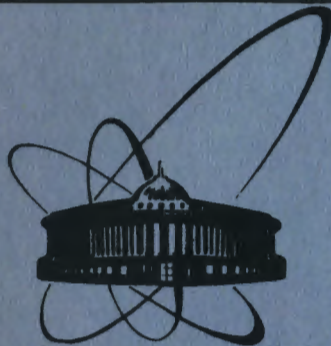


12/III-84



ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА

1395/84

10-83-852

А.К.Чураков, А.А.Бялко, Н.Г.Волков,  
Й.Ференцеи, М.И.Фоминых, В.М.Цупко-Ситников

ПАКЕТ ПРОГРАММ "АУТОР"  
ДЛЯ АВТОМАТИЗИРОВАННОЙ ОБРАБОТКИ  
СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ  
НА МАЛЫХ ЭВМ

Направлено в журнал  
"Прикладная ядерная спектроскопия"

1983

## ВВЕДЕНИЕ

В последние годы в экспериментальных исследованиях все шире используются малые ЭВМ типа PDP 11/40, СМ-3, СМ-4, ЕС-1010, сравнительно дешевые, не требующие сложного обслуживания и в то же время обладающие основными качествами, необходимыми для успешной организации на их базе управления экспериментом и обработки получаемой информации.

Важным достоинством малых ЭВМ является их доступность и возможность эффективной работы в интерактивном режиме, с использованием операторского дисплея и средств для графического отображения информации.

Основной сложностью, возникающей при переходе на малые ЭВМ, является отсутствие проблемно-ориентированного математического обеспечения и трудности адаптации программ, разработанных ранее для больших машин.

В настоящей работе описывается пакет прикладных программ "AUTOP", предназначенный для решения различных задач, связанных с обработкой спектрометрической информации на малых ЭВМ. Все программы написаны на языке FORTRAN-IV и адаптированы на ЭВМ СМ-3, СМ-4, ЕС-1010. В пакет вошли:

- FITDEV - подпрограмма аппроксимации экспериментальных данных произвольными аналитическими функциями <sup>1/1</sup>.
- RETIX - программа решения уравнения Фредгольма 1-го рода для задач восстановления искаженных данных <sup>1/2</sup>.
- AUTOP - программа автоматической обработки линейчатых спектров, осуществляющая автоматический поиск пиков, разделение мультиплетов и определение параметров пиков путем подгонки несимметричным гауссианом <sup>1/3</sup>.
- PUCH - программа обработки отдельных участков спектра, в том числе с возможностью задания начальных приближений световым карандашом с экрана графического дисплея <sup>1/4</sup>.  
Подгонка осуществляется несимметричным гауссианом для одиночных линий и симметричным - для мультиплетов <sup>1/5</sup>.
- MESS - программа обработки спектров ядерного гамма-резонанса /ЯГР/ с использованием индексного алгоритма задания аппроксимирующей функции <sup>1/6</sup>.
- SPLINE - программа проведения аналитических кривых методом сплайн-МНК <sup>1/7</sup>.

- CMGR - программа вывода графиков спектров.  
 NUGRAF - программа построения графиков разложения участков спектров.  
 MESGRF - программа построения графиков разложения спектров ЯГР.

Базовый комплект "АУТОР" работает в операционных системах РАФОС или RT 11 V03(02) ЭВМ СМ-3 при наличии оперативной памяти не менее 32 К.

Цель данной работы - описание комплекса программ с точки зрения его применения пользователями. Возможности отдельных программ описаны очень кратко, так как имеются специальные работы по этому вопросу, на которые даны ссылки. Нам представляется, что такое описание-руководство для пользователей будет полезным. Подтверждением тому являются многочисленные запросы на отдельные программы комплекса, опубликованные ранее. Соединение ряда наиболее необходимых в спектрометрии программ в единый пакет, реализованный на широко распространенных в странах-участницах ОИЯИ ЭВМ, поможет в освоении этих машин и будет способствовать их эффективному использованию в исследованиях и решении прикладных задач.

## 1. FITDEV - УНИВЕРСАЛЬНАЯ ПОДПРОГРАММА ДЛЯ АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Подпрограмма FITDEV предназначена для минимизации путем подгонки параметров квадратичного функционала вида:

$$S = \sum_{i=1}^N (Y(x_i) - f(\vec{p}, x_i))^2 \frac{1}{\sigma_{Y(x_i)}^2}, \quad /1/$$

где  $Y(x_i)$  - значение экспериментальной зависимости в  $i$ -той точке;  $x_i$  - абсцисса  $i$ -той точки;  $f(\vec{p}, x_i)$  - значение задаваемой пользователем аппроксимирующей функции;  $\vec{p}$  - вектор варьируемых параметров аппроксимирующей функции;  $\sigma_{Y(x_i)}^2$  - дисперсия  $Y(x_i)$ ;  $N$  - число точек.

