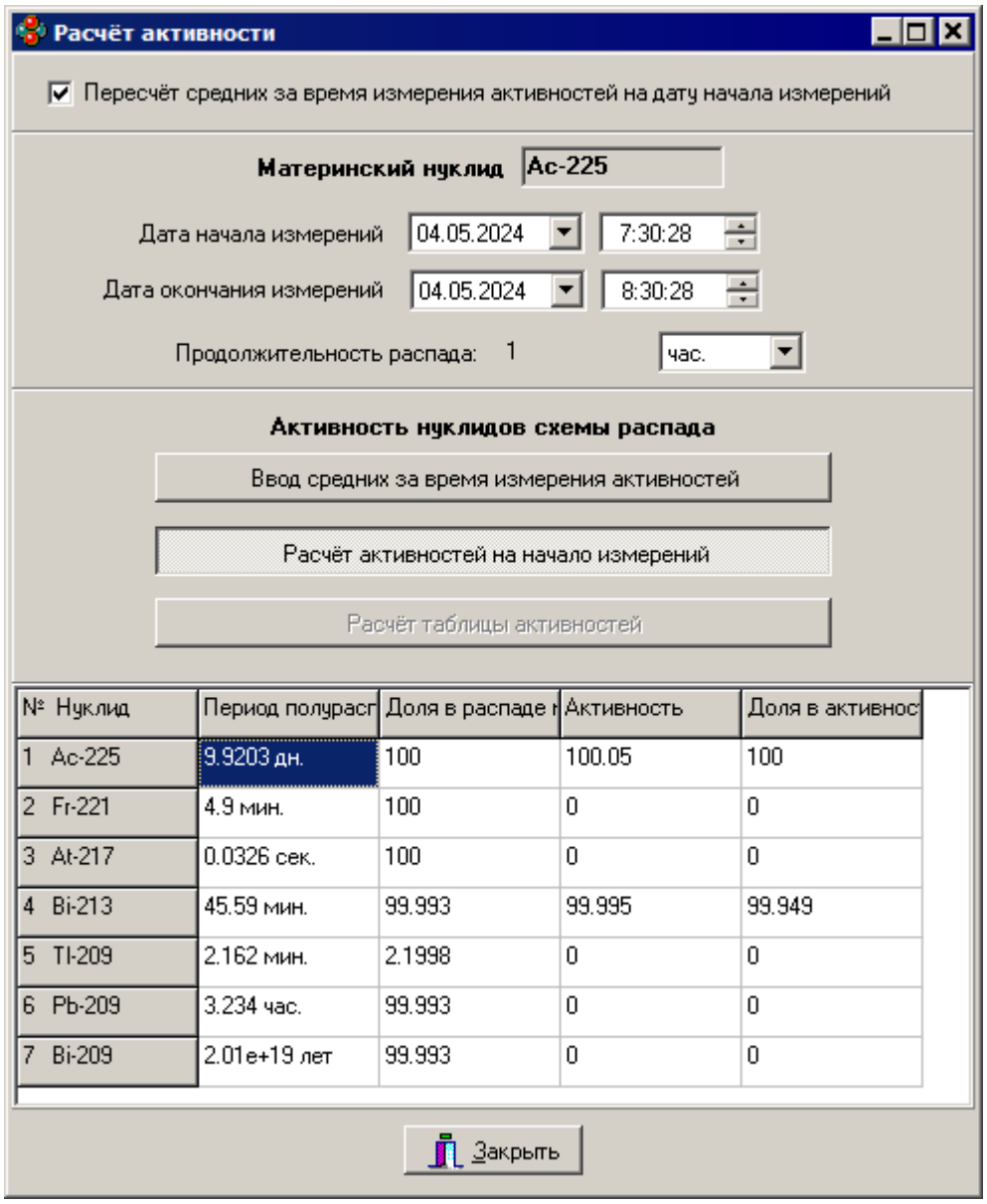
.

И соответствующую схему распада Ac-225



.

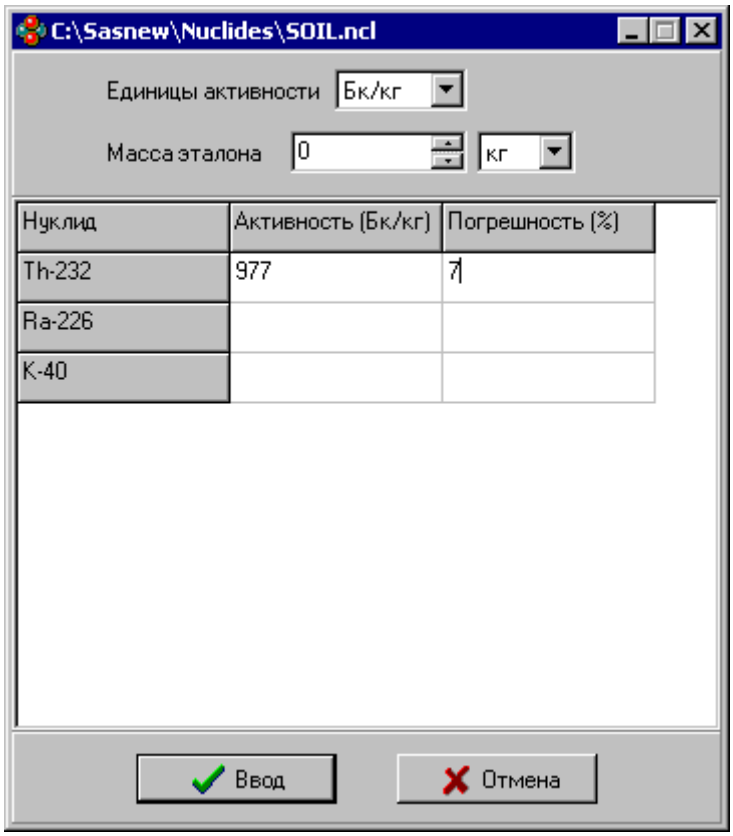
Повторив расчёт активностей на начало измерений по средним за время измерения активностям, получим вполне корректный результат активностей на начало измерения:



№	Нуклид	Период полурасп	Доля в распаде	Активность	Доля в активнос
1	Ac-225	9.9203 дн.	100	100.05	100
2	Fr-221	4.9 мин.	100	0	0
3	At-217	0.0326 сек.	100	0	0
4	Bi-213	45.59 мин.	99.993	99.995	99.949
5	Tl-209	2.162 мин.	2.1998	0	0
6	Pb-209	3.234 час.	99.993	0	0
7	Bi-209	2.01e+19 лет	99.993	0	0

Аттестат эталона

Пункт меню «***Сервис / Аттестат эталона...***» позволяет оператору дополнить информацию о нуклидах сведениями о активностях и погрешностях активностей выбранных нуклидов таблицы. При этом на экране появится форма для ввода активностей:



Оператор может выбрать **единицы активности** нуклидов в эталоне: «**Бк**» или «**Бк/кг**», задать при необходимости **массу эталона** и ввести данные по активностям и погрешностям активностей выбранных нуклидов. Отсутствие данных в графе “**Активность**” или нулевое значение активности означает отсутствие информации об активности данного нуклида и при необходимости процедура калибровки запросит недостающие сведения у оператора. Количество строк таблицы для ввода активностей зависит от того, были ли предварительно выбраны записи таблицы нуклидов или нет. При предварительном выборе строк таблицы, в таблицу для ввода активностей копируются только выбранные записи, при отсутствии выбранных – все записи таблицы нуклидов. Задание массы эталона позволяет рассчитать активность счётного образца приготовленного из эталона в случае, если активность нуклидов задана в Беккерелях и не весь эталон используется как счётный образец.

Задание в качестве рабочей таблицы при установке геометрии в программном пакете «SPECTRRAD» таблицы нуклидов со сформированным аттестатом эталона значительно упрощает процедуры калибровки, поскольку оператору не придётся вводить при расчёте элементарных спектров или калибровке эффективности регистрации данные об активностях нуклидов присутствующих в эталоне. Дату аттестации эталона (дату на которую приведены значения активностей) в любом случае оператор должен указать при запуске измерении эталона в графе «Дата отбора».

Приложения

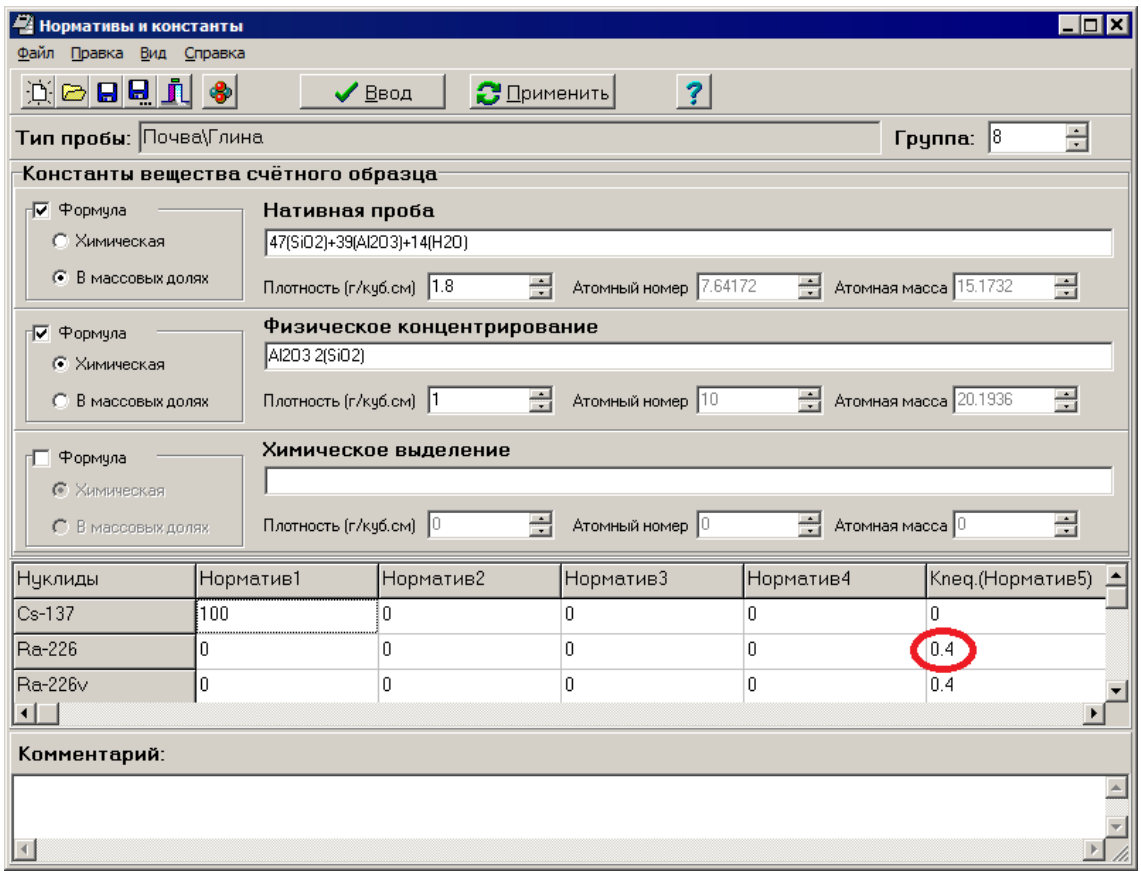
Определение Ra-226 гамма спектрометрическими методами

Ra-226 имеет практически одну значимую гамма линию (186.211 кэВ, 3.64 %), которая почти совпадает с наиболее мощной гамма линией U-235 (185.715 кэВ, 57 %) и рядом слабых линий дочерних U-238: Pa-234 (186.15 кэВ, 1.85 %), (Th-230 (186.53 кэВ, 0.0088 %), Pa-234m (184.7 кэВ, 0.00168 %).

Возможности разделения спектра на U-235, U-238 (или U-nat) и Ra-226 **для сцинтилляционных спектров** практически нет. Поэтому используется определение Ra-226 по дочерним Rn-222 (Pb-214, Bi-214). Но Rn-222 имеет достаточно длительный период полураспада (3.82 дня) и вполне может вылететь из материала пробы и из измерительной ёмкости. Стандартная методика определения Ra-226 по Rn-222 требует 20-ти дневную выдержку счётного образца в герметичном измерительном сосуде. Как показала практика стандартные пластмассовые сосуды Маринелли требуемой герметичностью не обладают. Требуются металлические сосуды с герметичной крышкой. Методика экспрессной оценки содержания Ra-226 предлагает использовать средний коэффициент эманирования Rn-222 равный 0.75±0.25 и соответственно к погрешности измерения добавляется неопределённость коэффициента эманирования (≈30 %).

В последние годы опубликовано немало исследований коэффициентов эманирования радона для различных материалов – например, «Влияние свойств глинистых пород на эманирование радона» Микляев П.С., Петрова Т.Б и др., «Особенности эманации радона из грунтов на территориях, подработанных угольными шахтами (на примере Ленинск-Кузнецкого района)» Т.В. Лещуков, А.В. Ларионов и др. и т.п.

Корректнее использовать не усреднённый коэффициент эманирования радона, а различный для разных материалов. Пакет «СпектрРад» такую возможность предоставляет - в структуре нормативов пакета «СпектрРад» **норматив 5** используется процедурой формирования отчёта как коэффициент неравновесности **Kneq**.



В том случае, если активность нуклида A_{N1} в равновесной цепочке определяется через активность другого нуклида A_{N2}, коэффициент неравновесности N2 относительно N1 определяется как $K_{neq} = \frac{A_{N1} - A_{N2}}{A_{N1}}$. В этом случае активность нуклида N1 рассчитывается по формуле $A_{N1} = A_{N2} / (1 - K_{ntq})$ (1). Коэффициент неравновесности определяется процессами, не учитываемыми процедурами расчёта отклика спектрометра на излучение равновесной цепочки нуклидов: эманация газообразных продуктов распада из пробы, различная растворяемость нуклидов в растворителях и т.п. При определении активности Ra-226 экспресс методом (без 20 дневной выдержки в герметичном сосуде) по излучению дочерних Rn-222 коэффициент неравновесности будет в основном определяться коэффициентом эманации Rn-222 из счётного образца. Расчёт по формуле (1) производится только в том случае, если в параметрах формирования отчёта установлен флажок «**Учитывать коэффициент неравновесности**».

