

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

10-99-219

На правах рукописи
УДК 519.673, 519.654, 519.642

Л-641

ЛИТВИНЕНКО
Елена Ивановна

МЕТОДЫ И ПРОГРАММЫ
ДЛЯ ЭКСПРЕСС-АНАЛИЗА ДАННЫХ
НЕЙТРОННОГО РАССЕЯНИЯ

Специальность: 05.13.16 — применение
вычислительной техники, математического моделирования
и математических методов в научных исследованиях

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1999

I. Общая характеристика работы

Работа выполнена в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка
Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель: доктор физико-математических наук, профессор
Е.П. Жидков

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор
Иванченко И.М.


доктор физико-математических наук, доцент
Севастьянов Л.А.

Ведущая организация: Московский инженерно-физический институт
(Технический университет)

Защита состоится "___" _____ 1999 г.
в "___" часов на заседании Диссертационного совета Д047.01.04 при
Лаборатории вычислительной техники и автоматизации по адресу: г.Дубна
Московской области, ЛВТА ОИЯИ.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Диссертационного совета
кандидат физико-математических наук

 З.М. Иванченко

Актуальность темы. Разработка методов и программ, предназначенных для пользователей экспериментальных установок исследовательских нейтронных источников, является актуальной задачей, и прежде всего это связано с отсутствием стандартных программных средств для визуализации и анализа данных, принятых всеми нейтронными центрами. Кроме того, вплоть до последнего времени используемые форматы экспериментальных данных существенно отличались не только в разных нейтронных центрах, но и даже на различных установках одного и того же центра. При этом исследования конденсированных свойств материи методами нейтронного рассеяния - одно из приоритетных и быстро развивающихся направлений науки в России и в мире. Расширение международного сотрудничества и проведение открытой пользовательской политики на нейтронных источниках повышает уровень требований к предоставляемому программному обеспечению, и в том числе к программам по визуализации и экспресс-анализу данных, которые могут использоваться в процессе проведения экспериментов.

Цель работы. Создание математических методов и компьютерных программ общего назначения для визуализации и экспресс-анализа экспериментальных данных по рассеянию нейтронов при исследованиях конденсированных свойств материи.

Используемые численные методы. Для анализа данных используются хорошо зарекомендовавшие себя численные методы, а также методы, предложенные автором работы. При фитировании данных используется метод Маккардта-Левенберга. Для построения устойчивых к ошибкам во входных данных приближенных решений уравнений типа свертки применяется метод регуляризации по Тихонову. Уточнение регуляризованных решений производится с помощью метода экстраполяции Ричардсона. В качестве метода визуализации трехмерных данных используется метод воспроизведения поверхностей. Кроме того, для ребиннинга гистограмм (операции вычисления гистограммы, изменившейся вследствие перехода к новой сетке по независимым переменным) используются предложенные и реализованные автором диссертации методы расчета для одномерного случая с автоматическим пересчетом статистических ошибок и для многомерного случая с ячейками произвольной формы.

Объединенный институт
ядерных исследований
БИБЛИОТЕКА

Подходы, реализованные при разработке программного обеспечения. В качестве базового языка программирования используется коммерческий пакет визуального анализа PV-WAVE, лицензированный для использования как в Лаборатории нейтронной физики им. И.М.Франка (ЛНФ) ОИЯИ, так и в ряде других нейтронных центров (институт Хана-Майтнер в Берлине, лаборатория Леона Бриллюэна во Франции и т.д.). Созданное программное обеспечение характеризуется высоким уровнем пользовательского интерфейса и реализует предложенный автором общий подход к организации процесса первичной обработки и экспресс-анализа данных, полученных на различных экспериментальных установках.