Минимизация осуществляется на базе сравнительно простого, но обладающего хорошей сходимостью, метода переменной метрики Дэвидона <sup>/1/</sup>.

Для применения подпрограммы FITDEV пользователь должен написать управляющую программу с вызовом этой подпрограммы и две подпрограммы-функции: REAL FUNCTION AFUN (X,P) - вычисляющую значение аппроксимирующей функции для данных  $X$  и  $P$ , где  $P$  - идентификатор вектора варьируемых параметров  $\vec{P}$ , и REAL FUNCTION GRADI (X,P,J) - вычисляющую значение производной аппроксимирующей функции в данной точке  $X$  по  $J$ -тому параметру.

Вызов подпрограммы осуществляется командой  
 CALL FITDEV (X,Y,DY,N,P,DP,NP,NIT),

здесь  $X, Y$  и  $DY$  - идентификаторы массивов, содержащих соответственно  $x_i, Y(x_i), \sigma_{Y(x_i)}^2$ ;  $N$  - число точек;  $P$  и  $DP$  - идентификаторы массивов, содержащих варьируемые параметры и их ошибки /перед вызовом необходимо задать первое приближение этих величин/;  $NP$  - число варьируемых параметров;  $NIT$  - граничное число итераций ( $NIT = 3 \cdot NP$ ).

Все массивы должны быть описаны в вызывающей программе оператором DIMENSION.

После вызова подпрограмма FITDEV выводит на экран дисплея или АЦПУ наложенные графики экспериментальных точек и функции первого приближения и задает вопрос:

ПРОДОЛЖАТЬ /1/ ИЛИ ВЫХОДИТЬ ИЗ ПОДГОНКИ /0/ - ?

В соответствии с качеством первого приближения, оператор вводит с экрана в ЭВМ 1 или 0. Если вводится 0, происходит возврат в основную программу.

В конце работы FITDEV выводит итоговый график подгонки, значение  $\chi^2$  и заменяет значения  $\vec{P}$  и  $\vec{DP}$  получившимися в результате минимизации.

## 2. ПРОГРАММА РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ФРЕДГОЛЬМА 1-ГО РОДА ТИПА СВЕРТКИ - RETIX

Программа предназначена для решения интегральных уравнений, описывающих различные искажения экспериментальных данных:

$$U_{\delta}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} R(x-\xi) Z(\xi) d\xi, \quad /2/$$

где  $U_{\delta}(x)$  - искаженные данные, имеющие некоторую статистическую ошибку /например, мультиплет/;  $R(x-\xi)$  - приборная /искажающая/ функция;  $Z(\xi)$  - данные до искажения.

Легко видеть, что заменой переменных  $\omega = x - \xi$  можно переписать в уравнении /2/  $R$  и  $Z$  местами, поэтому RETIX позволяет /с точностью до сдвига/ получать в качестве решений как  $R$ , так и  $Z$ . Решение получается с помощью метода регуляризации по А.Н.Тихонову, с задаваемым параметром регуляризации  $\alpha^{/2/}$ .

Необходимость решения задачи /2/ часто возникает при обработке спектров. В качестве примеров можно привести задачу разделения мультиплетов <sup>/2/</sup>, восстановления дифференциальных спектров по интегральным, задачу вычисления приборной функции по известному идеальному и приборному спектрам и т.п.

Исходная информация для работы RETIX должна быть предварительно записана в файл на диске. Этот файл будет содержать последовательную запись значений векторов  $U$  и  $R$  /или  $Z$  / в формате F7.0.

После запуска программы

.RUN RETIX

с экрана дисплея запрашивается исходная информация:

ЧИСЛО КАНАЛОВ /<77/, АЛЬФА - ?

Оператор отвечает, например: 77,0.01.

Следующий вопрос:

ИМЯ ФАЙЛА С ЗАПИСЬЮ U, R (F7.0) - ?

Пример ответа:

\*URDAT.002

Программа считывает с диска файл, в котором последовательно записаны U и R /центр функции R должен соответствовать среднему каналу массива R/, нормирует и сдвигает ядро R и решает уравнение /2/. На график совместно выводятся полученные значения Z и U<sub>δ</sub>, а также U<sub>δ</sub> и свертка полученного решения Z с ядром R. Сумма квадратов отклонений U<sub>δ</sub> от свертки печатается в конце работы.

