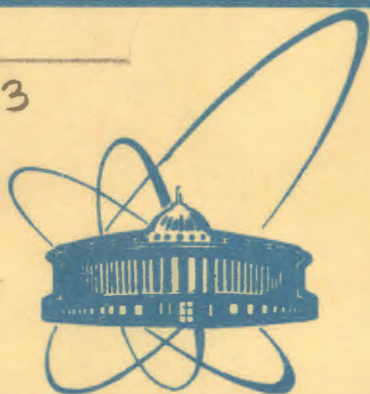


Г-13



СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

5604/2-79

2/1-80

P10 - 12724

В.Гаджоков, Ив.Пенев, Л.Александров

ПОТОЧНАЯ ОБРАБОТКА
ДИСКРЕТНЫХ СПЕКТРОВ ЯДЕРНЫХ ИЗЛУЧЕНИЙ
ПРИ ПОМОЩИ АВТОРЕГУЛЯРИЗОВАННОГО
ИТЕРАЦИОННОГО ПРОЦЕССА
(ПРОГРАММА КОЛОВОК)

1979

Гаджиков В., Пенев Ив., Александров Л.

P10 - 12724

Поточная обработка дискретных спектров ядерных излучений при помощи авторегуляризованного итерационного процесса /Программа KØLØBØK/

Дано краткое описание программы KØLØBØK, предназначенной для поточной обработки дискретных спектров с симметричной гауссовской формой линии на ЭВМ серии ЕС моделей 1020 и выше. Программа решает поток нелинейных задач, порожденных дискретной спектрометрией, при помощи авторегуляризованного итерационного процесса. В приложении приведен текст программы на языке ФОРТРАН-IV.

Настоящая работа начата в ИЯИЯЕ Болгарской АН /София/ и окончена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1979

Gadjikov V., Penev Iv., Aleksandrov L.

P10 - 12724

Streamline Processing of Discrete Nuclear Spectra by Means of Autoregularized Iteration Process (the KØLØBØK Code)

A brief description of the KØLØBØK computer code designed for streamline processing of discrete nuclear spectra with symmetric Gaussian shape of the single line on computers of the ES series, models 1020 and above, is given. The program solves the stream of discrete-spectrometry generated nonlinear problems by means of autoregularized iteration process. The Fortran-IV text of the code is reported in an Appendix.

This work was begun at the Institute of Nuclear Research and Nuclear Energy of the Bulgarian Academy of Sciences, Sofia, and completed in the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1979

1. ВВЕДЕНИЕ

Во время выполнения программы ЯСНАПП ^{/1,2/}, при разработке методики спектрометрирования излучения радиоактивных нуклидов с помощью полупроводниковых детекторов ^{/3-10/} и при использовании этих детекторов для прецизионной спектрометрии гамма-лучей ^{/11/} программа КАТØК ^{/12/} являлась основным средством математической обработки дискретных ядерных спектров. Ввод в действие новых вычислительных мощностей поставил задачу запуска программы на новых ЭВМ с учетом накопленного опыта ее долголетней эксплуатации. Недавно усовершенствованный вариант программы КАТØК на ФОРТРАНЕ-IV был запущен на малых ЭВМ "Хьюлет-Паккард 2116 и 21МХ", а также на машине ИЗОТ-310 ^{/13-15/}. В настоящей работе описана вкратце программа KØLØBØK для ЭВМ серии ЕС типов 1020 и выше, которая решает ту же задачу при помощи более совершенных математических ^{/16-18/} и программных ^{/19/} средств. Хронологически программа KØLØBØK была написана ранее, чем КАТØК на ФОРТРАНЕ-IV; авторы сожалеют, что по техническим причинам подготовка настоящей работы задержалась приблизительно на год.