Научная новизна. Впервые созданы программные средства на базе пакета PV-WAVE для визуализации и экспресс-анализа экспериментальных данных нейтронного рассеяния, полученных на реакторах ИБР-2 (Дубна) и BER-II (Берлин). При разработке программ впервые предложен вариант некоторого общего (для различных установок) формата экспериментальных данных, содержащего минимально необходимый для проведения первичной обработки набор параметров. При разработке программы OpenG2 автором предложены и реализованы новые технологические решения (workspaces, VDA Tools, независимые функциональные компоненты), которые позволяют неограниченно наращивать ее возможности. Впервые созданы специализированные приложения пакета, в том числе для представления состояния реактора ИБР-2 в системе WWW. Предложены новый метод расчета одномерного ребиннинга гистограмм с автоматическим пересчетом статистических ошибок и новый метод расчета многомерного ребиннинга гистограмм и впервые разработаны соответствующие программы на языке pv-wave. Разработаны алгоритмы и впервые созданы программы на языке pv-wave для вычисления решений уравнений типа свертки, возникающих при анализе данных по рассеянию нейтронов, методом регуляризации по Тихонову с последующим их уточнением.

Достоверность содержащихся в диссертации результатов подтверждается успешным применением созданных программ начиная с 1997 года по настоящее время в ЛНФ ОИЯИ и институте Хана-Майтнер в Берлине.

Научная и практическая ценность для ЛНФ ОИЯИ связана с проведением открытой пользовательской политики на реакторе ИБР-2 и с переходом от применения систем сбора данных на базе КАМАК и РС к системам на базе VME и рабочих станций на экспериментальных установках. Работа обеспечивает пользователям доступ к высокоскоростной и высококачественной графической системе визуализации данных. Программы, разработанные автором для визуализации и экспресс-анализа, внедрены для использования на рабочих станциях Sun Sparc 20, могут вызываться с любого компьютера, подключенного к локальной сети ЛНФ. Они применялись на установках СПН-1, ЮМО, ДН-2, ФДВР и др. в 1997-1999 годах для визуализации и первичной обработки данных. Приложение для представления состояния реактора ИБР-2 в системе WWW активно используется большим числом сотрудников ЛНФ и внешних пользователей реактора с ноября 1996 года по настоящее время. Помимо своего прямого назначения, разработанные автором программы внедряются в новые системы сбора данных как подсистемы по визуализации данных. Работа является перспективной разработкой и может применяться в других нейтронных центрах. Новые технологии, использованные автором при разработке программы OpenG2, позволяют неограниченно наращивать ее возможности. Предложенные автором методы расчета ребиннинга гистограмм позволяют решить задачи по визуализации многомерных данных в физических координатах, возникающие при использовании позиционно-чувствительных детекторов.

Апробация работы. Основные результаты диссертации докладывались на научных семинарах научно-исследовательского отдела электроники, компьютеров и сетей, научно-экспериментального отдела комплекса спектрометров ИБР-2 ЛНФ и отдела вычислительной математики ЛВТА ОИЯИ. Доложены автором на международных совещаниях по новым методам вычислений в физике AINENP'96 (Лозанна, Швейцария, 1996), по системам сбора данных для нейтронных спектрометров DANEF'97 (Дубна, 1997), по методам визуализации данных VISIONS'97 (Абингдон, Англия, 1997), по программному обеспечению для пользователей нейтронных и синхротронных центров NOBUGS'97 (Аргонн, США, 1997).

Публикации. Основные результаты диссертации опубликованы в работах [1]-[6].

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав, содержащих 41 параграф, заключения и списка литературы; изложена на 130 страницах и включает 30 рисунков и 2 таблицы.

II. Содержание работы

Во **введении** к диссертации кратко сформулирована общая постановка задачи и причины ее актуальности и дано краткое изложение содержания работы.

В **первой главе** проанализирована общая постановка задачи и подходы к ее решению. Глава состоит из 8 параграфов. Первый параграф посвящен обсуждению актуальности задачи, связанной с особенностями текущего периода в развитии исследовательских нейтронных центров и в частности с проведением в них так называемой открытой пользовательской политики. Во втором параграфе дан обзор общего состояния программ просмотра и экспресс-анализа данных в действующих нейтронных центрах, которое непосредственно связано с состоянием соответствующих программ сбора данных. Отмечено, что популярным подходом во многих нейтронных центрах для создания программ визуализации и анализа является использование коммерческих пакетов PV-WAVE и IDL.

