

3 - 681

11 - 10605

ЗЛОКАЗОВ
Виктор Борисович

ПРИБЛИЖЕННЫЕ МЕТОДЫ РАЗЛОЖЕНИЯ
АППАРАТУРНЫХ СПЕКТРОВ

Специальность 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научные руководители:

доктор физико-математических наук
член-корреспондент АН СССР профессор Н.Н.ГОВОРУН

кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник Л.С.НЕФЕДЬЕВА

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
доцент В.Б.ГЛАСКО

кандидат физико-математических наук
старший научный сотрудник В.М.ПУШКО-СИТНИКОВ

Ведущее предприятие - Ленинградский институт ядерной физики
им. Б.П.Константинова АН СССР.

Защита диссертации состоится " " 1977 г.

в часов на заседании Ученого совета Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна, Московской обл.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан " " 1977 г.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук

Пузынина

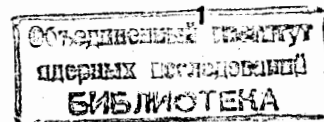
Т.П.ПУЗЫНИНА

Актуальность проблемы. Прогресс в области техники и методики проведения экспериментов в различных областях науки и, в частности, ядерной физики со всей остротой ставит проблему совершенствования существующих методов анализа измеренных данных, а также проблему создания новых методов. Объясняется это тем, что, с одной стороны, резко возрос поток получаемых данных, с другой - не менее резко расширилась область применения методологии измерения количественных характеристик изучаемых объектов и процессов. На базе классического аппарата математического анализа и статистики выросла фактически новая мощная отрасль математики - анализ данных (data analysis, в зарубежной терминологии^{/33/}), составившая, наряду с кибернетикой, основу для автоматизации научных исследований.

Особый интерес представляют вопросы автоматизации сбора и обработки данных спектрометрических измерений, во-первых, потому, что спектры (оптические, молекулярные, ядерные и т.д.) представляют собой наиболее распространенную в экспериментальной физике форму описания свойств наблюдаемых процессов; во-вторых, спектральные методы имеют не только научное, но и большое, все увеличивающееся прикладное значение; в-третьих, задачи анализа спектров формально эквивалентны очень большому классу задач во многих других отраслях науки (любимым задачам разделения наблюдаемой экспериментально смеси значений многих факторов на отдельные компоненты, т.е. задачам факторного анализа), так что применяемые методы анализа спектров могут быть использованы и в других областях науки.

Цель работы. Целью работы автора диссертации были:

- а) разработка универсального метода разложения спектров на компоненты, который бы в минимальной степени зависел от типа анализируемых спектров и мог быть использован для разложения произвольных смесей на компоненты;
- б) математическое обоснование такого метода;



- в) его программная реализация;
 г) создание программного обеспечения для спектрометрических on-line экспериментов и используемых в них терминалов.

Научная новизна. Несмотря на множество работ в области анализа спектров ⁷²⁴⁻³²⁷, проблемы оптимального анализа спектрометрических данных не находят еще своего решения и требуют все новых усилий со стороны исследователей. По сравнению с обычно применяемой классической техникой регрессионного анализа решения этих проблем метод, изложенный в диссертации, вводя нелинейную параметризацию гистограмм, используемых в качестве моделей, существенно расширяет класс решаемых задач разложения смесей. Этот метод в работе обоснован математически.

Строгий математический анализ как метода, развиваемого автором, так и многих аспектов анализа спектрометрических данных вообще представляет интерес для специалистов-математиков. Предложенные автором решения в области разработки вопросов системного (в частности, терминального) программного обеспечения могут оказаться полезными для системных программистов.

Практическая ценность. Созданное программное обеспечение используется для накопления и обработки различных спектров. Спектрометрические методы в настоящее время имеют не только научное, но и большое прикладное значение.

Реализация. Созданное автором программное обеспечение использовалось в течение многих лет и используется в настоящее время в большинстве on-line и off-line экспериментов, проводимых на базе вычислительно-измерительных центров ЛНФ и ЛЯР ОИЯИ. В частности, широко используются программные обеспечения дисплея для ЭВМ БЭСМ-4^{16/} и ЭВМ "Минск-32" ^{13,15/}; с помощью программ обработки спектров решены многие задачи активационного анализа геологических, биологических, экологических и других проб ^{12,20/}; с помощью этих программ обрабатывались данные экспериментов по изучению прямых взаимодействий ядер с тяжелыми ионами ^{21/}, а также данные экспериментов по изучению структуры кристаллов на нейтронном дифрактометре по времени пролета ^{22/}. Созданная автором программа оценки параметров экспоненциальных распределений была использована в экспериментах по открытию новых изотопов Ю4-го, Ю6-го и Ю7-го элементов ^{23/}.