2. ПОТОК ОДНОТИПНЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ДИСКРЕТНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

При определенных физических и математических условиях ^{/13-15/} исходный спектр, подлежащий обработке, можно разбить на участки, содержащие изолированные скопления спектральных линий. Каждому такому участку соответствует своя переопределенная система нелинейных уравнений относительно искомым параметров спектра

/т.е. относительно позиций и площадей отдельных линий /.
Совокупность всех порожденных исходным спектром та-
ких систем будем называть потоком однотипных нелиней-
ных задач дискретной спектрометрии. Предполагая, что
форма одиночной линии - гауссовская, что ширина участ-
ка позволяет нам считать полуширины отдельных линий
одинаковыми и что при обработке учитывается интегриро-
вание распределения импульсов в пределах каждого кана-
ла регистрирующего анализатора, каждую задачу потока
можно записать в виде /13/

$$Y_q = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^k S_i [J(T_{qi}) - J(P_{qi})] + \sum_{j=0}^r a_j q^j, \quad (2.1)$$

$$q = q_{in}, q_{in} + 1, \dots, q_{end}.$$

Здесь q_{in} - начальный канал участка;
 q_{end} - конечный канал участка;
 k - число гауссианов на участке;
 S_i - площадь i -го пика;
 a_j - коэффициенты полинома, представляющего
фоновую подложку;
 r - степень фонового полинома;
 $J(y)$ - обозначение интеграла ошибок $\int_{-y}^{-u^2} e^{-u^2} du$;

T_{qi} и P_{qi} соответственно выражаются как

$$\left. \begin{aligned} T_{qi} &= (q - p_i) / \sigma\sqrt{2} \\ P_{qi} &= (q - p_i - 1) / \sigma\sqrt{2}, \end{aligned} \right\} (2.2)$$

причем p_i - позиция максимума i -го пика, а σ связа-
на с полной шириной линии на половине высоты h соот-
ношением

$$h = 2\sqrt{2 \ln 2} \sigma. \quad (2.3)$$

Заметим, что левые части системы (2.1) - это непосред-
ственно измеряемые числа импульсов в каналах. Они под-
вержены статистическому разбросу, оцениваемому в $\sqrt{Y_q}$,
и поэтому каждому уравнению можно сопоставить вес

$$w_q = 1/Y_q. \quad (2.4)$$

Путем переноса левых частей (2.1) вправо систему
эту можно записать в виде

$$f x = 0, \quad (2.5)$$

где $f \in C^1$ - нелинейный оператор из (2.1), отображающий
пространство R^n на R^m , а $x = \text{col}(h, p_1, S_1, \dots, p_k, S_k, a_0, a_1, \dots, a_r)$ -
вектор неизвестных. Очевидно,

$$m = q_{end} - q_{in} + 1, \quad (2.6)$$

$n = 2k + r + 2$,
причем $m > n$, т.е. исходная система переопределена.

Поток однотипных нелинейных задач дискретной спект-
рометрии состоит из большого числа M систем типа (2.1)
или (2.5) с разными значениями размерностей m, k и r .
Программа КОЛОВОК, так же как и КАТОК, решает все
системы такого потока как одну большую задачу.

3. МЕТОД РЕШЕНИЯ

По ряду причин, подробно разобранных в /13/, для
задач потока характерна плохая обусловленность итера-
ционных шагов, из-за чего классические методы их ре-
шения часто приводят к расходимости. Кроме того, среди
них может встретиться ограниченное число полных задач
на отыскание скрытых закономерностей /20/, которые вы-
рождены в точке решения *a priori* и, следовательно, не
подлежат решению обычными градиентными методами. Это
выдвигает следующие требования к используемому алго-
риту:

- широкая область сходимости, т.е. нечувствительность
к неточным начальным приближениям, задаваемым
разметкой участков в диалоговом режиме с указа-
нием характерных точек /21/;
- быстродействие /ввиду большого числа решаемых
задач/;
- универсальность, т.е. способность решить все зада-
чи данного потока независимо от степени их слож-
ности.

Этим требованиям удовлетворяет алгоритм, состоящий из
следующих шагов:

- а) Построение вектора начальных приближений x^0 из
координат характерных точек.
- б) Автоматическая перенормировка (scaling) в целях
понижения числа обусловленности итерационных шагов /13/.