В заключение программа выводит на экран символ \*, после которого можно указать имя файла для записи полученного результата Z /формат записи F7.0/. Максимально возможный размер векторов U и Z N ≤ 77, время работы программы - N<sup>2</sup>/10 с.

### 3. ПРОГРАММА АВТОМАТИЧЕСКОЙ ОБРАБОТКИ ЛИНЕЙЧАТЫХ СПЕКТРОВ AUTOP

Программа AUTOP /3,5/ автоматически осуществляет поиск пиков в линейчатых спектрах, разделение мультиплетов и уточнение параметров пиков с помощью аппроксимации несимметричными гауссианами. Автоматический поиск пиков осуществляется в подпрограмме FINDE на основе метода "плавающего отрезка", разделение мультиплетов в подпрограмме MULTY - с помощью решения уравнения Фредгольма 1-го рода, описывающего искажение истинного спектра аппаратурой /см. описание RETIX /2/. В качестве аппаратурной функции при этом используется гауссиан с заданной дисперсией. Определение точных параметров пиков производится после аппроксимации участков спектра, содержащих отдельные группы пиков, аналитическими функциями вида:

$$f_1(\vec{p}, x) = \frac{p_1}{\sqrt{2\pi}(p_3 + p_4(p_2 - x))} \exp\left[-\frac{(p_2 - x)^2}{2(p_3 + p_4(p_2 - x))^2}\right] + ax + b, \quad /3/$$

$$f_2(\vec{p}, x) = \sum_{n=1}^{NPIK} \frac{p_{1n}}{\sqrt{2\pi} p_{3n}} \exp\left[-\frac{(p_{2n} - x)^2}{2p_{3n}^2}\right] + ax + b. \quad /4/$$

Функция  $f_1(\vec{p}, x)$  применяется для аппроксимации синглетов, а  $f_2(\vec{p}, x)$  - мультиплетов.

Функция  $f_1(\vec{p}, x)$  представляет собой гауссиан с переменной дисперсией и хорошо аппроксимирует несимметричные пики, характерные для спектров, полученных с помощью ППД /см.рис.1/. Применение  $f_1(\vec{p}, x)$  для аппроксимации мультиплетов некорректно, так как значительная асимметрия способна скрыть небольшие пики на одном из фронтов, поэтому мультиплеты аппроксимируются в программе набором гауссианов  $f_2(\vec{p}, x)$ . Аппроксимация производится с помощью подпрограммы FITTY на базе уже описанной подпрограммы FITDEV.

После вызова программы

.RUN AUTOP

с экрана операторского дисплея запрашиваются начальные данные для обработки:

Н.К., К.К., ДИСП., DSK, П.ОТСЕВА, ИНДЕКС ПЕЧАТИ, здесь -Н.К. - начальный канал обработки, который должен находиться на участке стабильного фона; К.К. - конечный канал, до которого спектр вводится и обрабатывается. Число обрабатываемых каналов, т.е. разность К.К.-Н.К. ≤ 1024; ДИСП. - предполагаемая дисперсия одиночного пика в начале спектра; DSK - коэффициент изменения дисперсии в зависимости от номера канала i; ДИСП.(i) = ДИСП. + i x DSK; П.ОТСЕВА - параметр отсева ложных пиков, меняется в диапазоне 1÷10. Пик регистрируется, если удовлетворяется условие  $S_1 > П.ОТСЕВА * \sqrt{S_1 + S_2}$ , где  $S_1$  - площадь над отрезком, соединяющим две отстоящие на заданное расстояние L точки спектра /расстояние L вычисляется равным ширине основания одиночного пика на основании заданного значения DISP(i)/;  $S_2$  - площадь под отрезком; ИНДЕКС ПЕЧАТИ - параметр уровня распечаток. Если индекс печати равен 1, то производится распечатка промежуточных данных/для отладки/, если равен 2, то выводятся графики и результаты обработки, если равен 3, выводятся только результаты обработки.

После того, как оператор вводит с экрана соответствующую информацию, например:

100, 1100, 4, 0.01, 7, 2\*

/Н.К.=100, К.К.=1100, ДИСП.=4, DSK=0.01, П.ОТСЕВА = 7, ИНДЕКС ПЕЧАТИ = 2/, программа запрашивает на экране имя файла на диске, в котором записан спектр /базовый формат записи спектров в пакете AUTOP F7.0/, например:

\* DK3: TESPEC

Считав спектр, программа AUTOP поочередно вызывает подпрограммы FINDE, MULTY и FITTY, по окончании работы которых выводится итоговая таблица результатов, каждая строка которой содержит

\* Подчеркивание данных в тексте везде означает, что они набираются оператором на экране дисплея и вводятся командой (CR).