Шаблон декомпозиции: ЕРН+Cs-137

Компоненты | Параметры 1 | Параметры 2 | Априорные данные | Параметры окон | Отчет | Калькулятор

Параметры отчёта | Содержание

- [x] Форматирование текста табуляцией
- [x] Нормировать на величину пробы
- [x] Учитывать распад нуклидов
- [x] Учитывать коэффициент неравновесности
- [ ] Пересчитать результаты на дату отбора пробы
  - [ ] Использовать при пересчёте период полураспада материнского нуклида
- [x] Пересчитать результаты на коэффициент концентрирования
- [x] Рассчитать эфф. активность по сумме нормированных активностей нуклидов
- [ ] Рассчитать эфф. активность по мощности излучения
- [x] Заменять отрицательные значения активностей нулевыми
- [ ] Приводить верхнюю границу max(МДА или Акт+Погр) для активностей меньше МДА

В качестве погрешности величин приводить
- (•) Полную погрешность
- ( ) Случайную составляющую погрешности

- [x] Округлить результаты при выводе в отчёт до 100 % от погрешности
  - [ ] Округлять переменные калькулятора

Точность представления результатов Авт. цифр

Единица измерения активности Бк Единица измерения мощности (кэВ/с)

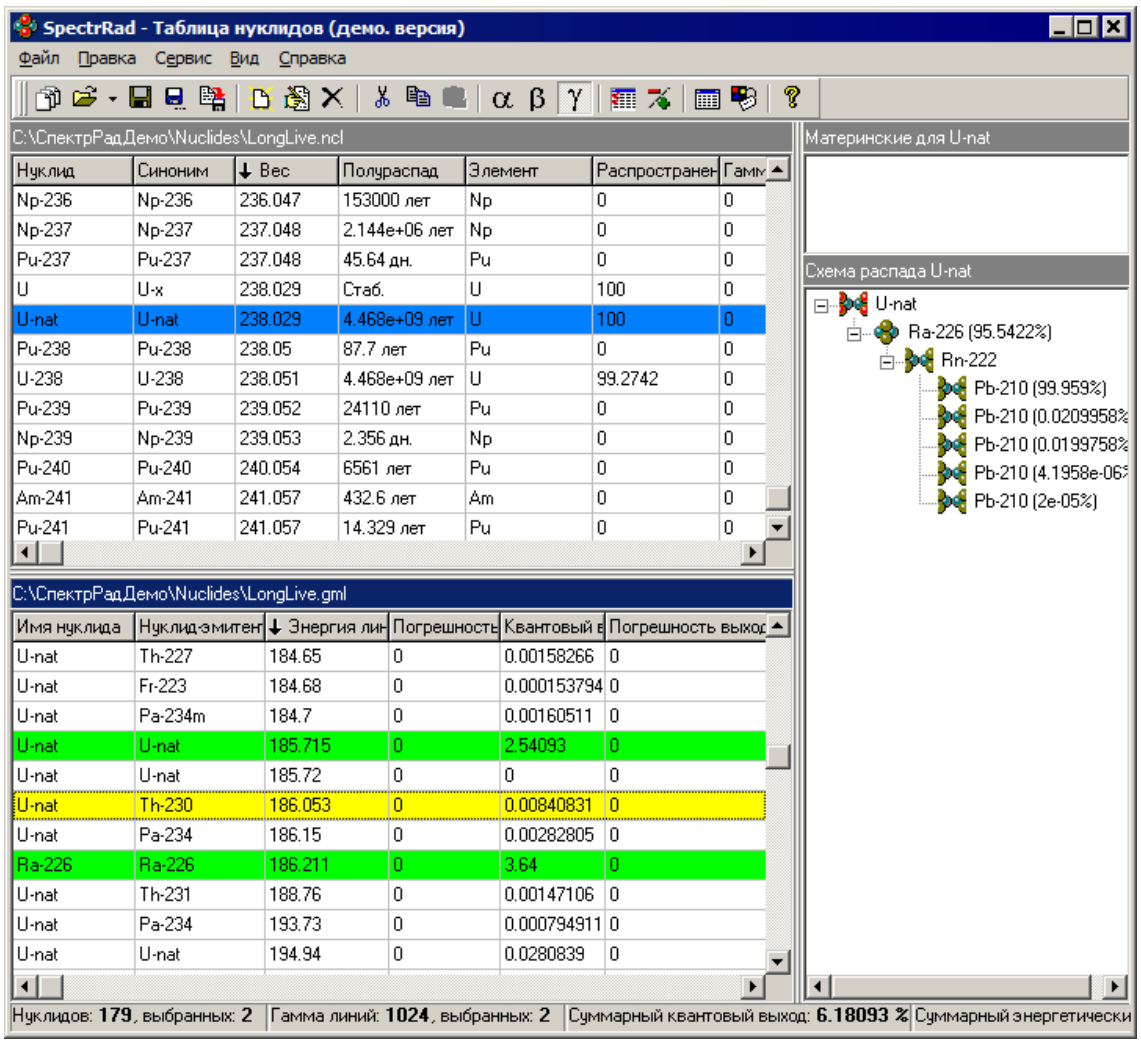
Шаблон отчета
- [ ] Включить DOCTemplate\Почва.doc Обзор...

- [x] Вывести отчёт на экран
- [x] Сохранить отчёт в архиве

Сохранить | Отмена | Справка

Для гамма спектров, **измеренных на спектрометрах с охлаждаемыми детекторами из особо чистого германия**, возможно использование собственной линии Ra-226.

U-238 и U-235 в уране находятся в определённом соотношении и поэтому, если уран не обогащённый, разумнее не разделять ураны в библиотеке, а использовать естественную смесь уранов – U-nat:



Нуклид	Синоним	Вес	Полураспад	Элемент	Распространен	Гамм
Np-236	Np-236	236.047	153000 лет	Np	0	0
Np-237	Np-237	237.048	2.144e+06 лет	Np	0	0
Pu-237	Pu-237	237.048	45.64 дн.	Pu	0	0
U	U-x	238.029	Стаб.	U	100	0
U-nat	U-nat	238.029	4.468e+09 лет	U	100	0
Pu-238	Pu-238	238.05	87.7 лет	Pu	0	0
U-238	U-238	238.051	4.468e+09 лет	U	99.2742	0
Pu-239	Pu-239	239.052	24110 лет	Pu	0	0
Np-239	Np-239	239.053	2.356 дн.	Np	0	0
Pu-240	Pu-240	240.054	6561 лет	Pu	0	0
Am-241	Am-241	241.057	432.6 лет	Am	0	0
Pu-241	Pu-241	241.057	14.329 лет	Pu	0	0

Имя нуклида	Нуклид-эмитент	Энергия лин	Погрешность	Квантовый в	Погрешность выход
U-nat	Th-227	184.65	0	0.00158266	0
U-nat	Fr-223	184.68	0	0.000153794	0
U-nat	Pa-234m	184.7	0	0.00160511	0
U-nat	U-nat	185.715	0	2.54093	0
U-nat	U-nat	185.72	0	0	0
U-nat	Th-230	186.053	0	0.00840831	0
U-nat	Pa-234	186.15	0	0.00282805	0
Ra-226	Ra-226	186.211	0	3.64	0
U-nat	Th-231	188.76	0	0.00147106	0
U-nat	Pa-234	193.73	0	0.000794911	0
U-nat	U-nat	194.94	0	0.0280839	0

Поскольку у Ra-226 химические свойства отличаются от химических свойств урана (в грунтах он может вымываться), радий в цепочке распада выделен как отдельный нуклид.

Если мы уверены, что Ra-226 находится в равновесии с U-nat, мы можем включить Ra-226 в U-nat:

SpectrRad - Таблица нуклидов (демо. версия)

Файл Правка Сервис Вид Справка

C:\СпектрРадДемо\Nuclides\U-nat_Eq_Ra-226.ncl

Нуклид	Синоним	Вес	Полураспад	Элемент	Распространен	Гамм
U-233	U-233	233.04	159200 лет	U	0	0
Pa-233	Pa-233	233.04	26.975 дн.	Pa	0	0
U-234	U-234	234.041	245500 лет	U	0.0054	0
U-235	U-235	235.044	7.038e+08 лет	U	0.7204	0
U-236	U-236	236.046	2.342e+07 лет	U	0	0
Np-236	Np-236	236.047	153000 лет	Np	0	0
Np-237	Np-237	237.048	2.144e+06 лет	Np	0	0
Pu-237	Pu-237	237.048	45.64 дн.	Pu	0	0
U	U-x	238.029	Стаб.	U	100	0
U-nat	U-nat	238.029	4.468e+09 лет	U	100	0
Pu-238	Pu-238	238.05	87.7 лет	Pu	0	0
U-238	U-238	238.051	4.468e+09 лет	U	99.2742	0

C:\СпектрРадДемо\Nuclides\U-nat_Eq_Ra-226.gml

Имя нуклида	Нуклид-эмитент	Энергия лин	Погрешность	Квантовый в	Погрешность выход
U-nat	U-nat	182.62	0	0.0173853	0
U-nat	Th-231	183.5	0	0.00147106	0
U-nat	Th-227	184.65	0	0.00158266	0
U-nat	Fr-223	184.68	0	0.000153794	0
U-nat	Pa-234m	184.7	0	0.00160511	0
U-nat	U-nat	185.715	0	2.54093	0
U-nat	U-nat	185.72	0	0	0
U-nat	Th-230	186.053	0	0.00840831	0
U-nat	Pa-234	186.15	0	0.00282805	0
U-nat	Ra-226	186.211	0	3.47798	0
U-nat	Th-231	188.76	0	0.00147106	0

Материнские для U-nat

Схема распада U-nat

- U-nat
  - Rn-222 (95.5422%)
    - Pb-210 (99.959%)
    - Pb-210 (0.0209958%)
    - Pb-210 (0.0199758%)
    - Pb-210 (4.1958e-06%)
    - Pb-210 (2e-05%)

Нуклидов: **179** | Гамма линий: **1024**, выбранных: **2** | Суммарный квантовый выход: **6.01891 %** | Суммарный энергетический выход: **11.1**

Это повышает обусловленность задачи и, соответственно, точность определения Ra-226.

Пример программы расчета параметра соответствия

Программа для калькулятора рассчитывающая параметр соответствия количества Cs-137 и Sr-90 нормам СанПиН может выглядеть следующим образом:

Программа вычислений

```
//Секция инициализации
p1; // КУ по Sr-90
p2; // КУ по Cs-137
p;a;e;a1;a2;e1;e2;
//Секция вычислений
{p1=Norm1(Sr-90);   // Считать норматив.
 if(p1==0)           // Если норматив не определен,
 {
  p1=100;            // определить значение по умолчанию,
  p1=input("Контр. уровень для Sr-90 (Бк/кг)");// запросить у
оператора
 }
 p2= Norm2(Cs-137);
 if(p2==0)
 {
   p2=100;
   p2=input("Контр. уровень для Cs-137 (Бк/кг)");
 }
 a1=Act(Sr-90)/p1;
 a2=Act(Cs-137)/p2;
 e1=Err(Sr-90)/p1;
 e1=e1*e1;
 e2=Err(Cs-137)/p2;
 e2=e2*e2;
 Calc1=round(100*(a1+a2)/SampleValue)/100;
 ErCalc1=round(100*sqrt(e1+e2)/SampleValue)/100;
 Calc2=Calc1+ErCalc1;
 if(Calc2 > 1)          // Если не удовлетворяет требованиям
СанПиН,
   Report("Не проходит СанПиН"); // использовать соотв. шаблон
отчета
}
```

Формат вывода результатов в отчете

```
_____________________________________________________
  Параметр соответствия (В=Акт./Контр.Уровень)
КУ для Sr-90 - %s Бк/кг, КУ для Cs-137 - %s Бк/кг
В   =  %s(Акт.)  +  %s(Погр.)  =  %s
```

Список переменных для печати в отчете

```
p1,p2,Calc1, ErCalc1, Calc2
```

Результаты вычислений программа сохраняет в колонках Calc1 - Calc2 архива результатов измерений. Соответствующим образом рекомендуется переименовать данные колонки архива:

Calc1 - Параметр соответствия.
ErCalc1 - Погрешность параметра соответствия.
Calc2 - Суммарный параметр соответствия.