Объем работы. Диссертация представлена на 150 страницах и состоит из введения, 6 глав и заключения. Общий объем разработанного автором программного обеспечения характеризуется следующими цифрами:

- 1) автокодные программы для on-line экспериментов, организации обработки и использования дисплея составляют около 20000 инструкций;
- 2) фортранные программы обработки суммарно составляют около 7000 операторов (более 100 программных модулей).

Содержание. Во введении приводится краткое изложение сущности задач декомпозиции (разложения) спектров, наиболее типичных методов решения этих задач, тех трудностей, с которыми сопряжена реализация этих методов, и приводится описание метода декомпозиции спектров в условиях недостаточности априорной информации о компонентах, развитого автором. Здесь же дается краткое описание содержания отдельных глав диссертации.

Формальный аспект задачи состоит в следующем: задан набор функций $\{\varphi_i(x), i=1, \dots, n\}$ - моделей компонент; на дискретном множестве $\{x_j, j=1, \dots, M\}$ определена экспериментально измеренная величина $y(x)$ - линейная смесь - такая, что:

$$y(x_j) = \sum_{i=1}^n \hat{T}_i \varphi_i(x_j) + e(x_j),$$

где \hat{T}_i - оператор деформации i -ой компоненты, $e(x)$ - погрешка измерения - дискретный случайный процесс с нулевым средним и некоторой ковариационной функцией $K(x_1, x_2)$ (при отсутствии корреляций - дисперсионной функцией $D(x)$).

Требуется, зная качественный состав смеси $y(x)$, разложить ее на компоненты y_i ($y_i(x) = \hat{T}_i \varphi_i(x)$) и оценить некоторые числовые характеристики этих компонент.

Данный формализм служит математической основой большого количества задач анализа данных как в спектрометрии, так и в других областях экспериментальной науки, всюду, где могут использоваться методы количественного анализа сложных процессов: в биологии, социологии, психологии и т.д.

Обычный подход для решения задач декомпозиции состоит в следующем. Функции $\varphi_i(x)$ подбираются на основе визуального анализа данных, реже - из теоретических соображений. Далее в эти функции вводятся параметры \bar{p} так, чтобы всевозможные деформации компонент $\varphi_i(x)$ описывались соответствующими значениями

этих параметров, т.е. $\hat{T}_i \varphi_i(x, \bar{p}_i) = \varphi_i(x, \bar{p}_i)$.

Здесь \bar{p}_1 - вектор некоторых "эталонных" значений, \bar{p}_i - вектор искоемых значений, причем зависимость φ от \bar{p} обычно нелинейная. Затем ищется минимум величины

$$\Phi(X, \bar{p}, \epsilon(x)) = \sum_{j=1}^M \frac{1}{Z(x_j)} \left\{ \lambda(x_j) - \sum_{i=1}^n \varphi_i(x_j, \bar{p}_i) \right\}^2$$

на множестве значений векторов \bar{p} . Здесь $X \equiv \{x_j\}$ и предполагается, что корреляциями между соседними $\lambda(x_j)$ можно пренебречь (в спектрометрии это часто оправдано). Оценки параметров \bar{p}_i , получаемые таким способом (оценки метода наименьших квадратов, или, сокращенно, м.н.к.-оценки), берутся в качестве решения, если они однозначно определяют положение и характеристики компоненты в смеси. Минимизация Φ осуществляется с помощью какого-либо итерационного процесса.

Другие методы: методы последовательного вычитания компонент; методы, использующие преобразование Фурье и т.д., в силу их слабой эффективности используются крайне редко.

Декомпозиция смеси осуществляется сравнительно просто, если $\varphi_i(x)$ являются простыми функциями, как, например, гауссиан, лоренциан или экспонента и число параметров невелико: 2-3 на каждую компоненту. К сожалению, в реальных задачах форма компонент значительно сложнее, и почти ни для одного аппаратного спектра не существует простой функции, достаточно точно описывающей форму его компонент. Если все же для разложения берутся, например, гауссиан или лоренциан, то это означает, что м.н.к.-оценки параметров будут иметь смещение, величина которого методом не определяется и никак не контролируется. Некоторые авторы вводят дополнительные параметры, которые учитывают форму компонент точнее; однако каждый дополнительный параметр усиливает корреляции функций компонент между собой, в результате резко увеличиваются дисперсии оценок. Суммарная линия при этом хорошо согласуется с экспериментальными данными (т.е. подгонка получается хорошей), но распределение компонент внутри суммарной регрессии оказывается произвольным.