Таблица 1

CHANNEL-COUNTS---MIN= 28.0---MAX= 1992.0-----

1	64.	+
2	71.	+
3	59.	**
4	66.	+
5	74.	+
6	85.	+
7	129.	**
8	136.	**
9	168.	**
10	202.	**
11	294.	**
12	334.	**
13	492.	**
14	732.	**
15	1051.	**
16	1445.	+
17	1887.	+
18	1992.	+
19	1578.	**
20	980.	**
21	441.	+
22	145.	**
23	61.	**
24	28.	+
25	43.	+
26	42.	+

CHANNEL-COUNTS---MIN= 28.0---MAX= 1992.0-----

a/

ХИ-ТЕСТ	ЦЕНТР	+--КАНАЛ	ОП. ПИ.	ПЛОЩАДЬ	+--ПРОЦЕНТ	ШПНВ
3.36	68.88	0.08	456.38	13536.11	3.37	2.98
3.36	72.67	0.41	215.44	3046.36	7.07	2.98
2.97	133.61	0.09	307.24	9511.57	3.23	3.14
5.85	181.14	0.10	443.46	14646.50	3.03	3.00
5.85	190.57	0.62	255.21	1272.82	20.05	3.00
5.85	200.14	0.18	345.15	6441.80	5.36	3.00
1.23	212.64	0.06	187.55	5159.87	3.63	2.90
1.23	215.77	0.12	132.11	2200.48	6.00	2.90
1.23	223.41	0.18	101.06	927.26	10.90	2.90
1.23	233.14	0.11	109.53	1706.19	6.42	2.90

Таблица 2

ХИ-ТЕСТ	ЦЕНТР	+--КАНАЛ	АМПИТУДА	+--ПРОЦЕНТ	ШПНВ	+--КАНАЛ
3.240	51.622	1.459	4156.296	9.558	3.864	0.924
3.240	59.161	1.172	5358.251	7.065	3.864	0.924
3.240	70.097	1.292	5358.251	7.065	3.864	0.924
138118.547	81.564	1.066	7093.566	4.916	3.864	0.924

В последнем элементе первой колонки записан уровень фона для MESGRF

CHANNEL-COUNTS---MIN= 3100.0---MAX= 7789.0-----

56	3676.	*2
57	3596.	*2
58	3657.	*
59	3656.	*
60	3558.	*2
61	3660.	*
62	3595.	*
63	3639.	*2
64	3794.	2 *
65	3763.	2 *
66	4042.	2 1 *
67	4824.	2 *1
68	6728.	2 *1
69	7789.	2 *1
70	6380.	2 1 *
71	4827.	2 1 **
72	4540.	1 2 *
73	4204.	1 *2
74	3900.	1 *
75	3566.	1 2*
76	3481.	2 *
77	3321.	2*
78	3224.	*2
79	3277.	*
80	3216.	*2
81	3121.	*2
82	3144.	*2
83	3100.	*2

CHANNEL-COUNTS---MIN= 3100.0---MAX= 7789.0-----

б/

данные по одному пику /см. табл.1/, и на экране дисплея появляется запрос:

"ИМЯ ФАЙЛА ДЛЯ ЗАПИСИ РЕЗУЛЬТАТОВ" - ?

оператор отвечает, например:

\* DK3: TESRES,

после чего в указанный файл записывается число найденных пиков /в формате I2/ и таблица результатов /в формате 7F10.3/, эти данные сохраняются на диске и могут быть использованы для дальнейшего анализа.

Время обработки 1024-канального спектра на СМ-4 в зависимости от его сложности составляет 15-20 мин.

Рис.1. а/ Пример аппроксимации аппаратурной линии с помощью  $f_1(p, x)$  /см.п.3/. График выведен во время работы AUTOP, символом \* показано значение экспериментального спектра, + - значение аппроксимирующей функции; б/ пример автоматического разделения мультиплета программой AUTOP /линии  $^{99}\text{Mo}$  - 140.50,  $^{141}\text{Ce}$  - 145.44 в каналах 68,9 и 72,7, см.табл.1/. График выведен с помощью программы NUGRAF /см.п.8/.