В третьем параграфе первой главы проанализирована связь сырых экспериментальных данных с сечением рассеяния нейтронов и динамическим структурным фактором (законом рассеяния), являющимся предметом исследований во многих экспериментах по рассеянию нейтронов. Приведена принятая в литературе классификация различных типов экспериментов в физике конденсированного состояния и указаны соответствующие типы нейтронных спектрометров. Подчеркнуто, что в наиболее общем виде связь измеренных данных с искомой функцией выражается интегральным уравнением типа свертки, в котором ядром уравнения является разрешающая (аппаратная) функция установки. В четвертом параграфе обсуждены некоторые способы расчета и измерения разрешающих функций нейтронных спектрометров.

В пятом параграфе изложены традиционные методы анализа данных по рассеянию нейтронов. Наиболее популярный метод заключается в подгонке (фитировании) параметров модельной функции, свернутой с разрешающей функцией установки, к значениям, обеспечивающим хорошее согласие с измеренными данными (прошедшими некоторую первичную обработку). Перечислены популярные программные пакеты, в принципе позволяющие решить эту задачу. Метод применим в случаях, когда закон рассеяния можно предсказать теоретически. Вторым по значению традиционным методом можно назвать подход с применением байесовского анализа, который позволяет определить наиболее вероятное число пиков заданной формы. В шестом параграфе первой главы дан обзор работ по применению быстрого преобразования Фурье для решения уравнения типа свертки в задачах по анализу данных нейтронного рассеяния и обсуждены достоинства и недостатки этого подхода, связанные с неустойчивостью самой задачи по отношению к ошибкам во входных данных. Седьмой параграф посвящен изложению метода регуляризации по Тихонову для решения уравнения типа свертки, позволяющего преодолеть указанную неустойчивость. Метод может применяться и при отсутствии предположений о виде закона рассеяния.

В восьмом параграфе первой главы сформулированы основные требования к программному обеспечению для просмотра и экспресс-анализа данных по рассеянию нейтронов в физике конденсированного состояния, вытекающие из приведенного анализа основной поставленной задачи.

Вторая глава посвящена описанию созданных автором работы программных средств для визуального анализа экспериментальных данных на базе пакета PV-WAVE Point & Click. Этот пакет является отдельным продуктом, который может функционировать отдельно от основной части - пакета PV-WAVE Advantage, с удобным для новых пользователей графическим интерфейсом. Глава 2 состоит из 9 параграфов. В первом параграфе изложены отличительные особенности пакетов Point & Click и Advantage. Во втором параграфе дано описание предложенного автором варианта общего для различных установок формата экспериментальных данных, содержащего минимально необходимый для проведения первичной обработки данных набор параметров в виде чисел и остальные параметры в виде текстовых строк. Наличие такого формата позволило создать библиотеку процедур для чтения заметно

различающихся по структуре экспериментальных данных с различных установок и проведения необходимых при первичной обработке преобразований. В третьем параграфе дано краткое описание особенностей и возможностей пользовательского интерфейса базового пакета, расширенного для вызовов разработанных процедур.

В четвертом и пятом параграфах главы 2 дано описание разработанных процедур манипуляций над спектрами, способа вычисления статистических ошибок результирующего спектра и приведены формулы перехода от каналов к физическим переменным. В шестом параграфе изложено описание предложенного и реализованного автором метода расчета одномерного ребиннинга гистограмм (то есть пересчета числа событий в интервале при переходе к новым границам интервалов), сопровождающегося вычислением соответствующих статистических ошибок.