в) Авторегуляризованный итерационный процесс /16-18/

$$x^{\circ}: x^{t+1} = x^t - [f'(x^t)Wf'(x^t) + \alpha^t I]^{-1} f'(x^t)Wf x^t, (3.1)$$

где t - номер итерации;

$f'(x^t)$ - производная оператора f в точке x^t /черта сверху является знаком транспонирования/;

W - диагональная матрица весов из (2.4);

I - единичная матрица ранга n ;

α^t - скаляр, выражаемый как явная функция $\|f x^t\|$ /18,19/

Критерием достижения решения является минимум невязки, нормированной по числу степеней свободы и учитывающей матрицу весов

$$\theta = \sqrt{f x W f x / (m-n)}, (3.2)$$

откуда видно, что найденное решение является также решением в смысле наименьших квадратов.

г) Проверка физической значимости решения /18,20/.

Считается, что решение имеет физический смысл, если

$$S_i > Y_q^{(min)} / 25, \quad i = 1, 2, \dots, k, (3.3)$$

где $Y_q^{(min)}$ - минимальное число отсчетов на обрабатываемом участке, и если

$$|p_i - p_j| > h / 25, \quad i, j = 1, 2, \dots, k, \quad i \neq j. (3.4)$$

При выполнении неравенств (3.3) и (3.4) следует перейти к пункту д), в противном же случае - провести редукцию задачи /освободиться от лишних пиков/ и вернуться к а).

д) Оценка наследственных ошибок компонентов вектора неизвестных /18,19/.

Шаги а)-д) повторяются M раз, т.е. применяются последовательно ко всем задачам обрабатываемого потока.

4. ПРОГРАММА КОЛОБОК

Программа КОЛОБОК состоит из 17 модулей, написанных на ФОРТРАНе-IV. Одиннадцать из них заимствованы из /19/ и представляют собой программный пакет общего назначения REGN-COMPIL, предназначенный для решения не-

линейных систем уравнений. Шесть дополнительных модулей, текст которых приведен в Приложении, реализуют шаги 3.а), 3.б) и 3.г) алгоритма, а также осуществляют общую организацию обработки потока. Объем программы вместе с рабочими массивами - около 100 килобайтов оперативной памяти. КОЛОБОК воспринимает ввод в формате, идентичном описанному в /18/, и может работать под управлением ДОС ЕС на всех моделях серии от 1020 и выше. Выход программы включает все физические параметры спектра и фоновой подложки с оценками их наследственных ошибок. Пробная обработка тестовых потоков по программам КАТОК /12/, КАТОК-F /13-15/ и КОЛОБОК показала полное совпадение результатов в соответствующих коридорах наследственных ошибок.

Авторы выражают благодарность коллективу измерительно-вычислительного центра Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ за содействие во время отладки и окончательного запуска программы.

ПРИЛОЖЕНИЕ

```

C      PROGRAM MAIN
C
C      COMMON/CONST/SGPI,SGPI 2,SG 2
COMMON/IDENT/IDENTF(36)
COMMON/FLAG/NOIRAS,IRMMIN
C
FLAG(1,111)IDENTF
111  FORMAT(36A2)
FLAG(1,112)IRMMIN
112  FORMAT(I3)
ND=16
MONTH=02
LY=1979
SGPI=1.7724539
SGI2=.88622693
SG2=1.4142136
CALL GASYN(ND,MONTH,LY)
STOP
END

