

6655

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАЛА

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

P10-6655



В.Гаджоков

ПРОГРАММА КАТОК-Б

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

1972

P10-6655

В.Гаджиков

ПРОГРАММА КАТОК-Б

ОИ И
БИБЛИОТЕКА

Программа КАТОК-Б

Описаны изменения, введенные в программу "КАТОК", предназначенную для обработки спектров от германиево-литиевых детекторов на ЭВМ Минск-2(22). Новый вариант программы при той же точности работает в 4 раза быстрее существующего. Приведены результаты численного эксперимента, в котором спектральные участки были обработаны для сравнения по обоим вариантам программы.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1972

Gadjikov V.

P10-6655

КАТОК-В Program

The changes are described introduced into the KATOK program for processing spectra from Ge-Li detectors on Minsk-2 (-22) computers. The new program version runs four times faster than the previous one, conserving the same precision. For the sake of comparison, the results of a numerical experiment are given in which sample spectra were processed with both the old and the new versions of the program discussed.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1972

Подавляющее большинство существующих программ обработки спектров не учитывает интегрирования распределения импульсов на выходе спектрометрического тракта в пределах одного канала многоканального анализатора. Это общепринятое упрощение берет свое начало от "сцинтилляционной" эпохи ядерной спектроскопии, когда измеряемые пики были широки по сравнению с одиночным каналом, а поправки на интегрирование пренебрежимо малы. При современных разрешающих способностях, однако, дисперсии σ^2 одиночных пиков сравнимы с шириной канала, учет этих поправок позволяет улучшить точность конечных результатов. Почти повсеместное пренебрежение интегрированием не случайно: нелинейная задача обработки спектров достаточно сложна и ее решение традиционными методами зачастую наталкивается на непреодолимые трудности (расходимость итерационной процедуры). Отсюда вытекает стремление избежать дополнительных усложнений даже ценой заведомого искажения математической модели.

В программе КАТОК^{/1/} реализован алгоритм, представляющий собой частный случай регуляризованного итерационного процесса Ньютона-Канторовича^{/2,3/}. Арифметический блок программы построен с учетом интегрирования в пределах одного канала анализатора при предположении

симметричного гауссовского распределения импульсов в пике полного поглощения. Как показал двухлетний опыт эксплуатации программы, несмотря на это усложнение вычислительный процесс обработки спектральных участков сходится во всех случаях, имеющих физический смысл. Более того, благодаря регуляризации сходимость сохраняется и при намеренно заданной извне вырожденности задачи, что предоставляет возможность применять подход скрытых закономерностей^{/4/} к обработке сложных участков спектров с неизвестным числом пиков.

В процессе обработки спектров программе приходится вычислять многократно определенные интегралы типа

$$J = \int_a^b N(x) dx, \quad (1)$$

где $N(x)$ - амплитудное распределение импульсов на выходе спектрометрического тракта, a и b - соответственно нижний и верхний пороги некоего канала. Для оценки этих интегралов использовался метод Гаусса. Между тем, если $N(x)$ представляет собой симметричное гауссовское распределение, то нетрудно видеть, что путем элементарных преобразований выражение^{/1/} сводится к

$$J = c \left[\int_{-b}^b e^{-x^2} dx - \int_{-a}^a e^{-x^2} dx \right], \quad (2)$$

где c - множитель, не зависящий от x , a и b . Оба интеграла в квадратных скобках берутся уже в симметричных пределах и для их оценки можно применить известное разложение в степенной ряд^{/5/}

$$\frac{1}{2} \int_{-a}^a e^{-x^2} dx = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{a^{2n+1}}{(2n+1)n!}. \quad (3)$$

С чисто вычислительной точки зрения степенной ряд оценивается значительно легче, чем определенный интеграл (предполагая сходимость

того и другого). Ряд же (3) имеет вдобавок следующие преимущества:

а) он знакопеременен и начиная с определенного n его члены монотонно убывают по модулю, что позволяет легко оценивать точность его расчета;

б) при росте a , когда сходимость замедляется, его сумма стремится к постоянной величине $\sqrt{\pi}/2$;

в) его соседние члены t_n и t_{n+1} связаны простой рекуррентной формулой

$$t_{n+1} = -a^2 \frac{2n+1}{(2n+3)(n+1)} \cdot t_n \quad (4)$$

Второй множитель правой части ^{/4/} не зависит от пределов интегрирования и может быть задан в виде таблицы.

Логическая схема нового блока программы, рассчитывающего выражения ^{/2/}, представлена на рис. 1. Блок расписан в тех ячейках памяти, где ранее находилась подпрограмма численного интегрирования по методу Гаусса. Для сохранения прежней абсолютной точности в 0,0001 каждый из двух членов формулы ^{/2/} вычисляется с ошибкой, не превышающей 0,00005. Связь с основной программой КАТОК осуществлена так, что новый вариант КАТОК-Б внешне ничем не отличается от предыдущего, т.е. операторская инструкция осталась без изменений. В целях сравнения быстродействия двух вариантов времена обработки двух групп спектральных участков приведены в таблице.

Автор выражает свою искреннюю благодарность коллективу эксплуатации ЭВМ Минск-2 ОЯСиРХ ЛЯП ОИЯИ за содействие во время отладки.