Пример программы расчета объемной активности радона

Программа для калькулятора рассчитывающая объемную и объемную эквивалентную активность радона по результатам измерения активности радона (Rn-222) в угольных фильтрах пассивным методом по методике предложенной Павловым И.В. (НТЦ «Нитон») может выглядеть следующим образом:

Программа вычислений

```
//Секция инициализации
a;c;n=3;dexpos;teks;tcool=1;m1=20;m2=21;m;e;ce;ee;
//Секция вычислений
{
 n=input("Количество адсорберов");
 dexpos = Dsample;                // Значение по умолчанию
 dexpos = inputdate("Дата начала экспозиции");
 m1=input("Масса адсорберов до экспозиции (г)");
 m2=input("Масса адсорберов после экспозиции (г)");
 teks = (Dsample-dexpos)/3600.;
 tcool = (Dact-Dsample)/3600.;
 m=(m2-m1)/n;
 c=1000*Act(Rn-222)*exp(0.00755*tcool);
 e=1000.*Err(Rn-222)*exp(0.00755*tcool);
 m1=1.58+0.307*ln(teks)-0.923*sqrt(m);
 m2=2.04*sqrt(m)*exp(-0.0438*teks);
 Calc3=round(c/(n*exp(m1-m2))+0.5);
 ErCalc3=round(e/(n*exp(m1-m2))+0.5);
 Calc8=0.4*Calc3;
 ErCalc8=0.4*ErCalc3;}
```

Формат вывода результатов в отчете

```
------------------------------------------------------------
 Объёмная активность радона = %s  +/-  %s (Бк./куб.м)
 Экв.равн.об. активность радона = %s  +/-  %s (Бк./куб.м)
------------------------------------------------------------
```

Список переменных для печати в отчете

```
Calc3,ErCalc3,Calc8,ErCalc8
```

Результаты вычислений программа сохраняет в колонках Calc3 - ErCalc8 архива результатов измерений. Соответствующим образом рекомендуется переименовать данные колонки архива:

Calc3 - объёмная активность радона.
ErCalc3 - погрешность объёмной активности.
Calc8 - эквивалентная равновесная объёмная активность радона.
ErCalc8 - погрешность эквивалентной равновесной объёмной активности.

Пример шаблона отчёта

МИНИСТЕРСТВО ЗДРАВООХРАНЕНИЯ РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Центр государственного санитарно- эпидемиологического надзора в г. Москве

Испытательный центр (ГСЭН.RU.ЦОА.021)
Государственный реестр N РОСС RU.0001.510895

129626, г. Москва, Графский пер., д.4/9 тел. (095)-287-78-34, факс (095)-287-47-20

ОТДЕЛ ОРГАНИЗАЦИИ НАДЗОРА ЗА ИСТОЧНИКАМИ ИОНИЗИРУЮЩИХ ИЗЛУЧЕНИЙ

ПРОТОКОЛ ИСПЫТАНИЙ ПРОДУКЦИИ № {Sample} от {Date}

{Program}
{lbAnalyser}: {Analyser}
{lbGeometry}: {Geometry}
{lbInfo}: {Info}
{lbAddNote}: {AddNote}
{lbSampleType}: {SampleType}
{lbSampleNote}: {SampleNote}
{lbSampleArea}: {SampleArea}
{lbComment}: {Comment}
{lbSize}: {Size}
{lbMeasTime}: {MeasTime}

Нуклид	Активность ({AUnit})	Погрешность ({AUnit})	(%)
<<{Nucl}	{Activ}	{AbsErr}	{RelErr}

>>{Calculator}

{Warnings}
{ActualDate}
{NumberOfSamples}

Исполнитель:

Заключение санитарного врача:

Исследованные образцы пищевой продукции по содержанию радионуклидов цезия-137 и стронция-90 соответствуют действующим СанПин 2.3.2.560-96.

Заведующий отделом ОНзаИИИ

Пример шаблона отчёта для выборки

Протокол лабораторных испытаний от {Date}
испытания образцов почвы на содержание радионуклидов

1. Заказчик, адрес: {Declarant}
2. Адрес объекта: {SampleArea}
3. Объект испытаний: {SampleNote}
4. Количество образцов: {NumberOfSamples}
5. Дата отбора: {SampleDate}
6. Цель испытания: определение удельной активности естественных и техногенных радионуклидов
7. Нормативно-методическая документация, использованная при проведении измерений: Методические рекомендации по выполнению измерений на сцинтилляционном спектрометре «Активность радионуклидов в объемных образцах» Москва, ЦМИИ НПО «ВНИИФТРИ», 1993
8. Измерительная аппаратура: {Analyser}
9. Поверка: {Info}

Результаты испытания

№№	**Код пробы**	**Дата и время измерения**	**Количество пробы**	**Активность радионуклидов {AUnit}**		**Эфф. активность {AUnit}**
<<{SN}	{SampleCode}	**Дата отбора:** {SampleDate} **Дата измерения:** {MeasDate} **Время измерения:** {MeasTime}	**Исх. материала:** {RawValue} **Концентрата:** {ConcMass} **Сч. Образца:** {SampleMass}	**Cs-137**	{Act[Cs-137]}±{Err[Cs-137]}	{AEff}±{AEff Err}
				K-40	{Act[K-40]}±{Err[K-40]}	
				Ra-226	{Act[Ra-226]}±{Err[Ra-226]}	
				Th-232	{Act[Th-232]}±{Err[Th-232]}	

>>

Результат определения эффективной удельной активности ЕРН рассчитан в соответствии с ГОСТ 30108-94 (п.4.2.5.3. – 4.2.5.4.)

Пример шаблона статистического отчёта

Федеральное государственное учреждение здравоохранения
«Центр гигиены и эпидемиологии в Московской области»
Аккредитованный испытательный лабораторный центр (АИЛЦ)
Аттестат аккредитации № ГСЭН.RU.ЦОА/ТОА 023.17от 25.10.2006г. Государственный реестр № РОСС RU. 0001.511448 от 25.10 2006г.

141100, Московская область, г. Щелково, ул.Советская, д. 6, тел/факс 526-99-81, E-mail: ***fguz@ shelkovo. comcor.ru***

ПРОТОКОЛ ИСПЫТАНИЙ ГРУНТА № от {Date}

Спектрометр: {Analyser}
Заявитель: {Declarant}
Место отбора: {SampleArea}
Дата измерения: {MeasDate}

РЕЗУЛЬТАТЫ ИСПЫТАНИЙ

Проба	**Эфф. активность {AUnit}**	**Активность радионуклидов, {AUnit}**			
		Cs137	**K40**	**Ra226**	**Th232**
<<{Sample}	{Aeff&Err}	{Act&Err[Cs-137]}	{Act&Err[K-40]}	{Act&Err[Ra-226]}	{Act&Err[Th-232]}

>>

Число записей	{N[Aeff]}	{N[Cs-137]}	{N[K-40]}	{N[Ra-226]}	{N[Th-232]}
Минимальное значение	{XMin[Aeff]} ±{GMin[Aeff]}	{XMin[Cs-137]} ±{GMin[Cs-137]}	{XMin[K-40]} ±{GMin[K-40]}	{XMin[Ra-226]} ±{GMin[Ra-226]}	{XMin[Th-232]} ±{GMin[Th-232]}
Максимальное значение	{XMax[Aeff]} ±{GMax [Aeff]}	{XMax[Cs-137]} ±{GMax [Cs-137]}	{XMax [K-40]} ±{GMax [K-40]}	{XMax [Ra-226]} ±{GMax [Ra-226]}	{XMax [Th-232]} ±{GMax [Th-232]}
Среднее	{X0[Aeff]} ±{G0[Aeff]}	{X0[Cs-137]} ±{G0[Cs-137]}	{X0[K-40]} ±{G0[K-40]}	{X0[Ra-226]} ±{G0[Ra-226]}	{X0[Th-232]} ±{G0[Th-232]}
Средне-квадратичное отклонение	{Sx[Aeff]}	{Sx[Cs-137]}	{Sx[K-40]}	{Sx[Ra-226]}	{Sx[Th-232]}
Стат. неопре-делённость	{USx[Aeff]}	{USx[Cs-137]}	{USx[K-40]}	{USx[Ra-226]}	{USx[Th-232]}
Расш. неопре-делённость	{UTx[Aeff]}	{UTx[Cs-137]}	{UTx[K-40]}	{UTx[Ra-226]}	{UTx[Th-232]}

Подпись проводившего измерения:

Пример шаблона контрольной карты

ГРАФИК ИЗМЕРЕНИЙ АКТИВНОСТИ КОНТРОЛЬНОГО ИСТОЧНИКА

{Programm}

{lbSampleCode}:**{SampleCode}**
{lbSample}:**{Sample}**
{lbSampleNote}: **{SampleNote}**
{lbSampleType}: **{SampleType}**
{lbComment}: **{Comment}**
{lbSampleDate}: **{SampleDate}**

Средство измерения	
Наименование средства измерения	Свидетельство о поверке
{Analyser}	{Info}

{Image}
Дополнительная погрешность: {AddError} %
Минимум: {Ymin}±{YminErr} {Yunit}
Максимум: {Ymax}±{YmaxErr} {Yunit}
Среднее: {Ymid}±{YErrmid} {Yunit}
Смещение: {Bias} {Yunit} ({BiasPercent} %)
Средне квадр. отклонение: {StDvn} {Yunit}
Стат. неопределённость: {ExStDvn} {Yunit}
Полная неопределённость: {ExTotDvn}{Yunit}

Контрольные уровни:
Номинал: {Level1} {Yunit}
Верхняя граница: {Level2} {Yunit}
Нижняя граница: {Level3} {Yunit}

{EnergyPar}

{Warnings}

Приведённые на графике активности пересчитаны на дату аттестации контрольного источника.

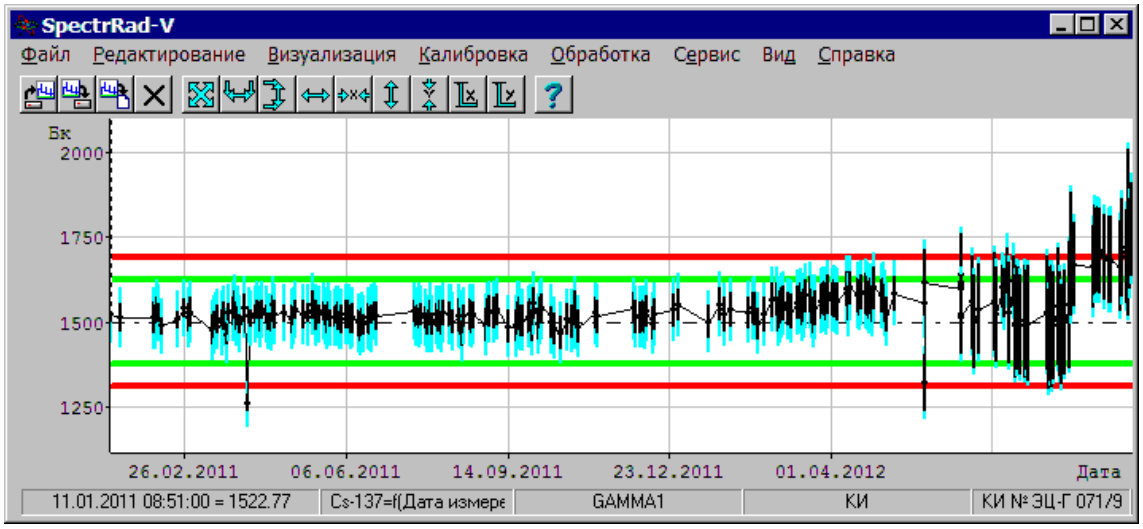
Ответственный
за оформление протокола лаборант {Operator} _____
должность Ф.И.О. подпись

Образец контрольной карты

График измерений контрольного источника

Код пробы:**КИ № ЭЦ-Г 071/98**
Наименование пробы:**Акт Cs-137 = 1500 Бк.,Акт K-40 = 16500 Бк.**
Описание пробы: **Контрольный источник Cs-137+K-40 № ЭЦ-Г 071/98 Акт Cs-137 = 1500 Бк. Акт K-40 = 16500 Бк.**
Тип пробы: **Контрольный источник**
Примечание: **Акт(Cs-137)=f(Дата измерения)**
Окончание отбора: **11.01.2011 8:51:00**

Средство измерения	
Наименование средства измерения	Свидетельство о поверке
0781-Ар-Б-Г	3004845



Минимум:	1261±66.2 Бк
Максимум:	1770±160 Бк
Среднее:	1540±105 Бк
Смещение:	36.853 Бк (2.45687 %)
Средне квадр. отклонение:	59 Бк
Стат. неопределённость:	118 Бк
Полная неопределённость:	141Бк
Запас стат. точности:	-59 %

Контрольные уровни:

Номинал:	1500 Бк
Верхняя граница уровня предупреждений:	1625 (+125) Бк
Нижняя граница уровня предупреждений:	1375 (-125) Бк
Верхняя граница уровня действий:	1687.5 (+187.5) Бк
Нижняя граница уровня действий:	1312.5 (-187.5) Бк

Временной диапазон: 11.01.2011 - 04.10.2012 (5.46043e+07 с)

Ответственный за оформление протокола лаборант Васильева В.Ю. _____
должность Ф.И.О. подпись

Математика

Энергетическая калибровка

Энергетическая калибровка спектрометра (или выбранного спектра) определяет связь между каналами спектрометра (спектра) и энергией регистрируемого излучения. Энергетическая калибровка разделяется на два типа: **начальная** и **коррекция дрейфа**.

Для начальной калибровки используется четыре варианта функции связи $E = \varphi(Pn(z))$:

Шкала	**Вид функции**
Линейная	$\mathrm{E = Pn(z)}$
Экспонента	$\mathrm{E = exp(Pn(z))}$
Логарифм	$\mathrm{E = log(Pn(z))}$
Кв. корень	$\mathrm{E = \sqrt{Pn(z)}}$

По умолчанию используется линейная шкала $\mathrm{E = Pn(z)}$ **.**

$\mathrm{Pn(z)}$ - полином рангом не выше 3-его, который на крайних калибровочных точках заменяется касательной.

$\mathrm{z < z_0}$ $\quad \mathrm{Pn = P'n(z_o) \cdot z + Pn(z_o) - P'n(z_o) \cdot z_o}$

$\mathrm{z < z_0} < z_n$ $\quad \mathrm{Pn = Pn(z)}$

$\mathrm{z > z_n}$ $\quad \mathrm{Pn = P'n(z_n) \cdot z + Pn(z_n) - P'n(z_n) \cdot z_n}$

Здесь: E - энергия; $\mathrm{z = x - (x_0 + x_n)/2}$; x_0**,** ($\mathrm{z_0 = (x_0 - x_n)/2}$) - первая калибровочная точка; x_n**,** ($\mathrm{z_n = (x_n - x_0)/2}$) - последняя калибровочная точка; $\mathrm{Pn(z)}$ - полином; $\mathrm{P'n(z)}$ - производная по z от полинома: $\mathrm{P'n(z_0)}$ - производная в точке z_0, $\mathrm{P'n(z_n)}$ - производная в точке z_n.

