

Вибір величини АКЕ

Відносна різниця між лівою та правою межами сусідніх піків нижче якою піки вважаються одним піком. За умовчанням $AKE=0.012$.

Як було сказано в Додатку 2, при $AK=0.0001$ програма знаходить 20 порізаних піків, а потім об'єднує деякі із них і дає вже лише 8 об'єднаних піків. Щоб прояснити принцип дії АКЕ, розглянемо більш ретельно пік 1 з рис.1 (див. Додаток 2). На рис. 2 представлено енергетичний регіон лише для цього піку.

В файлі F_RES\inpfile.LST надано інформацію, що при $AKE=0.012$ 1-ий пік складається з 4-х піків. Дійсно, з рис.2 видно, що функція T*SPECTRUM розрізана на 4 частини. Ці частини помічено на рис.2 синіми цифрами. Детальніше область, помічену синім овалом, тобто область між 3-ю та 4-ою частинами, показано праворуч.

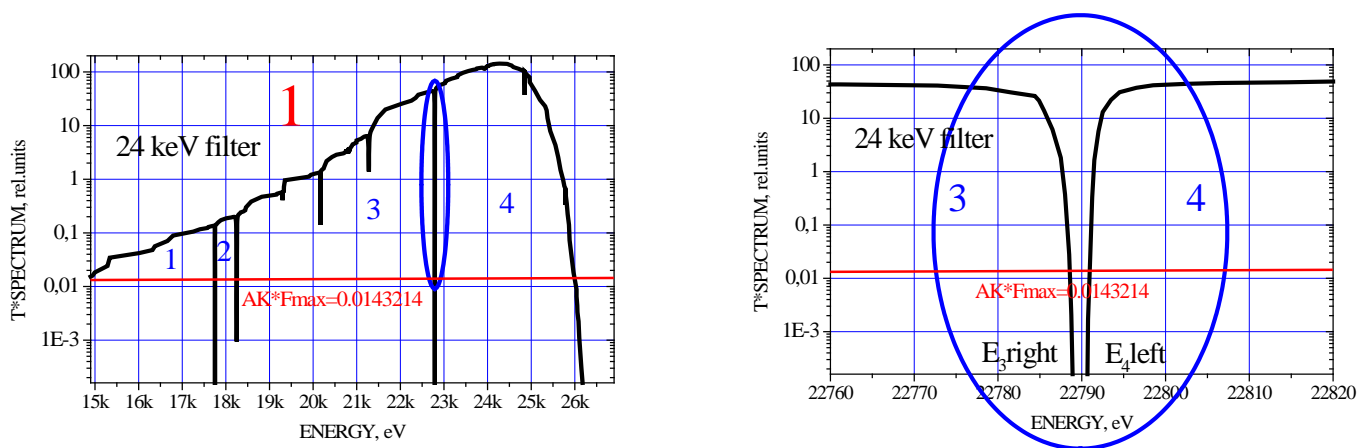


Рис. 2.

Частини 3 та 4 будуть вважатися одним піком, коли

$$\frac{E_i^{left} - E_{i-1}^{right}}{E_i^{left}} < AKE$$