В седьмом параграфе главы 2 дана информация о доступе к разработанным процедурам, открытым для всех пользователей локальной сети ЛНФ ОИЯИ, о наличии соответствующего краткого руководства и рекомендаций для пользователей на веб-узле ЛНФ с указанием соответствующих адресов ^{1/}. В восьмом параграфе изложены ограничения пакета Point & Click по сравнению с пакетом Advantage и обстоятельства, которые приводят к необходимости разработки приложений на базе полной версии пакета. В девятом параграфе изложены основные результаты главы 2:

1. Предложен вариант общего формата экспериментальных данных, который содержит минимально необходимый для проведения первичной обработки данных набор параметров.
2. Наличие общего формата позволило создать библиотеку процедур для чтения заметно различающихся по структуре экспериментальных данных с различных установок и проведения необходимых при первичной обработке преобразований.
3. Все процедуры первичной обработки сопровождаются автоматическим пересчетом статистических ошибок.
4. Предложен и реализован метод расчета одномерного ребиннинга гистограмм.
5. Удобный графический интерфейс, визуализационные возможности и сетевой доступ к программам позволяют пользователям применять разработанные программы для просмотра и первичной обработки результатов измерений в любое время, в том числе и в процессе проведения экспериментов на реакторе.

¹ <http://nfdfn.jinr.ru/flnph/pv/>

Третья глава диссертации содержит описание методов и программ для визуализации многомерных данных и некоторых специальных приложений. Глава состоит из семи параграфов. В первом параграфе показано, какого рода задачи возникают при применении позиционно-чувствительных детекторов (ПЧД) с тремя независимыми координатами. Во втором параграфе дано описание известных из литературы методов визуализации трехмерных данных – метода воспроизведения поверхностей и метода воспроизведения объемов. В третьем параграфе описана разработанная автором программа dn2_viewer для просмотра данных, измеренных с помощью ПЧД на дифрактометре ДН-2 реактора ИБР-2. В качестве метода визуализации в данном случае был выбран метод воспроизведения поверхностей. Элементы разработанного пользовательского интерфейса программы обеспечивают интерактивную локализацию пиковых интенсивностей (по каналам) для последующей юстировки аппаратуры.

В четвертом параграфе главы 3 изложены проблемы, возникающие при попытках обеспечить визуализацию многомерных данных не в каналах, а в физических переменных, таких как координаты обратной решетки (h,k,l). В силу нелинейности соответствующих формул перехода и в связи с невозможностью даже в рамках современных пакетов визуального анализа визуализировать многомерные данные на неоднородной сетке возникает необходимость в разработке методов расчета многомерного ребиннинга гистограмм. Предлагаемые другими авторами программы решают эту задачу только для случаев с рядом ограничений (на размерность или на форму ячеек). В пятом параграфе изложен предложенный автором метод расчета многомерного ребиннинга, свободный от указанных ограничений, и проведено сравнение результатов его применения с методом Велтца в двумерном случае. Приведенные иллюстрации ^{2/} демонстрируют близкие результаты на моделях и на данных дифрактометрических экспериментов.

В шестом параграфе главы 3 дано описание узко специализированного программного приложения пакета PV-WAVE, разработанного автором для использования в распределенной информационной системе по представлению состояния мощности реактора ИБР-2 в системе WWW ^{3/}. Разработанное приложение является одной из компонент этой системы и обеспечивает обработку данных и

² <http://nfdfn.jinr.ru/~litvin/trans/>

³ http://nfdfn.jinr.ru/flnph/ibr-2/cycles/ibr2_monitoring.html

автоматическую генерацию web-страниц с таблицами текущих результатов и графическими представлениями поведения мощности реактора и состояния пучков нейтронов.

В седьмом параграфе изложены основные результаты главы 3:

1. Создана программа для визуализации трехмерных данных с позиционно-чувствительного детектора.
2. Предложен и реализован алгоритм расчета многомерного ребиннинга для ячеек произвольной формы, позволяющий проводить вычисления для размерности 2 и выше.
3. В двумерном случае проведено тестирование предложенного алгоритма многомерного ребиннинга в сравнении с алгоритмом Велтца, который разработан для размерности 2 и не может быть обобщен на более высокие размерности. При тестировании использовались модельные и экспериментальные данные. Тестирование показало весьма близкие результаты.
4. Разработана и реализована программа для обработки данных о состоянии мощности и пучков реактора ИБР-2 и представления результатов в системе WWW. Программа является важной компонентой информационной системы, функционирующей в Internet и активно используемой с конца 1996 года.