Коэффициенты полинома определяются методом наименьших квадратов

$$k_{Pn} = (A^T \cdot W^T \cdot W \cdot A)^{-1} \cdot A^T \cdot W^T \cdot W \cdot e$$

Здесь:

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^{n} P^i(z_k) \cdot P^j(z_k);$$

n - число точек для калибровки;

$P^j(z_k)$ - ортогональный полином Чебышева ранга ***j*** в точке z_k

$W = K_z^{-1/2}$ - матрица весов;

$K_z = D_z \cdot I$ (I – единичная матрица, D_z – вектор дисперсий);

K_z - ковариационная матрица положений помеченных пиков или каналов. Энергии помеченных пиков или каналов считаются известными, а вся неопределённость калибровки связана с неопределённостью положений пиков, используемых для калибровки линейчатых спектров или каналов выбранных оператором. Если для калибровки используются каналы выбранные оператором, неопределённость положения принимается равной половине канала.

e - вектор энергий используемых для калибровки пиков или каналов.

В случае если погрешность определения коэффициента при старшей степени полинома превышает его величину, ранг полинома понижается и рассчитывается новый полином энергетической калибровки.

Дрейф энергетической калибровки в процессе эксплуатации спектрометра предполагается нелинейным: $\mathrm{x = a \cdot ch + b + c \cdot ch^2}$ (ch - канал спектрометра, $\mathrm{a - 1}$ -

дрейф коэффициента усиления, b - дрейф нуля шкалы, c – коэффициент нелинейных искажений). При начальной калибровке $x = ch$.

Калибровка ширины пиков

В качестве ширины пиков используется ширина пиков на половине высоты. Калибровка ширины пиков определяет связь между шириной и энергией пиков.

Для калибровки ширины пиков используется четыре варианта функции связи $FWHM = \varphi(Pn(z))$:

Шкала	**Вид функции**
Линейная	$FWHM = \mathrm{Pn(z)}$
Экспонента	$FWHM = \exp(\mathrm{Pn(z)})$
Логарифм	$FWHM = \log(\mathrm{Pn(z)})$
Кв. корень	$FWHM = \sqrt{\mathrm{Pn(z)}}$

По умолчанию используется $FWHM = \sqrt{\mathrm{Pn(z)}}$.

$\mathrm{Pn(z)}$ полином рангом не выше 3-его, который на крайних калибровочных точках заменяется касательной.

$z < z_0$ $\quad \mathrm{Pn} = \mathrm{P'n}(z_o) \cdot z + \mathrm{Pn}(z_o) - \mathrm{P'n}(z_o) \cdot z_o$

$z < z_0 < z_n$ $\quad \mathrm{Pn} = \mathrm{Pn(z)}$

$z > z_n$ $\quad \mathrm{Pn} = \mathrm{P'n}(z_n) \cdot z + \mathrm{Pn}(z_n) - \mathrm{P'n}(z_n) \cdot z_n$

Здесь: FWHM - ширина пиков; x - энергия; $z = x - (x_0 + x_n)/2$; x_0, ($z_0 = (x_0 - x_n)/2$) - первая калибровочная точка; x_n, ($z_n = (x_n - x_0)/2$)- последняя калибровочная точка; $\mathrm{Pn(z)}$ - полином; $\mathrm{P'n(z)}$ - производная по z от полинома: $\mathrm{P'n}(z_0)$ - производная в точке z_0, $\mathrm{P'n}(z_n)$ - производная в точке z_n.

Расчёт коэффициентов полинома такой же, как и в процедуре энергетической калибровки (см. «Энергетическая калибровка»).

Калибровка эффективности регистрации

В программном пакете «SPECTRRAD» можно рассчитать четыре функции эффективности регистрации квантов:

- эффективность регистрации квантов определённой энергии в пиках полного поглощения *Eff(e) = S(e)/Q(e),*
- в пиках одиночного вылета *EffEsc1(e-511) = Sesc1(e-511)/Q(e),*
- в пиках двойного вылета *EffEsc2(e-1022) = Sesc2(e-1022)/Q(e).*
- полная эффективность регистрации квантов определённой энергии в спектре *Eff(e) = S/Q(e),*

Здесь: *e* - энергия линии в кэВ, *S(e), Sesc1(e-511), Sesc2(e-1022), S* - соответственно: площадь пика полного поглощения, площади пиков утечки одиночного и двойного вылета, площадь спектра, включающая комптон и все пики, соответствующие количеству квантов излучения *Q(e)* данной энергии.

В пакете «SPECTRRAD» функция эффективности регистрации задаётся в табличном виде. При малой плотности точек таблицы рекомендуется аппроксимировать таблицу сплайном (под сплайном понимается сшитый с точностью до значений функции или первых производных, в зависимости от ранга сплайна, полином). Сплайн имеет аппроксимирующий характер - он не проходит через все точки таблицы, а аппроксимирует её, формируя отрезок сплайна взвешенным методом наименьших квадратов из ортогональных полиномов Чебышева по заданному количеству точек.

Считается, что для аппроксимации функций эффективности регистрации квантов в пиках полного поглощения в диапазоне 30-3000 кэВ, лучше других подходит двойной

логарифмический масштаб полиномиальной аппроксимации *F=exp(Pm(log(x)))*, а для функций эффективности регистрации квантов в пиках утечки - логарифмический масштаб полиномиальной аппроксимации *F=Pm(log(x))*.

Расчёт элементарных спектров из спектров эталонов

Полагаем, что альфа, гамма или бета спектр, накопленный спектрометром, является линейной суммой элементарных спектров:

$$s = F \cdot x + b$$

Здесь:

F - матрица элементарных спектров нуклидов,

x - вектор активностей нуклидов,

b - спектр фона.

Необходимым условием расчета элементарных спектров является требование невырожденности матрицы активностей рассчитываемых элементарных спектров в рабочем наборе эталонов. Наиболее желательный вариант - ортогональность матрицы активностей.

Формула для расчета: $F = R\{(S - B) \cdot C^{-1}\}$

Здесь:

R - оператор проектирования получаемых значений на ограничения. В данном случае используется обнуление значений меньших заданного статистического уровня (<***G***) для задания области значений элементарного спектра.

C^{-1}-матрица обратная матрице средних за время измерения активностей нуклидов в эталонах:

$$C_{nm} = A_{nm}\left\{\sum_{k=0}^{l}\lambda_l\int_{Tm}^{Te}\left(\frac{X_k}{\lambda_k}\cdot\prod_{i=0}^{k-1}\beta_i\cdot\lambda_i\cdot\left(\sum_{i=0}^{k}\frac{\exp(-\lambda_i\cdot(t-T_p))}{\prod\limits_{\substack{j=0\\ j\neq i}}^{k}(\lambda_j-\lambda_i)}\right)\right)\cdot dt\right\}/(T_E - T_M)$$

A_{nm} - активность ***n*** -ого нуклида в ***m*** - том эталоне на дату аттестации; ***n*** -ый нуклид в матрице активностей является ***l*** –ым нуклидом в цепочке распада нуклидов содержащихся в в ***m*** - ом эталоне;

λ_j - постоянная распада *j* – ого нуклида в цепочке распада;

β_i - доля выбранного перехода (ветви) в данном узле дерева распада.

T_P - дата аттестации эталона;

T_M - дата начала измерений эталона;

T_E - дата окончания измерений.

S - матрица спектров измеренных эталонов нормированных на живое время измерения.

B – матрица спектров фона нормированных на живое время измерения.

Расчёт погрешностей элементарных спектров основан на условии, что статистические флуктуации спектра пренебрежимо малы в сравнении с погрешностью аттестации эталонов (спектры эталонов должны быть измерены с хорошей статистикой), и, соответственно, относительная погрешность значений в каналах спектров эталонов равна относительной погрешности аттестации эталонов. Соответственно

$$D_{Aij} = \sum_k D((S-B)_{ik})\cdot(X_{kj}^{-1})^2 .$$

D_{Aij} - дисперсия ***i*** ого канала ***j*** -ого элементарного спектра.

$D((S-B)_{ik})$ - дисперсия ***k*** ого элемента ***i*** -ой строки матрицы $(S-B)$.

Расчёт спектров линий

Аппаратурный спектр, зарегистрированный спектрометром, описывается выражением

$$S(x)=\int F(x,e)\cdot s(e)\cdot de$$

Здесь:

$F(x,e)$ - функция, описывающая процесс регистрации квантов излучения *s(e)* в виде аппаратурного спектра *S(x)* - ядро преобразования.

В случае линейчатого спектра $s(e)=A_i\cdot\delta(e-e_i)$, δ - дельта функция Дирака.

$$S(x)=\sum A_i\cdot F(x,e_i),$$

где $F(x,e_i)$ - сечения ядра преобразования для заданной энергии e_i, или, другими словами, - отклик спектрометра на излучение заданной энергии - спектр линии.

Если мы сможем рассчитать какое-то количество таких сечений ядра преобразования (спектров линий), то сможем интерполяцией по этим сечениям рассчитывать аппаратурные спектры нуклидов.

Исходя из предположения непрерывности $F(x,e)$, предлагается следующая параметризация:

- ***Для линейчатых спектров с высоким разрешением***.

  Под спектром понимается спектр пиков (для гамма спектров - спектр с предварительно вычтенным спектром непрерывного рассеяния). Для альфа спектров рассчитывается отклик спектрометра на одну альфа частицу заданной энергии. Для полупроводниковой гамма спектрометрии эффективность регистрации хранится в таблицах эффективности регистрации и в качестве модели линии рассчитывается пик единичной площади заданной энергии и ширины. Отклик спектрометра будет произведением эффективности регистрации для кванта заданной энергии и рассчитанной модели линии.

  $$F(x,e)=Eff(e)\cdot F((x-En^{-1}(e)+En^{-1}(e_i))/(W(e)/W(e_i))$$

  Здесь:

  $Eff(e)$ - функция эффективности регистрации, для альфа спектрометрии $Eff(e)=1$.

  $En(e)$ - энергетическая калибровка спектрометра,

  $W(e)$ - калибровка ширины пиков,

  e_i - энергия линии.

  Используется энергетическая калибровка спектрометра, калибровка ширины пиков и калибровка эффективности регистрации.

- ***Для линейчатых спектров с плохим разрешением (обработка без поиска пиков)***.

  Спектр включает и спектр непрерывного рассеяния. Сечение ядра преобразования - полный отклик спектрометра на один квант излучения заданной энергии (сечение включает и эффективность регистрации).

  $$F(x,e)=F(e\cdot(x-En^{-1}(e)+En^{-1}(e_i))/e_i)$$

  Используется только энергетическая калибровка спектрометра.

Для линейчатых хорошо разрешённых спектров модель линии рассчитывается по спектрам пиков полного поглощения. При этом предполагается (и подтверждается опытом), что в пределах используемого для расчёта модели линии пика или мультиплета

все изменения формы достаточно точно описываются деформацией аффинного типа $\varphi(z) = \varphi(\frac{x-p}{w})$.

Спектр линии $\varphi(i)$ при таком предположении рассчитывается решением системы интегральных уравнений $B(i) = \int_{i}^{i+1} \sum_{j=1}^{n} \varphi(\frac{i - p(e_j)}{w(e_j)}) \cdot di$.

Здесь: $B(i) = S(i) - S_{compt}(i) - Bgd(i) + Bgd_{compt}(i)$

$S(i)$ - спектр эталона, $S_{compt}(i)$ - спектр непрерывного рассеяния спектра эталона,

$Bgd(i)$ - спектр фона приведённый к времени измерения спектра эталона,

$Bgd_{compt}(i)$ - спектр непрерывного рассеяния для фона,

$p(e_j)$ - положение j-ой линии с энергией e на шкале каналов,

$w(e_j)$ - ширина j-ой линии с энергией e.

Процедура рассчитывает искомую функцию для всей области используемого одиночного пика или мультиплета, определяет параметры линии (энергия, ширина, площадь). Для гамма спектров нормирует выбранные пики на площадь. И сохраняет их как модели линий.

Для плохо разрешенных спектров (обработка без выделения пиков) спектры линий рассчитываются из элементарных спектров. При этом может быть, что весь набор элементарных спектров не содержит спектров из одной линии (из набора нуклидов, обычно используемых для калибровки сцинтилляционных гамма спектрометров, только элементарный спектр K-40 состоит из одной линии 1460.8 кэВ). Поэтому процедура расчёта использует описанную параметризацию линий и для расчёта линий. Предположим, элементарный спектр содержит n линий и нет ни одной рассчитанной линии. Оператор должен выбрать наиболее мощную линию в качестве рассчитываемой (линия с индексом 0), при этом все остальные линии программа выражает, пользуясь описанной параметризацией, экстраполяцией рассчитываемого спектра линии. Если элементарный спектр s содержит k каналов, мы получаем систему из k уравнений с k неизвестными

$$F(e_i \cdot (x - En^{-1}(e_i) + En^{-1}(e_i)) / e_0) = s$$

Поскольку все дополнительные линии получаются экстраполяцией основной, решение будет приемлемым при выполнении условий:

- дополнительные линии расположены вблизи основной,
- вклад дополнительных линий незначителен в сравнении с вкладом основной линии.

Если рассчитываются несколько линий из нескольких элементарных спектров, процедура вначале рассчитывает наиболее обусловленные линии и использует полученные спектры для интерполяции линий рассчитываемых позже.

Процедура расчета для повышения обусловленности матрицы накладывает ещё одно ограничение - формируемая система уравнений должна иметь треугольный характер, то есть выбираемые линии должны быть крайними в спектре нуклида (либо первыми, либо последними).