Для решения задачи декомпозиции смесей автором был предложен следующий подход:

1) в качестве моделей компонент берутся гистограммы $\psi(x)$ реальных измерений этих компонент в экспериментах, в которых эти компоненты наблюдаются в изолированном виде;

2) гистограммы $\psi(x)$ доопределяются до гладких функций с помощью интерполяции и в них вводятся параметры: $\psi(x, \bar{p})$;

3) аппарат параметризации компонент строится на основе аксиомы о том, что множество операторов $\{\hat{T}\}$ имеет структуру группы; отсюда, перебирая различные группы преобразований точек плоскости, мы вводим числовые параметры соответствующих групп в качестве искоемых параметров компонент.

Пусть, например, рассматривается аффинная группа, из которой удалена подгруппа вращений, т.е. образ компоненты в смеси есть результат сдвига, уширения и подобного преобразования модели; тогда:

$$\hat{T} \varphi(x) = A \varphi\left(\frac{x-P}{W}\right),$$

где величины P, W, A характеризуют соответственно сдвиги модели, ее уширение и коэффициент подобия.

Автором исследованы вопросы математического обоснования данного метода. В частности, предложена ясная трактовка понятия количества информации, более точно учитывающая специфику спектрометрических экспериментов, и получены в рамках этой трактовки достаточные условия существования состоятельной нелинейной м.н.к.-оценки как для случая точных моделей регрессий $\varphi(x)$, так и для приближенных моделей $\psi(x)$.

Преимущества такого подхода состоят в следующем:

1) $\psi(x)$ может описать модель с любой степенью точности, которую допускает данный эксперимент, и в то же время число параметров минимально; более того, они допускают ясную физическую интерпретацию (например, в гамма-спектре, P - энергия, а AW - интенсивность перехода между уровнями);

2) метод универсален, свободен от субъективизма в описании модели компонент и позволяет обрабатывать спектры (и вообще линейные смеси) самого различного типа без переделок программы, простой подстановкой таблицы соответствующей модели;

3) легко проверить устойчивость декомпозиции к вариациям модели, т.к. внесение каких-либо изменений в гистограмму не представляет трудностей.

В первой главе описаны образцы наиболее часто встречающихся аппаратурных спектров (спектров α - и β - частиц, γ - спектров, нейтронных спектров и т.д.) и качественно сформулирована основная задача анализа этих спектров - задача декомпозиции спектра на компоненты и построение оценок характеристик отдельных компонент. Столь детальное рассмотрение конкретных примеров спектров понадобилось для того, чтобы рассматриваемая далее теория декомпозиции смесей была достаточно содержательной.

Во второй главе приведен математический анализ и обоснование аппарата, применяемого к решению задач декомпозиции. Аппаратурный спектр формально трактуется как линейная смесь функций, описывающих отдельные компоненты.

В §1 описаны особенности регрессионного анализа в спектрометрии и сформулированы основные понятия и определения. В частности, показана целесообразность трактовки отдельного события как траектории дискретного случайного процесса и понятие статистики измерения определено как число таких траекторий:

$$z(x) = N(f(x, \bar{p}) + \tau(x)) = Nf(x, \bar{p}) + e(x),$$

под количеством информации в выборке будет пониматься далее величина N .

В §2 исследованы достаточные условия существования состоятельной нелинейной оценки искомых параметров, получаемой методом наименьших квадратов (м.н.к.-оценок). Пусть $\{x_j\}$, $j = 1, \dots, M$ множество точек измерения, на котором измерена величина $z(x)$,

$f(x, \bar{p})$ - модель регрессии, нелинейно зависящая от n -мерного вектора параметров \bar{p} , $e(x)$ - помеха измерения с дисперсией $D(x)$, N - статистика измерения. Тогда м.н.к.-оценка истинных значений параметров есть значения \bar{p} , обращающие в минимум выражение: (\bar{p}_0 - истинные значения параметров)

$$\Phi(X, \bar{p}, e(x)) = \sum_{j=1}^M \frac{1}{D(x_j)} \{z(x_j) - f(x_j, \bar{p})\}^2$$