Глава 4 посвящена описанию созданной автором программы OpenG2⁴ для визуализации и экспресс-анализа данных по рассеянию нейтронов. Глава состоит из 12 параграфов. В первом параграфе излагается первоначальная постановка задачи и предыстория проекта, направленного на разработку программы с современным уровнем пользовательского интерфейса, способной заменить используемую в институте Хана-Майтнер с 1992 года программу G2 для просмотра и анализа экспериментальных данных. Второй параграф посвящен описанию выбранного подхода и основных идей, предложенных автором и реализованных при разработке программы. Это использование концепции так называемых workspaces, применение новой в PV-WAVE технологии VDA Tools для разработки программ визуального анализа и создание программы из набора отдельных независимых функциональных компонент, раздельно решающих задачи чтения данных экспериментов и последующих действий с workspaces. В третьем параграфе дано описание технологии VDA Tools, а в

⁴ <http://nfdfn.jinr.ru/~litvin/openg2/>

четвертом параграфе - основного меню программы OpenG2. Через это меню осуществляется доступ к экспериментальным данным, после чтения которых возникают workspaces.

Пятый параграф главы 4 содержит описание обязательных и необязательных компонент, из которых состоят workspaces, и следующие два параграфа содержат описания разработанных автором VDA Tools (независимых мини-приложений), ориентированных на работу с workspaces. В шестом параграфе дано описание WzWorkspace – средства просмотра всех имеющихся в наличии workspaces и выбора некоторых из них для 1D или 2D визуализации и различных манипуляций, включающих арифметические операции, генерацию новых workspaces и фитирование одиночных пиков на предварительно выбранных участках. Седьмой параграф посвящен описанию основных функций мини-приложения WzWPlot, обеспечивающего просмотр в виде графиков соответствующих частей workspaces, выбор участков графика и проведение интерактивного фитирования данных. Восьмой параграф содержит описание той части пользовательского интерфейса WzWPlot, которая обеспечивает проведение фитирования с помощью графика и мыши до 15 перекрывающихся или разделенных пиков гауссовой или иной задаваемой пользователем формы.

В девятом параграфе главы 4 обсуждены методы нелинейного фитирования и более подробно метод Маркгардта-Левенберга, использованный в разработанном программном обеспечении. В десятом параграфе уточнены особенности и отличия алгоритмов фитирования, примененных в WzWPlot и в WzWorkspace. В WzWPlot в качестве начальных оценок параметров используются координаты точек графика, на которые пользователь указал мышкой, а в WzWorkspace начальные оценки одиночного пика выбранной формы (гауссовой, лоренцевой или псевдо-войгтовой) определяются автоматически. В одиннадцатом параграфе отражен текущий опыт использования программы OpenG2, а двенадцатый параграф формулирует основные результаты главы 4:

1. На базе пакета PV-WAVE Advantage и новой технологии создания приложений создана новая программа OpenG2 для визуального экспресс-анализа данных.
2. Программа OpenG2 предложена пользователям ЛНФ в момент перехода от предыдущего поколения систем сбора данных на базе КАМАК и персональных ЭВМ с системой MS-DOS к новому поколению систем на базе VME и рабочих станций с

операционной системой OS-9 и позволяет освободить программы сбора данных от задач по визуализации.

3. Помимо визуализации, программа OpenG2 позволяет проводить манипуляции с данными и интерактивное фитирование до 15 перекрывающихся или разделенных пиков выбранной пользователем формы.
4. В процессе работы программа OpenG2 опирается на концепцию workspaces, аналогичную концепции программы OpenGenie⁵ из Резерфордской лаборатории. Workspaces должны иметь набор обязательных компонент, и могут иметь другие компоненты, возникающие в процессе работы.
5. Workspaces могут возникать при чтении данных с реактора ИБР-2 или реактора ВЕР-II, при чтении ASCII файлов или файлов в формате NeXus, в процессе работы программы или команд, введенных пользователем в командной строке.
6. Программа OpenG2 состоит из набора отдельных функциональных компонент со своими пользовательскими интерфейсами, которые могут использоваться и развиваться независимо.
7. Гибкая структура workspaces и программы OpenG2 позволяет неограниченно наращивать ее возможности в соответствии с потребностями пользователей и вновь возникающими задачами.