Расчёт элементарных спектров по таблице линий

В том случае, если необходимый для декомпозиции измеренного спектра элементарный спектр не найден в наборе рассчитанных из спектров эталонов элементарных спектров, он рассчитывается процедурой расчёта элементарных спектров по таблице сформированных откликов спектрометра на излучение определённых энергий (спектров линий), функциям калибровок спектрометра и библиотеке нуклидов (для краткости и отличия от других методов расчёта - процедурой «***генерации***»).

Процедура использует метод кусочно линейной интерполяции (экстраполяции) спектров линий, формирующих элементарный спектр, по двум ближайшим к энергии рассчитываемой линии предварительно сформированных спектров линий (см. «Расчёт спектров линий») определённых энергий e_1 и e_2 в заданном оператором режиме интерполяции:

*f=a*x+b*
*f=exp(a*x+b)*
*f=a*log(x)+b*
*f=exp(a*log(x)+b)*

Отклик на излучение определенной энергии e рассчитывается интерполяцией (экстраполяцией):

$$f(e,i) = ((e_2 - e)\cdot f(e_1,k_1,i) + (e_1 - e)\cdot f(e_2,k_2,i))/(e_2 - e_1),\ldots k_1 = e/e_1,\ k_2 = e/e_2$$

Спектр нуклида $F = \sum A_j \cdot f_j$ - сумма откликов с соответствующим квантовым выходом A_j всех линий данного нуклида.

Для расчёта спектров линий заданной энергии ***e*** используется следующая параметризация рассчитанных спектров линий

- ***Для линейчатых спектров с высоким разрешением***.
  Под спектром понимается спектр пиков (спектр с предварительно вычтенным спектром непрерывного рассеяния). Под спектром линии понимается пик единичной площади заданной энергии и ширины
  $$F(e,x) = Eff(e)\cdot F(e_i,(x - En^{-1}(e) + En^{-1}(e_i))/(W(e)/W(e_i))$$
  Здесь:
  $Eff(e)$ - функция эффективности регистрации, $En(e)$- энергетическая калибровка спектрометра, $W(e)$ - калибровка ширины пиков, e_i - энергия линии.
  Используется энергетическая калибровка спектрометра, калибровка ширины пиков и калибровка эффективности регистрации.
- ***Для линейчатых спектров с плохим разрешением (обработка без поиска пиков***).
  Спектр включает и спектр непрерывного рассеяния.
  $$F(e,x) = F(e_i,(x - En^{-1}(e) + En^{-1}(e_i))/e_i)$$
  Используется только энергетическая калибровка спектрометра.

Поглощение излучения в веществе пробы

При прохождении через вещество частицы излучения взаимодействуют с электронами и ядрами атомов вещества. При взаимодействии они либо поглощаются, либо теряют часть своей энергии и изменяют направление. Для потока частиц N_0 проходящих через единицу площади на отрезке Δx в реакцию взаимодействия вступят $\Delta n = N_0 \cdot (\rho \cdot N_a / A)\cdot \sigma \cdot \Delta x$ частиц.

Здесь ρ - плотность среды , N_a - число Авогадро , A - молярная масса атомов среды, σ - полное эффективное (усреднённое для всех атомов вещества) сечение взаимодействия.

Величина $\sigma \cdot \rho \cdot N_a / A$ называется полным линейным коэффициентом ослабления излучения. Полный линейный коэффициент ослабления зависит от плотности вещества, поэтому при расчётах пользуются величиной $\mu = \sigma \cdot N_a / A$ (кв.см/г) – массовым сечением взаимодействия (или массовым коэффициентом ослабления). Для альфа и бета излучения принято использовать величину обратную массовому коэффициенту ослабления – пробег частицы в веществе $R = 1/\mu = A/(\sigma \cdot N_a)$ (г/кв.см.). Пробег измеряемый в г/кв.см также не зависит от плотности счётного образца. Для вычисления пробега в единицах длины его требуется поделить на плотность вещества.

Эффективность регистрации частиц в детекторе зависит от плотности счётного образца и массового коэффициента ослабления (или пробега) частиц в веществе счётного образца:

$eff_1 = eff_0 \cdot k(\mu_0, \rho_0, \mu_1, \rho_1)$ или $eff_1 = eff_0 \cdot k(R_0, \rho_0, R_1, \rho_1)$

$k(\mu_0, \mu_1) = \mu_0 \cdot \rho_0 \cdot (1 - \exp(-\rho_1 \cdot \mu_1)/(\mu_1 \cdot \rho_1 \cdot (1 - \exp(-\rho_0 \cdot \mu_0))$ - коэффициент эффективности регистрации связанный с массовым коэффициентом ослабления излучения в эталоне μ_0 в кв.см/ г и в счётном образце μ_1 для эффективности регистрации выраженной в (имп./с)/ Бк или в имп./квант – измерения в «тонком» слое для гамма и бета излучения.

$k(\mu_0, \mu_1) = \mu_0 \cdot (1 - \exp(-\rho_1 \cdot \mu_1)/(\mu_1 \cdot (1 - \exp(-\rho_0 \cdot \mu_0))$ - коэффициент эффективности регистрации связанный с массовым коэффициентом ослабления излучения в эталоне μ_0 в кв.см/ г и в счётном образце μ_1 для эффективности регистрации выраженной в (имп./с)/ (Бк/кг) или в имп./(квант/кг) – измерения в «толстом» слое для гамма и бета излучения.

$k(R_0, R_1) = \dfrac{R_1 \cdot fAtten(\rho_1, R_1)}{R_0 \cdot fAtten(\rho_0, R_0)}$ - коэффициент эффективности регистрации связанный с пробегом излучения в эталоне R_0 в г/кв.см и в счётном образце R_1 (измерения в «толстом» слое) для альфа излучения.

$fAtten(\rho, R) = 1 - sqrt(1 - (\rho / R)^2) + (\rho / R) \cdot \arccos(\rho / R)$ - для. $\rho / R < 0.8$.

$fAtten(\rho, R) = 1 - \exp(-\alpha \cdot \rho / R)$ - для. $\rho / R > 0.8$.

ρ - поверхностная плотность в г/кв.см, соответственно эталона и пробы.

α - коэффициент для связки двух функций.

Гамма излучение

При прохождении через вещество гамма кванты либо поглощаются в результате фотоэлектрического эффекта, либо теряют часть своей энергии и изменяют направление в результате комптоновского рассеяния и эффекта рождения электрон – позитронных пар (есть ещё ряд эффектов, но наиболее существенны три указанных). При малых энергиях гамма квантов, наиболее значимым является фотоэффект. При энергиях квантов Eγ ≥1022 кэВ, возникает эффект рождения электрон-позитронных пар. Сечение совместного действия эффектов равно сумме сечений отдельных реакций:

$\sigma = \sigma_ф + \sigma_к + \sigma_{пар}$

$\sigma_ф, \sigma_к, \sigma_{пар}$ - сечения фотоэффекта, комптоновского рассеяния и эффекта образования пар.

В пакете «SPECTRRAD» существует несколько способов определения сечений реакций как функций от энергии излучения для заданных видов материалов счётных образцов:

- задание в виде таблицы,
- расчёт по массовой или химической формуле вещества с учётом поглощения для конкретного элемента по таблицам https://physics.nist.gov/PhysRefData/Xcom/html/xcom1.html:
- расчёт по процедуре определённой оператором.

Если процедура расчёта оператором не задана, используется расчёт по массовой или химической формуле вещества по формулам, предложенные преподавателями кафедры общей ядерной физики физического факультета МГУ:

$$\sigma_ф = 4\pi r_0^2 a^4 Z^5 * \frac{(2+\varepsilon)^{3/2}}{\varepsilon^{7/2}} * \left[\frac{4}{3} + (1+\varepsilon) * \frac{(\varepsilon - 1)}{(2+\varepsilon)} * \left(1 - \ln\left(\frac{1+\varepsilon+\sqrt{\varepsilon*(2+\varepsilon)}}{1+\varepsilon-\sqrt{\varepsilon*(2+\varepsilon)}} \right) \right) \right]$$

где:

$\varepsilon = \dfrac{E_\gamma}{(m_e * c^2)}$ - безразмерный параметр энергии гамма-квантов,

$r_0 = \dfrac{e^2}{(m_e * c^2)} = 2.81794092 \ *10^{-15} м$ - классический радиус электрона,

Z - заряд ядра элемента вещества счётного образца.

$a = \dfrac{e^2}{(h * c)} = \dfrac{1}{137.03598}$ - постоянная тонкой структуры,

E_γ - энергия гамма излучения.

$m_e * c^2$ – энергия покоя электрона,

$$\sigma_к = 2\pi r_0^2 Z * \left\{ \frac{(1+\varepsilon)}{\varepsilon^2} * \left[2 * \frac{(1+\varepsilon)}{(1+2*\varepsilon)} - \frac{\ln(1+2*\varepsilon)}{\varepsilon} \right] + \frac{\ln(1+2*\varepsilon)}{2*\varepsilon} - \frac{(1+3*\varepsilon)}{(1+2*\varepsilon)^2} \right\}$$

$$\sigma_{пар} = r_0^2 a Z^2 * \left(\frac{28}{9} * \ln(2*\varepsilon) - \frac{218}{27} \right), \text{ при } 1 << \varepsilon < \frac{1}{a * Z^{1/3}}$$

$$\sigma_{пар} = r_0^2 a Z^2 * \left(\frac{28}{9} * \ln(183 * Z^{-1/3}) - \frac{218}{27} \right), \text{ при } \varepsilon > \frac{1}{a * Z^{1/3}}$$

Для расчёта таблицы эффективности регистрации в фотопиках используется суммарное сечение трёх эффектов. Для расчёта таблицы эффективности регистрации в пиках утечки используется сечение образования пар.

В сцинтилляционной спектрометрии (при обработке без выделения пиков) нельзя использовать суммарное сечение трёх реакций, поскольку гамма кванты, испытавшие комптоновское рассеяние, могут не зарегистрироваться в детекторе, а могут и зарегистрироваться в спектре комптоновского рассеяния. Точно так же гамма кванты, образовавшие пары электрон-позитрон, могут зарегистрироваться в спектре, но естественно, в другой энергетической области. Рассчитать, где в спектре зарегистрируется гамма квант (если зарегистрируется) после комптоновского рассеяния, очень непросто. Для сцинтилляционных спектров в пакете «SPECTRRAD» производится перерасчёт (интерполяция или экстраполяция) спектров компонентов на заданную плотность электронов (комптоновское рассеяние пропорционально плотности электронов) по спектрам компонентов, рассчитанным из эталонов различной плотности, приведённых к заданному эффективному заряду атомов и эффективной атомной массе. А перерасчёт на заданный эффективный заряд и эффективную атомную массу, то есть учёт фотопоглощения производится по формуле поглощения излучения в веществе для фотоэффекта ($\sigma_ф$).

Бета излучение

Пробег бета частиц обратно пропорционален плотности электронов. По умолчанию используется формула:

$$R = 0.19272464 \ * E_\beta^{1.4} * \frac{A}{Z} \text{ для } E_\beta < 0.8 \text{ МэВ},$$

$$R = 0.4818116 \ * \left(0.54 * E_\beta - 0.133\right) \cdot \frac{A}{Z} \text{ для } E_\beta \geq 0.8 \text{ МэВ}.$$

Поскольку спектр бета излучения непрерывен, расчёт по формулам может применяться (с осторожностью) только при расчёте суммарной активности. Расчёт

спектров компонентов разложения для бета спектров в пакете «SPECTRRAD» производится интерполяцией или экстраполяцией спектров компонентов с различными значениями плотности электронов на плотность электронов счётного образца.

Альфа излучение

Пробег альфа частиц в веществе рассчитывается по эмпирической формуле Уильяма Генри Брэгга: $R = 0.0001 \cdot \sqrt{A \cdot E_\alpha^3}$ г/кв.см. (энергия E_α в МэВ).

Интерполяция таблиц и спектров компонентов

Таблицы эффективности регистрации и спектры компонентов разложения, приведённые к заданному значению геометрического параметра (параметра интерполяции), рассчитываются из таблиц и элементарных спектров с различными значениями параметра интерполяции в соответствии с выбранным геометрическим параметром пробы. В качестве геометрического параметра, как правило, используется плотность счётного образца, а если заданы эффективный атомный номер и эффективная атомная масса вещества эталонов и счётного образца – в соответствии с плотностью электронов счётного образца. Расчет осуществляется процедурой кусочно-полиномиальной интерполяции (экстраполяции) для каждого канала спектра или точки таблицы по ***n*** (***n<7***) таблицам или элементарным спектрам с различными значениями геометрического параметра по выбранной формуле:

F(S)=F([EXP](Pm[LOG](X)))

с параметрами *Parameter, Rang, Mode, Points* и *Volume* устанавливаемыми в файле “**decomp.ini**”.

Здесь:

F(S) Функция интерполируемых значений:
(S - значения аппроксимируемых точек спектра).

X Параметр интерполяции (плотность пробы или один из размеров пробы или изменяемых размеров геометрии).

Pm Полином ранга *Rang*. Значение по умолчанию - *Rang* =1.
Rang должен лежать в диапазоне от 0 до 3.

Mode Вид интерполяции:
mode=0 – F=Pm(x),
mode=1 – F=Pm(log(x)),
mode=2 – F=exp(Pm(x)) – значение по умолчанию для гамма спектрометров,
mode=3 – F=exp(Pm(log(x))),
mode=4 – F=1/Pm(x), если *Points* = 2 и *Rang* = 1, то $F=1/(ax+b)^2$,
mode=5 – F=1/Pm(log(x)),
mode=6 – F=1/exp(Pm(x)),
mode=7 – F=1/exp(Pm(log(x))),
mode=8 – F=F0·(1-exp(-k·x)) - значение по умолчанию для геометрий «толстого слоя»,
mode=9 – F=F0·(1-exp(-k·x))/(k·x) - значение по умолчанию для альфа и бета спектрометров,

Points Число точек, участвующих в формировании полинома.

