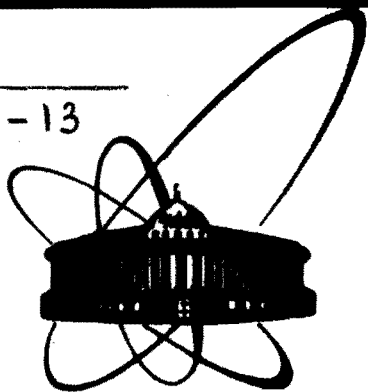


Г-13



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-86-824

В.Гаджоков, В.Б.Бруданин, С.К.Васильев*

О ТЕСТИРОВАНИИ ПРОГРАММЫ КАТОК

*Радиовый институт им.В.Г.Хлопина АН СССР, Ленинград

1986

19/2.86

Программа КАТОК¹⁻⁴ используется для обработки заранее размеченных участков дискретных спектров ядерных излучений с 1969 года. Составленная первоначально для машин типа "Минск-2" /"Минск-22"/, программа впоследствии адаптировалась без существенных изменений алгоритма и запускалась на ЭВМ типов HP-2116 /HP-21MX/, ИЗОТ-310, М-6000, СМ-3 /СМ-4/, ЕС-1010, БЭСМ-6, ЕС-1020 /ЕС-1040, ЕС-1060/, МERA-60, БК-1300 и др. Она была передана из ОИЯИ в некоторые институты стран-участниц. В ряде случаев программа подвергалась модификациям, затрагивающим преимущественно организацию ввода-вывода.

Автор программы не располагал возможностью участвовать во всех адаптациях и модификациях. Сопровождения программы не осуществлялся, и в настоящий момент нельзя поручиться, что все имеющиеся ее версии равноценны.

Цель настоящего сообщения состоит в детальном описании серии из трех тестовых задач, проверяющих все блоки программы. Мы считаем, что успешное выполнение теста гарантирует работоспособность программы. Кроме того, благодаря длительной и успешной апробации этой программы, данный тест можно использовать и для проверки иных программ, обрабатывающих дискретные спектры по модели симметричного гауссиана.

ТИПЫ ТЕСТОВЫХ ЗАДАЧ

В тест включено 3 задачи. Первая из них представляет собой участок спектра, измеренного хорошим спектрометрическим Ge(Li)-детектором большого объема. Статистика отсчетов на канал вблизи вершины пика достигает почти 70000; при такой точности измерения начинает сказываться отличие истинной формы линии от симметричного гауссиана, вследствие чего нормированное на одну степень свободы значение χ^2 достигает 2,232 /вместо ожидаемой единицы/. Тем не менее точность обработки достаточно высока: позиция и дисперсия пика определены с абсолютной ошибкой, меньшей 0,01 канала, а относительная ошибка площади составляет 0,54%.

Вторая задача содержит участок спектра, снятого в стандартных условиях производственного контроля на промышленном предприятии. Интенсивности двух пиков на этом участке находятся в отношении $\sim 10:1$, причем более слабый пик заметен только по асимметричному уширению правого ската сильного. Нормированный χ^2 в этом случае составляет 1,059.

Третья задача - пример полной задачи на нахождение скрытых закономерностей⁵, то есть считается, что число линий неизвест-

но. Для его определения программе дается задание искать 8 пиков, что заведомо больше, чем число визуально различимых четырех. В процессе решения программа устанавливает, что две линии лишние, удаляет их и уточняет параметры оставшихся шести. Данная задача была составлена в 1970 г. З. Стахурой. Ее детальное описание приведено в работе /57/. В точке решения нормированный χ^2 принимает значение 0,808.

ВХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Входные данные для трех задач объединены в один файл ввода, распечатка которого воспроизведена в табл.1. Файл состоит из символьных записей в коде ASCII и в формате, описанном в работе /31/. В первой строке содержится идентификатор спектра, затем - количество участков для обработки. Далее последовательно для каждого участка указываются: количество каналов в участке, количество пиков, степень полинома, описывающего фон под пиками, номер