В главе 5 излагаются результаты работы по созданию алгоритмов и программ для решения уравнения свертки

$$J(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} S(\omega)R(\omega - \omega')d\omega'$$

методом регуляризации по Тихонову с последующим уточнением. Глава состоит из 6 параграфов. Описание метода решения уравнения свертки с применением алгоритмов регуляризации и быстрого преобразования Фурье для применения в машинных вычислениях дано в первом параграфе главы. Во втором параграфе проанализированы и проиллюстрированы ошибки, неизбежно возникающие при машинных вычислениях Фурье-коэффициентов, и сделаны выводы о путях устранения этих эффектов посредством надлежащего выбора параметра и порядка регуляризации. В третьем

⁵ <http://www.isis.rl.ac.uk/OpenGENIE>

параграфе дано описание разработанных автором программ на языке pv-wave для получения регуляризованных решений и поиска наилучших значений параметра и порядка регуляризации, исследуемых на моделях критериев отбора таких значений и использованных при тестировании моделей. Позднее тестирование программ было успешно проведено на экспериментальных данных, полученных на спектрометре неупругого рассеяния ДИН-2 реактора ИБР-2.

В четвертом параграфе главы 5 изложены и проиллюстрированы результаты численного моделирования и указан критерий отбора параметров, показавший наилучшее согласие полученного результата с заложенной моделью. Наилучшее согласие проявлялось при тех значениях параметра и порядка регуляризации, которые соответствовали минимуму нормы отклонения решения S от его модуля по выбранной области изменения параметров либо по той ее части, в которой невязка (норма отклонения свертки решения S с аппаратной функцией R от левой части уравнения J) не превышала норму статистических ошибок левой части уравнения:

$$\Omega_{neg} = \sum_{i=0}^{N-1} |S_i - |S_i||^2 = Min$$

$$\Omega_{nev} = \sum_{i=0}^{N-1} (|Convolution(S, R) - J|)^2 \leq \Delta = \begin{cases} \Omega_{err}, & \Omega_{nevmin} \leq \Omega_{err} \leq \Omega_{nevmax} \\ \Omega_{nevmax}, & \text{if not} \end{cases}$$

В пятом параграфе главы 5 изложен алгоритм уточнения регуляризованных решений, полученных вариационным способом, предложенный в работе⁶ и основанный на методе экстраполяции Ричардсона, предложенном в 1927 году и получившем дальнейшее развитие в работе⁷. Метод позволяет с помощью линейной комбинации двух приближенных решений построить новое решение с улучшенной точностью. Проиллюстрированы примеры применения этого метода для уточнения регуляризованных решений, полученных с помощью вышеупомянутых программ, которые демонстрируют эффективность такого подхода.

В шестом параграфе изложены **основные результаты главы 5:**

1. Предложен численный алгоритм по вычислению решений уравнения типа свертки на основе метода регуляризации по Тихонову и последующего уточнения.

⁶ В.П.Акопян, Е.П.Жидков, Нгуен Монг, А.В.Федоров, "Асимптотическое разложение регуляризованных решений линейных некорректных задач", Сообщения ОИЯИ, P5-81-793, Дубна 1981

⁷ Марчук Г.И., Шайдулов В.В., "Повышение точности решений разностных схем". Москва

2. Предложенный алгоритм позволяет повысить устойчивость метода решения уравнения типа свертки с использованием быстрого преобразования Фурье для достаточно широкого класса задач анализа экспериментальных данных нейтронного рассеяния.
3. Использование уточненных регуляризованных решений повышает эффективность и точность расчетных алгоритмов.
4. Получены некоторые полезные заключения о машинных вычислениях фурье-коэффициентов для функций типа гауссианов и лоренцианов.
5. Разработанные программы являются полезным дополнением к возможностям программных средств для экспресс-анализа нейтронных данных на базе пакета PV-WAVE, работа над созданием и развитием которых ведется в Лаборатории нейтронной физики ОИЯИ и институте Хана-Майтнер в Берлине.