#### 4. ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ УЧАСТКОВ СПЕКТРА - PUCH

Программа PUCH предназначена для уточнения параметров пиков путем аппроксимации участка спектра задаваемой моделью вида /3/. Аппроксимация осуществляется подпрограммой FITT1, работающей на базе алгоритма FITDEV, описанного в п.п.1.

После вызова

.RUN PUCH

программа запрашивает с экрана операторского дисплея данные, необходимые для обработки:

ЧИСЛО КАНАЛОВ, ИНДЕКС ПЕЧАТИ - ?

и после ввода этих данных /см. п.3/ запрашивает имя файла, в котором записан спектр, например:

\* DK1: TESPEC ,

вводит спектр с диска и спрашивает данные об обрабатываемом участке:

Л.Г., П.Г., NPIK, ШППВ, ЦЕНТРЫ.

Оператор отвечает, например:

120, 240, 2, 5.0, 150, 220,

где Л.Г. = 120 - левая граница участка; П.Г. = 240 - правая граница участка; NPIK = 2 - предполагаемое число пиков на участке; ШППВ = 5.0 - предполагаемая ШППВ одиночного пика; 150 и 220 - предполагаемые центры пиков.

После ввода исходных данных программа выводит на экран дисплея наложенные графики участка и первого приближения аппроксимирующей функции и запрашивает, начинать ли подгонку или начальные данные нужно уточнить /см. п.1/. В этом случае на экране вновь появляется запрос начальных параметров. Для каждого обработанного участка выводится на печать или экран итоговый график участка и аппроксимирующей функции /если индекс печати <3/, а также таблица результатов /см. табл.1/. Аналогично описанному в п.3, таблица результатов может быть записана в файл на МД. Время обработки одного участка на СМ-4 составляет  $\sim N \cdot NPIK$  с, N - число каналов.

## 5. ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ОСК ДЛЯ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ

С целью обработки большого количества спектров программами AUTOP и PUCH были разработаны их модификации для измерительного комплекса установки "СПИН"<sup>1/8</sup>. Обработка осуществляется с использованием дисплея со световым карандашом<sup>4, 9</sup>, подключенного к ЭВМ СМ-3. Световым карандашом в спектрах размечаются участки, подлежащие обработке, и задаются необходимые начальные приближения для подгонки параметров модели.

Ввод начальных приближений для программы PUCH осуществляется с помощью программы OSK, после запуска которой на экране дисплея появляется:

TYPE FILE NAME FOR SPECTRUM.

Задается имя выходного файла на диске для начальных приближений, после чего на дисплее появляется:

TYPE IDENTIFICATOR.

В идентификаторе набирается текст длиной  $\leq 36$  символов к выходному файлу. После этого диалога на экране осциллографа со световым карандашом появляется начальный участок спектра длиной 116 каналов и управляющие символы:

⚡, D, M, O, Y, E.

Далее работа программы осуществляется с помощью светового карандаша. При помощи символов ⚡ производится движение спектра влево-вправо. Для остановки спектра необходимо указать карандашом любую точку на спектре.

Данные об обрабатываемом участке получаются следующим образом:

а/ отмечается начало и конец участка, затем указывается символ "O";

б/ для каждого пика внутри участка отмечается max и min и указывается символ "M". Если необходимо увеличить масштаб для какой-то области, то отмечаются ее границы и указывается символ "Y";

в/ запись на диск размеченного участка осуществляется по символу "D";

г/ после разметки всех участков спектра указывается символ "E", по которому осуществляется закрытие файла на диске и возврат к диалогу с операторским дисплеем.

Такая структура ввода и вывода позволяет /при отсутствии быстрой аппаратной арифметики с плавающей запятой на ЭВМ СМ-3, что затрудняет обработку в реальном времени/ накапливать на диске результаты разметки спектров и осуществлять анализ большого объема экспериментальных результатов без необходимости присутствия при этом оператора.

Используя преимущества системы РАФОС, таким образом можно создать командный файл для организации обработки данных. После завершения работы на печать выводятся результаты, а на дисплей с помощью специальной программы - графическое изображение результатов подгонки /экспериментальные значения вместе с аппроксимирующей функцией/.

## 6. ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ ЯДЕРНОГО ГАММА-РЕЗОНАНСА - MESS

Программа предназначена для определения параметров пиков ядерного гамма-резонанса путем аппроксимации экспериментального спектра аналитической моделью.



Работа MESS основана на сочетании нелинейного метода наименьших квадратов /МНК/ и индексного алгоритма формирования аппроксимирующей функции /8/. Поскольку мессбаузровские спектры, отличаясь малым отношением эффект/шум и значительным числом линий, имеют, как правило, известную симметрию, применение индексного алгоритма позволяет получать эффективные оценки параметров линий даже в самых сложных спектрах.