Рассмотрим линеаризацию в точке \bar{p} выражения Φ :

$$L(X, \bar{p}, e(x)) = \sum_{j=1}^M \frac{1}{D(x_j)} \{z(x_j) - f(x_j, \bar{p}_0) - \sum_{i=1}^n \frac{\partial f(x_j, \bar{p}_0)}{\partial p_i} (p_i - p_{i0})\}^2$$

и точку \bar{p}_0 ее минимума будем называть линеаризованной м.н.к.-оценкой. Пусть $f(x, \bar{p})$ непрерывно-дифференцируемы по p_i до 2-го порядка включительно и либо функции $\partial f(x, \bar{p}) / \partial p_i$ образуют систему Чебышева по x , либо существует множество $\{x_j\}$,

на котором векторы $\partial f(x_j, \bar{p}_0) / \partial p_i$ линейно-независимы.

Рассмотрим для данных $\varepsilon > 0$, N усечение распределения помехи $e(x)$:

$$e_N(x) = \begin{cases} e(x), & \text{если } |e(x)| < \varepsilon / N \\ c, & \text{иначе } (c \in [0, \varepsilon / N]); \end{cases}$$

эта процедура соответствует таким действиям экспериментатора: прежде чем измерение анализируется, в нем корректируются все те значения, которые слишком сильно отличаются от значений, ожидаемых в данных точках. Впредь будем называть такие помехи регулярными. Усечение ведет к тому, что с вероятностью 1 $\sup |e_N(x)| \rightarrow 0$ при $N \rightarrow \infty$.

Т е о р е м а . При любом $\varepsilon > 0$ для достаточно большого N существует выпуклая окрестность Q точки \bar{p}_0 , такая, что Φ с вероятностью 1 строго выпукло в данной окрестности, и значения \bar{p} , обращающие в локальный минимум Φ в Q , являются состоятельной м.н.к.-оценкой параметра \bar{p}_0 . Если при этом линеаризованная м.н.к.-оценка имеет асимптотически (при $N \rightarrow \infty$) нормальное распределение, то м.н.к.-оценка нелинейной задачи также будет иметь при $N \rightarrow \infty$ нормальное распределение с матрицей ковариаций линеаризованной м.н.к.-оценки.

Результаты теоремы распространены на случай коррелированных между собой $z(x_j)$, а также на случай, когда $\bar{p}_0 \in Q \subset R^n$, где Q - измеримое выпуклое множество, а в качестве оценки \bar{p}_0 берется проекция м.н.к.-оценки на Q .

В §3 исследованы свойства приближенных оценок. В излагаемом в диссертации методе предлагается брать в качестве моделей регрессий гистограммы $\psi(x)$ реально измеренных физических процессов. Далее гистограммы с помощью интерполяции доопределяются до гладких функций, в них вводятся параметры $\psi(x) \rightarrow \psi(x, \bar{p})$ и применяется обычная техника регрессионного анализа с заменой функции $\varphi(x, \bar{p})$ на $\psi(x, \bar{p})$. Такие приближенные модели мы можем рассматривать как результаты некоторого измерения, давшего

$$\psi_i(x) = \varphi_i(x) + \delta_i(x),$$

где случайные величины $\delta_i(x)$ имеют нулевое математическое ожидание, статистики N_i и дисперсии $D_i(x)$.

Т е о р е м а . Пусть имеет место условия теоремы §2 и $\|\tau_i\|$ - норма в C погрешности доопределения функций $\psi(x)$ и ее производ-

ных по x . Тогда при $\min N_i \rightarrow \infty$, $\max \|z_i\| \rightarrow 0$ приближенные м.н.к.-оценки \bar{p}_0 сходятся с вероятностью 1 к обычным (нелинейным) м.н.к.-оценкам.

Теорема распространена на случай приближенного указания дисперсий в выражении Φ .