III. Основные результаты работы

1. Впервые созданы программные средства на базе пакета PV-WAVE для визуального экспресс-анализа экспериментальных данных нейтронного рассеяния, полученных на реакторах ИБР-2 и BER-II в Берлине, которые обеспечивают высокий уровень пользовательского интерфейса и удовлетворяют требованиям, предъявляемым к программному обеспечению нейтронных центров.
2. Предложен вариант общего формата данных, содержащий минимально необходимый для проведения первичной обработки набор параметров, и библиотеки процедур для чтения и обработки различающихся по структуре экспериментальных данных с различных установок.
3. Созданная автором программа OpenG2 для визуализации и экспресс-анализа данных позволяет проводить интерактивное фитирование с помощью графика и мыши до 15 перекрывающихся или разделенных пиков различной формы.

4. Новые технологии (workspaces, VDA Tools, независимые функциональные компоненты), примененные автором при разработке программы OpenG2, позволяют неограниченно наращивать ее возможности.
5. Разработанные независимые от формата исходных данных программные компоненты для визуального анализа workspace-ов могут быть использованы для манипуляций и интерактивного фитирования данных произвольной природы.
6. Предложен и реализован новый метод расчета одномерного ребиннинга гистограмм с автоматическим пересчетом статистических ошибок.
7. Разработано программное приложение по визуализации трехмерных данных.
8. Предложен и реализован алгоритм расчета многомерного ребиннинга гистограмм для ячеек произвольной формы. Сравнение результатов использования предложенного алгоритма и ранее известного алгоритма Велтца, применимого только для двумерного случая, дает весьма близкие результаты в случае размерности, равной 2.
9. Подготовлены алгоритмы и созданы программы на языке PV-WAVE для вычисления решений уравнений типа свертки, возникающих при анализе данных по рассеянию нейтронов, методом регуляризации по Тихонову с последующим уточнением. Проведены численные расчеты и получены результаты для типичных задач анализа данных нейтронного рассеяния.
10. Создано специализированное приложение пакета для представления состояния мощности реактора ИБР-2 в системе WWW, активно использующееся с конца 1996 года.

IV. Публикации по теме диссертации

1. E.I.Litvinenko, "PV-WAVE Based Tools for Visual Analysis of Neutron Scattering Data in FLNP ", Proceedings of the Intern. Workshop DANEF' 97, Dubna 1997, E10-97-272, pp. 248-258
2. E.I.Litvinenko, "Interactive Data Analysis for Neutron Spectrometers Data Based on Visual Numerics' PV - WAVE Software Package ", Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 389 (1997), 93-94
3. E.I. Litvinenko, "Current state and prospects of PV-WAVE based applications", Proceedings of the Intern. Workshop NOBUGS'97, Argonne, USA, Dec. 1997, http://www.aps.anl.gov/xfdb/bcda/nobugs/proceed/litvin_pv.html
4. Е.И.Литвиненко, Ю.В.Обухов, "Программа восстановления магнитного момента образца при измерениях на СКВИД - магнетометре", Сообщения ОИЯИ, P10-94-44, Дубна 1994
5. Е.П. Жидков, Е.И. Литвиненко, "О некоторых методах анализа данных нейтронного рассеяния.", Препринт ОИЯИ P10-98-376, Дубна 1998, направлено в *Computer Physics Communications*
6. Yu.A.Astakhov, E.I.Litvinenko, Yu.N.Pepelyshev, A.I.Tulaev, "Distributed Information System for Neutron Reactor Status Presentation on the Web", Proceeding of the Intern. Workshop DANEF'97, Dubna 1997, E10-97-272, pp. 259-264

Рукопись поступила в издательский отдел
2 августа 1999 года.