Суть метода индексации, подробно описанного в /8/, заключается в том, что вектор параметров аппроксимирующей функции  $\vec{P}$  и вектор варьируемых параметров  $\vec{P}'$  разделены и связь между ними задается специальным индексным вектором перехода  $\vec{V}$ :

$$\vec{P}' = \vec{P}(\vec{V}).$$

Это позволяет варьировать однородные параметры как один и фиксировать любые параметры в процессе подгонки, максимально используя таким образом имеющуюся информацию о виде аппроксимирующей функции.

Аппроксимирующая функция  $f(\vec{p}, i)$  имеет следующий вид:

$$f(\vec{p}, i) = \sum_{n=1}^{NPIK} \frac{-p_{1n}}{1 + p_{3n}(i - p_{2n})^2} + p_0, \quad /5/$$

где  $\vec{P} = \{P_0, \dots, P_{3NPIK}\}$  - параметры; NPIK - число линий в модели. /5/ представляет собой набор обратных лоренцианов. Для подгонки параметров используется алгоритм FITDEV /см.п.1/.

После вызова программы

.RUN MESS

на экране дисплея появляется вопрос:

ЧИСЛО ТОЧЕК, ИНДЕКС ПЕЧАТИ - ?

Оператор вводит нужные значения, например:

200,1

после чего требуется задать имя файла с записью спектра /в формате F7.0/:

\* DK1: MESSP.

Следующий вопрос относится к параметрам участка:

Л.Г., П.Г., NPIK ( $\leq 14$ ), ШППВ, ЦЕНТРЫ.

Пример ответа:

2, 100, 6, 3, 16, 24, 36, 48, 56, 72,

т.е. Л.Г. = 2, П.Г. = 100, NPIK = 6, ШППВ = 3, ЦЕНТРЫ линий находятся приблизительно в 16, 24, 36, 48, 56 и 72 каналах.

Следующий вопрос ЭВМ относится к вектору задания варьируемых параметров:

ИНДЕКСЫ ПАРАМЕТРОВ - АМПЛ, ЦЕНТР, ШППВ?

Индексы параметров вводятся по три значения, причем в каждой тройке первое значение соответствует амплитуде, второе - положению центра, а третье - полуширине одной линии. Само число, записанное в каждой позиции, определяет номер данного элемента в векторе варьируемых параметров. Те из параметров, которые желательнее зафиксировать, переносятся в конец этого списка. Поясним сказанное на примере:

1, 2, 3

4, 5, 6

7, 8, 9

7, 10, 9

4, 11, 6

1, 12, 3

ЧИСЛО ИЗМЕНЯЕМЫХ ПАРАМЕТРОВ - ? 12.

Такое задание вектора  $\vec{V}$  означает, что параметры амплитуды и ШППВ для пар пиков 3-4, 2-5 и 1-6 будут варьироваться как один, т.е., например, амплитуды 1-го и 6-го пиков будут одним параметром подгонки. Если в модели все параметры независимы, то вектор  $\vec{V}$  будет заполняться просто последовательными целыми числами и число изменяемых параметров для 6 линий будет равно 18.

После ввода вектора  $\vec{V}$  программа вычисляет значения аппроксимирующей функции и выводит /при индексе печати < 2/ на экран или АЦПУ графики функции и спектра, после чего задается вопрос: нужно ли продолжать подгонку или следует уточнить начальные данные:

ПРОДОЛЖАТЬ /1/ или ВЫХОДИТЬ ИЗ ПОДГОНКИ /0/?

Соответственно надо ввести 0 и 1 с экрана.

По окончании работы программа выводит графики и итоговую таблицу результатов /см. табл.2/, которую можно записать в задаваемый с экрана файл на диске, аналогично п.п.3,4. На рис.2 приводится график, полученный на основе записанного файла результатов обработки спектра ЯГР программой MESS с помощью программы MESGRF /см.п.8/.

Время работы программы MESS составляет  $\sim 3 \cdot N \cdot NPIK$  с., где N - число точек.