В §4 рассмотрен аппарат параметризации компонент смесей. В качестве параметров регрессий предлагается брать параметры примитивных групп Ли преобразований плоскости (x, y) на самое себя. Выше уже был указан способ параметризации, вводимый аффинной группой. Для проективной группы (более общей) зависимость реальной регрессии $f(x, \bar{p})$ от ее модели $m(x, \bar{p})$ будет выражаться формулой:

$$f(x, A, P, W, K) = A m \left(\frac{x-P}{Kx+W} \right). \quad (I)$$

На основе соотношений (1) можно легко вычислять производные регрессий f по параметрам, необходимые для получения м.н.к.-оценок. Действительно,

$$\frac{\partial f}{\partial A} = m(z), \quad \frac{\partial f}{\partial P} = -\frac{A}{Kx+W} \varphi'_x(z)$$

$$\frac{\partial f}{\partial W} = -\frac{Az}{Kx+W} \varphi'_x(z), \quad \frac{\partial f}{\partial K} = -\frac{Azx}{Kx+W} \varphi'_x(z),$$

где $z = (x-P)/(Kx+W)$.

В §5 проанализированы трудности определения качественной структуры смесей методами статистической проверки гипотез и обоснована важность разработки эвристических приемов для решения этой задачи.

В третьей главе формально поставлена и исследована задача декомпозиции спектров при условии использования параметризации, вводимой проективной группой.

В §1 исследованы условия существования решения задачи. Спектр $\beta(x)$ представлен в виде:

$$\beta(x) = \sum_{i=1}^n A_i m_i \left(\frac{x-P_i}{K_i x + W_i} \right) + e(x) = f(x, \bar{p}) + e(x), \quad (2)$$

где $m_i(z)$ - модели компонент, n известно, известна дисперсия $\mathcal{D}(x)$, $\bar{p} \equiv \{A_i, P_i, W_i, K_i\}$ и помеха $e(x)$ является регулярной. Показано, что условия существования решения эквивалентны условиям существования состоятельной м.н.к.-оценки параметров \bar{p}_0 .

В §2 исследованы условия единственности решения задачи. Указан класс функций, вообще недопустимых для использования в

задачах анализа смесей при параметризации (2). Описан класс функций $y_i(x, \bar{p}_i)$ ($\bar{p}_i = A_i, P_i, W_i, K_i$) таких, что $\partial y_i(x, \bar{p}_i) / \partial p_i$ образует систему Чебышева по x , а также выведен способ построения множества $X \equiv \{x_j\}$ точек измерения спектра, гарантирующий линейную независимость векторов $\partial y_i(x_j, \bar{p}_i) / \partial p_i$. Таким множеством будет объединение экстремальных точек функции $y_i(x, \bar{p}_i)$ и ее производной $\partial y_i(x, \bar{p}_i) / \partial x$. Указаны важные случаи неединственности минимума выражения Φ и вырождения Φ в гиперповерхность цилиндрического типа.

В §3 исследована устойчивость декомпозиции к помехам $e(x)$. Показано, что м.н.к.-оценка вектора \bar{p}_0 является устойчивой для различных $e(x)$, если минимизация Φ осуществляется в области $Q \in R^{4n}$, заданной неравенствами:

$$A_i \geq \beta_i, \quad P_{i+1} - P_i \geq \tau_i, \quad K_i x + W_i = const, \quad (3)$$

где величины $\beta_i > 0$ и $\tau_i > 0$ согласованы с нормой помех $e(x)$. Если параметры $P_i \equiv 0$, то (3) имеет вид:

$$A_i \geq \beta_i, \quad W_{i+1} - W_i \geq \tau_i, \quad K_i = const.$$

Величины β_i и τ_i имеют прозрачный физический смысл: это чувствительности и разрешения метода. Таким образом, задача минимизации Φ в области (3) является корректно поставленной.

В §4 рассмотрены некоторые способы качественного анализа состава спектров.

В §5 рассмотрены вопросы калибровки измерительных приборов. Показано, что способ параметризации компонент смесей, излагаемый в диссертации, пригоден также и для параметризации калибровочных кривых.

В §6 освещены вопросы обработки спектров осколков деления. Задача анализа таких спектров имеет специфические особенности, в силу чего методы ее решения выпадают из общей схемы декомпозиции смесей.

В четвертой главе исследуются алгоритмические аспекты минимизации Φ в области $Q \in R^{4n}$, задаваемой неравенствами (3), к которым для улучшения качества м.н.к.-оценок могут быть добавлены также следующие неравенства:

$$P_{i+1} \leq P_i \leq P_{i+2}$$

$$A_j = \beta_j A_i \pm \varepsilon_j, \quad P_j = P_i + d_j \pm \delta_j, \quad j > i. \quad (4)$$

В §1 описана комбинированная итерационная процедура, включающая в себя 2 стадии:

1) демпфированный процесс Гаусса-Ньютона с проектированием промежуточных оценок на неравенства (3), (4) и регулированием длины шага на начальных итерациях;

2) процесс Ньютона на заключительных итерациях при условии положительной определенности матрицы процесса (демпфирование резко ослаблено).