Volume Объём стандартного для данной геометрии сосуда для измерения проб.

Поиск пиков

Процедура поиска пиков использует по выбору оператора три метода поиска пиков:

- «***Плавающий отрезок***».

$$f(i) = \left(\int_{i-w(i)/2}^{i+w(i)/2} (Sp(x) - Sbgd(x)) \cdot dx\right) / \sqrt{1 + \int_{i-w(i)/2}^{i+w(i)/2} Sp(x) \cdot dx}$$

Здесь:

f(i) - функция детектирования.

i - канал спектра, *w(i)* -ширина пика (в каналах).
Sp -спектр, *Sbgd* - значения «фона» под пиком, аппроксимируемые отрезком прямой закреплённых на спектре в точках *i-w(i)/2* и *i+w(i)/2*.

- ***Свёртка с моделью пика***.

$$f(e) = \left(\int_{e-w(e)/2}^{e+w(e)/2} F(x,e) \cdot (Sp(x) - Sbgd(x)) \cdot dx \right) / \int_{e-w(e)/2}^{e+w(e)/2} \sqrt{Sp(x) \cdot F(x,e)^2} \cdot dx$$

Здесь:
f(e) - функция детектирования.
e - энергия, *w(e)* -ширина пика (в единицах энергии).
F(x,e) - модель линии (пика).

- ***Метод Марискотти***.

$$f(e) = \left(\int_{e-2w(e)}^{e+2w(e)} M(x,e) \cdot Sp(x) \cdot dx \right) / \int_{e-2w(e)}^{e+2w(e)} \sqrt{Sp(x) \cdot M(x,e)^2} \cdot dx$$

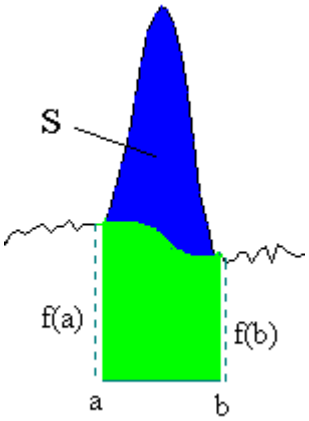
Здесь:
f(e) - функция детектирования.
e - энергия, *w(e)* -ширина пика (в единицах энергии).
M(x,e) – функция Марискотти.

Считается, что в спектре присутствует пик, если значение функции детектирования превышает порог, заданный параметрах настройки.

Аппроксимация спектра непрерывного рассеяния

Для аппроксимации спектра непрерывного рассеяния под пиком используется два метода:

- ***Интегральная ступенька Филиппота***.



$$f_j(i) = f(a) - (s(i) - f_{j-i}(i)) \cdot (f(a) - f(b)) / S_{j-1}$$

Здесь:
f - спектр непрерывного рассеяния, ***i*** - канал спектра, ***j*** - номер итерации.
s - спектр; ***a, b*** - начало и конец области пика.

$S = \sum_{a}^{b} (s(i) - b(i))$ - площадь пика.

- ***Полином.*** При аппроксимации полиномом участок спектра, содержащий пики раскладывается методом наименьших квадратов на сумму спектров пиков и полином спектра непрерывного рассеяния.

Учёт каскадных переходов

Для линейчатых гамма спектров эффекты, связанные с каскадными переходами (утечка импульсов из пиков полного поглощения в пики суммирования каскадных

переходов), учитываются как при обработке спектров с поиском пиков (калибровка эффективности, генерация спектров, расчёт активностей нуклидов), так и при обработке спектров без поиска пиков (генерация спектров, расчёт активностей нуклидов).

Для двух каскадных переходов:

$N_1 = Ef_1 \cdot Q_1 - N_1^*$ - вероятность регистрации импульсов регистрируемых в первом пике с учётом утечки.

$N_2 = Ef_2 \cdot Q_2 - N_2^*$ - вероятность регистрации импульсов регистрируемых во втором пике с учётом утечки.

$N_{12} = Ef_1 \cdot K_1 \cdot Q_1 \cdot Ef_2 \cdot K_2 \cdot Q_{2/1}$ - вероятность регистрации импульсов регистрируемых в пике суммирования.

$N_1^* = Ef_1 \cdot K_1 \cdot Q_1 \cdot Ef_2^* \cdot K_2 \cdot Q_{2/1}$ - вероятность утечки импульсов из первого пика.

$N_2^* = Ef_2 \cdot K_2 \cdot Q_2 \cdot Ef_1^* \cdot K_1 \cdot Q_{1/2}$ - вероятность утечки импульсов из второго пика.

Q_1 - вероятность выхода квантов для первой каскадной линии.

Q_2 - вероятность выхода квантов для второй каскадной линии.

$Ef_1 = \iiint f(e_1) \cdot dv / Vol$ - усреднённая по объёму пробы эффективность регистрации в пике полного поглощения для первой каскадной линии. Здесь: $f(e)$ - эффективность регистрации кванта с энергией *e* для данной точки геометрии, Vol - объём пробы.

Ef_2 - усреднённая по объёму пробы эффективность регистрации в пике полного поглощения для второй каскадной линии.

Ef_1^* - усреднённая по объёму пробы полная эффективность регистрации для первой каскадной линии (вероятность регистрации кванта в любой области спектра: пике полного поглощения, спектре комптоновского рассеяния, пиках утечки, аннигиляционном пике).

Ef_2^* - усреднённая по объёму пробы полная эффективность регистрации для второй каскадной линии.

$K(e) = \sqrt{(\iiint f(e) \cdot f(e) \cdot dv)/(\iiint f(e) \cdot dv \cdot \iiint f(e) \cdot dv)}$ - геометрический фактор учитывающий отличие эффективности регистрации в данной точке от эффективности регистрации усреднённой по объёму.

$Q_{2/1}$ - вероятность выхода кванта второй каскадной линии при условии выхода кванта для первой.

$Q_{1/2}$ - вероятность выхода кванта первой линии при условии выхода кванта для второй.

При расчёте используется равенство $Q_2 \cdot Q_{1/2} = Q_1 \cdot Q_{2/1}$. – вероятность одновременного выхода двух гамма квантов.

Для трёх каскадных переходов:

$N_1 = Ef_1 \cdot Q_1 \cdot (1 - Ef_2^* \cdot K_1 \cdot K_2 \cdot Q_{2/1}) \cdot (1 - Ef_3^* \cdot K_1 \cdot K_3 \cdot Q_{3/1})$ - вероятность регистрации импульсов регистрируемых в пике полного поглощения с учётом утечки (аналогично для N_2 и N_3).

$N_{12} = Ef_1 \cdot K_1 \cdot Q_1 \cdot Ef_2 \cdot K_2 \cdot Q_{2/1} \cdot (1 - Ef_3^* \cdot K_3 \cdot Q_{3/1})$ - вероятность регистрации импульсов регистрируемых в пике суммирования двух каскадных (аналогично для N_{13} и N_{23}).

$N_{123} = Ef_1 \cdot K_1 \cdot Q_1 \cdot Ef_2 \cdot K_2 \cdot Q_{2/1} \cdot Ef_3 \cdot K_3 \cdot Q_{3/1}$ - вероятность регистрации импульсов регистрируемых в пике суммирования трёх каскадных.

$Q_{3/1}$ - вероятность выхода квантов третьей каскадной линии при условии выхода квантов для первой.

Ef_3 - эффективность регистрации в пике полного поглощения для третьей каскадной линии.

Ef_3^* - полная эффективность регистрации для третьей каскадной линии.

Расчёт активностей и оценка погрешностей

Методика расчёта активностей основана на разложении спектра в выбранном энергетическом диапазоне на спектры компонентов в предположении, что измеренный спектр является суммой спектров нуклидов счетного образца (пробы) и спектра фона. Нуклидный состав пробы полагается либо заранее известным, либо определяется процедурами предварительного анализа. Предполагается, что спектр компонента не изменяется от наличия в пробе других нуклидов, но зависит от геометрических факторов (геометрия измерений) химического состава и плотности счётного образца.

Метрика

Распространенный подход в оценивании – найти такие параметры p_x модели $M(p)$ (p – вектор оцениваемых параметров модели), которые имели бы минимальные дисперсии $D_{px} = \min(D_p)$ и удовлетворяли условию $\|M(p_x) - S\| < E$ ($\|..\|$ - обозначение нормы вектора, S - объект, в нашем случае, - измеренный спектр, E - заданный порог приемлемости модели). Для класса линейных оценок (и для несколько более широкого класса в случае нормальности $M(p) - S$) эти два условия объединяются в одно $\left\|K_x^{-1/2} \cdot (M(p_x) - S)\right\| = \min\left\|K_x^{-1/2} \cdot (M(p_x) - S)\right\|$.

Здесь K – ковариационная матрица вектора $M(p) - S$.

Использование в качестве нормы $\|...\|$ евклидовой длины и, соответственно, в качестве процедуры – метода наименьших квадратов обеспечило бы нам минимальные дисперсии оценок, но только при выполнении предположения о заранее известной ковариационной матрице K. Метод наименьших квадратов является весьма неустойчивой, по отношению к нарушениям исходных предположений, процедурой и поэтому в настоящее время используются различного рода помехоустойчивые (робастные) методы оценивания. Широко распространено оценивание Хуберовского типа (Huber estimation), которое используется и в нашей программе. Норма в Хуберовской метрике (Huber metric) выглядит следующим образом:

$\|...\| = (M(p) - S)^2$ в случае $0 > C_a < (M(p) - S) < C_b > 0$ - наименьшие квадраты при небольшом отклонении.

$\|...\| = |M(p) - S|$ в случае $0 > C_a > (M(p) - S)$ или $(M(p) - S) > C_b > 0$ – наименьшие модули при отклонениях превышающих заданный порог.

В нашей методике $C_a = -m \cdot G$, $C_b = n \cdot G$, где G – предполагаемое среднеквадратичное отклонение, значения *m* и *n* задаются в параметрах декомпозиции (*m* и *n* могут быть заданы равным ∞, в этом случае оценка будет МНК оценкой).

Объект

Мы предполагаем, что спектр S имеет диагональную ковариационную матрицу $K_s = D_s \cdot I$ (I – единичная матрица, D_s – вектор дисперсий) причем $D_{Si} = F_i + \eta^2 F_i^2$ для $F_i > 0$ и $D_{Si} = 1$ для $F_i < 1$. $F_i = S_i$ для первой итерации и $F_i = M(p,i)$ для последующих итераций.

Здесь:

S_i – количество отсчётов в ***i*** – том канале спектра S ,

η – коэффициент линейной составляющей статистики $(\eta \geq 0)$. То есть спектр имеет составную: пуассоновскую плюс линейную статистику. Для спектра пробы η определяется дифференциальной нелинейностью спектрометра. Для спектра фона η является коэффициентом изменчивости фона, рассчитываемой процедурой статистической обработки результатов измерений фона.

Модель

Мы полагаем

$$M(p,i) = \{\int (\Phi(x,w) \cdot f \cdot_0 (a_0 \cdot (i-x)^2 + b_0 \cdot (i-x) + c_0) +$$

$$k(Z,i) \cdot \sum A_j \cdot f_j (a_j \cdot (i-x)^2 + b_j \cdot (i-x) + c_j)) \cdot dx\} + S_{compt}(i) + Pn(i)$$

$$p = (Z, w, a_0, b_0, c_0, A_1, a_1, b_1, c_1, ...A_n, a_n, b_n, c_n, Pn_0, ...Pn_k).$$

Здесь:

$f_0 = B - B_{compt}$– спектр фона с вычтенным спектром непрерывного рассеяния (B_{compt} включается в модель только в режиме обработки гамма спектров с выделением пиков).

$f_1, ...f_n$ – спектры компонентов (нормированные на число распадов спектры излучения отдельных нуклидов или цепочек нуклидов, находящихся в состоянии радиоактивного равновесия).

$A_1, ...A_n$ – амплитуды соответствующих компонентов.

$a_0, ...a_n$, $b_0, ...b_n$ и $c_0, ...c_n$ – параметры энергетического дрейфа спектрометра.

Множитель $k(Z,i) = (1 - \exp(-\mu \cdot \rho \cdot Z^4 \cdot \Delta / f(E(i))))/(\mu \cdot \rho \cdot Z^4 \cdot \Delta / f(E(i))$ используется только в режиме обработки гамма спектров.

Z - отклонение условного Z эффективное пробы от Z эффективное эталона использованного при расчёте эффективности регистрации. $E(i)$ - энергия канала i. μ - линейный коэффициент поглощения. ρ - плотность счётного образца. Δ - толщина счётного образца (задаётся при установке геометрии).

$S_{compt}(i)$ – спектр непрерывного рассеяния для спектра пробы (спектр непрерывного рассеяния включается в модель только в режиме обработки гамма спектров с выделением пиков).

$Pn(i)$ - сплайн. Сплайн используется при разложении гамма спектра на спектры пиков для аппроксимации спектра непрерывного рассеяния в том случае, если не производилась предварительная обработка спектра для поиска пиков и расчёта спектра непрерывного рассеяния ($S_{compt}(i)$ =0).

i - канал спектра.

Свёртка с функцией рассеяния $\Phi(x,w)$ моделирует ухудшение разрешения спектрометра. В качестве функции рассеяния, за исключением альфа спектрометрии, используется гауссиан $\exp(-(x/w)^2)$. Для альфа спектрометрии используется свёртка с откликом спектрометра на квант излучения - моделью пика $S((x-p)/w)$.