Таблица 1

KATOK TEST DATA: 1.SPECTROMETRIC; 2.INDUSTRIAL; 3.STACHURA'S PROBLEM

$k = 0,95$

3										
19	1	1								
1033	34	35	36	37	38	39	40	41	42	
6117.	6200.	6022.	6153.	6383.	6482.	7494.	11685.	24775.	47832.	
68327.	64722.	44008.	21773.	10797.	6954.	6110.	5986.	5952.		
1043.	68327.	1048.	6954.							
45 2 1										
580	1	2	3	4	5	6	7	8	9	
402.	440.	441.	408.	396.	427.	411.	448.	385.	411.	
388.	414.	446.	467.	526.	606.	790.	899.	960.	1080.	
1083.	950.	873.	715.	585.	516.	455.	413.	468.	401.	
354.	374.	387.	329.	325.	310.	332.	303.	334.	314.	
287.	300.	290.	251.	269.						
592.	446.	599.	1080.							
605.	516.	613.	329.							
45 8 1										
6756	7	8	9	1	2	3	4	5		
56.	60.	75.	121.	215.	382.	659.	938.	1183.	1226.	
1080.	798.	509.	323.	262.	246.	206.	253.	448.	785.	
1315.	1893.	2400.	2409.	2116.	1583.	1101.	827.	242.	840.	
1021.	1254.	316.	1239.	1114.	1014.	945.	760.	653.	392.	
217.	116.	52.	21.	9.						
763.	938.	760.	215.							
765.	1226.	758.	75.							
768.	509.	772.	206.							
778.	2400.	781.	1583.							
787.	1254.	783.	827.							
788.	1316.	784.	742.							
789.	1239.	794.	653.							
791.	1014.	796.	217.							

первого канала, содержимое каналов и координаты примерных максимума и минимума для каждого пика на участке. КАТОК вычисляет начальные приближения искоемых параметров, исходя из координат, то есть номера канала и числа импульсов в нем, так называемых характерных точек, указанных оператором на этапе разметки спектра и соответствующих предполагаемому максимуму и концу данного пика. Приводим значения начальных приближений, чтобы облегчить применение теста к другим программам, не выполняющим обработку характерных точек. При этом используются следующие обозначения: FWHM - полная ширина на полувысоте; σ - дисперсия ($FWHM = 2\sqrt{2 \ln 2} \cdot \sigma$); $= 2,35\sigma$; P_i - позиция i-го пика; S_i - площадь i-го пика; a_0 - постоянная составляющая фона; a_1 - линейный коэффициент фона. Фон во всех трех задачах считается линейным.

Задача 1. FWHM = 5 ($\sigma = 2,123$),
 $P_1 = 1043, S_1 = 306865, 247152$
 $a_0 = 5952,$
 $a_1 = 0.$

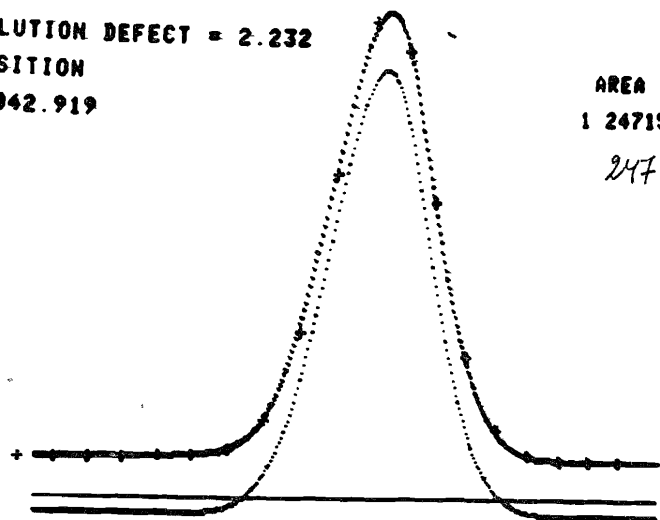
Задача 2. FWHM = 7,5 ($\sigma = 3,185$),
 $P_1 = 599, S_1 = 4438, 5369$
 $607,8 P_2 = 605, S_2 = 1496, 523$
 $a_0 = 251,$
 $a_1 = 0.$

Задача 3. FWHM = 4,375 ($\sigma = 1,858$),
 $764 P_1 = 763, S_1 = 2169, 6823 6816$
 $770 P_2 = 765, S_2 = 8057, 839 836$
 $1,0 - P_3 = 768, S_3 = 1212, 778 13639 13604$
 $2,0 - P_4 = 778, S_4 = 2451, 782 1606 1619$
 $P_5 = 787, S_5 = 1708,$
 $P_6 = 788, S_6 = 2296,$
 $1,0 - P_7 = 789, S_7 = 2930, 787 6663 6674$
 $P_8 = 791, S_8 = 3985,$
 $a_0 = 9,$
 $a_1 = 0. 792 4129 4135$