Такая схема имеет следующие преимущества:

1) неравенства не позволяют оценкам выходить за пределы области их состоятельности и сходимости итераций;

2) в процессе Ньютона не требуется указывать длину шага во время итераций (всегда 1);

3) обрыв процесса более надежен и обоснован (строго говоря, процесс Ньютона является на практике единственным процессом, который обладает свойством: малость приращений параметров указывает на близость точки минимума);

4) есть возможность, проверив матрицу на положительную определенность, убедиться, что решение соответствует минимуму Φ , а не другим нулям градиента Φ . Последнее очень важно, поскольку можно привести много примеров спектров, разложение которых с помощью только процесса Гаусса-Ньютона (даже с применением техники демпфирования) дает результаты, резко расходящиеся с истинными значениями параметров, несмотря на то, что все внешние признаки свидетельствуют о том, что минимизация осуществлена хорошо (точность подгонки достигнута, Φ значимо согласуется с χ^2 -распределением, графики компонент в спектре выглядят весьма правдоподобно). Матрицы проверялись следующим образом: вычислялись все диагональные миноры первого и второго порядка прямой и обратной матрицы и их положительность рассматривалась как признак положительной определенности матрицы.

Для быстрого осуществления процедуры проектирования оценок на (3), (4) все операторы проектирования выведены в аналитическом виде.

В §2 произведен качественный анализ решения задачи декомпозиции спектра.

В §3 обсуждены возможные причины несходимости процесса минимизации и указаны некоторые способы воздействия на данные и изменения постановки задачи для достижения сходимости процесса.

В пятой главе обсуждаются вопросы организации программного обеспечения дисплеев и экспериментов на линии с ЭВМ "Минск-32". Для создания соответствующего программного обеспечения автором была разработана и реализована следующая идеология:

а) создана базисная система автокодных стандартных подпрограмм, реализующих все основные функции на ЭВМ, связанные с обслуживанием канала связи ЭВМ и физических установок, а также внешних устройств (магнитных лент, устройства ввода перфоленты и т.д.) и терминалов (дисплея со световым карандашом и пишущей машинки), программы, осуществляющих переработку битовой и символьной информации;

б) на ФОРТРАН-4 написаны программы, которые, используя вышеуказанные служебные подпрограммы, осуществляют прием, накопление и обработку информации, проводя при этом необходимый контроль и анализ возникающих ситуаций. Обращение к служебным подпрограммам осуществляется обычным путем:

$CALL F(P_1, \dots, P_n)$,

где F - имя соответствующей подпрограммы, а P_1, \dots, P_n - список фактических параметров.

Необходимость и целесообразность такого подхода вытекает из следующего. Большой объем программирования, необходимость обеспечения скорости, оперативности и высокого сервиса в обмене сообщениями между ЭВМ и экспериментатором, необходимость гибкости и маневренности получаемого программного обеспечения и легкости его изменений вследствие постоянных изменений условий проведения экспериментов требуют использования языка программирования высокого уровня и мощной операционной системы, дающей пользователю достаточно удобный аппарат для конструирования и использования программного обеспечения экспериментов на линии с ЭВМ. На ЭВМ "Минск-32" имеются и транслятор с языка ФОРТРАН-4 и большая операционная система. Но ФОРТРАН-4, будучи ориентированным на решение счетных научно-технических задач, не может быть непосредственно использован для создания, например, программ обслуживания каналов. Операционная система "Минск-32" ориентирована на обработку информации экономического характера и плохо учитывает специфику программного обеспечения физических экспериментов.

Поэтому естественно возникает идея дополнить ФОРТРАН-4 возможностями обращения к произвольным внешним устройствам и возможностями

работы с битовой и символьной информацией, а операционную систему — элементами, компенсирующими ее вышеуказанные недостатки. При этом одновременно должно учитываться требование стандартности: чтобы иметь возможность использовать все математическое обеспечение "Минск-32", следует оставаться в рамках тех положений, которые выдвигает система программирования на ЭВМ "Минск-32".

Учесть эти противоречивые требования можно было путем приспособления к операционной системе и создания программ-посредников, которые, полностью подчиняясь всем формальным требованиям операционной системы, создавали бы все вышеуказанные дополнительные возможности. Такой подход дает возможность физику-экспериментатору участвовать в разработке программного обеспечения экспериментов на линии с ЭВМ и программного обеспечения дисплея (что особенно важно).