## 7. ПРОГРАММА ПРОВЕДЕНИЯ АНАЛИТИЧЕСКОЙ КРИВОЙ МЕТОДОМ СПЛАЙН - МНК - SPLINE

Программа SPLINE определяет с помощью МНК коэффициенты набора полиномов произвольной степени, последовательно аппроксимирующих задаваемый набор реперных точек /7/. На границах участков функции сшиваются по значениям полинома и первой производной.

```

CHANNEL-COUNTS---MIN=131206.0---MAX=138470.0-----
45 138098. + 1 *
46 137777. + 1*24
47 138241. +1 24*
48 137492. + 1 * 24
49 136781. + 1* 24
50 136224. + 1 * 24
51 134145. + *1 2 4
52 133341. * + 1 2 4
53 136024. + 1 * 2 4
54 136743. + 1 * 2 4
55 136074. + * 2 4
56 136174. + * 2 1 4
57 134601. 1 34
58 134800. + 2 * + 2 1 34
59 132430. ** 2 + 2 * 134
60 133649. + * 34
61 135205. + * 314
62 136480. + * 314
63 137174. + 2* 3 14
64 136746. ** 2 3 4
65 137388. + *32 4
66 136252. + * + 3 2 4
67 136307. + * 3 241
68 135483. + *3 241
69 134310. + 3 * 41
70 132417. ** 3 + 3 * 41
71 133134. ** 3 421
72 135500. + 3* 421
73 137163. + 3 * 4 2
74 137534. + 3 * 4 2
75 138156. + 3 4 2*
76 137150. + * 4 3 2
77 137526. + 4 * 3 2
78 136065. * 4 3 2
79 135099. ** 4 3 2
80 133342. * + 4 32
81 131288. ** 4 32
82 131206. *4 32
83 132549. * +4 32
84 135528. +4* 3
85 136678. +4 * 3
86 137471. +4 * 3
87 137922. 14 * 3
88 138354. 4 3 *
89 138470. +4 3
90 137208. * 4 3
91 137997. +4*3
92 137994. 4*3
93 137752. **43
CHANNEL-COUNTS---MIN=131206.0---MAX=138470.0-----

```

Рис.2. Пример разложения спектра ЯГР программой MESS /см.табл.2/. ШПВ для всех линий варьировались как один параметр; амплитуда двух средних пиков также варьировалась как один параметр; вектор  $\vec{V}$  имел вид:  $\vec{V} = \{1, 2, 3, 4, 5, 3, 4, 6, 3, 7, 8, 3\}$ . График выведен программой MESGRF /см.п.8/.

После вызова программы

.RUN SPLINE

с экрана дисплея запрашиваются исходные данные:

ЧИСЛО ТОЧЕК, УЧАСТКОВ, СТ.ПОЛИНОМА.

Пример ответа:

50,5,3,

то есть будут введены 50 точек, которые надо разбить на 5 участков /по 10 точек/ и каждый участок должен быть аппроксимирован полиномом 3 степени - кубической параболой.

Следующий вопрос:

ИМЯ ФАЙЛА, В КОТОРОМ ЗАПИСАНЫ X,Y,DY (3F7.2) - ?

Пример ответа:

\*DK2: XYDY.

В этом файле в указанном формате должны быть последовательно, в каждой строке, записаны данные о каждой точке: X и Y - координаты и погрешность определения  $\Delta Y$ .

Программа определяет вектор значений коэффициентов полиномов и выводит на график и печать значения точек и соответствующие значения полиномов, а также вычисленные значения  $\chi^2$ .

Максимальное число точек  $\leq 100$ , число участков и степень полиномов ограничены условием  $NU \cdot NP + 2(NU - 1) \leq 40$ . Здесь NU - число участков, NP - степень полинома. Лучшие результаты дает использование полиномов нечетных степеней и участков с максимально возможным количеством точек. Время работы SPLINE  $\approx 3 \cdot NU \cdot NP$  с.

## 8. ПРОГРАММА ВЫВОДА СПЕКТРОВ НА ГРАФИК - CMGR

Программа выводит спектр в виде вертикального графика на терминал или АЦПУ. Вызов программы осуществляется командой:

.RUN CMGR,

после чего программа запрашивает с дисплея начальные данные:

ЧИСЛО КАНАЛОВ - ?

Пример ответа:

1000

на экране появляется запрос имени файла с записью спектра, например:

\*SPECTS.

После ввода спектра программа запрашивает границы выводимого участка:

НАЧАЛЬНЫЙ И КОНЕЧНЫЙ КАНАЛЫ ГРАФИКА - ?

Пример ответа:

800, 850

Соответствующий участок выводится, после чего программа возвращается на запрос границ.

Скорость вывода определяется быстродействием устройства.