```

```

C      SUBROUTINE GASINF(INF,NX,NY,NP,FC,Y,X)
      DIMENSION X(NX),Y(NY)
      DIMENSION W(100)
      COMMON/FLAG/NOMAS,MMMMM
C
      INF=0
      READ(1,1000)NY,K,L,P
      NX=2*K+NP+2
      IF(NOMAS.EQ.MMMMM)INF=INF-1
      INF=INF-1
      READ(1,999)FC
      READ(1,998)(Y(I),I=1,NY)
      NW=4*K
      READ(1,997)(W(I),I=1,NW)
      X(1)=0.0
      DO 410 I=1,K
      I1=4*(I-1)+1
      I2=I1+1
      I3=I2+1
      I4=I3+1
      QDEL=ABS(W(I1)-W(I3))
      YDEL=W(I2)-W(I4)
      IF(YDEL)405,406,406
405 X(2*I)=W(I3)
      GO TO 407
406 X(2*I)=W(I1)
407 X(2*I+1)=QDEL*ABS(YDEL)
      X(1)=X(1)+QDEL
410 CONTINUE
      X(1)=X(1)/FLOAT(K)
      YGMIN=1.0E+20
      DO 420 I=1,NY
      IF(Y(I).LT.YGMIN)YGMIN=Y(I)
420 CONTINUE
      X(2*I+2)=YGMIN
      IF(NP.GT.0)GO TO 425
      RETURN
425 DO 430 I=1,NP
      I1=2*K+2+I
430 X(I1)=0.0
      RETURN
C
      997 FORMAT(4F7.0)
      998 FORMAT(10F7.0)
      999 FORMAT(F7.0)
      1000 FORMAT(3I3)
      END

```

```

      SUBROUTINE GASYM(ND,NM,NY)
      16 FEBRUARY 1979
C
      COMMON/OUTN/ITN,KPN,KPFN/LC/LC/TYP/K,KK/ARPN/TN,AIN/ITS/ITS
      1/CRITW/ROMW,RMW,REVW,CDI,EPSIW,TAUIW/LINTL/LINTL
      2/DROPX/DX(100)/SIGMA/SIGMA(100)/X/X(10)/LINT/LINT/NPN/NPN
      3/KGSN/KGSN/LCH/LCH/CINT/C(15)/MARQ/MARQ
      4/RPBC/ADN,SN,TTN,TTM,C3N
      5/CONST/SQPI,SQPI 2,SQ 2/COEFK/CHK(40),CLL,HOP,NPOL
      COMMON/IDENT/IDENTF(36)
      COMMON/FLAG/NOMAS,MMMMM
      DIMENSION Z(40,40),XX(40),YF(300),ZL(40,40)
      DIMENSION YYR(300)
      DIMENSION NYRK(100),NYRC(100),NPRINT(11)
      INTEGER IFM,NOX,NOY,NP
      REAL FCAN
C
      WRITE(3,503) ND,NM,NY
C
      K=3
      KK=3
C
      NPN=1
      LCH=0
C
      LC=0
      ITS=0
      TN=0.
C
      C3N=.01
      SN=.1
      TTM=.1
      TTN=1.
      LINTL=20
      D=0.
      MARQ=0
      LINT=60
      ITS=0
      EI=-1.
C
      WRITE(3,501)IDENTF
      ITN=15
      AIN=0.0
      C(3)=0.00054
      KGSN=1
      KPN=0
      KPFN=3
      NOMAS=0
521 NOMAS=NOMAS+1
      WRITE(3,502) NOMAS
C
      CALL GASINF(INF,NOX,NOY,NP,FCAN,YYR,XX)
      NPOL=NP
      NFC=FCAN+0.5
      WRITE(3,504) NOX,NOY,NFC,NPOL
      DO 522 I=1,NOY
      YF(3*(I-1)+1)=YYR(I)