В §1 описано программное обеспечение для приема и накопления спектров.

В §2 — система СПОРС, предназначенная для автоматизации обработки спектров.

В §3 дано программное обеспечение дисплея со световым карандашом и рассмотрены возможности, создаваемые дисплеем для реализации алгоритмов декомпозиции спектров.

Шестая глава посвящена изложению программной реализации методов декомпозиции спектров. Разработка программы, реализующей описанные в предыдущих главах методы разложения спектров, ставит не только вопросы, связанные с алгоритмами этих методов, но и вопросы оптимальной организации этой программы. Дело в том, что программа не только должна правильно реализовать алгоритмы, но и при этом оптимально использовать ресурсы ЭВМ, быть достаточно универсальной, предоставлять пользователю достаточные удобства при работе с ней и т.д. Но, как показывает практика, достичь этой цели нелегко, ибо универсальность может обернуться непригодностью для конкретных применений, а удобства, поставляемые в принудительном порядке, легко превращаются в свою противоположность. Выходом из этой ситуации явилась некоторая многоплановая композиция, которая представляет собой не столько законченную программу, сколько набор блоков для изготовления этой программы и указания, как эти блоки собирать.

В результате был создан комплекс программных модулей, каждый из которых реализует какую-либо элементарную операцию в обработке

спектров, такой, что на базе этого комплекса можно собирать различные программные конфигурации, предназначенные для решения задач разложения спектрометрических смесей определенного типа.

В §1 перечислены программные модули вышеуказанного комплекса.

В §2 приведена конкретная конфигурация модулей, ориентированная на анализ нейтронных спектров.

В §3 описана другая конкретная конфигурация модулей, ориентированная на анализ гамма-спектров для целей активационного анализа. В нее входят дополнительные блоки, связанные со спецификой задач активационного анализа.

В заклччении перечислены основные результаты диссертации:

1) Развѣт, математически обоснован и программно реализован метод для разложения смесей регрессий в условиях недостаточности априорной информации о форме компонент этих смесей; метод достаточно универсален и пригоден для анализа широкого класса смесей регрессий; изучены условия, накладываемые на траектории помех и точность начальных данных, при которых существует состоятельная нелинейная м.н.к.-оценка, использующая как точные модели регрессий, так и приближенные.

2) В рамках развитого автором формализма поставлена и изучена задача разложения смесей, ориентированная на анализ спектрометрических данных. Исследованы условия существования, единственности и устойчивости решения и показано, что при выполнении ряда условий единственное разложение смеси существует и является устойчивым по отношению к помехам. Сформулированы понятия чувствительности и разрешения как двойственных переменных к амплитуде и положению компоненты смеси и показана их роль в корректности постановки задачи и в априорной оценке структуры смеси. Обоснована необходимость использования комбинации итерационных процессов Гаусса-Ньютона и Ньютона при вычислениях. Построены аналитически проекторы решения задачи на множества, порожденные соответствующими ограничениями. Исследована точность решения задачи в зависимости от помехи измерения и погрешности модели.

3) Проанализирован и обобщен опыт создания и применения в спектрометрии программного обеспечения экспериментов на линии с ЭВМ, а также дисплей-ориентированного программного обеспечения, с использованием такого языка программирования высокого уровня, как ФОРТРАН, и указаны наиболее целесообразные расширения этого языка. Создана интерактивная (с использованием дисплея) система

взаимодействия экспериментатора с ЭВМ "Минск-32", лучше учитывающая специфику обработки данных экспериментальной физики, чем это делает стандартная операционная система.

Апробация. Результаты диссертации доложены на различных симпозиумах и конференциях (всесоюзных и международных)^{/3,8,10,13,14,15,17/}, семинарах ЛВТА, ЛНФ, ЛЯР ОИЯИ, НИВЦ МГУ и опубликованы в виде журнальных статей, препринтов и сообщений ОИЯИ^{/1,2,4-7,9,11,12,16,18-20/}.

Публикации.