ПРОЦЕСС РЕШЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ОБРАБОТКИ

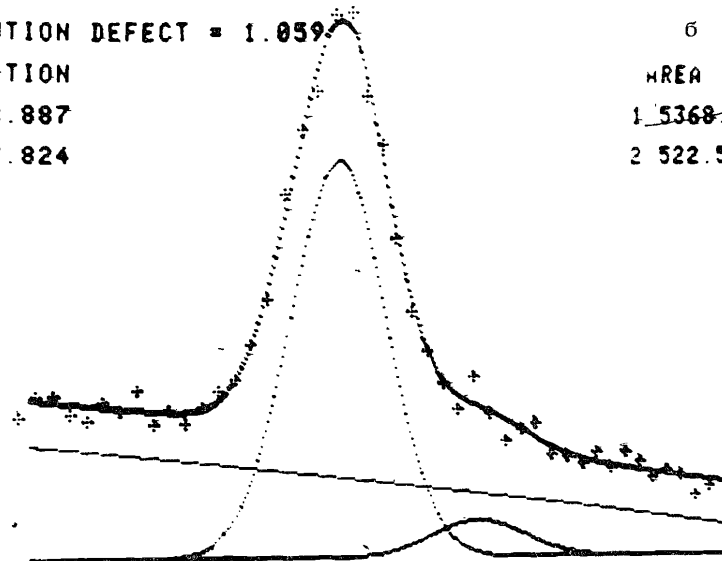
Во время решения тестовых задач происходит автоматическое переключение режимов алгоритма, что остается скрытым для потребителя. Программа не требует ни дополнительных данных, ни операторского вмешательства. Результаты обработки записываются в выходной файл, распечатка которого показана в табл.2. Туда же записывается и предупреждение о том, что в третьей тестовой задаче обнаружены "лишние" пики и проведена редукция к меньшим размерностям.

SOLUTION DEFECT = 2.232
 POSITION
 1 1042.919



AREA
 1 24715.2E+1
 247152

SOLUTION DEFECT = 1.059
 POSITION
 1 598.887
 2 607.824



AREA
 1 5368.8 5391
 2 522.5 498

Рис.1. Графическое представление результатов решения тестовых задач. Внизу - чистые выделенные пики; выше - линия фоновой подложки; сверху - суммарная аппроксимирующая кривая с экспериментальными отсчетами /крестики/: а - тестовая задача 1; б - тестовая задача 2; в - тестовая задача 3.

Таблица 2

DISCRETE SPECTRA PROCESSING BY 'KATOK' AUTOMATIC SUBROUTINE
 VERSION SM4-RSX11 DUBNA/OCTOBER 1984 V.GADJOKOV

STREAM PROCESSED -
 KATOK TEST DATA: 1.SPECTROMETRIC; 2.INDUSTRIAL; 3.STACHURA'S PROBLEM
 - CONSISTS OF 3 SECTIONS

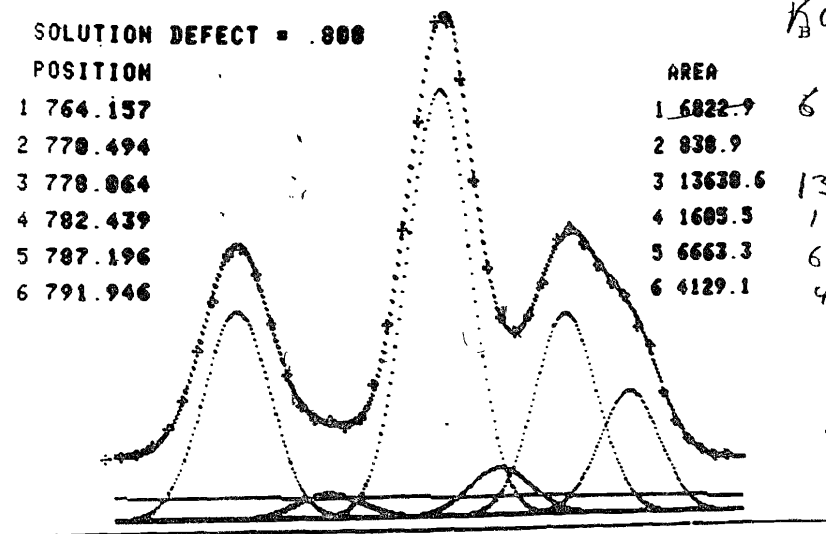
PEAK NO.	POSITION	ERROR	AREA	ERROR	SIGMA	ERROR
1	1042.920	0.009	247152.	1338.	1.523	0.008
2	598.888	0.088	5369.	150.	3.025	0.088
3	607.824	0.796	523.	89.	3.025	0.088
4	764.158	0.035	6823.	89.	2.282	0.024
5	770.495	0.244	839.	50.	2.282	0.024
6	778.064	0.061	13639.	323.	2.282	0.024
7	782.439	0.701	1606.	255.	2.282	0.024
8	787.197	0.128	6663.	168.	2.282	0.024
9	791.946	0.082	4129.	143.	2.282	0.024