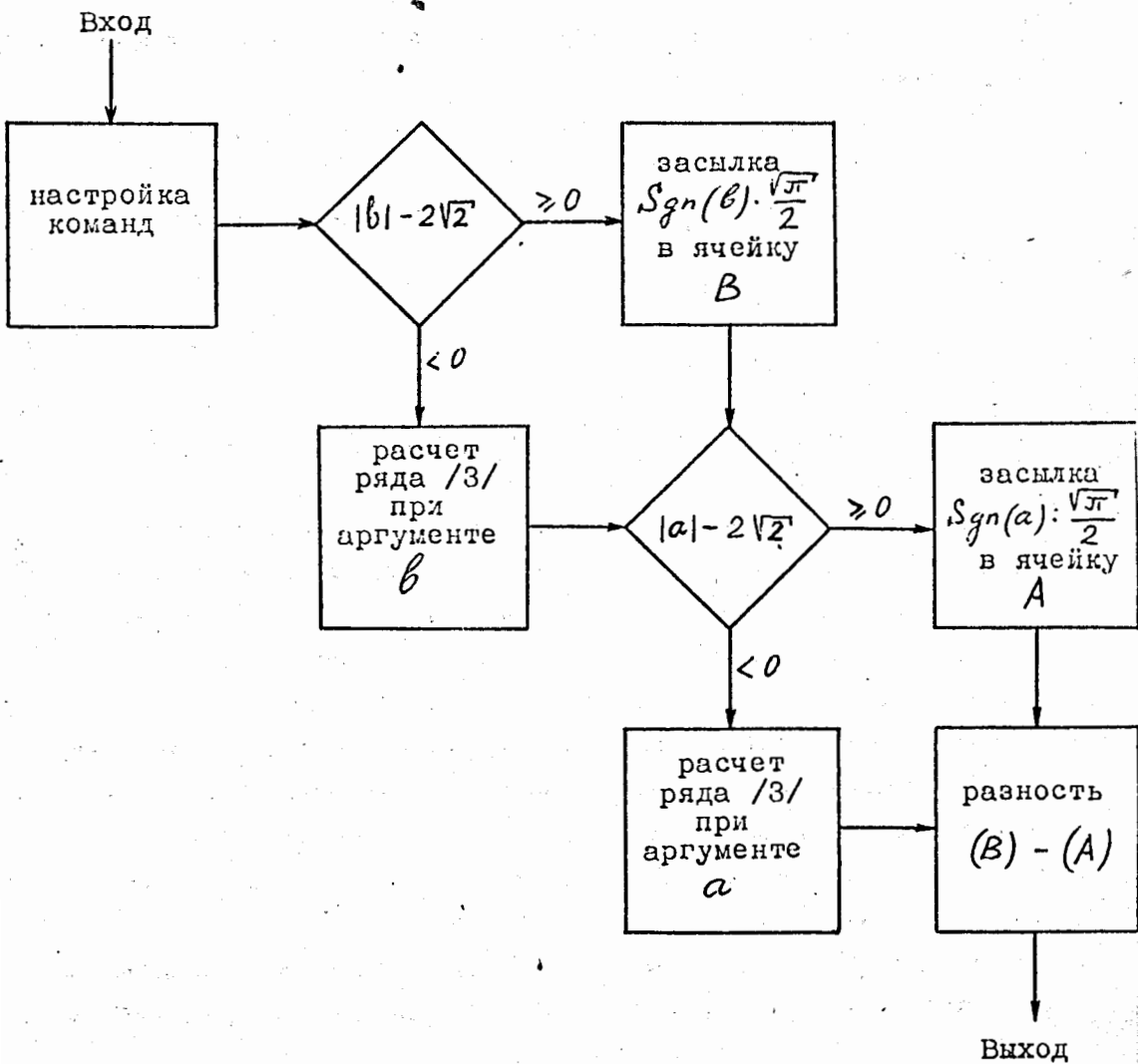


Рис. 1. Блок-схема подпрограммы, вычисляющей выражение /2/.

Таблица.

№ группы	число участков в группе	структура участков		время обработки		фактор выигрыша по времени
		число пиков	степень фона	КАТОК	КАТОК-Б	
1	1	3	1	14' 50"	3' 30"	4,24
2	5	1	1	48' 20"	11' 10"	4,31
		2	1			
		3	1			
		3	1			

Л и т е р а т у р а

1. В.Гаджиков. Препринт ОИЯИ Р10-5035, Дубна 1970; В.Гаджиков. ПТЭ №5 (1970), стр. 82-85.
2. Л.Александров. Препринт ОИЯИ Р5-5136, Дубна 1970.
3. Л.Александров. Препринт ОИЯИ Р5-5237, Дубна 1970.
4. Л.Александров, В.Гаджиков. Препринт ОИЯИ Р5-5294, Дубна 1970.
5. L.Aleksandrov, V.Gadjikov. J.Radioanal.Chem 2(1971)279-292.
6. См. напр. Д.Мак-Кракен, У.Дорн. Численные методы и программирование на ФОРТРАНе. Изд. "Мир", Москва, 1969, стр. 150.

Рукопись поступила в издательский отдел
11 августа 1972 года.