1. Акапьев Г.Н., Злоказов В.Б. Препринт ОИЯИ, Ю-8161, Дубна, 1974.
2. Вагов В.А. и др. Препринт ОИЯИ, Ю-5370, Дубна, 1970.
3. Владимиров В.А. и др. Автоматизация обработки многомерной информации. - В сб.: VI Международный симпозиум по ядерной электронике, Варшава, 1971, ОИЯИ, Д13-6210, Дубна, 1972, с.317-320.
4. Воробьева Н.Н., Злоказов В.Б., Нефедьева Л.С. и др. ПОФИ-72, Б1-Ю-8674, ОИЯИ, Дубна, 1974.
5. Евдокимов А.К., Злоказов В.Б., Козлов С.И. и др. Препринт ОИЯИ, 9-9545, Дубна, 1976.
6. Злоказов В.Б., Нефедьева Л.С. Препринт ОИЯИ, Ю-5966, Дубна, 1971.
7. Злоказов В.Б., Савенко Б.Н., Хенниг К. Препринт ОИЯИ, Р14-6731, Дубна, 1972.
8. Злоказов В.Б., Саламатина Т.С., Челноков Л.П. - В сб.: Сопещение по программированию и математическим методам решения физических задач, Дубна, 1973, ОИЯИ, Д10-7707, Дубна, 1974, с.509-513.
9. Злоказов В.Б. Препринт ОИЯИ, Ю-7130, Дубна, 1973.
10. Злоказов В.Б. В сб.: Межд. школа по вопросам использования ЭВМ в ядерных исследованиях, Ташкент, 1974, ОИЯИ, Д10, П1-8450, Дубна, 1974.
11. Злоказов В.Б., Кулькина Л.П. Препринт ОИЯИ, Ю-8162, Дубна, 1974.
12. Злоказов В.Б., Кулькина Л.П., Маслов О.Д. Ат. энергия, т.39, вып.4, с.286-88, (1975).
13. Злоказов В.Б., Сухов А.М. В сб.: VIII Межд. симпозиум по ядерной электронике, Дубна, 1975, ОИЯИ, Д13-8950, Дубна, 1975, с.57.
14. Злоказов В.Б. В сб.: XIV Сопещение по ядерной спектроскопии и теории ядра, Дубна, 1975, ОИЯИ, Д6-8846, Дубна, 1975, с.158.
15. Злоказов В.Б., Сухов А.М., Смирнов В.И., Фефилов Б.В. В сб.: VIII Межд. симпозиум по ядерной электронике, Дубна, 1975, ОИЯИ, Д13-8950, Дубна, 1975, с.56.
16. Злоказов В.Б. Препринт ОИЯИ, Р11-Ю1В6, Дубна, 1976.

17. Фефилов Б.В., Беляева Л.М., Гаггская О.Г. и др. В сб.: I Всесоюзное сопещение по автоматизации научных исследований в ядерной физике (тезисы докладов). ИЯИ АН УССР, Киев, 1976, стр.61.
18. Zloказov V.B. Nucl. Instr. & Meth., 130, 543, (1975).
19. Zloказov V.B. Preprint JINR, E10-10192, Dubna, 1976.
20. Выролаев В.Я., Злоказов В.Б., Кулькина Л.П. и др. Препринт ОИЯИ, Ю-Ю248, Дубна, 1976.

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

21. Артых А.Г. и др. Препринт ОИЯИ, Е7-Ю464, Дубна, 1977.
22. Балагуров А.М. и др. Препринт ОИЯИ, Р3-9796, Дубна, 1976.
23. Друин В.А. Препринт ОИЯИ, Р7-Ю359, Дубна, 1977.
24. Аврамов С.А., Сосновская Е.В., Цупко-Ситников В.М. Препринт ОИЯИ, Р10-9741, Дубна, 1976.
25. Гаджиков В., ПТЭ, 5, 82, (1970).
26. Кабина Л.П., Кондуров И.А. Препринт ФТИ, Ленинград, 1972.
27. Попов А.Б. и др. Сопещение ОИЯИ, 3-9742, Дубна, 1976.
28. Рупп Э. Сопещение ОИЯИ, Ю-6614, Дубна, 1972.
29. Шелонцев И.И., ОИЯИ, Б2-Ю-4090, Дубна, 1968.
30. Элер Г. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-6817, Дубна, 1972.
31. Meerwall K., Gawlik M.Q. Comput. Phys. Commun., 5, 309, (1973).
32. Rutti J.T., Prussin S.G. Nucl. Instr. & Meth., 72, 125, (1969).
33. Tukey J.W. Ann. Math. Statist., 33, 1, (1962).

Рукопись поступила в издательский отдел
19 апреля 1977 года