```

```

522 CONTINUE
523 CONTINUE
524 CONTINUE
XX(1)=XX(1)/(2.*SQRT(2.*ALOG(2.)))
DO 525 I=1,NOY
CONTINUE
IF(YR(3*(I-1)+1))200,200,300
200 YR(3*(I-1)+2)=0.38
GO TO 525
300 CONTINUE
YR(3*(I-1)+2)=YR(3*(I-1)+1)
H=FLOAT(1)
YR(3*(I-1)+3)=H+FCAN-1.
525 CONTINUE
C
CLL=- (YR(3*(NOY-1)+3)+YR(3))/2.
NOP=(NOX-NPOL-2)/2
ITNIP=ITN
M=3*NOY
IFF=0
DO 526 I=1,M
YYR(1)=YR(1)
526 CONTINUE
5260 CONTINUE
IF(NPOL+1)7010,7010,401
401 CONTINUE
CMM(2*NOP+2)=500.
XX(2*NOP+2)=XX(2*NOP+2)/CMM(2*NOP+2)
IF(NPOL)7010,7010,402
402 CONTINUE
H=2./(YR(3*(NOY-1)+3)+CLL)
DO 701 I=1,NPOL
CMM(2*NOP+2+I)=H*I*500.
XX(2*NOP+2+I)=XX(2*NOP+2+I)/CMM(2*NOP+2+I)
701 CONTINUE
7010 AR=6.0
DO 702 I=1,NOP
CMM(2*I+1)=XX(2*I+1)/AR.
CMM(2*I)=1.0
702 CONTINUE
CMM(1)=1.0
XX(1)=XX(1)/CMM(1)
DO 703 I=1,NOP
IP=2+I
IS=IP+1
XX(IP)=XX(IP)/CMM(IP)
XX(IS)=XX(IS)/CMM(IS)
703 CONTINUE
IF(IFF)100,100,10700
100 CONTINUE
NYRN(1)=IFIX(FCAN/10.)*10
NFC=FCAN
NLC=NFC+NOY-1
H=NLC
NDELL=9-NLC+IFIX(H/10.)*10
NDELF=NFC-NYRN(1)
NFUL=NOY+NDELF+NDELL
DO 1010 I=1,NFUL
NYRN(1)=1+NYRN(1)-1
IF(1-NDELF)1020,1020,1030

```

```

1020 NYRC(1)=-8386600
GO TO 1010
1030 CONTINUE
IF(NFUL-1-NLELL)1040,1050,1050
1040 NYRC(1)=-8386600
GO TO 1010
1050 NYRC(1)=YR(3*(1-NDELF)-2)
1010 CONTINUE
NFUL=NFUL/10
DO 1070 I=1,NFUL
NFC=(1-1)*10+1
DO 1060 J=1,10
NPRINT(1)=NYRN(NFC)
NPRINT(J+1)=NYRC(NFC+J-1)
1060 CONTINUE
WRITE(3,1500)NPRINT
1070 CONTINUE
10700 CONTINUE
H=XX(1)*CMM(1)*2.*SQRT(2.*ALOG(2.))
WRITE(3,1510)H,CMM(1)
DO 1080 I=1,NOP
IP=2+I
IS=IP+1
H=XX(IP)*CMM(IP)
HH=XX(IS)*CMM(IS)
HC=CMM(IP)
HHC=CMM(IS)
WRITE(3,1520)I,H,HC,I,HH,HHC
1080 CONTINUE
IF(NPOL)11000,1090,1090
1090 CONTINUE
HH=CMM(2*NOP+2)
H=XX(2*NOP+2)*HH
WRITE(3,1530)H,HH
IF(NPOL-1)11000,1095,1095
1095 CONTINUE
DO 1100 I=1,NPOL
HH=CMM(2*NOP+2+I)
H=XX(2*NOP+2+I)*HH
WRITE(3,1540)I,H,HH
1100 CONTINUE
11000 CONTINUE
C
M=NOY*3
N=NOX
CALL COMPIL(M,N,D,LI,Z,ZL,XX,YR)
C
SOL=SQRT(REVV/(NOY-NOX-1))
WRITE(3,520)SOL
DO 705 I=1,NOX
SIGMA(1)=SIGMA(1)*CMM(1)
XX(1)=XX(1)*CMM(1)
705 CONTINUE
IFF=0
ACR=2.*SQRT(2.*ALOG(2.))*XX(1)/25.
NOP1=NOP-1
IF(NOP1)527,527,900
900 CONTINUE
DO 560 I=1,NOP1
IP=2+I