)))WARNING: PROBLEM REDUCED TO 6 PEAKS

***** END OF PROCESSING *****

START ON 23-OCT-84, AT 18:54:49
 ELAPSED TIME IS 0 H 2 MIN 33 SEC

SOLUTION DEFECT = .808
 POSITION
 1 764.157
 2 770.494
 3 778.064
 4 782.439
 5 787.196
 6 791.946



AREA
 1 6822.9 6816
 2 838.9 836
 3 13638.6 13604
 4 1603.5 1619
 5 6663.3 6674
 6 4129.1 4135

Указанное решение тестовых задач выполнено по нашей последней версии программы KATOK, куда вошли следующие изменения по сравнению с описанием/2-4/:

а/ модифицирован подход к перенормировке пространства неизвестных параметров; в отличие от более ранних версий, матрица итерационного шага масштабируется к единичным элементам главной диагонали;

б/ вместо заимствованного из IBM-SSP модуля INVKA подключена новая подпрограмма обращения симметричной матрицы HОLINV, работающая по алгоритму Холецкого;

в/ добавлен набор программных модулей, осуществляющих графический вывод результатов обработки на экран телевизионного цветного дисплея, управляемого КАМАК-станцией типа КИ029. На рис.1 представлены фотографии экрана дисплея после обработки трех тестовых задач;

г/ ускорен расчет функции ошибок $\text{erf}(x)$.

Благодаря этим изменениям программу удалось разместить в 24,5Кслов оперативной памяти при ускорении обработки более чем в 2 раза, не понижая качества решения задачи.

Время выполнения теста на ЭВМ типа СМ-4 при отсутствии других пользователей системы разделения времени составляет 2 мин 33 с.

Авторы были бы благодарны пользователям за сообщения, относящиеся к особенностям и длительности обработки тестовых задач на других ЭВМ и по иным /возможно, более ранним/ версиям программы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Gadjokov V. - Instr. and Exper. Technique, 1970, No.5, p.1338 (ЛТЭ)
2. Gadjokov V. JINR, E10-12352, Dubna, 1979.
3. Gadjokov V. JINR, E10-12353, Dubna, 1979.
4. Gadjokov V. JINR, E10-12354, Dubna, 1979.
5. Aleksandrov L., Gadjokov V. - J. of Radioanal. Chem., 1971, vol.9, p.279.

Рукопись поступила в издательский отдел
19 декабря 1986 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги,
если они не были заказаны ранее.

Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985.	4 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Гаджиков В., Бруданин В.Б., Васильев С.К. P10-86-824
О тестировании программы КАТОК

Описывается усовершенствованная версия широко распространенной программы КАТОК, предназначенной для обработки сложных гамма-спектров. Произведенные изменения позволили увеличить скорость обработки более чем в два раза, не понижая качества решения задачи. Приводятся тестовые примеры, позволяющие сравнивать различные существующие версии программы, а также проводить сравнение с другими программами обработки гамма-спектров.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Gadjikov V., Brudanin V.B., Vasiliev S.K. P10-86-824
On KATOK Program Testing

The modification of the well-known computer code for complex γ -ray spectra processing KATOK is described. The changes carried out allowed one to accelerate processing of spectra by more than twice without reducing solution quality. The test examples for comparing different versions of program and for making comparisons with other γ -ray processing codes are presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986