Используется нелинейная модель, так как в сцинтилляционной спектрометрии (и не только в сцинтилляционной) пренебрегать энергетическим дрейфом спектрометрических трактов нельзя (обычный рабочий дрейф в пределах 1-3% для сцинтилляционных спектров вызывает искажение оценок в несколько раз превышающее оцененные статистические погрешности даже при 3 – 4 компонентах в модели). В общем случае предполагаются независимые значения параметров дрейфа для всех компонентов, поскольку измерение эталонов происходило в разное время и при различной загрузке

спектрометра, соответственно - при различных значениях коэффициентов усиления и нуля шкалы спектрометра. В том случае, если с помощью процедур предварительных энергетических калибровок при измерениях эталонов, мы добились, в какой-то степени, единой энергетической шкалы для всех компонентов разложения, оператор может указать в табличке параметров декомпозиции, что спектры компонентов находятся в единой шкале, то есть $a_0 = a_1 ... = a_n = 0$, $b_0 = b_1 ... = b_n$, $c_0 = c_1 ... = c_n$. Оператор может исключить из списка параметров Z, w, $a_0, a_1, ... a_n$ и (или) $b_0, b_1, ... b_n$ и (или) $c_0, c_1, ... c_n$ и Pn, удалив соответствующие галочки в таблице параметров декомпозиции.

При оконном методе обработки, который неплохо работает при разложении линейчатых спектров с высоким разрешением регистрирующего детектора (гамма спектрометрия с охлаждаемыми ППД детекторами), используется линейная модель

$$M(p,i) = f_0(i) + \sum A_j \cdot f_j(i) + Comp(i); \quad p = (A_1, ... A_n).$$

Здесь i – номер окна, $f_0, f_1, ... f_n, Comp(i)$– интегральные значения в ***i***–ом окне, соответственно, фона, компонентов и спектра непрерывного рассеяния.

При разложении спектров можно использовать значения активностей нуклидов для одного и того же материала пробы, измеренные на других спектрометрах или полученные другими методами. Модель при этом дополняется информацией о таких априорных данных: $X = X_0$; $K_x = G_0$.

X – значения активностей, K_x – ковариационная матрица X.

Решение

Используем метод Гаусса – Ньютона. Начальное значение вектора параметров p^0 находим, используя глобальное варьирование выбранных параметров в заданном диапазоне с заданным шагом. Быстродействие современных компьютеров, пока что не позволяет варьировать все параметры с достаточной плотностью сетки, поэтому оператор может задать в параметрах декомпозиции варьирование четырёх основных параметров: Z эффективное, коэффициента усиления, нуля шкалы и разрешения спектрометра. Найденное приближение уточняем, используя ньютоновский процесс.

$$p^{k+1} = p^k + R\left\{\lambda_k \cdot (M_{jl} + \beta_k \cdot D_{jl} + G_0^{-1})^{-1} \cdot F\right\}$$

Здесь:

p^k – вектор параметров на ***k*** –ой итерации;

p^{k+1} – вектор параметров на ***k+1*** –ой итерации.

R – оператор проектирования получаемых значений параметров на ограничения.

λ_k – шаг на ***k*** – ой итерации $(0 < \lambda_k < 1)$.

$M_{jl} = (W \cdot \frac{dM}{dp})^T \cdot (W \cdot \frac{dM}{dp})$ - матрица Гаусса - Ньютона;

$W = K^{-1/2}$ - матрица весов. K - ковариационная матрица вектора $M(p) - S$

$\beta_k \cdot D_{jl}$ - коэффициент (задается в параметрах декомпозиции) и демпфирующая матрица ***k*** -ого шага.

G_0 - ковариационная матрица априорных данных.

$$F = (W \cdot \frac{dM}{dP})^T \cdot (M(p) - S) + G_0^{-1} \cdot (A^k - X_0 \cdot b^k) \; для \; 0 > C_a < (M(p) - S) < C_b > 0.$$

$$F = (W \cdot \frac{dM}{dP})^T \cdot C_a + G_0^{-1} \cdot (A^k - X_0 \cdot b^k) \; для \; (M(p) - S) < C_a < 0.$$

$$F = (W \cdot \frac{dM}{dP})^T \cdot C_b + G_0^{-1} \cdot (A^k - X_0 \cdot b^k) \; для \; (M(p) - S) > C_b > 0.$$

X_0 - априорные данные об активностях компонентов.

A^k - оценка вклада компонентов на ***k*** -ом шаге,

b^k - оценка коэффициента усиления тракта.

C_a, C_b - границы МНК оценивания.

Средняя за время измерения активность *k* – ого нуклида:

$$\overline{X_k} = (\int_{El}^{Er} k(Z^n, e) \cdot A_k^n \cdot f_k(p^n) \cdot de / \int_{El}^{Er} f_k(p_0) \cdot de);$$

Здесь:

El, Er - левая и правая энергетические границы декомпозиции, *e* - энергия;

$p^n = (w, a_j, b_j, c_j)$. - значения параметров энергетического дрейфа на последней итерации;

p_0 - начальные значения параметров энергетического дрейфа: $w = 0, a = 0, b = 1, c = 0$

A_k^n - оценка вклада *k*-ой компоненты на последнем шаге,

f_k - спектр *k*-ой компоненты (нормированный на число распадов спектр излучения нуклида или цепочки нуклидов, находящихся в состоянии радиоактивного равновесия);

Значения активностей на момент начала измерений для одиночных нуклидов, нуклидов равновесных цепочек и материнских нуклидов цепочек распада:

$X_k = \overline{X_k} \cdot (1 - \exp(-\lambda_k \cdot T_{meas})) / (\lambda_k \cdot T_{meas})$. Здесь:

λ_k - постоянная распада нуклида (постоянная распада материнского нуклида, обеспечивающего радиоактивное равновесие цепочки нуклидов, в случае цепочки нуклидов);

T_{meas} - время измерения.

Для нуклидов входящих в цепочку распада решение не описывается выражением из элементарных функций, а является численным решением системы интегральных уравнений:

$$\overline{X_n} = \left\{ \lambda_n \cdot \sum_{k=0}^{n} \int_0^{Tmeas} \frac{X_k}{\lambda_k} \cdot \prod_{i=0}^{k-1} \beta_i \cdot \lambda_i \cdot (\sum_{i=0}^{k} \frac{\exp(-\lambda_i \cdot t)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{k} (\lambda_j - \lambda_i)}) \cdot dt \right\} / T_{meas}$$

X_k - искомое решение;

λ_j - постоянная распада *j* – ого нуклида;

β_i - доля выбранного перехода (ветви) в данном узле дерева распада.

Оценка погрешностей

Наши предположения о характере ковариационной матрицы спектра сформулированы в разделе «**Объект**».

Ковариационную матрицу спектра непрерывного рассеяния также полагаем диагональной $K_{comp} = D_{comp} \cdot I$ (I – единичная матрица, D_{comp} – вектор дисперсий) причем $D_{COMPi} = \alpha^2 C_i^2$, C_i - число отсчётов в спектре непрерывного рассеяния. α -

погрешность формирования спектра непрерывного рассеяния задаётся в параметрах поиска пиков.

Значения в каналах спектра фона полагаем коррелированными (если фон увеличился, то он увеличился, вероятно, во всех каналах). $K_{i,j} = \beta^2 B_i \cdot B_j$ для $i \neq j$, $K_{i,i} = B_i + \beta^2 B_i^2$. Такая коррелированность сохраняет свойство составной пуассоновской статистики для дисперсии $D(\sum B_i) = \sum B_i + \beta^2 (\sum B_i)^2$. Погрешностью вносимой неопределённостью спектра непрерывного рассеяния для фона пренебрегаем.

Здесь:

B_i – количество отсчётов в ***i*** – том канале спектра фона.

β – коэффициент изменчивости фона. Значение β задаётся в параметрах настройки спектрометра.

В итоге:

$$K_p^n = \max(K_p^{n-1}, (p^n - p^{n-1}) \cdot (p^n - p^{n-1})^T + (M_{jl}^n + G_0^{-1})^{-1})$$

Здесь

K_p^n, K_p^{n-1} - оценки ковариационной матрицы определяемых параметров на последнем и предпоследнем шаге процедуры решения.

$$p^n = (Z^n, w^n, A_1^n, ...A_N^n, a_1^n, ...a_N^n, b_1^n, ...c_N^n, c_1^n, ...c_N^n)$$

и

$$p^{n-1} = (Z^{n-1}, w^{n-1}, A_1^{n-1}, ...A_N^{n-1}, a_1^{n-1}, ...a_N^{n-1}, b_1^{n-1}, ...c_N^{n-1}, c_1^{n-1}, ...c_N^{n-1})$$

оценки параметров на последнем и предпоследнем шаге процедуры решения. То есть мы используем оценки погрешностей линеаризованной модели дополненной погрешностями, связанными с обрывом итерационного процесса (погрешности дрейфа спектрометра).

$M_{ji}^n = (W \cdot \frac{dM}{dp})^T \cdot (W \cdot \frac{dM}{dp})$ - матрица Гаусса - Ньютона рассчитанная на последнем шаге процедуры решения. Наша процедура решения формирует ковариационную матрицу параметров в матрице обратной матрице Гаусса - Ньютона.

$W = K_S^{-1/2}$ - матрица весов. K_S - ковариационная матрица вектора $M(p) - S$. Считаем её диагональной $K_S = D_S \cdot I$ (I – единичная матрица, D_S – вектор дисперсий) причем $D_{Si} = S_i + \eta^2 \cdot S_i^2 + \alpha^2 \cdot C_i^2 + (B_i + \beta^2 \cdot B_i^2)/t^2$, где $t = t_B / t_S$ отношение времени измерения фона и пробы.

G_0 - ковариационная матрица априорных данных.

Дисперсии оценок средних за время измерения активностей:

$\overline{Dxi} = \Pr es \cdot D_i / (b_i^n)^2$. Здесь:

$\Pr es$ - парциальные (рассчитанные в пределах объединения значимых областей определения коррелированных с *i*-м компонентом элементарных спектров) невязки для данного нуклида. Значимая область определения - область, где значения элементарного спектра отличны от нуля.

$D_i = K_p^n(i,i)$ - диагональный элемент ковариационной матрицы параметров для параметра A_i^n в режиме обработки спектров без поиска пиков и вычитания спектра непрерывного рассеяния.

$D_i = \max(H_i, K_p^n(i,i))$ - максимальное значение из порога детектирования *i*- го нуклида и диагонального элемента ковариационной матрицы параметров для

параметра A_i^n в режиме обработки спектров с вычитанием спектра непрерывного рассеяния.

$H_i = \min(\{(h \cdot S_{compj} / ((k(Z, e_j) \cdot q_j^i \cdot Eff(e_j) \cdot T_{meas}))^2\}_{j=1..n})$ - минимальное значение порога из значений, рассчитанных по всем *n* значащим линиям *i*-го нуклида.

h - значение порога детектирования задаваемое в параметрах настройки процедуры поиска пиков.

S_{compj} - интегральное значение спектра непрерывного рассеяния в области равной трём полуширинам пика для энергии e_j *j*-ой линии *i*-го нуклида.

q_j^i - квантовый выход *j*-ой линии *i*-го нуклида.

$Eff(e_j)$ - эффективность регистрации для энергии e_j.

b_i^n - коэффициент линейного энергетического дрейфа ($z = b \cdot x + d$) *i*-ой компоненты рассчитанный как коэффициент линейной регрессии оценённого нелинейного энергетического дрейфа, n - последняя итерация;

T_{meas} - время измерения.

Дисперсии оценок активностей на момент начала измерений для одиночных нуклидов, нуклидов равновесных цепочек и материнских нуклидов цепочек распада:

$$Dxi = \overline{Dxi} \cdot ((1 - \exp(-\lambda_i \cdot T_{meas})) / (\lambda_i \cdot T_{meas}))^2$$

λ_i - постоянная распада нуклида (постоянная распада материнского нуклида, обеспечивающего радиоактивное равновесие цепочки нуклидов, в случае цепочки нуклидов).

Дисперсии Dxi для нуклидов входящих в цепочку распада рассчитываются при решении системы интегральных уравнений описывающих распад и накопление нуклидов в процессе измерения:

$$\overline{X_n} = \left\{ \lambda_n \cdot \sum_{k=0}^{n} \int_0^{Tmeas} \frac{X_k}{\lambda_k} \cdot \prod_{i=0}^{k-1} \beta_i \cdot \lambda_i \cdot \left(\sum_{i=0}^{k} \frac{\exp(-\lambda_i \cdot t)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{k} (\lambda_j - \lambda_i)} \right) \cdot dt \right\} / T_{meas}$$

Решением является линейное преобразование $x = F \cdot \overline{x}$, соответственно:

$$Kx = F \cdot K\overline{x} \cdot F^T, \; Dxi = Kx_{ii}$$

Итоговая полная погрешность ***i*** - ой активности:

$$G_{Xi} = \sqrt{(E_0 \cdot Xi)^2 + (E_i \cdot Xi)^2 + 4 \cdot Dxi}.$$

E_0 - *погрешность метода* - дополнительная относительная погрешность. E_0 - связана с погрешностями определения массы пробы, нарушений геометрии и т.д. и т.п. В пакете «SPECTRRAD» E_0 задается как параметр декомпозиции.

E_i - относительная погрешность, рассчитанных при калибровке спектрометра, значений интенсивности компонентов разложения и связана с погрешностями аттестации эталонов, погрешностями расчёта элементарных спектров. E_i - *погрешность средства измерения* для конкретного нуклида.

Нюансами, связанными с рекомендуемой несимметричностью систематической погрешности для оценок положительно определённых величин ($U^{+} = \frac{\delta}{1-\delta}$ и $U^{-} = \frac{\delta}{1+\delta}$) решено пренебречь, поскольку пользователи пакета и к двум цифрам как результатам измерений с трудом привыкают, три цифры – это чересчур, тем более, что эти нюансы тонут в рекомендуемом представлении погрешности - не более двух цифр.

Оценка погрешности соответствует 95% доверительному интервалу.

Расчёт суммарной активности пробы

Суммарная активность - условная активность пробы равная интенсивности радиоактивного излучения от пробы. Суммарная гамма активность - число гамма квантов излучаемое пробой за 1 секунду, суммарная альфа и бета, соответственно, - число альфа и бета частиц в единицу времени. Поскольку спектрометр регистрирует излучение в ограниченном энергетическом диапазоне, можно говорить о суммарной активности пробы в определённом энергетическом диапазоне.

При обработке линейчатых спектров с поиском и выделением пиков:

$$A_{sum} = \sum (S_i(e) - F(e)) / Eff(e, Am, Z)$$

Здесь:

$S_i(e)$ - интенсивность ***i***-ого пика с энергией ***e***.

$F(e)$ - интенсивность фона в области ***i***-ого пика с энергией ***e***.

$Eff(e, Am, Z)$ - эффективность регистрации квантов излучения с энергией ***e*** в пиках полного поглощения для счётного образца с эффективной атомной массой Am и эффективным атомным номером Z.

Сумма вычисляется по всем пикам энергетического диапазона спектрометра. Без анализа нуклидного состава излучения невозможно выделить пики полного поглощения из общего набора найденных в спектре пробы пиков, поэтому оценка суммарной активности будет несколько завышенной за счёт включения в расчёт пиков утечки.

При обработке спектров, не имеющих линейчатой структуры или плохо разрешенных (обработка без выделения пиков):

$$A_{sum} = k(R_0, R_1) \cdot (\int (S(e) - F(e)) \cdot de) / ((\int Elem(nucl, e) \cdot de) / \sum Q_i(nucl))$$

Здесь:

$k(R_0, R_1) = \frac{R_1 \cdot fAtten(\rho_1, R_1)}{R_0 \cdot fAtten(\rho_0, R_0)}$ - коэффициент эффективности регистрации связанный с пробегом излучения в эталоне R_0 в г/кв.см и в счётном образце R_1 при измерениях в «толстом» слое.

Для гамма и бета излучения:

$$fAtten(\rho, R) = 1 - \exp(-\rho / R)$$

Для альфа излучения:

$fAtten(\rho, R) = 1 - sqrt(1 - (\rho / R)^2) + (\rho / R) \cdot \arccos(\rho / R)$ - для. ρ / R < 0.8.

$fAtten(\rho, R) = 1 - \exp(-\alpha \cdot \rho / R)$ - для. ρ / R > 0.8.

ρ - поверхностная плотность в г/кв.см, соответственно эталона и пробы.

α - коэффициент для связки двух функций.

$S(e)$ - интенсивность спектра пробы (***e*** - энергия).

$F(e)$ - интенсивность фона.

$Elem(nucl, e)$ - элементарный спектр нуклида ***nucl***, выбранного оператором для расчёта суммарной активности.

$Q_i(nucl)$ - квантовый выход ***i*** -ой линии нуклида ***nucl***.

Пробег квантов излучения в веществе счётного образца $R = f(E, Am, Z)$ является функцией средней начальной энергии излучения E и значений эффективной атомной массы Am и эффективного номера (заряда) Z атомов вещества счётного образца.

Пробег квантов излучения в пакете «SPECTRRAD» задаётся пользователем либо в виде таблиц, либо в виде формул в процедуре ввода и редактирования нормативов и констант для различных типов проб (см. «Нормативы и константы»). По умолчанию используются следующие формулы:

Для альфа излучения - $R = 10^{-4}\sqrt{Am \cdot E^3}$ г/кв.см (формула Уильяма Брэгга). Энергия E в МэВ.

Для бета:

$R = 0{,}19272464 \cdot \mathrm{E}^{1.4} \cdot Am / Z$ для начальной энергии электронов менее 0.8 МэВ,

$R = 0.4818116 * (0.54 * E - 0.133) \cdot Am / Z$ для начальной энергии электронов более 0.8 МэВ.

Для гамма: эффект образования пар не учитывается, комптоновское рассеяние учитывается перерасчётом элементарного спектра нуклида ***nucl*** на плотность электронов в счётном образце интерполяцией по спектрам эталонов с различной плотностью электронов, влияние фотоэффекта рассчитается по следующим формулам:

$R = Am/(kz \cdot ke \cdot Z^5)$

$kz = 4\pi \cdot R_e^2 \cdot a^4 \cdot N_a$, здесь: R_e - радиус электрона в см, a = 7.2973525376e-3 – постоянная тонкой структуры, N_a - число Авогадро.

$$ke = \frac{(2+e)^{1,5}}{e^{3,5}} \cdot \left\{ \frac{4}{3} + (1+e) \cdot \frac{e-1}{2+e} \cdot \left[1 - \ln\left(\frac{1+e+\sqrt{e \cdot (2+e)}}{1+e-\sqrt{e \cdot (2+e)}} \right) \right] \right\}$$

$e = E / 511$. Энергия E в кэВ.

Усреднённая по всем линиям попадающим в заданный энергетический диапазон регистрации квантов начальная энергия E для нуклида ***nucl*** рассчитывается при калибровке спектрометра и хранится в параметрах элементарного спектра. Средняя начальная энергия квантов излучения счётного образца для бета частиц рассчитывается процедурой обработки по положениям медиан элементарного спектра $Elem(nucl, e)$ и спектра пробы $S(e) - F(e)$, для альфа частиц либо задаётся оператором в параметрах пробы или спектрометра, либо рассчитывается по медианам спектров, если не задана в параметрах пробы.

Интеграл элементарного спектра рассчитывается по заданному в шаблоне обработки энергетическому диапазону, энергетический диапазон интеграла для спектра пробы умножается на коэффициент растяжения-сжатия, рассчитываемый по квартилям спектров пробы и эталона. Для уменьшения дополнительных погрешностей связанных с перерасчётом энергетического диапазона для пробы, оператор для расчёта суммарной активности должен выбрать нуклид, имеющий энергию излучения близкую к предполагаемой энергии регистрируемого излучения.

Сумма квантового выхода нуклида ***nucl*** берётся для всех линий с энергией линий (для линейчатых спектров) или граничной энергией (для непрерывных спектров) превышающей левую энергетическую границу выбранного диапазона.

Поскольку элементарные спектры нормированы на распад нуклида, а не на квант излучения, для корректного перерасчёта требуется в параметрах декомпозиции задать таблицу нуклидов соответствующую выбранному элементарному спектру. Например, если мы указали в качестве нуклида для расчёта суммарной активности Sr-90, а элементарный спектр Sr-90 содержит суммарный отклик Sr-90 и Y-90, в используемой таблице нуклидов Sr-90 должен быть представлен в виде равновесной цепочки Sr90+Y90.

Расчёт активности цепочки нуклидов

Активность нуклидов в выбранной ветви цепочки распада материнского нуклида описывается системой дифференциальных уравнений:

$$\frac{dN_0}{dt} = -\lambda_0 \cdot N_0$$

$$\frac{dN_1}{dt} = \beta_0 \cdot \lambda_0 \cdot N_0 - \lambda_1 \cdot N_1$$

. . . . . .

$$\frac{dN_n}{dt} = \beta_{n-1} \cdot \lambda_{n-1} \cdot N_{n-1} - \lambda_n \cdot N_n$$

Здесь:

N - число атомов нуклида,

λ - постоянная распада

β - доля выбранного перехода (ветви) в данном узле дерева распада.

Решение имеет вид:

$$N_n(t) = N_0 \cdot \prod_{i=0}^{n-1} \beta_i \cdot \lambda_i \cdot \left(\sum_{i=0}^{n} \frac{\exp(-\lambda_i \cdot t)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^{n} (\lambda_j - \lambda_i)}\right)$$

Активность $A(t) = \lambda \cdot N(t)$.

Содержание:

ОБЩИЕ ЗАМЕЧАНИЯ **3**

КРАТКАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА **3**

РАБОТА С ПАКЕТОМ **5**

Запуск. Главное окно 5
Главное меню 8
Клавиатура и мышь 16
«Всплывающие» меню 17
Окно «Спектрометры» 18
Проведение измерений 20
Создание общей группы спектрометров *20*
Запуск измерений *21*
Режим циклических измерений *29*
Автокалибровка *31*
Контроль фона *34*
Обработка спектров. Декомпозиция *36*
Меню 40
Ввод априорных данных 42
«Выбор дополнительных компонентов 47
Ввод данных в программу калькулятора 48
Расчёт суммарной активности 48
Обработка спектров. Поиск пиков *49*
Обработка спектров. Радиометрия *51*
Отчёт о результатах обработки *51*
Настройка формы отчёта 56
Редактирование отчёта 61
Список найденных пиков 63
Дополнительные возможности 64
Сохранение отчета 64
Отчет о результатах радиометрии 64
Редактирование параметров декомпозиции 64
Инструкция *67*
Архив результатов измерений 69
Структура архива *69*
Главное окно *70*
Меню *71*
Создание архива *75*
Настройка архива *76*
Редактирование архива *85*
Групповая обработка спектров *92*
Поиск записей *93*
Статистическая обработка результатов измерений *94*
Формирование отчёта *104*
Метки статистического отчёта *104*
Коды колонок *111*
Выборка *113*
Суммарный отчёт *115*
Создание графиков, контрольных карт Шухарта *115*
Чистка архива *124*

ФАЙЛЫ И ПРОГРАММЫ **126**

Структура и размещение 126
Программы: 126
Файлы: 126

УСТАНОВКА **129**

Лицензия 129

Установка ключа защиты 129
Удаление драйвера *130*
Правила эксплуатации *130*
Установка программ пакета 131
Установка драйвера спектрометров 131
Режим доступа 132
Создание таблиц нуклидов 133
Установка спектрометра 146
Установка геометрии измерений 154
Расчёт глубины детектора *163*
Расчёт эффективности регистрации *166*

НАСТРОЙКА 170

Настройка процедуры измерений 170
Настройка общих параметров *170*
Режим циклических измерений *171*
Контроль загрузки *174*
Наблюдение за набором *174*
Калибровка спектрометра 175
Энергетическая калибровка спектрометра *175*
Калибровка ширины пиков *182*
Установка параметров автокалибровки *185*
Установка спектра фона в программу обработки *189*
Калибровка эффективности регистрации *192*
Особенности калибровки эффективности регистрации для детекторов с высокой эффективностью регистрации *205*
Расчёт эффективности регистрации для объёмных или плоских геометрий по эффективности регистрации точечного источника *206*
Расчёт элементарных спектров из спектров эталонов *207*
Расчёт моделей пиков *214*
Расчёт моделей линий *221*
Расчёт моделей линий для альфа спектров *225*
Расчёт элементарных спектров по таблице линий *230*
Радиометрия. Установка параметров 234
Настройка процедуры поиска пиков 237
Создание шаблонов декомпозиции 240
Общие понятия *240*
Вызов процедуры создания шаблона *240*
Выбор компонентов разложения *241*
Расчёт суммарной активности *242*
Параметры декомпозиции *245*
Измерение радона, предварительная обработка спектра фона *256*
Формирование отчёта *259*
Метки шаблона отчёта *262*
Программа калькулятора *268*
Сохранение шаблона *269*
Калькулятор 270
Назначение *270*
Термины *270*
Структура программы калькулятора *270*
Предопределенные переменные *271*
Синтаксис программы *274*
Последовательность выполнения операций *275*
Условный оператор *275*
Оператор цикла *276*
Функции *276*
Процедуры *277*
Ввод, вывод *278*
Сообщения об ошибках *279*
Пример программы *281*

Нормативы и константы ... 282
Структура ... *282*
Главное окно ... *283*
Меню ... *284*
Ввод формул химического состава пробы ... *285*
Расчёт сечения реакций ... *287*
Нормативы ... *289*
Изменение списка нуклидов ... *290*
Редактирование группы нормативов ... *290*
Таблицы нуклидов ... 292
Назначение ... *292*
Структура таблиц ... *292*
Программа «Таблица нуклидов». Главное окно ... *296*
Меню ... *298*
Настройка программы ... *301*
Редактирование записей ... *302*
Формирование равновесных цепочек ... *305*
Формирование неравновесных цепочек ... *312*
Создание смеси нуклидов ... *319*
Учёт линий утечки и сложения каскадных ... *320*
Расчёт активности нуклидов схемы распада ... *321*
Аттестат эталона ... *332*

ПРИЛОЖЕНИЯ ... 333

Определение Ra-226 гамма спектрометрическими методами ... 333
Пример программы расчета параметра соответствия ... 338
Пример программы расчета объемной активности радона ... 339
Пример шаблона отчёта ... 340
Пример шаблона отчёта для выборки ... 341
Пример шаблона статистического отчёта ... 342
Пример шаблона контрольной карты ... 343
Образец контрольной карты ... 344
Математика ... 345
Энергетическая калибровка ... *345*
Калибровка ширины пиков ... *346*
Калибровка эффективности регистрации ... *346*
Расчёт элементарных спектров из спектров эталонов ... *347*
Расчёт спектров линий ... *348*
Расчёт элементарных спектров по таблице линий ... *349*
Поглощение излучения в веществе пробы ... *350*
Интерполяция таблиц и спектров компонентов ... *353*
Поиск пиков ... *353*
Аппроксимация спектра непрерывного рассеяния ... *354*
Учёт каскадных переходов ... *354*
Расчёт активностей и оценка погрешностей ... *356*
Расчёт суммарной активности пробы ... *362*
Расчёт активности цепочки нуклидов ... *364*

Пакет программ "SPECTRRAD" постоянно развивается. За информацией обращаться по телефону, электронной почте:

Телефон: +7-910-420-01-96 - Дрёмин Геннадий Иванович
E-mail: ***gidremin@gmail.com***, ***gidremin@mail.ru***
Https: ***spectrrad.ru***