```

```

FUNCTION EFSEK(U)
DIMENSION AR(25)
REAL N,Z
DATA      AN/-3.3333333E-1,-3.E-1,-2.38E9524E-1,-1.9444444E-
D1,-1.6363636E-1,-1.4162564E-1,-1.238E952E-1,-1.1E29412E-1,-9.94152
D25E-2,-9.047619E-2,-8.3E3953E-2,-7.6666667E-2,-7.1225071E-2,-6.65
D02463E-2,-6.2365591E-2,-5.8712121E-2,-5.546E185E-2,-5.2552553E-2,-
D4.9932524E-2,-4.7560976E-2,-4.54E4208E-2,-4.3434343E-2,-4.1628122E
D-2,-3.9965986E-2,5.E-5/
Z=U**2
IF(Z-6.25)26,26,23
23 IF(U)24,24,25
24 EFSEK=-0.88622693
GO TO 26
25 EFSEK=+0.88622693
GO TO 28
26 EFSEK=U
N=U
I=0
27 I=I+1
N=AN(I)*N**Z
EFSEK=LESEK+N
LIV=ADS(N)
DIV=DIV-AR(25)
IF(DIV)28,27,27
28 CONTINUE
RETURN
END

```

```

SUBROUTINE RELADI(N,NP,INDEX,T,Y,DF)
COMMON/X/X(I0)/CONST/SGPI,SQPI 2,SG 2/COEFM/CMM(40),CLL,NOP,NPOL
DIMENSION T(N),DF(N)
Y=0.
DF(1)=0.
DESI=CMM(1)*T(1)*SG 2
DO 801 I=1,NOP
IF=2*I
IS=IP+1
XPO=X(I)-CMM(IP)*T(IP)
XPI=XPO-I.
A=XPI/DESI
B=XPO/DESI
DF(IS)=CMM(IS)*(EPSEK(B)-EPSEK(A))/SQPI
Y=Y+DF(IS)*T(IS)
C=CMM(IS)*T(IS)/(DESI*SQPI)
B=EPEK(B)
A=EPEK(A)
DF(IP)=C+CMM(IP)*(A-B)
DF(1)=DF(1)+C*(XPI*A-XPO*B)/T(1)
801 CONTINUE
IF(NPOL+1)802,802,401
401 CONTINUE
IS=2*NOP+2
DF(IS)=CMM(IS)
Y=Y+DF(IS)*T(IS)
IF(NPOL)802,802,402

```

```

402 CONTINUE
A=X(1)+CLL
C=1.
DO 803 I=1,NPOL
IP=IS+1
C=A*C
DF(IP)=CMM(IP)*C
Y=Y+DF(IP)*T(IP)
803 CONTINUE
802 CONTINUE
RETURN.
C
END

```

ЛИТЕРАТУРА

1. Арлт Р. и др. ЭЧАЯ, 1974, 5, 4, сс 843-891.
2. Громов К.Я. и др. ЭЧАЯ, 1975, 6, 4, сс 971-1039.
3. Цупко-Ситников В.М. ОИЯИ, Д-10, 11-8450, Дубна, 1974, сс 285-307.
4. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р6-9071, Дубна, 1975.
5. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р6-9072, Дубна, 1975.
6. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р6-9073, Дубна, 1975.
7. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р6-10414, Дубна, 1977.
8. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р,-10415, Дубна, 1977.
9. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р6-10416, Дубна, 1977.
10. Вылов Ц. и др. ОИЯИ, Р6-11085, Дубна, 1977.
11. Вылов Ц. ОИЯИ, Р6-10417, Дубна, 1977.
12. Гаджоков В. ПТЭ, 1970, №5, сс. 82-85.
13. Gadjokov V. JINR, E10-12352, Dubna, 1979.
14. Gadjokov V. JINR, E10-12353, Dubna, 1979.
15. Gadjokov V. JINR, E10-12354, Dubna, 1979.
16. Александров Л. ОИЯИ, Р5-5136, Дубна, 1970.
17. Александров Л. ОИЯИ, Р5-5137, Дубна, 1970.
18. Александров Л. ОИЯИ, Р5-5515, Дубна, 1970.
19. Александров Л. ОИЯИ, Б1-5-9969, Дубна, 1976.
20. Aleksandrov L., Gadjokov V. J.Radioan.Chem., 1971, 9, p.279-292.
21. Гаджоков В. Ядрена Енергия, 1979, № 9, сс 63-75.

Рукопись поступила в издательский отдел
8 августа 1979 года.