## 9. ПРОГРАММЫ ПОСТРОЕНИЯ ГРАФИКОВ РАЗЛОЖЕНИЯ СПЕКТРОВ - NUGRAF И MESGRF

По записанной на диске таблице результатов обработки участков спектра /см. табл.1 и п.4,6/ программы строят графики, на которых символом \* обозначены экспериментальные значения, + - значения аппроксимирующей функции, а цифрами 1,2,...9,0 изображены гауссианы /в MESGRF - лоренцианы/, составляющие аппроксимирующую функцию /см. рис.1,2/.

Вызов программы осуществляется командой:

.RUN NUGRAF.

С экрана запрашивается начальная информация /приводится пример ответов/:

НАЧАЛЬНЫЙ И КОНЕЧНЫЙ КАНАЛЫ - ?

15,45

ИМЯ ФАЙЛА С ЗАПИСЬЮ СПЕКТРА - ?

\*SPEKTS

ИМЯ ФАЙЛА С ЗАПИСЬ РЕЗУЛЬТАТОВ - ?

\*RESPTS

Программа считывает данные с файлов и выводит на экран или АЦПУ таблицу результатов /см. табл.1/ и таблицу разложения, в первых 14 колонках которой приводятся значения отдельных составляющих /+ фон/ в каждой точке, а в последней - значения суммарной кривой. После вывода таблицы выводятся графики разложения /см. рис.1,2/. Время работы программ определяется скоростью работы устройств вывода.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Модульный принцип, положенный в основу пакета "AUTOP", позволяет широко использовать его в различных областях, связанных с обработкой данных, как спектрометрических / $\gamma$ -спектры, спектры акустической эмиссии, оптические спектры, нейтронограммы, спектры рентгеновского излучения,  $\beta$ -спектры и т.д./, так и не связанных со спектрометрией /анализ вольт-амперных характеристик, аппаратных шумов, оптимальное планирование эксперимента и т.д./.

Описанный здесь вариант пакета "AUTOP" является последней версией и может отличаться от тех версий, которые уже имеются у пользователей. Так, например, введен бесформатный ввод величин, улучшены характеристики отдельных программ, добавлены новые программы (FITDEV, NUGRAF, MESGRF).

## ЛИТЕРАТУРА

1. Davidon W.C. Variable Metric Method for Minimisations, Research and Development Report ANL-5990, Argonne National Lab., US Atomic Energy Commission, 1959.
2. Волков Н.Г., Чубченко В.Г., Чураков А.К. Прикладная ядерная спектроскопия. Атомиздат, М., 1975, вып.5, с.24-29.
3. Волков Н.Г., Чубченко В.Г., Чураков А.К. ОИЯИ, Б1-10-80-745, Дубна, 1980, с.1, с.56.
4. Вылова Л. и др. ОИЯИ, P10-7061, Дубна, 1973.
5. Бялко А.А., Волков Н.Г., Чураков А.К. "AUTOP" - пакет прикладных программ для обработки экспериментальной физической информации на мини-ЭВМ. В сб. "Аппаратное и программное обеспечение систем автоматизации ядерно-физического эксперимента. Энергоиздат, М., 1982, с.61-65.
6. Чураков А.К. и др. ОИЯИ, P11-82-459, Дубна, 1982.
7. Волков Н.Г., Чубченко В.Г., Белов О.Х. Прикладная ядерная спектроскопия. Атомиздат, М., 1974, вып.4, с.177-181.
8. Громова И.И. и др. Прикладная ядерная спектроскопия, Атомиздат, М., 1979, вып.9, с.3-13.
9. Корнев В.И., Никульников А.В., Приходько В.И. ОИЯИ, P10-8355, Дубна, 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел  
15 декабря 1983 года.

## НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

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

	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
D2,4-83-179	Труды XV Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Дубна, 1982.	4 р. 80 к.
	Труды УШ Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Протвино, 1982 /2 тома/	11 р. 40 к.
D11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
D7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
D2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.

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

Чураков А.К. и др. 10-83-852  
Пакет программ "AUTOP" для автоматизированной обработки спектрометрической информации на малых ЭВМ

Описывается пакет прикладных программ "AUTOP", предназначенный для решения различных задач, связанных с обработкой спектрометрической информации на малых ЭВМ. Все программы написаны на языке FORTRAN-IV и адаптированы на ЭВМ СМ-3, СМ-4, ЕС-1010.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Churakov A.K. et al. 10-83-852  
AUTOP Program Package for Automatic Processing of Spectrometric Information on Small Computers

The description of the package of application programs AUTOP for solving the problems connected with the analysis of the spectroscopic information on small computers is given. All programs are written in FORTRAN-IV language and implemented on СМ-3, СМ-4, ЕС-1010 computers.

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

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой