

Ц, 840В

А-211

Аврамов С.Р. и др.

Б1-10-83-698.



ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

6651/83

Б1-10-83-698

ДЕПОНИРОВАННАЯ ПУБЛИКАЦИЯ

Дубна 19 83

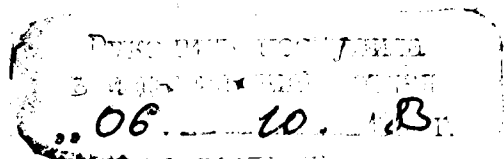
ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
Лаборатория вычислительной техники и автоматизации

Ц 840.8
А-211

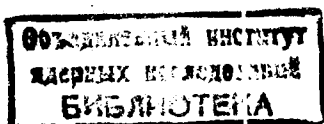
51-10-83-698

С.Р.Аврамов, А.Г.Белов, Г.Л.Бутцева, Н.Н.Воробьева, А.С.Завьялова,
В.Б.Злоказов, Л.С.Нефедьева, В.Ф.Петрянкин, А.А.Расторгуев,
Т.С.Рерих, А.И.Салтыков, В.Н.Стройков, В.Н.Тарасова, В.Ф.Украинцев,
М.В.Уфимцев, Е.В.Шафранов, В.М.Ягафарова, Н.Янева

БИБЛИОТЕКА
ПРОГРАММ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ НА ЭВМ ЕС-1060
Том III



Дубна, 1983 г.



ВВЕДЕНИЕ

Настоящий том содержит описание программ библиотеки системы обработки спектров (СОС, БЭСМ-6) /1,2/, адаптированных для ЭВМ ЕС-1060.

В процессе адаптации исходных программ (написанных на языке Фортран-Дубна для БЭСМ-6) на ЕС-1060 были внесены многочисленные исправления, повышающие их качество и сокращающие время счета. Ввиду отсутствия в настоящее время на ЕС-1060 системы, аналогичной СОС, все программы переведены на автономный режим работы. Поэтому в качестве параметров программ задаются непосредственно имена массивов и их размерности, а не имена файлов, в которых записывались предварительно эти массивы (как это организовано в СОС).

После того, как на ЕС-1060 будет создан аналог системы СОС, все программы библиотеки будут включены в эту систему.

В библиотеку включены новые программы, отсутствующие в аналогичной библиотеке на БЭСМ-6, а именно:

- а) ACTIV - программа обработки γ -спектров для целей активационного анализа;
- б) DOMUS - программа обработки двумерных спектров;
- в) MNCARL - программа моделирования сечений трансактиниевых ядер в области неразрешенных резонансов.

Программа ввода данных в свободном формате (UREAD) была переработана и написана на языке ассемблера ЭВМ ЕС-1060, а вместо программы минимизации квадратичного функционала (FUMILI) используется ее модификация под именем FUMILA.

1. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, В1-10-80-345, том I, Дубна, 1980.

2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, том II, Дубна, 1981.

СИСТЕМА ПРОГРАММ ДЛЯ ОБРАБОТКИ γ -СПЕКТРОВ

Адаптацию выполнили: Аврамов С.Р., Бутцева Г.Л.

I. Обработка одного участка γ -спектра

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программы SIMPCO, SIFACO, SIFPCO, SIAFCO, SIAACO, SIPFCO предназначены для обработки одного участка γ -спектра. Они отличаются вариантами параметризации модели пика. Возможно использование четырех вариантов параметризации (см. общее описание /I/).

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL SIMPCO(F)
CALL SIFACO(F)
CALL SIFPCO(F)
CALL SIAFCO(F)
CALL SIAACO(F)
CALL SIPFCO(F) , где

F - имя массива, в элементах которого находится следующая информация:

- 1 элемент - L - число каналов на участке ($L \leq 300$);
 - 2 элемент - K - число пиков на участке ($K \leq 15$);
 - 3 элемент - ν - степень полинома фона: $\nu \leq 3$ при 15 пиках,
 $\nu \leq 5$ при 14 пиках;
 - 4 элемент - ℓ_0 - номер начального канала по экспериментальной шкале;
 - 5 элемент - Γ - полная ширина пика в его основании (при фоне);
 - 6 элемент - P_I
 - 7 элемент - C_I
 - ⋮
 - (5+(2K-1)) элемент - P_K
 - (5+2K) элемент - C_K
 - (5+2K+1) элемент - S_1
 - (5+2K+L) элемент - S_L
- } - начальные приближения для позиций и площадей всех пиков.
- } - содержимое каналов участка спектра.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Программа S1AEC формирует элементы массива F, вводит дополнительную информацию с перфокарт, выбирает из массива F1 нужный участок спектра.

CALL S1AEC(F,F1), где

F - имя сформированного массива,
F1 - имя массива, содержащего спектр.

Дополнительная информация на перфокартах:

1-я карта - L,K,V - в формате 3I10;
2-я карта - ϵ_0 - в формате F10.1;
3-я карта - Γ - в формате F10.1;
с 4 п/к по (4+2K) - P_IC_I... P_KC_K - в формате 8F10.1.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Для каждого обработанного участка спектра на АЦПУ выдаются сведения об исходных данных, о результатах обработки, график участка спектра с результатами обработки. (См. общее описание /I/).

2. Обработка γ -спектров

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программы SIMPC3, SIPFC3, SIFAC3, SIFPC3, SIAFC3, SIAAC3 предназначены для обработки γ -спектра и отличаются способом обработки участков γ -спектра. Соответствие между названиями программ обработки участка спектра и всего спектра смотрите в общем описании /I/.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL SIMPC3(F)
CALL SIFAC3(F)
CALL SIPFC3(F)
CALL SIFPC3(F)
CALL SIAFC3(F)
CALL SIAAC3(F), где

F - имя массива спектра.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Каждая из программ вводит с перфокарт дополнительную информацию о следующих величинах:

- IG - число пиков в спектре;
- IS2 - число участков в спектре;
- IW1 - номер канала в начале спектра;
- IW2 - номер канала в конце спектра;
- W1 - ширина пика (число точек в пике) в канале IW1;
- W2 - ширина пика в канале IW2;
- (P(i), i = 1, IG) -- список позиций пиков в спектре;
- ((AP(i,j), i = 1, IS2), j=1,2) -- список каналов левых и правых границ участков.

Эта информация пробивается на перфокартах следующим образом:

- 1-я карта - 1 IG IS2 IW1 IW2 - в формате 5I10;
- 2-я карта - W1 W2 - в формате 2F10.1;
- с 3-ей карты - (P(i), i=1, IG) - в формате 8F10.1;
- с (K+1) по (K+P) карту - ((AP(i,j), i=1, IS2), j=1,2) - в формате 8F10.1 .

Для получения этой информации рекомендуется использовать программу EXPRES.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Во время обработки спектра на АЦПУ выдается информация по каждому обрабатываемому участку спектра. По окончании обработки всех участков спектра печатается сводная таблица с данными о каналах, площадях, полуширинах и соответствующих им ошибках.

3. Автоматический поиск пиков в γ -спектре

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа EXPRES предназначена для автоматического поиска пиков, вычисляет площади по амплитудам этих пиков, производит энергетическую калибровку.

В программе имеется косвенное ограничение на число найденных пиков ≤ 300 . Спектры, содержащие более 300 пиков, должны обрабатываться по частям.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL EXPRES(S), где

S - имя массива, содержащего спектр.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Дополнительная информация задается на перфокартах:

1. Уровень чувствительности - число 1 и VG
($30 \leq VG \leq 120$). Формат 2I10.
2. Позиция, энергия и полная ширина первого и последнего пиков в спектре - числа P1, E1, S1, P2, E2, S2. Формат 6F10.1.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Программа выдает на АЦПУ очередной номер, положение (в каналах), энергию (в KeV) и площадь (в импульсах) для всех пиков, найденных в спектре.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, БИ-10-80-345, Дубна, 1980.

ОБРАБОТКА СПЕКТРОВ С ГАУССОВСКОЙ ФОРМОЙ ОДИНОЧНОЙ ЛИНИИ

Адаптацию выполнила: Рерих Т.С.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа КАТОК /1/ осуществляет окончательную обработку группы участков спектра. Каждый участок обрабатывается независимо от остальных.

Программа находит значения параметров математической модели отдельного участка спектра, которые описывают измеренный спектр наилучшим образом в смысле наименьших квадратов.

Программа работает по композиционному алгоритму, включающему:

- метод Гаусса-Ньютона;
- метод регуляризованного итерационного процесса с экспоненциально убывающим регуляризатором /2/;
- метод регуляризованного итерационного процесса с постоянным регуляризатором /2/.

Выбор метода решения производится автоматически для каждого участка входного потока данных на основе численных особенностей.

Ограничения:

число участков спектра	$1 \leq M \leq 999$;
число каналов на участке	$4 \leq M \leq 100$;
число пиков на участке	$1 \leq K \leq 19$;
степень фоновго полинома	$-1 \leq L \leq 5$;
общее число неизвестных	$3 \leq N \leq 40$;
обеспечение переопределенности	$N+1 \leq L$.

Замечание: при $L=-1$ участок считается бесфоновым.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL КАТОК(FS,N,NN,KN,IC) , где

- FS - имя массива спектра, размерности N ;
- N - длина спектра;
- NN - массив длин обрабатываемых участков спектра;
- KN - количество участков;
- IC - режим печати:
 - IC=1 - печать минимальная;
 - IC=2 - более подробная /1/.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Дополнительная информация вводится с перфокарт для каждого участка спектра во время счета в следующей последовательности:

- NFC - начальный канал участка,
- M - число каналов участка,
- K - число пиков на участке,
- L - степень фонового полинома.

к групп x_1, y_1, x_2, y_2 , где

- x_1 - номер канала первой характерной точки,
- y_1 - число импульсов в канале x_1 ,
- x_2 - номер канала второй характерной точки,
- y_2 - число импульсов в канале x_2 .

Все данные пробиваются в любом формате через запятую. Последней должна быть запятая (смотри описание программы UREAD).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Печатается таблицы позиций пиков, их площадей, значений коэффициентов фонового полинома и их ошибки.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, Б1-10-81-394, Дубна, 1981.
2. Gadjokov V. JINR, E10-12352, Dubna, 1979.

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ СЛОЖНЫХ ГАММА-СПЕКТРОВ

Адаптацию выполнили: Бутцева Г.Л., Завьялова А.С., Нефедьева Л.С.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа /1/ предназначена для обработки сложных γ -спектров, измеряемых Ge(Li) -детекторами. Особенностью программы является возможность обработки как симметричных, так и асимметричных пиков. Главные этапы обработки /2/: отделение дискретных γ -линий от сплошного распределения, определение положений и площадей пиков, калибровка по энергии γ -линий с помощью набора заданных значений энергии, определение интенсивностей линий с помощью заданной кривой эффективности детектора.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL SPECTR(A,L,N,K,IP) , где

- A - имя массива спектра, размерности L;
- L - длина спектра;
- N } - номера каналов начального и конечного
- K } участка спектра;
- IP - режим печати:
 - IP=1 - печатаются промежуточные результаты в виде таблиц,
 - IP=0 - промежуточные результаты не печатаются.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Дополнительная информация подготавливается на перфокартах в следующем порядке:

1 перфокарта - тип функции (формат I2):

- 0 - симметричный,
- 1 - асимметричный.

2 перфокарта - F,OUT,EFFES,KA,E,ZP,NE (формат 7I5), где

- F - минимальная ширина участка ($2 \leq F \leq 100$);
- OUT - если 0, то промежуточной печати не будет, если 1, то будет промежуточная печать;

- EFFEC - если 0, то калибровка производится по эффективности,
- если 1, то калибровка не производится.
- KA - число пиков;
- E - число одиночных линий;
- ZP - начальная полуширина;
- NE - число калибровочных линий.

- Группа перфокарт - начальные положения пиков (формат 1515).
- Группа перфокарт - положение одиночных пиков (формат 315).
- Группа перфокарт - данные для калибровки по энергии: канал, энергия, ошибка энергии (формат 3F10.3).
- Группа перфокарт - максимальная и минимальная степени калибровки по энергии (формат 2110).
- Группа перфокарт - параметры кривой эффективности при $E \leq NG$ (формат 3F10.3).
- Группа перфокарт - точка максимума энергии в кривой эффективности NG (формат 110).
- Группа перфокарт - параметры кривой эффективности при $E \geq NG$ (формат 3F10.3).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Печатается исходные данные, затем по каждому участку - график и результаты обработки, степень и параметры кривой градуировки по энергии, а также точные положения градуировочных пиков и воспроизводство точных значений их энергий. В сводной таблице печатаются рассчитанные значения положений, энергий, площадей, интенсивностей линий и погрешности этих величин.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, Б1-10-80-345, том I, Дубна, 1980.
2. Гиппнер П. и др. ОИЯИ, II-8195, Дубна, 1974.

НАБОР ПРОГРАММ ДЛЯ ОБРАБОТКИ γ -СПЕКТРОВ (SAMPO)

Адаптацию выполнила: Нефедьева Л.С.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Данный набор программ предназначен для обработки γ -спектров методом фотопика. В целях экономии оперативной памяти и для удобства пользователя весь набор представлен тремя самостоятельными программами:

LINFIT - калибровка формы пика, калибровка по энергии и эффективности.

FINDER - автоматический поиск пиков.

FITTER - разбиение спектра на интервалы, содержащие пики; подгонка одиночных пиков и мультиплетов, вычисление площадей и энергий с помощью линейной интерполяции и вычисление эффективностей с помощью логарифмической интерполяции.

Результаты работы программы LINFIT (параметры формы, коэффициенты калибровочного полинома для энергии, параметры функции эффективности) могут быть использованы программами FINDER и FITTER, а результаты работы программы FINDER (вычисленные положения пиков) могут быть использованы в программе FITTER.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL LINFIT

CALL FINDER

CALL FITTER(N,K), где

N - количество положений пиков ($N \leq 200$),

K - длина спектра ($K \leq 4096$).

Исходная и результативная информация располагается в COMMON-блоках.

COMMON/SOS1/A(4096) - содержит исходный спектр.

COMMON/SOS2/B(250) - содержит дополнительную информацию, если в головной программе обращение происходит ко всем программам, то надо вводить дополнительную информацию в COMMON/SOS2/ перед каждым обращением к текущей программе.

- COMMON/SOC3/C(250) - содержит результат работы программы LINFIT.
 COMMON/SOC4/D(200) - содержит результат работы программы FINDER.
 COMMON/SOC5/E(1000) - содержит разметку спектра (границы интервалов подгонки и центры пиков) для программы FITTER.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

В массивы COMMON -блоков пользователь вводит информацию согласно правилам, подробно описанным в /I/. В связи с тем, что на ЭВМ типа ЕС в одно машинное слово (ячейку) можно занести не более четырех символов, управляющие коды заменены следующим образом:

SHAPED - SHAD
 OPTIONS - OPTI
 ENIN - ENIN
 ENFITI - ENTI
 EFFITD - EFFI
 EFFITI - EFTI
 CALDAT - CALD
 SSTOP - STOP
 EFIN - EFIN
 PEAKFI - PEFI
 FITTES - FITD
 FITS - FITS
 RESULT - RESU

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Виды печати задаются управляющими словами /I/.

ЛИТЕРАТУРА

I. Боганч М. и др. ОИЯИ, В1-Ю-81-394, Дубна, 1981.

ОБРАБОТКА γ -СПЕКТРОВ С ФИКСИРОВАННЫМ ПОЛОЖЕНИЕМ ПИКОВ

Адаптацию выполнил: Салтыков А.И.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Набор программ FITSOS включает в себя две основные подпрограммы: LINE и FIT.

Подпрограмма LINE вводит исходную информацию с перфокарт и преобразует ее для дальнейшей обработки. На печать выдаются все исходные данные с соответствующими заголовками. Подпрограмма FIT осуществляет подгонку по методу наименьших квадратов γ -спектров с фиксированными значениями положений пиков /1/.

Ограничения

Длина спектра не должна превышать 2048 каналов.

Количество коэффициентов полинома калибровки по энергии не больше 50.

Количество точек с известным положением и известной энергией для калибровки по энергии не больше 50.

Количество точек с известными положениями двухвылетных, одновылетных пиков и пиков полного поглощения для энергетической калибровки не больше 50.

Общее количество заданных пиков для подгонки не больше 99.

Количество интервалов не больше 50.

Количество коэффициентов полинома фона в интервале не больше 50.

Количество коэффициентов полинома для определения полуширины пика не больше 10.

Количество коэффициентов полинома отношения площадей F/D не больше 10.

Количество участков спектра не больше 50.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL LINE

CALL FIT

Ш. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Для подпрограммы LINE .

1. Текст названия реакции в A формате не больше 24 символов.
На той же карте в позиции 75 признак для распечатки спектра:
если 0, нет печати;
если 1, будет распечатываться информация о каждом канале интервала.
2. В формате I5 количество коэффициентов полинома калибровки по энергии.
3. В формате I5 количество точек с известной энергией и известным положением пика $\equiv N$.
4. N перфокарт `FORMAT(2(F10.2, F5.2)I5)` данные: энергия, ошибка энергии, положение, ошибка положения, тип пика (если 1 - двухвылетний, 2 - одновылетний, 3 - пик полного поглощения).
5. В формате I5 количество точек с известными положениями двухвылетних, одновылетних и пиков полного поглощения $\equiv NN$.
6. NN перфокарт `FORMAT(3(F10.2, F5.2))` данные: положения, и ошибки для D, S и F пиков.
7. В формате I5 количество пиков на спектре с известной энергией $\equiv M$.
8. M перфокарт `FORMAT(F10.2)` данные: энергии пиков .
9. В формате I5 количество пиков на спектре с известным положением $\equiv MM$.
10. MM перфокарт `FORMAT(F10.2, I5)` данные: положение и тип пика (если 1 - двухвылетний, 2 - двухвылетний, 3 - пик полного поглощения).
11. В формате I5 количество спектров $\equiv K$.
12. K перфокарт `FORMAT(2I5, I10)` данные: нижняя граница сканирования, верхняя граница сканирования и условное число спектра.
13. K перфокарт `FORMAT(E10.3)` данные: захватные площади спектров.
14. В формате I5 количество коэффициентов полинома полуширины пиков в зависимости от положения.
15. `FORMAT(8E10.3)` данные: коэффициенты полинома полуширины, начиная со старших.

16. В формате I5 количество коэффициентов полинома отношения площадей F/D в зависимости от энергии пика.
17. FORMAT(8E10.3) данные: коэффициенты полинома F/D.
18. FORMAT(E10.3) данные: отношение площадей S/D.
19. В формате I5 количество коэффициентов полинома эффективности детектора в зависимости от энергии.
20. FORMAT(8E10.3) данные: коэффициенты полинома эффективности.
21. FORMAT(E10.3) данные: степень зависимости усредненной интенсивности от энергии.
22. В формате I5 количество интервалов \equiv KK.
23. KK перфокарт FORMAT(3I5) данные начало интервала, конец интервала, количество коэффициентов полинома фона в интервале.

Примечание: Во всех полиномах, зависящих от энергии или положения, в качестве аргумента берется величина E/1000 или P/1000.

Для подпрограммы FIT.

1. В вызывающей программе должен быть описан COMMON -блок /COS1/ длиной IOIO6 слов (четырёхбайтных):

```
COMMON/COS1/DUMMY1(6),ESPECT(2048),
DUMMY2(8050),NSNA,DUMMY3
```

Здесь DUMMY1, DUMMY2 и DUMMY3 - фиктивные массивы и переменные, необходимые для правильного расположения массива ESPECT и переменной NSNA.

2. Перед обращением к подпрограмме FIT в массиве ESPECT должен находиться экспериментальный спектр, а переменная NSNA должна содержать число каналов этого спектра.
3. Теоретический спектр, полученный в результате работы подпрограммы FIT, располагается в COMMON-блоке /FITRES/ длиной 2048 слов.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Для каждого интервала спектра печатаются результаты с текстовым обозначением. Если задана распечатка каждого канала, печатается номер канала, экспериментальное значение, теоретическое значение, уровень фона, отклонение теоретического значения от экспериментального.

ЛИТЕРАТУРА

1. Библиотека программных модулей системы обработки спектров, том I, ОИЯИ, БИ-Ю-80-345, Дубна, 1980.

НАБОР ПРОГРАММ ДЛЯ ОБРАБОТКИ γ -СПЕКТРОВ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ АКТИВАЦИОННОГО АНАЛИЗА (АСТІАН)

Адаптацию выполнил: Стройков В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Имеются две независимые по времени работы программы ^{/I/} KALIB и АСТІАН . Программа KALIB предназначена для калибровки γ -спектров по энергии, эффективности и разрешению. Результаты работы программы KALIB могут быть использованы в программе АСТІАН.

Программа АСТІАН предназначена для обработки γ -спектров для целей активационного анализа. С помощью программы решаются следующие задачи:

- 1) фильтрация и коррекция γ -спектров;
- 2) обработка γ -спектров статистическими методами;
- 3) количественный и качественный анализ изотопного состава облучаемого образца.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL KALIB

CALL АСТІАН(SS,SD,SSS,SDD) , где

- SS - массив исходного спектра;
SD - массив с информацией о разметке пиков;
SSS - массив с дополнительной информацией о каждом изотопе;
SDD - массив, содержащий библиотеку изотопов.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

В common/coc2/ программа KALIB записывает калибровочные коэффициенты, факторы корреляции, а также значения функции нелинейной модели. При обращении к программам KALIB и АСТІАН в одном задании, надо описать common/coc2/ak(200),alb(50) . Далее, как и в ^{/I/}, вводится спектр и информация о разметке пиков. Спектр и пики могут быть введены с перфокарт при ca(21) \neq 0 . Если ca(21) = 0 , то спектр и пики должны быть записаны в массивы ss и sd заранее. В обоих случаях необходимо подготовить на перфокартах следующие величины:

- CA(1) = a - начало спектра;
 CA(2) = b - конец спектра;
 CA(3) = KCA - число точек разметки;
 CA(4) = PO - если PO > 0, то с перфокарт вводится только разметка пиков;
 если PO ≤ 0, то вводится также и спектр.

Библиотека изотопов и последовательность массивов энергий, квантовых выходов и признаков также могут быть введены с перфокарт или записаны в массивы SSS и SDD заранее. В последнем случае CA(22) > 0, а в первом CA(22) ≤ 0. Информация об изотопах ^{I/} набивается на перфокартах через запятую. Например, для изотопа BR2 на перфокарте следует пробить:

82.,BR,35.3,3.,49.48,8,

A T σ e N_i

- A - атомный вес (идентификатор изотопа);
 T - период полураспада в часах;
 σ - сечение в барнах;
 e - распространенность в процентах;
 N_i - число энергий (линий) для данного изотопа.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

В результате работы программы КАЛИВ на АЦПУ выдается следующая информация: параметры калибровочной функции P_i; соответствующие им ошибки и факторы корреляции; сведения о начальных данных; вычисленные значения энергий E_{теорет.}; разности (E_{теорет.} - E_{экспер.}) и соответствующие значения χ²; эффективности и энергии регистрации; модель пика со своими характеристиками.

В результате работы программы АСТАН на АЦПУ выдается следующая информация: распечатываются массивы CA, CB, затем для каждого пика в отдельности печатается положение, энергия, площадь, интенсивность, полуширина, разрешение, площадь фона и отношение площади пика к площади фона. Строится график каждого пика, печатается номер канала, соответствующая ему энергия и значение χ² в нем. Затем выдается сводная таблица, в которую внесена информация о каждом пике, распечатывается массив эталонов ^{I/}, массив AF, библиотека эталонов и таблица изотопов. Рядом с каждой библиотечной энергией ЕТАВЛ печатается ближайшая энергия, обнаруженная при анализе энергия эталона, вычисленные массы и соответствующие им ошибки, а также результаты количественного анализа.

ЛИТЕРАТУРА

I. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, БИ-10-80-345, том I, Дубна, 1980.

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ γ -СПЕКТРОВ ДЛЯ ЦЕЛЕЙ АКТИВАЦИОННОГО АНАЛИЗА (АСТІV)

Адаптацию выполнил: Злоказов В.Б.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа АСТІV предназначена для обработки γ -спектров, получаемых при самых различных условиях (в реакциях мгновенного или задержанного γ -излучения, при регистрации с помощью полупроводниковых или кристаллических детекторов, при симметрической или резко асимметрической форме пика, при большой, средней или малой статистике отсчетов). Управление работой программы также варьируется в широком диапазоне (от автоматического до полуручного). Результатом работы программы являются оценки положений и площадей пиков полного поглощения и их ошибки, которые с помощью калибровочных данных могут быть переведены в энергии и интенсивности излучений; затем, по желанию пользователя, на основе этой информации и библиотеки описаний изотопов, может быть осуществлен качественный и количественный анализ образца, спектр которого анализировался, с помощью формулы активации или на основе метода эталонов. Программа может также обрабатывать спектры x -лучей. С помощью программы АСТІV можно осуществлять как прецизионный анализ уникальных спектров, так и вести рутинную обработку потоков спектров для прикладных целей.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL АСТІV (SP, AP, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, OA, AI) , где

SP - массив под спектр,

AI - массив под библиотеку изотопов,

TAB - массив результатов,

AP, ONL, ANP, AM1, AM2, OA - рабочие массивы (см. полное описание^{/3/}).

Пример (не более 100 пиков в спектре) обращения:

```
DIMENSION SP(4096), AP(600), ONL(256), ANP(1400), AM1(35, 35), AM2(35)
```

```
DIMENSION OA(100), AI(1000), TAB(601)
```

```
CALL АСТІV (SP, AP, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, OA, AI)
```

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Подробное описание данных см. /1,2,3/.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

- 1) Заголовок.
- 2) Оценки площадей и положений пиков и их ошибки.
- 3) Энергии и интенсивности пиков.
- 4) Графики разложения и подгонки спектра.
- 5) По желанию пользователя - вспомогательная информация /1/.
- 6) Сводная таблица результатов.
- 7) Результаты качественного и количественного анализа.
- 8) Сообщения о работе программы (например, диагностика ошибок пользователя).

ЛИТЕРАТУРА

1. В.Б.Злоказов. ОИЯИ, Р10-80-510, Дубна, 1980.
2. В.Б.Злоказов. ОИЯИ, Р10-81-204, Дубна, 1981.
3. В.Б.Злоказов. ОИЯИ, Р10-82-105, Дубна, 1982.

СПЕКТРООРИЕНТИРОВАННАЯ ПРОГРАММА РАЗЛОЖЕНИЯ СМЕСЕЙ

Адаптацию выполнил: Злоказов В.Б.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Данные физического эксперимента, в частности спектры ядерного излучения, могут формально рассматриваться как линейная смесь полезных и фоновых компонент, на которые наложена статистическая ошибка. Математически это выражается так:

$$s(x) = \sum_{i=1}^n \Phi_i(x, \bar{p}_i) + b(x, \bar{q}) + e(x), \text{ где}$$

- x - номер канала;
- $s(x)$ - анализируемые данные;
- $\Phi_i(x, \bar{p}_i)$ - i -ая полезная компонента, зависящая от параметров \bar{p}_i ;
- $b(x, \bar{q})$ - сумма всех фоновых компонент; зависит от параметров \bar{q} ;
- $e(x)$ - статистическая ошибка с нулевым средним и дисперсией $D(x)$.

Цель программы UPEAK - разложение $s(x)$ на $\Phi_i(x, \bar{p}_i)$ и $b(x, \bar{q})$ оптимальным в определенном смысле способом для возможно более широкого класса аппаратных спектров или других спектроподобных смесей.

Программа использует следующие способы параметризации модели спектра. Пусть $m(x)$ - модель пика, т.е. гистограмма, воспроизводящая возможно более точно все особенности образа некоторого идеального пика. Тогда первый способ параметризации есть

$$\Phi_i(x, \bar{p}_i) = A_i m\left(\frac{x - P_i}{W_i}\right) \text{ или } \Phi_i(x, \bar{p}_i) = A_i m\left(\frac{x - P_i}{Cx + W}\right),$$

т.е. $\bar{p}_i = \{A_i, P_i, W, C\}$

Физический смысл введенных таким образом параметров:

- A_i - амплитуда пика;
- P_i - положение пика;
- W - ширина пика на полувысоте;
- C - коэффициент линейной зависимости полуширины пика от канала.

Параметры A_i и P_i индивидуальны для каждого пика на отдельном участке; параметры W и C - общие для группы пиков на этом участке.

Программа позволяет работать одновременно с 2 моделями пиков. Второй способ параметризации:

$$\Phi_i(x, \bar{p}_i) = A_i m\left(\frac{x - P_i}{W_i}\right), \text{ т.е. } \bar{p}_i = \{A_i, W_i, P_i\}.$$

Физический смысл параметров тот же, но в этом случае параметры A_i , w_i - индивидуальны для каждого пика, а P (положение) является общим для всех. Данная параметризация предназначена для разложения пика на составляющие, имеющие общий центр, но отличающиеся друг от друга ширинами.

Третий способ параметризации:

$$\phi_i(x, \bar{p}_i) = A_i \cdot m\left(\frac{x}{w_i}\right), \quad \text{т.е.} \quad \bar{p}_i = \{A_i, w_i\}.$$

Эта параметризация предназначена для задачи разложения суммы экспонент. Спектр может вводиться с перфокарт самой программой UPEAK или должен быть введен в массив SP перед обращением к программе UPEAK.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL UPEAK(SP, DISP, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, RM, NM), где

SP - массив спектра;

DISP - массив дисперсий спектра в каждом канале;

ONL - вспомогательный массив;

ANP, AM1, AM2, RM - рабочие массивы;

TAB - массив результатов;

NM - максимальное число параметров на интервал спектра.

Подробное описание всех массивов приведено в полном описании /1/.

Простейшее обращение к UPEAK (пуассоновские дисперсии отсчетов, байесовские оценки не используются, взаимодействие с программой через перфокарты) имеет вид:

```
DIMENSION SP(4096), ONL(100), ANP(1400), TAB(601), AM1(25, 25), AM2(50)
```

```
ONL(1)=0
```

```
ONL(2)=0
```

```
TAB(1)=0
```

```
CALL UPEAK(SP, SP, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, AM1, 10)
```

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Подробное описание входных данных см. /1/.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

1. Сначала печатается заголовок: "Программа UPEAK".
2. Далее (по желанию) входные данные.
3. Затем оценки величин: положение, площадь и ширина пиков.
4. Далее (по желанию) графики подгонки спектра.
5. Сводная таблица результатов (положения и площади пиков).

6. В процессе работы программы могут выдаваться различные сообщения (например, диагностика ошибок пользователей)^{/2/}.

ЛИТЕРАТУРА

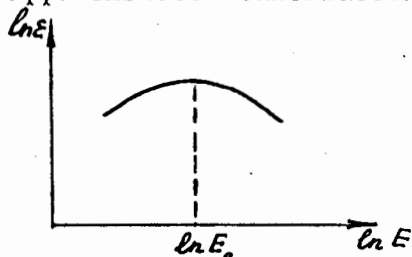
1. Злоказов В.Б. ОИЯИ, Р10-10350, Дубна, 1976.
2. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, Б1-10-80-345, том I, Дубна, 1980.

ПРОГРАММА КАЛИБРОВКИ ПО ЭФФЕКТИВНОСТИ

Адаптацию выполнила: Ягафарова В.М.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа определяет методом наименьших квадратов параметры кривой эффективности по заданным градуированным данным ξ . Кривая эффективности описывается уравнением:



$$\xi = \exp(a_0 + a_1 \ln E + a_2 (\ln E)^2), \quad E < E_0; \quad (1)$$

$$\xi = \exp(b_0 + b_1 \ln E + b_2 (\ln E)^2), \quad E > E_0; \quad (2)$$

$$\xi_0 = \xi(E_0).$$

Параметры: $a_0, a_1, a_2, b_0, b_1, b_2, E_0, \xi_0$.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL EFCAL(A,L,M,Q) , где

- A - массив экспериментальных данных длиной ($L \times 4$);
- L - число экспериментальных точек, ($L \leq 100$);
- M - число заданных точек на кривой от 1-ой точки до точки E_0 включительно;
- Q - множитель пропорциональности значений эффективности.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Для работы программы подготовить массив A, состоящий из L экспериментальных точек, определяемых величинами:

- K(I) - энергия I-ой точки;
- DE1(I) - ошибка энергии I-ой точки;
- E(I) - эффективность I-ой точки, умноженная на Q;
- DEP(I) - ошибка эффективности I-ой точки, умноженная на Q.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

1) EFFECT CALIBRATION DEGREE 2 , Q = ...

2) Таблица исходных величин:

K(I), DE1(I), E(I), DEP(I) .

Всего L точек.

- 3) PARAMETERS (a_i) ERROR (Δa_i), $i=1+3$.
- 4) Таблица калибровочных точек (экспериментальных и вычисленных с помощью параметров a_i по формуле (1)) от i -ой до m -ой.
- | CALL | POINTS | REPRODUCTION | DEVIATION |
|----------|--------|--------------|-----------------|
| $K(I)$, | $E(I)$ | $\xi(I)$ | $E(I) - \xi(I)$ |
- 5) E_0 , ошибки ΔE_0 , $\xi(E_0)$ и ошибки $\Delta \xi(E_0)$.
- 6) PARAMETERS (b_i) и ERRORS (Δb_i), $i=4+6$.
- 7) Таблица калибровочных точек (экспериментальных и вычисленных с помощью параметров b_i по формуле (2)) от m -ой до L -ой. Всего $L-m+1$ точек.
- $K(I)$, $E(I)$, $\xi(I)$, $E(I) - \xi(I)$.
- 8) E_0 , ΔE_0 , $\xi(E_0)$, $\Delta \xi(E_0)$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, В1-10-80-345, том I, Дубна, 1980.

ПРОГРАММА КАЛИБРОВКИ ПО ЭНЕРГИИ

Адаптацию выполнила: Ягафарова В.М.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа^И определяет методом наименьших квадратов параметры зависимости энергии от канала по формуле:

$$E = \sum_{n=0}^N a_n k^n \quad (I) , \text{ где}$$

- N - степень калибровочного многочлена,
N+1 - число параметров a_i .

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL ENCAL(A,L,M) , где

- A - массив исходных данных, длиной не менее (Lx3);
L - число экспериментальных точек, (L ≤ 33);
M=N+1, где N - степень калибровочного многочлена.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Для работы программы необходимо подготовить массив A , состоящий из L групп следующих величин:

- K(I) - i -ый канал,
E(I) - i -ая энергия,
DE(I) - ошибка i -ой энергии.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

- 1) ENERGY CALIBRATION DEGREE N
2) Входные экспериментальные точки (всего L) в виде таблицы:

K(I), DK(I), F(I), DE(I)

где DK(I) - ошибка канала = 1 .

- 3) Параметры a_i и ошибки параметров Δa_i .

PARAMETERS	ERRORS	
a_0	Δa_0	} всего N+1
a_1	Δa_1	
a_2	Δa_2	

- 4) Таблица калибровочных точек (экспериментальных и вычисленных по формуле (I)), где

$$\text{DEVIATION} = E_{\text{эксп.}} - E_{\text{выч.}}$$

$$\text{REPRODUCTION} = E_{\text{эксп.}}$$

- 5) СНІQV/F - показатель точности вычислений; $|\text{СНІQV/F}| < 1$.

ЛИТЕРАТУРА

І. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, БІ-ІО-80-345, том І, Дубна, 1980.

ПРОГРАММА АНАЛИЗА 2-МЕРНЫХ АМПЛИТУДНЫХ СПЕКТРОВ

Адаптацию выполнил: Злоказов В.Е.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

2-мерный амплитудный спектр (например, дифракционный) может быть формально представлен в виде следующего выражения:

$$s(x, y) = \sum_{i=1}^n P_i(x, y, \bar{p}_i) + b(x, y, \bar{q}) + e(x, y), \text{ где}$$

s - спектр,

x, y - номера каналов по обоим координатам,

$P_i(x, y, \bar{p}_i)$ - i -ый 2-мерный пик,

\bar{p}_i - вектор параметров i -ого пика,

$b(x, y, \bar{q})$ - 2-мерный фон,

\bar{q} - вектор параметров фона,

$e(x, y)$ - 2-мерная статистическая ошибка с нулевым средним и дисперсией $D(x, y)$.

Цель программы `DOMUS` - разложение спектра $s(x, y)$ на компоненты и получение оценок параметров пиков и их ошибок^{/1/}. 2-мерный спектр может или читаться самой программой `DOMUS` с перфокарт, или должен быть считан с какого-либо носителя в массив `SP` до обращения к ней.

II. ОБРАЩЕНИЕ

`CALL DOMUS (SP, DISP, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, RM, NM)` , где

`SP` - массив под спектр,

`DISP` - массив дисперсий спектра,

`ONL, ANP, AM1, AM2, RM` - рабочие массивы (см. полное описание^{/2/}),

`TAB` - массив результатов обработки,

`NM` - максимальное число пиков на участке.

Обращение в случае, если пуассоновские дисперсии, байесовские оценки не требуются, имеет вид:

```
DIMENSION SP(4096), ONL(100), ANP(1500), TAB(601), AM1(27, 27), AM2(27)
```

```
ONL(1)=0 .
```

```
ONL(2)=0 .
```

```
TAB(1)=0 .
```

```
CALL DOMUS (SP, SP, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, AM1, 5)
```

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Подробное описание данных см. /2/.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

- 1) Заголовок.
- 2) Оценки объемов, положений и полуширин пиков и их ошибки.
- 3) Графики распределений.
- 4) По желанию пользователя входная и вспомогательная информация /1/.
- 5) Сообщения о работе программы (например, диагностика ошибок пользователя).

ЛИТЕРАТУРА

1. Злоказов В.Б. ОИЯИ, Р10-12075, Дубна, 1978.
2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, Б1-10-81-394, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ α -СПЕКТРОВ РАЗЛИЧНЫХ ТИПОВ МЕТОДОМ ДЕКОНВОЛЮЦИИ

Адаптацию выполнила: Ягафарова В.М.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Сущность метода деконволюции заключается в том, что на основе преобразования Фурье можно учесть конечное разрешение детектора и получить спектр, свободный от аппаратурных искажений. В результате спектр будет узким, как, например, в случае использования детектора более высокого разрешения.

Для этого необходим эталонный спектр, полученный путем измерения с хорошей точностью, или теоретически рассчитанный на основе данных о разрешении детектора^{/1/}.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL DECON(A,IN,F,NCH,L) , где

- A - вещественный массив, содержащий характеристики, общие для эталонного и для экспериментального спектров;
- IN - массив, содержащий целые величины из серии общих характеристик;
- F - массив, содержащий экспериментальный спектр;
- NCH - длина экспериментального спектра;
- L - количество участков, на которые разбивается экспериментальный спектр.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

В основном, вся исходная информация: эталонный и экспериментальный спектры, дополнительная информация, комментарии для печати вводятся в головной программе. Для ввода информации с перфокарт можно использовать подпрограммы: DARETA,DARSPE.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Программа распечатывает вводимые комментарии к спектрам, график эталонного спектра, печатает положение пика в эталонном спектре. Далее печатаются комментарии к обрабатываемому участку спектра, коэффициенты Фурье и обрезанные коэффициенты Фурье, графики и таблицы.

У. НАБОР ПРОГРАММ ВВОДА ИНФОРМАЦИИ С ПЕРФОКАРТ

1. Программа DARETA

Программа осуществляет ввод с перфокарт информации, общей для эталонного и экспериментального спектров с разделением ее на массив вещественных чисел и массив целых чисел, используя программу бесформатного ввода UREAD. Числа пробиваются на перфокартах через запятую, в конце массива также пробивается запятая.

Программа вводит также характеристики эталонного спектра и эталонный спектр.

CALL DARETA(A,IN) , где

- A - массив вещественных чисел, длиной 44;
IN - массив целых чисел, длиной 3.

Информация, общая для эталонного и экспериментального спектров, размещается в следующем порядке (всего 44 значения):

1. Величина, обратная удельной потере энергии на единицу расстояния (dx/DE).

2. Энергия пика 1 (E1).

3. Энергия пика 2 (E2).

4. Энергия пика 3 (E3).

5. Вес пика 1 (W1).

6. Вес пика 2 (W2).

7. Вес пика 3 (W3).

8. Таблица STUDENT /I/ (30 значений).

9. Положение пика 1 в канале (P1).

10. Положение пика 2 в канале (P2).

11. Положение пика 3 в канале (P3).

12. Коррекция энергии пика 1 из-за потери при прохождении через неактивный слой.

13. То же, что I2, только для энергии пика 2.

14. То же, что I2, только для энергии пика 3.

15. Количество атомов в эталонном спектре в единицах 10^{17} .

В массив IN вводятся следующие величины:

1. Длина обрабатываемого участка спектра (2^n), n - целое число.

2. Полуширина эталонного спектра.

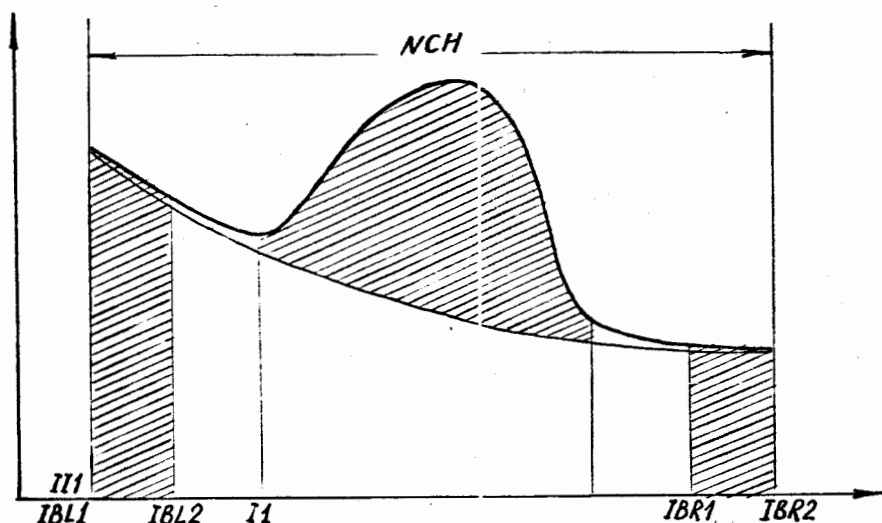
3. Если необходима гистограмма эталонного спектра, то вводится любое целое число больше 0.

Дополнительная информация к эталонному спектру вводится в следующем порядке:

1. Комментарий, состоящий из 72 символов (формат 72AI).

2. Номер начального канала данного спектра (II1).
3. Первый канал, с которого начинается обработка (I1).
4. Нижняя граница для левого фона (IBL1).
5. Верхняя граница для левого фона (IBL2).
6. Нижняя граница для правого фона (IBR1).
7. Верхняя граница для правого фона (IBR2).
8. Граница обрезания (ICUT) (если вводится величина, равная 0, то граница определяется автоматически).
9. Длина участка спектра (NCH).
10. Мониторный счет (MON).
11. Площадь образца в см^2 (AREA) (формат F8.2).

Числа с 2 по 10 вводятся по бесформатному вводу. Эталонный спектр пробивается на перфокартах (по 8 чисел на перфокарте в формате 8I5).



2. Программа DARSPE

Программа вводит с перфокарт экспериментальный спектр. Данные пробиваются по 8 чисел на перфокарте в формате 8I5.

CALL DARSPE(F,N) , где

- F - массив, куда помещается спектр;
- N - длина спектра.

3. Программа CRTIN

Программа вводит с перфокарт дополнительную информацию к обрабатываемому участку экспериментального спектра. CRTIN вызывается из программы DECON .

CALL CRTIN(F,N,NY) , где

- F - массив экспериментального спектра;
- N - длина спектра;
- NY - относительный адрес начала обрабатываемого участка спектра.

Дополнительная информация для программы CRTIN подготавливается и следует в том же порядке, как и дополнительная информация к эталонному спектру (см. описание программы DARETA).

ЛИТЕРАТУРА

Г. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, т.2, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПРОБЕГОВ α -ЧАСТИЦ В МНОГОКОМПОНЕНТНЫХ ВЕЩЕСТВАХ

Адаптацию выполнила: Ягафарова В.М.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Для определения пробегов заряженных частиц в многокомпонентных веществах использовалась формула:

$$\int_{E_0}^{E_0 - \Delta E_0} (dE/dx)^{-1} dE, \text{ где}$$

ΔE_0 - измеренные потери энергии α -частиц (кэВ).

Расчет для многокомпонентных веществ проводится методом численного интегрирования [1].

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL MAINRP(L,EO) , где

L - длина массива A (см. п. III), содержащего коэффициенты полуэмпирического полинома.

EO - начальная энергия E_0 .

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Программа использует COMMON/SOS1/A(2,6).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Программа выдает на печать таблицу, составленную из полученных величин пробегов α -частиц. Первая величина соответствует энергии $(E_0 - 1)$ кэВ, а последняя $(E_0 - 300)$ кэВ.

ЛИТЕРАТУРА

I. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, т.П, Дубна, 1981.

СРАВНЕНИЕ СПЕКТРОВ

Адаптацию выполнила: Бутцева Г.Л.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа после ввода массивов частот и их дисперсий для каждого из двух сравниваемых спектров упорядочивает списки частот в порядке возрастания, проверяет на "разрешимость" линии каждого спектра, проводит предварительную идентификацию линий и их отбор^{/1/}. По спискам окончательно идентифицированных линий составляются величины уклонений этих линий по интенсивностям (программа IDENT1).

Если для каждого спектра дополнительно задаются массивы интенсивностей и их дисперсии (программа IDENT2), то производится дополнительное сравнение спектров по интенсивностям.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL IDENT1 (F1,D1,F2,D2,L1,L2)

CALL IDENT2 (F1,D1,F11,D11,F2,D2,F12,D12,L1,L2), где

- F1,F2 - имена массивов частот I - 2 спектров;
- D1,D2 - имена массивов дисперсий;
- F11,F12 - имена массивов интенсивностей;
- D11,D12 - имена массивов дисперсий интенсивностей;
- L1 - длина соответствующих массивов I-го спектра;
- L2 - длина соответствующих массивов II-го спектра.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

С перфокарт вводится информация EPS1, EPS2, NN , которая соответствует величинам $\epsilon_q, \epsilon_p, N$ (см. общее описание^{/2/}) и определяет точность вычисления. Формат (2F8.2,I2).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Печатаются все исходные данные программы под заголовком:

THE LIST OF INPUT DATA

Печатается сообщение о полном, частичном совпадении или о полном несовпадении спектров.

Печатается список окончательно идентифицированных линий.

У. ВВОД С ПЕРФОКАРТ ИСХОДНОЙ ИНФОРМАЦИИ
(программы IDENB1, IDENB2)

Данный набор программ осуществляет ввод с перфокарт исходной информации, преобразует к нужному виду и записывает в заданные массивы.

```
CALL IDENB1(F1,D1,F2,D2,L1,L2)
CALL IDENB2(F1,D1,F11,D11,F2,D2,F12,D12,L1,L2)
```

В качестве параметров задаются имена массивов, куда будет записана соответствующая информация.

Исходная информация для программы IDENB1.

Готовится пакет перфокарт частот и дисперсий I-го спектра в следующем порядке:

- I-я перфокарта-частота I-ой линии ξ'_1 ,
- 2-я перфокарта-дисперсия I-ой линии $D\xi'_1$,
- 3-я перфокарта-частота 2-ой линии ξ'_2 ,
-
-
- (2N-1) -я перфокарта-частота N -ой линии ξ'_N ,
- 2N -я перфокарта-дисперсия N -ой линии $D\xi'_N$,
- (2N+1) -я перфокарта-нулевая перфокарта (с пробитым нулем),
- (2N+2) - любая перфокарта.

Аналогично готовятся перфокарты для 2-ого спектра. Формат всех перфокарт (F10.0) .

Исходная информация для программы IDENB2 .

Помимо частот и дисперсий дополнительная информация содержит интенсивности и дисперсии интенсивностей:

- | | | |
|-------------|---|---|
| I-ый спектр | } | I-я п/к - частота I-ой линии, |
| | | 2-я п/к - дисперсия I-ой линии, |
| | | 3-я п/к - интенсивность I-ой линии, |
| | | 4-я п/к - дисперсия интенсивности I-ой линии, |
| | | |
| | | 4N-3 - частота N -ой линии, |
| | | 4N-2 - дисперсия N -ой линии, |
| | | 4N-1 - интенсивность N -ой линии, |
| | | 4N - дисперсия интенсивности N -ой линии, |
| | | 4N+1 - нулевая п/к |
| | | 4N+2
4N+3
4(N+1) } - 3 произвольные карты |

II-ой спектр аналогичен первому. Формат всех перфокарт (F10.0) .

ЛИТЕРАТУРА

1. Заикин П.Н., Критский В.Г., Уфимцев М.В. В сб.: "Обработка и интерпретация физических экспериментов". Вып.6, изд.МГУ, 1977.
2. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, БИ-10-80-345, Дубна, 1980.

ПРОГРАММА СРАВНЕНИЯ ДВУХ СПЕКТРОВ ПО ЧАСТОТАМ И ДИСПЕРСИЯМ

Адаптацию выполнила: Воробьева Н.Н..

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа /I/ проводит идентификацию линий (частот) двух спектров и по статистическим критериям /2/ сравнивает эти спектры.

Два спектра задаются наборами частот $\{\xi_i^I\}$, $\{\xi_j^II\}$ и дисперсий $\{D_{\xi_i^I}\}$, $\{D_{\xi_j^II}\}$. Линии ξ_i^I и ξ_j^II называются идентифицирующимися, если

$$\frac{(\xi_i^I - \xi_j^II)^2}{D_{\xi_i^I} + D_{\xi_j^II}} < 1 + \varepsilon_q .$$

Считается, что спектры полностью совпадают, если обобщенная невязка $p(I, II) < 1 + \varepsilon_p$ /2/.

Спектры совпадают, за исключением n резко выделяющихся наблюдений, если

$$p^N(I, II) < 1 + \varepsilon_p , \text{ где}$$

$\varepsilon_p, \varepsilon_q$ - доверительные границы (уровни значимости).

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTAIR(F, D, NL1, NL2, EPS1, EPS2, NN, MX, RO12, RO12F, NOUT, KP, IERR), где

F - вещественный двумерный массив частот (размера $2 \times m \times n$), в первой строке задаются $m \times n$ частот первого спектра, во второй строке задаются $m \times n$ частот второго спектра;

D - вещественный массив дисперсий (размера $2 \times m \times n$), в первой строке задаются $m \times n$ дисперсий первого спектра, во второй строке задаются $m \times n$ дисперсий второго спектра;

NL1, NL2 - число линий первого и второго спектров соответственно (тип - целый);

EPS1, EPS2 - задаваемые уровни значимости (тип-вещественный);

NN - максимально возможное число резко выделяющихся наблюдений (тип - целый);

MX - задается равным максимуму из чисел NL1, NL2 (тип - целый);

RO12 - вещественная переменная для вычисляемого начального значения невязки p ;

RO12F - вещественная переменная для вычисленного конечного значения

невязки $p^N(I, II)$ после отбрасывания n резко выделяющихся наблюдений;

NOUT - параметр результата:

NOUT = $\begin{cases} 0 & \text{- спектры полностью совпадают,} \\ -1 & \text{- спектры полностью не совпадают,} \\ >0 & \text{- число отброшенных наблюдений;} \end{cases}$

KP - целая константа, задающая режим работы печати:

KP = $\begin{cases} 0 & \text{- результат не выдается на печать,} \\ 1 & \text{- результат печатается.} \end{cases}$

При любом KP результат всегда содержится в параметрах обращения.

IERR - диагностическая переменная о работе программы. Если IERR $\neq 0$, то были нарушены условия работы программы /1/.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

1. Задать значения F, D, NL1, NL2, EPS1, EPS2, NN, MX, KP.

Замечания по использованию:

1. $MX \leq 300$.

2. Используются программы: внутренняя - PTAIR1, внешняя - SF48R - из библиотеки численного анализа НИВЦ МГУ.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Пример выдачи при KP=1:

```
PROGRAM IDENT-1
CALCULATING CENTER, МГУ 1977
THE LIST OF INPUT DATA
EPS1=0.05 EPS2=0.05 NN=1
SPECTRUM NUMBER 1 CONTAINS 2 LINES
NUMBER FREQUENCY DISPERSION
1      0.01      0.010
2      1.00      0.010
SPECTRUM NUMBER 2 CONTAINS 2 LINES
NUMBER FREQUENCY DISPERSION
1      0.10      0.01
2      2.00      0.01
PRIMARY IDENTIFIED LINES
```

SPECTRUM 1 SPECTRUM 2

0.01 0.1

RO12=30.302

SPECTRA 1 AND 2 COINCIDE PARTLY EXCLUDING

2 EXTENDED OBSERVATIONS

THE LIST OF FINALY IDENTIFIED LINES

SPECTRUM 1 SPECTRUM 2

0.01 0.10

RO12F = 0.405

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я и др. ОИЯИ, БИ-10-394, стр.50, Дубна, 1981.
2. Заикин П.Н. и др. Вопросы идентификации и сравнения спектров. Труды НИВЦ. Сборник "Обработка и интерпретация физических экспериментов", вып.6, МГУ, 1977.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОЦЕНИВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ В
РАМКАХ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ С ИСПОЛЬЗОВАНИЕМ ПРИНЦИПА
МИНИМАЛЬНЫХ ПОПРАВК К НАЧАЛЬНОМУ ПРИБЛИЖЕНИЮ

Адаптацию выполнил: Шафранов Е.В.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа PTDARC является модифицированным вариантом программы PTDARC /1/.

Пусть $Y_1 = (Y_1(NB), Y_1(NB+1), \dots, Y_1(NE))$, $Y_1(T)$ - независимые случайные величины, имеющие гауссоновское распределение с математическими ожиданиями $Y(T)$, где $Y(T) = Y(T; A(1), \dots, A(K))$ значения функции $Y(T; A(1), \dots, A(K))$ аргумента T , зависящей от параметров $A(1), \dots, A(K)$, на сетке $T = NB, \dots, NE$, где NB, NE - целые числа ($NB < NE$). Предполагается, что вид функции $Y(T; A(1), \dots, A(K))$ известен. Требуется определить параметры $A(1), \dots, A(K)$, исходя из Y_1 и начальных приближений параметров $AO(1), \dots, AO(K)$.

В качестве искомым значений параметров $A(1), \dots, A(K)$ берется нормальное решение /2/, реализующее минимум функции

$$Q(A(1), \dots, A(K)) = \sum_{I=1}^K ((A(I) - AO(I)) / (|AO(I)| + 0.05)) \times \times 2$$

на множестве, заданном неравенством:

$$|PO(A(1), \dots, A(K)) - (NE - NB + 1)| \leq \text{SQRT}(8 \times (NE - NB + 1)), \quad \text{где} \quad (1)$$

$$PO(A(1), \dots, A(K)) = \sum_{T=NB}^{NE} (Y_1(T) - Y(T; A(1), \dots, A(K))) \times \times 2 / W(T) \times \times 2, \quad (2)$$

$$W(T) = \text{SQRT}(Y_1(T)), \quad T = NB, \dots, NE$$

- II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTDARC (NB, NE, K, Y, V, C, PTDAN4, IT, IERR), где

- NB - заданная начальная точка сетки аргумента T (тип - целый);
- NE - заданная конечная точка сетки аргумента T (тип - целый);
- K - заданное количество параметров (тип - целый);
- Y - заданный вещественный массив длины $(NE - NB + 1)$ и $Y = Y_1$;
- V - заданный вещественный массив длины K , содержащий начальные приближения параметров $(V = (AO(1), \dots, AO(K)))$;

C - определяемый программой вещественный вектор длины K ,
содержащий вычисленные параметры;

PTDAN4 - имя внешней подпрограммы вычисления

Y(T;A(1),...,A(K) , и DY/DA(I), I=1,...,K.

Подпрограмма PTDAN4 задается пользователем и имеет вид:

```
SUBROUTINE PTDAN4(T,U)
COMMON/A/A/(100)/DOP/M,NA,NK,NK1,NK2/DF/DF(100)
U=Y(T;A(1),...,A(K))
DF(1)=DY/DA(1)
. . . .
DF(K)=DY/DA(K)
RETURN
END
```

IT - заданная целая переменная, задающая режим выдачи на печать промежуточных результатов итераций:

IT=-1 - выдачи на печать нет,

IT= 0 - выдача результатов последней итерации,

IT= N - где N=1,2,... - выдача результатов каждой N -ой итерации;

IERR - целочисленный диагностический параметр;

IERR=0 - получены параметры, реализующие минимум функционала $Q(A(1), \dots, A(K))$ на множестве, заданном неравенством (I);

IERR=1 - выходные параметры $C=(C(1), \dots, C(K))$ реализуют безусловный минимум $PO(A(1), \dots, A(K))$ на пространстве E размерности K , для них справедливо

$$PO(C(1), \dots, C(K)) - (NE - NB + 1) > \text{SQRT}(B * (NE - NB + 1)),$$

т.е. (I) не выполняется;

IERR=2 - в качестве окончательного решения выдаются начальные приближения параметров $C=(AO(1), \dots, AO(K))$, если выполняется условие:

$$PO(AO(1), \dots, AO(K)) - (NE - NB + 1) \leq -\text{SQRT}(8 * (NE - NB + 1)).$$

Фатальные ошибки возможны лишь при работе программы минимизации квадратичного функционала (смотри описание программы FUMILA).

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к программе РТДАВ. Пользователь заносит информацию в массивы перед обращением к данной программе.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Вид печати регулируется пользователем через значения фактического параметра IT .

Замечания по использованию: В целях экономного расходования бумаги следует задавать $IT=-1$ (нет печати), либо $IT=0$ (печать последней итерации). При $IT > -1$ происходит выдача на печать текущих значений невязки ($R6$) и параметра регуляризации (AL).

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981.
2. Заикин П.Н., Кандауров С.П. В сб.: "Некоторые вопросы автоматизированной обработки и интерпретации физических экспериментов". Изд-во МГУ, вып.3, 1975.

ПРОГРАММА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ В ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОМ ПРЕДСТАВЛЕНИИ
ФУНКЦИИ С ОЦЕНКОЙ ЧИСЛА КОМПОНЕНТ

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Функция $f(x) = \sum_{i=1}^m A_i e^{-\lambda_i x}$ задается на равномерной сетке по x , $x_k = x_0 + (k-1) \cdot H$, $k = 1, \dots, N$, с некоторой погрешностью δ_k , т.е. $|\tilde{f}(x_k) - f(x_k)| \leq \delta_k$. Число компонент задается пользователем или оценивается методом, изложенным в^{1/} при $\|\Delta B^M\| = m \cdot \max |\delta_k|$. Согласно методу Прони^{2/} строится матрица $B_{ij} = \tilde{f}(x_{i+j-1})$, $i, j = 1, \dots, m$ и вектор $b_i = \tilde{f}(x_{i+m})$. Тогда параметры $\{\tilde{\lambda}_i\}$ определяются как $\tilde{\lambda}_i = -\frac{1}{H} \ln \xi_i$, где ξ_i - корни уравнения $\sum_{k=0}^{\tilde{m}} c_k \xi^k = 0$, $i=1, \dots, m$, $c_{\tilde{m}} = 1$, $a(c_0, \dots, c_{m-1})$ - решение системы: $Bc = b$. После этого параметры $\{\tilde{A}_i\}$ определяются путем решения системы уравнений:

$$\sum_{i=1}^{\tilde{m}} \tilde{A}_i \exp(-\tilde{\lambda}_i x_k) = \tilde{f}(x_k), \quad k=1, 2, \dots, \tilde{m}.$$

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTDER(X, Y, DY, N, M, B, R, A, RR, IERR), где

- X - заданный одномерный массив длиной N значений аргумента x_k , а в конце работы программы в первые m элементов массива будут засланы найденные значения $\{\tilde{\lambda}_i\}$ (тип - вещественный);
- Y - заданный одномерный массив длиной N значений функции $\tilde{f}(x)$ (тип - вещественный);
- DY - заданный одномерный массив длиной N погрешностей измерения функции $\tilde{f}(x)$ (тип-вещественный);
- N - заданное число точек сетки $\{x_k\}$ (тип - целый);
- M - заданная оценка числа компонент m, а в конце работы программы в нее будет заслана оценка \tilde{m} (тип - целый);
- B - рабочий массив (mхm), в конце работы программы в его первый элемент будет заслана величина невязки $\Delta = \sum_{k=1}^{\tilde{m}} \{ \tilde{f}_k - f^T(x_k) \}^2$ (тип - вещественный);
- R - рабочий массив (Nхm), в конце работы программы в его первый элемент засылается норма матрицы ошибок (тип - вещественный);

A - массив длиной m , в который засылаются найденные интенсивности \tilde{A}_1 (тип - вещественный);
RR - рабочий массив длиной RR (тип - комплексный);
IERR - целая переменная, служащая для диагностики и выбора режима работы программы. При обращении к программе с $IERR < 0$ число компонент m должно быть задано пользователем. При $IERR > 0$ \tilde{m} оценивается подпрограммой.

После работы программы имеется следующая диагностика: при $IERR=0$ программа проработала нормально; при $IERR=-1$ - пользователь ошибочно задал $m < 0$ или $m > N/2$, в этом случае программа полагает $m = \lfloor N/2 \rfloor$. При $IERR > 0$ диагностика совпадает с диагностикой программы АЕН2R (вычисление собственных значений матрицы).

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к программе RTDER. Для чисел m, N должно иметь место соотношение $m \leq N/2$. В противном случае в программе принудительно берется $m = N/2$. Если пользователь задает массив DY равным нулю, то величина $\| \Delta V \|$ берется равной величине минимального положительного числа, представляемого на данной машине. Если в спектре по λ присутствует короткоживущая компонента $\lambda_i \geq 1$, это может привести к появлению $\tilde{\xi}_i \leq 0$. Такое λ_i полагается равным 1979 условно, это диагностируется через IERR.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Нет.

ЛИТЕРАТУРА

1. Ланцош Л. Практические методы прикладного анализа, М., ИЛ, 1962.
2. Заикин П.Н., Моисеев В.Н. Устойчивый метод интерпретации данных изотопного анализа. ЖВМ и МФ, 1978, № 2, с. 487.

ПРОГРАММА ОЦЕНКИ ЧИСЛА КОМПОНЕНТ В ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОМ
ПРЕДСТАВЛЕНИИ ФУНКЦИИ

Адаптацию выполнили:

Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Пусть функция $f(x) = \sum_{i=1}^m A_i e^{-\lambda_i x}$ задана на равномерной сетке /1,2/ по x : $x_k = x_0 + kh$ с некоторой погрешностью δf_k , т.е.

$$\tilde{f}(x_k) = f(x_k) + \delta f_k, \quad k=1,2,\dots,N1.$$

В качестве оценки числа компонент функции $\tilde{f}(x)$ берется число \tilde{m} , равное числу собственных значений матрицы $A_{ij} = f(x_{i+j-1})$, $i, j = 1, \dots, N$, превышающих по модулю число $\|\Delta A\| = \Delta$. Здесь $\Delta A = \tilde{A} - A$, а N - априори известная оценка m сверху, т.е. $N > m$.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTDNR(Y, DY, A, N, M, KP, IERR), где

- Y - заданный одномерный массив длиной N значений функции $\tilde{f}(x)$ (тип-вещественный);
- DY - заданный одномерный массив длиной N погрешностей измерения функции $\tilde{f}(x)$ (тип - вещественный);
- A - рабочий массив длиной $(M \times M)$ (тип - вещественный);
- N - заданное число точек на сетке $\{x_k\}$ (тип - целый);
- M - заданная оценка сверху числа компонент, и в конце работы программы в нее засылается оценка \tilde{m} (тип - целый);
- KP - целая переменная, задаваемая пользователем при выборе способа оценки \tilde{m} :

$$KP = \begin{cases} 0 & \text{при } \|\Delta A\| = N\delta f \\ 1 & \text{при } \|\Delta A\| = \|\Delta A\|_1 \\ 2 & \text{при } \|\Delta A\| = \|\Delta A\|_E \end{cases}$$

IERR - целая переменная, служащая для диагностики работы программы:

IERR=0 - программа проработала нормально,

IERR=-1 - пользователь ошибочно задает $m \leq 0$ или $m > N/2$,
 в этом случае полагается $m = \lfloor N/2 \rfloor$;

$\text{IERR} > 0$ и верных начальных данных диагностика совпадает с диагностикой программы AEN2R (вычисление собственных значений матрицы) из библиотеки общего назначения.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к программе RTDNR. Для чисел n, m должно иметь место $m \leq n/2$. Если пользователь задает массив DU равным нулю, то величина Δ полагается равной величине минимального положительного числа, допустимого в данной машине.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Нет.

ЛИТЕРАТУРА

1. Заикин П.Н., Моисеев В.Н. Устойчивый метод интерпретации данных изотопного анализа. ЖВМ и МФ, 1978, №2, с.487.
2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981.

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ОЦЕНИВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ НЕЛИНЕЙНОЙ МОДЕЛИ В РАМКАХ МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Адаптацию выполнил: Шафранов Е.Е.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа PTDWR является модифицированным вариантом программы PTDWRC^{/1/}.

Пусть $Y_1 = (Y_1(1), \dots, Y_1(NE))$, $Y_1(t)$ - независимые нормально распределенные случайные величины с математическими ожиданиями $Y(t)$ и дисперсиями $w_1(t) \times \times 2$, где $Y(t) = Y(t; A(1), \dots, A(K))$ значения функции $Y(t; A(1), \dots, A(K))$ аргумента t , зависящей от параметров $A(1), \dots, A(K)$, на сетке $t = 1, \dots, NE$, где NE - целое число, большее 1. Предполагается, что вид функции $Y(t; A(1), \dots, A(K))$ известен. Требуется определить параметры $A(1), \dots, A(K)$, исходя из Y_1 , начальных приближений параметров $AO(1), \dots, AO(K)$ и априорно известных величин $w_1(t)$, $t = 1, \dots, NE$.

В качестве искомого значения параметров берется нормальное решение^{/2,3/}, реализующее минимум функции

$$Q(A(1), \dots, A(K)) = \sum_{I=1}^K (A(I) - AO(I)) / (|AO(I)| + 0.05) \times \times 2$$

на множестве, заданном неравенством:

$$|PO(A(1), \dots, A(K)) - NE| \leq \text{SQRT}(8 \times NE), \quad (I)$$

$$\text{где } PO(A(1), \dots, A(K)) = \sum_{T=1}^{NE} (Y_1(T) - Y(T; A(1), \dots, A(K))) \times \times 2 / w_1(T) \times \times 2, \quad (2)$$

при $T = 1, 2, \dots, NE$

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTDWR(NE, K, Y, W, B, C, PTDAN4, IT, IERR), где

- NE - заданная конечная точка сетки аргумента t (тип - целый);
- K - заданное количество параметров (тип - целый);
- Y - заданный вещественный массив длины NE ($Y = Y_1$);
- W - заданный вещественный массив длины NE
 $(W(J) = w_1(J) \times \times 2)$, $J = 1, 2, \dots, NE$;
- B - заданный вещественный массив длины K , содержащий начальные приближения параметров ($B = (AO(1), \dots, AO(K))$);
- C - определяемый программой вещественный массив длины K , содержащий вычисленные параметры;

PTDAN4 - имя внешней подпрограммы вычисления $Y(T; A(1), \dots, A(K))$
и $DY/DA(I)$, $I=1, \dots, K$.

Подпрограмма PTDAN4 задается пользователем и имеет вид:

```
SUBROUTINE PTDAN4 (T,U)
COMMON/A/A(100)/DOP/M,NZ,NK,NK1,NK2/DF/DF(100)
U=Y(T;A(1),...,A(K))
DF(1)=DY/DA(1)
. . .
DF(K)=DY/DA(K)
RETURN
END
```

IT - заданная целая переменная, задающая режим выдачи на печать промежуточных результатов итераций, осуществляемых в подпрограмме FUMILA :

IT= -1 - выдачи на печать нет;

IT= 0 - выдача результатов последней итерации;

IT= N - где $N=1, 2, \dots$ - выдача результатов каждой N-ой итерации;

IERR - целочисленный диагностический параметр:

IERR=0 - получены параметры, реализующие минимум функционала $Q(A(1), \dots, A(K))$ на множестве, заданном неравенством (I);

IERR=1 - выходные параметры $C=(C(1), \dots, C(K))$ реализуют безусловный минимум $PO(A(1), \dots, A(K))$ на пространстве E размерности k, для них справедливо $PO(C(1), \dots, C(I)) - NE > \text{SQRT}(8 \times NE)$, т.е. (I) не выполняется;

IERR=2 - в качестве окончательного решения выдаются начальные приближения параметров $C=(AO(1), \dots, AO(K))$, если выполняется условие:

$PO(AO(1), \dots, AO(K)) - NE \leq -\text{SQRT}(8 \times NE)$;

IERR=65 - фатальная ошибка, т.е. выполнено условие:

\min по $T=1, \dots, NE$ от $W1(T) \times 2 \leq 2.0E-12$.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к PTDWR. Информация в массивах задается пользователем.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Вид печати определяется значением фактического параметра IT при обращении к `PTDWR`.

Замечания по использованию: В целях экономного расходования бумаги следует задавать $IT=-1$ (нет печати), либо $IT=0$ (печать последней итерации). При $IT>-1$ происходит выдача на печать текущих значений невязки (`R6`) и параметра регуляризации (`AL`).

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, Дубна, 1981.
2. Тихонов А.Н. ЖВМ и МФ, 1966, 6, №4, с.631-634.
3. Заикин П.Н., Кандауров С.П. В сб.: "Некоторые вопросы обработки и интерпретации физических экспериментов". Вып.3, Изд-во МГУ, 1975.

ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ РЕШЕНИЯ ОДНОМЕРНОГО ЛИНЕЙНОГО
ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ФРЕДГОЛЬМА ПЕРВОГО РОДА

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

В результате работы программы \sqrt{I} вычисляется решение исходного уравнения методом регуляризации $\sqrt{2}$, среднеквадратичная ошибка регуляризованного решения и матрица сглаживания:

$$A_i = (A \times A + \alpha C)^{-1} A \times A$$

II. ОБРАЩЕНИЕ

- CALL PTERC(M,N,L,ALFA,A1,A,AI,UI,U,DU,P,X,S,ZOI,Z,ZO), где
- M,N - размерность исходной матрицы ($M \geq N$).
 - ALFA - коэффициент невязки для случая $L=0$;
 - L - режим работы программы:
 - L=0 - решение вычисляется при ALFA заданном;
 - L=1 - решение вычисляется из критерия невязки;
 - L=2 - решение вычисляется из критерия квазинаилучшего;
 - L=3 - решение вычисляется из критерия отношения невязок;
 - A1 - вещественный двумерный массив размерности ($M \times N$), в котором задается исходная матрица ядра;
 - A - рабочий массив ($M \times N$);
 - AI - вещественный двумерный массив размерности ($M \times N$), в элементы которого помещается матрица сглаживания;
 - UI - вещественный массив длины M, в котором задается исходная правая часть;
 - U - рабочий массив размерности M;
 - DU - вещественный массив длины M, в котором задается погрешность правой части;
 - P - вещественный массив длины M, в котором задается весовая функция правой части;
 - X - вещественный массив длины M, в котором задается сетка правой части;
 - S - вещественный массив длины N, в котором задается сетка решения;
 - ZOI - вещественный массив длины N, в котором задается начальное приближение решения;

- Z - вещественный массив длины N , в котором помещается вычисленное решение;
- ZO - вещественный массив длины N , в котором помещается вычисленная среднеквадратичная ошибка решения.

Замечание

Исходная информация в массивах DU, P, X, S не сохраняется.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к программе RTIERS.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

На печать выдается значение IERR , которое указывает на тип ошибки:

- IERR=73 - матрица регуляризации не положительная,
IERR=74 - квазиинверсия не вычисляется,
IERR=75 - матрица не положительно определена,
IERR=76 - нулевая погрешность,
IERR=77 - нулевая правая часть,
IERR=78 - нулевая весовая функция,
IERR=79 - нулевое начальное приближение,
IERR=6 - заданный уровень невязки недостижим,
IERR=0 - правильная работа программы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, Дубна, 1981.
2. Тихонов А.Н. ДАН СССР, 1963, № 3.

ПРОГРАММА РЕШЕНИЯ ЛИНЕЙНОГО ИНТЕГРАЛЬНОГО УРАВНЕНИЯ ФРЕДГОЛЬМА
ПЕРВОГО РОДА МЕТОДОМ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ А.Н.ТИХОНОВА

Адаптацию выполнила: Воробьева Н.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа^{/1/} решает уравнение

$$AZ = U(x) \quad , \quad \text{где} \quad (I) \\ AZ = \int_a^b K(x,s)Z(s)ds, \quad A(I,J)=K(x(I), s(J)), \quad (I=1,M), (J=1,N),$$

$Z(s)$ - искомая функция из пространства F ,

$U(x)$ - заданная функция из пространства U .

Ядро $K(x,s)$ - непрерывная функция переменных x , с непрерывной частной производной $\partial K/\partial x$.

Решение вычисляется методом регуляризации А.Н.Тихонова^{/2/} с выбором параметра регуляризации α из критериев невязки^{/3/} , квазиинлучшего^{/4/} и отношения невязок^{/4/} соответственно:

$$\|DU\|_{L_{2,p}}^2 = \int_c^d \left[\int_a^b K(x,s)Z^\alpha(s)ds - U(x) \right]^2 / p^2(x) dx, \quad x \in [c,d];$$

$$\min_{\alpha > 0} \left\| \alpha dz^\alpha / d\alpha \right\|_{W_2'} ;$$

$$\max_{\alpha > 0} \left\| A\alpha dz^\alpha / d\alpha - (AZ^\alpha - U) \right\|_{L_{2,p}} / \|AZ^\alpha - U\|_{L_{2,p}} .$$

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTIIR(M,N,A,U,DU,P,X,S,C,D1,Q,Z,ZO,L,IERR) , где

- A - вещественная матрица ядра (размерность $M \times N$) ;
- U - вещественный массив (длина M) правой части уравнения (I);
- DU - вещественный массив (длина M) погрешностей правой части уравнения (I) в L_2 ;
- P - вещественный массив (длина M) весовой функции правой части уравнения (I);
- X - вещественный массив (длина M) сетки правой части уравнения (I);
- S - вещественный массив (длина N) сетки решения уравнения (I);
- C } - рабочие массивы (размерность $N \times 2$) ;
- D1 } - рабочие массивы (размерность $N \times 2$) ;
- Q } - рабочие массивы (размерность $N \times 2$) ;
- Z - вещественный массив (длина N) вычисленного решения уравнения (I);

- zo - вещественный массив (длина N) начального приближения решения уравнения (I);
- L - целая переменная, задающая режим работы программы:

$$\text{первоначально } L = \begin{cases} 0 \\ 1 \\ 2 \\ 3 \end{cases} \quad \text{повторно } L = \begin{cases} 4 \\ 5 \\ 6 \\ 7 \end{cases}$$

В последнем случае сокращается время счета.

При разных значениях L, решение вычисляется исходя из разных критериев:

$$L = \begin{cases} 0(4) - \text{из критерия } \alpha, \text{ заданного в } D1(N, 2), \\ 1(5) - \text{из критерия невязки}, \\ 2(6) - \text{из критерия квазинаилучшего}, \\ 3(7) - \text{из критерия отношения невязок}. \end{cases}$$

IERR - диагностическая переменная:

$$IERR = \begin{cases} 0 - \text{нормальная работа программы}, \\ \neq 0 - \text{были нарушения условий работы программы} / I / . \end{cases}$$

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

1. Задать значения M, N, A, U, DU, P, X, S, ZO, L.
2. Для L=0(4) задать значение α в элементе массива D1(N, 2).

Замечания по использованию:

1. $m \geq n$.
2. Исходные массивы A, U, DU, P, X, S, ZO используются в дальнейшем как рабочие.
3. Аппроксимация сглаживающего функционала проводится в подпрограмме согласно работе /5/.
4. Вычисление стабилизирующего функционала в w_2^1 и начального приближения zo проводится согласно работе /4/.
5. Решение системы линейных алгебраических уравнений проводится методом, изложенным в работе /3/.
6. Используются подпрограммы:
PTLBR1, PTLBR2, PTLBR4, PTLBR5, PTLBR6, PTLBR7, PTLBR8, PTLBR9, PTLB11.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Только в аварийном случае выдается диагностика об ошибке и значение IERR.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, Дубна, 1981, с.76.
2. Тихонов А.Н. ДАН СССР, 1963, т.153, № 1, с.49.
3. Морозов В.А. ЖВМ и МФ, 1968, т.8, № 2.
4. Леонов А.С. ЖВМ и МФ, 1978, т.18, № 6.
5. Меченов А.С. В сб.: "Обработка и интерпретация физических экспериментов", М., Изд-во МГУ, 1977, вып.6.
6. Воеводин В.В. ЖВМ и МФ, 1969, т.9, №3, с.637.

ПРОГРАММА РЕШЕНИЯ СИСТЕМЫ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ
МЕТОДОМ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ А.Н.ТИХОНОВА

Адаптацию выполнила: Воробьева Н.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа /1/ решает систему

$$AZ = B \quad (I)$$

методом, изложенным в /2,3/ с выбором параметра регуляризации α из критериев невязки /4/:

$$\|DB\|_{E_{M,P}}^2 = \sum_{I=1}^M \left[\sum_{J=1}^N A(I,J)z^\alpha(J) - B(I) \right]^2 P^2(I),$$

из критерия квази наилучшего /5/:

$$\min_{\alpha > 0} \|\alpha dz^\alpha / d\alpha\|_{E_N},$$

из критерия отношения невязок /5/:

$$\max_{\alpha > 0} \|\alpha dz^\alpha / d\alpha - (AZ^\alpha - B)\|_{E_{M,P}} / \|AZ^\alpha - B\|_{E_{M,P}}, \quad \text{где}$$

$A(I,J)$ - матрица левой части уравнения (I), $(I=1,M), (J=1,N)$ для $M \geq N$;

$B(I)$ - ненулевая правая часть уравнения (I);

$DB(I)$ - погрешность правой части (I) в E_M ;

$P(I)$ - весовая функция правой части (I);

$ZO(J)$ - начальное приближение решения (I) для вычисления стабилизирующего функционала E_{11} .

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTLER(M,N,A,B,C,D,D1,DB,P;Z,ZO,L,IERR) , где

A - вещественная матрица (размера $m \times n$) левой части уравнения (I);

B - вещественный массив правой части (I) (размера m);

C,D,D1 - вещественные рабочие массивы (размера $n \times 2$);

D1(N,2) - используется для засылки α ;

DB - вещественный массив (размера m) погрешностей правой части (I);

P - вещественный массив (размера m) весовой функции правой части уравнения (I);

- z - вещественный массив (размера N) решения уравнения (I);
 z_0 - вещественный массив (размера N) начальных приближений решения уравнения (I);
 L - целая переменная, задающая режим работы программы - первоначальный: ($L = 0, 1, 2, 3$), повторный: ($L = 4, 5, 6, 7$) (в последнем случае сокращается время счета).

При разных значениях L , решение вычисляется исходя из разных критериев:

$$L = \begin{cases} 0(4) - \text{из критерия } \alpha, \text{ заданного в } D1(N, 2), \\ 1(5) - \text{из критерия невязки}, \\ 2(6) - \text{из критерия квазинаилучшего}, \\ 3(7) - \text{из критерия отношения невязок}. \end{cases}$$

$IERR$ - диагностическая переменная:

$$IERR = \begin{cases} 0 - \text{нормальная работа программы}, \\ \neq 0 - \text{были нарушения условий работы программы} \\ \text{(подробнее см. /1/)} . \end{cases}$$

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Задать значения $M, N, A, B, DE, P, Z_0, L, \alpha$.

Замечания по использованию:

1. $M \geq N$.
2. Исходные массивы A, B, DE, P, Z_0 используются затем в программе как рабочие.
3. С особенностями работы критериев выбора параметра регуляризации α и всей программы в целом см. /2, 5/.
4. Используются внутренние подпрограммы
 $PTLBR1, PTLBR2, PTLBR4, PTLBR5, PTLBR6, PTLBR7, PTLBR8, PTLBR9, PTLB11$.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Только в аварийном случае выдается диагностика об ошибке и значение $IERR$.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981, с.70.
2. Воеводин В.В. ЖВМ и МФ, 1969, т.9, №3, с.637.
3. Тихонов А.Н. ЖВМ и МФ, 1965, т.5, №4, с.718.
4. Морозов В.А. ЖВМ и МФ, 1968, т.8, №2.
5. Леонов А.С. ЖВМ и МФ, 1978, т.18, №6.

ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ НОРМАЛЬНОГО РЕШЕНИЯ (ПСЕВДОРЕШЕНИЯ)
СОВМЕСТНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ДЕЙСТВИТЕЛЬНОЙ
ПРЯМОУГОЛЬНОЙ (ВОЗМОЖНО ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННОЙ) УПОРЯДОЧЕННОЙ
МАТРИЦЕЙ

Адаптацию выполнили: Воробьева Н.Н., Петрянкин В.Ф.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа /1/ вычисляет псевдорешение уравнения $Ax = y$ (I) с помощью прямого численного метода рекуррентного типа /2/:

$$x_{t+1} = x_t + \gamma_t a_{t+1}^T (a_{t+1} \gamma_t a_{t+1}^T)^+ (y_{t+1} - a_{t+1} x_t),$$

$$\gamma_{t+1} = \gamma_t - \gamma_t a_{t+1}^T (a_{t+1} \gamma_t a_{t+1}^T)^+ a_{t+1} \gamma_t,$$

где $t = 1, \dots, m$ - номера строк матрицы $A (M \times N)$,

a_t - строка t матрицы A ,

$$y_t = a_t x_t$$

$$x_0 = 0$$

$$\gamma_0 = E_{(N \times N)},$$

A_t - матрица, образованная первыми t строками матрицы A ,

$$y^t = A_t x_t,$$

$$x_t = A_t^+ y^t,$$

$$\gamma_t = E_t - A_t^+ A_t$$

$$\text{скаляр } (a_{t+1} \gamma_t a_{t+1}^T)^+ = \begin{cases} (A^+ - \text{псевдообратная матрица}) \\ (a_{t+1} \gamma_t a_{t+1}^T)^{-1}, & a_{t+1} \gamma_t a_{t+1}^T > 0 \\ 0, & a_{t+1} \gamma_t a_{t+1}^T = 0 \end{cases}$$

a_t^T - строка t матрицы A , транспонированная.

В процессе вычислений матрица A упорядочивается (т.е. строки матрицы располагаются в порядке возрастания линейной зависимости между ними).

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTLNR(A,G,U,V,C,V1,F,EN,N,M), где

A - вещественный двумерный массив ($M \times N$) исходной матрицы;

G - вещественный двумерный рабочий массив ($N \times N$);

U, V, C - вещественные рабочие массивы (длины N);

- V1 - вещественный массив (длины n), содержащий вычисленное решение системы (I);
- F - вещественный массив (длины m), содержащий правую часть уравнения (I);
- FN - вещественный двумерный массив (m x 2), показывающий, при участии каких строк было вычислено нормальное решение при данной точности вычислений:
- FN(m,1) - номера строк матрицы A после ее упорядочивания,
 FN(m,2) - массив-указатель:
- $$FN(i,2) = \begin{cases} 1. - \text{если строка, указанная в FN(i,1)} \\ \text{участвовала в вычислении решения,} \\ 0. - \text{в противном случае;} \end{cases}$$
- N - длина строки матрицы A ;
- M - длина столбца матрицы A .

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Задать значения m, n, массивы A, F.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Вычисленное решение содержится в массиве v1 , но на печать не выдается.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, стр.80.
2. Жуковский Е.Л., Липцер Р.Ш. "О рекуррентном способе вычисления нормальных решений линейных алгебраических уравнений. ЖВМ и МФ, 1972, т.12, № 4, стр.843-857.

ПРОГРАММА УПОРЯДОЧИВАНИЯ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ МАТРИЦЫ ПО СТРОКАМ
В ПОРЯДКЕ ВОЗРАСТАНИЯ ИХ ЛИНЕЙНОЙ ЗАВИСИМОСТИ ОТ ПРЕДЫДУЩИХ
СТРОК

Адаптацию провели: Белов А.Г., Вробьева Н.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Пусть задана матрица $A (M \times N)$.

Обозначим: a_i - i -строку матрицы A ,

A_t - первые t строк матрицы A ,

$\gamma_t = E_t - A_t^+ A_t$, где $E(t \times t)$ - единичная матрица, а

A_t^+ - псевдообратная матрица от A_t .

Пусть $\tau > t$ и $b(\tau, t) = a_\tau - \sum_{s=t}^{\tau-1} b_s a_s$, где числа b_1, \dots, b_t - (коэффициенты линейной зависимости строки a_τ от t предыдущих строк) подобраны так, чтобы невязка $\|b(\tau, t)\|^2$ была минимальной.

Программа ^{I/} упорядочивает матрицу A в порядке убывания евклидовой нормы невязки $\|b(\tau, t)\|^2 / 2$.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTLRR(A,G,D,U,V,C,M,N), где

- A - вещественный двумерный массив ($M \times N$) исходной матрицы (в него же засылается упорядоченная матрица);
- G - вещественный рабочий двумерный массив ($N \times N$);
- D - вещественный двумерный массив ($M \times 6$):
 - D(M,1) - номера строк исходной матрицы в порядке возрастания их линейной зависимости;
 - D(M,2) - квадраты евклидовой нормы строк неупорядоченной матрицы A ,
 - D(M,3) - невязки. D($\tau, 3$) - невязка между строкой с номером τ и t предыдущими,
 - D(M,4) - нормированные невязки. D($\tau, 4$) - нормированная невязка между строкой с номером τ и t предыдущими,
 - D(M,5) - квадрат евклидовой нормы копроекционной матрицы γ_t ,
 - D(M,6) - массив-указатель:
 - D(i,6) = $\begin{cases} 1. - \text{если строка } i \text{ матрицы } A \text{ может быть упорядочена при данной точности вычислений,} \\ 0. - \text{в противном случае;} \end{cases}$

U, V, C - вещественные рабочие массивы длиной N ;
 M - длина столбца матрицы A ;
 N - длина строки матрицы A .

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Задать значения M, N , массив A .

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Упорядоченная матрица содержится в массиве A , информация о ней - в массиве D . На печать не выдается.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, Б1-10-81-394, Дубна, 1981, стр.83.
2. Жуковский Е.Л. и др. "О рекуррентном способе вычисления нормальных решений линейных алгебраических уравнений". ЖВМ и МФ, 1972, т.12, № 4, стр. 843-857.

ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ ПСЕВДООБРАТНОЙ МАТРИЦЫ A^+ ПО МУРУ-ПЕНРОЗУ ДЛЯ ПРЯМОУГОЛЬНОЙ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННОЙ МАТРИЦЫ A .

Адаптацию выполнили: Воробьева Е.Н., Петрянкин В.Ф.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Для матрицы A (размера $M \times N$, $M \gg N$), программа ^{/1/} вычисляет псевдообратную матрицу A^+ конечным, рекуррентным методом ^{/2/}, не использующим трансформацию Гаусса, что важно при решении плохо обусловленных систем. Вычисляется ортогональная матрица P , затем решается матричное уравнение $Ax = P$ с помощью рекуррентного метода вычисления нормальных решений.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTLZR(A,G,D1,D,U,V,C,F,V1, FN,N,M) , где

- A - вещественный двумерный массив ($M \times N$) исходной матрицы;
- G - вещественный двумерный рабочий массив ($M \times N$);
- D1 - вещественный двумерный массив ($N \times M$) вычисленной псевдообратной матрицы;
- D - вещественный двумерный рабочий массив ($M \times 6$);
- U,V,C,F,V1 - вещественные рабочие массивы (размерности M);
- FN - вещественный двумерный рабочий массив ($M \times 2$);
- N - длина строки матрицы A ;
- M - длина столбца матрицы A .

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Задать значения m , n и массив A . Замечания по использованию: используются программы PTLNR, PTLRR.

PTLNR - программа вычисления нормальных решений линейной системы уравнений,

PTLRR - программа упорядочивания матрицы.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Вычисленная псевдообратная матрица находится в массиве D1, на печать не выдается.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, Дубна, 1981, с.86.
2. Жуковский Е.Л., Липцер Р.Ш. ЖВМ и МФ, 1975, т.15, № 2, с.489-492.

$$N2 = \begin{cases} \geq 0 - \text{вычисляются } A1, A2, A3, \\ < 0 - \text{вычисляются } A1, A2 ; \end{cases}$$

IERR - диагностическая переменная:

$$IERR = \begin{cases} 0 - \text{ошибок нет} \\ \neq 0 - \text{нарушения условий работы программы /I/.} \end{cases}$$

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

I. Задать значения $N, X, EPS, N2$.

Обычно $EPS = 0.05, 0.1, 0.25$, причем большее значение употребляется при больших отступлениях от нормального закона.

Замечания по использованию:

1. Используется программа: PTPRR1 - внутренняя.
2. Основной объем вычислений требуется для получения $A3$, поэтому при обработке выборок большого объема рекомендуется задать $N2 < 0$.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Вся информация содержится в параметрах обращения к программе.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981, с.88.
2. Huber P.J. Annals of mathematical statistics, v.43, No.4, 1973, p.1041.

ПРОГРАММА БРАКОВКИ "ВЫБИТЫХ" ТОЧЕК В МАССИВЕ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ И ВЫЧИСЛЕНИЯ МАТЕМАТИЧЕСКОГО ОЖИДАНИЯ И ДИСПЕРСИИ

Адаптацию выполнили: Воробьева Н.Н., Уфимцев М.В.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

В эксперименте измерены значения величины y в точках $j=1, N$. Проведено m серий. Имеем двумерный массив y_{ij} , где

i - номер серии ($i=1, \dots, m$)

j - номер точки ($j=1, \dots, N$)

Для каждого j :

1. Вычисляются \bar{y}_j - среднее значение и s_j^2 - дисперсия.

2. Находится значение i^* , для которого

$$y_{i^*,j} = \frac{\max |y_{ij} - \bar{y}_j|}{s_j^2}$$

3. Проверяется условие, по которому точку считают "выбитой" /I /:

$$y_{i^*,j} \geq z, \quad \text{где} \quad z = \sqrt{\frac{(m-1)t^2}{t^2+m-2}}$$

$t = t_{m-2}(\varepsilon)$ - ε - квантиль распределения Стьюдента с $(m-2)$ степенями свободы.

4. После отбраковки "выбитых" точек, для каждого j вычисляются математическое ожидание и дисперсия.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTPOR(M,N,EPS,MQ,MU,Y,E,D,DZ,IA,M1,IERR), где

M - число серий измерений (тип - целый);

N - число точек измерений (тип - целый);

EPS - значение уровня значимости ε (тип - вещественный);

MQ - число повторений процесса браковки по каждому столбцу j (тип - целый);

MU - рабочий массив ($M \times N$);

Y - двумерный массив ($M \times N$) экспериментальных данных;

E - массив (длиной N) вычисленных математических ожиданий;

D - массив (длиной N) вычисленных дисперсий;

DZ - рабочий массив (длиной N).

- IA - целая переменная, содержащая ожидаемое число "выбитых" точек, а после работы программы - выявленное число "выбитых" точек;
- M1 - вещественный двумерный массив (1×2), содержащий номера строк (1-ый столбец M1) и номера столбцов (2-ой столбец M1) матрицы Y, отвечающих "выбитым" точкам;
- IERR - диагностический параметр результата работы программы:
- $$IERR = \begin{cases} 0 & \text{- нормальная работа программы,} \\ \neq 0 & \text{- были нарушения условий работы программы/I/.} \end{cases}$$

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

I. Задать значения M, N, EPS, MQ, Y, IA.

Обычно полагают $EPS=0.1, 0.01, 0.001$; $MQ \leq M$, ($MQ=1, 2$).

Замечание по использованию:

Вызываются программы SF21R, PTROR1.

PTROR1 - внутренняя,

SF21R - вычисление гамма-функции вещественного аргумента (библиотека численного анализа НИВЦ МГУ).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Вычисленные значения находятся в массивах, указанных в обращении к программе. На печать не выводятся.

ЛИТЕРАТУРА

I. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-394, Дубна, 1981, с.90.

ПРОГРАММА ОПРЕДЕЛЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ МОДЕЛИ ФОНА ЭКСПОНЕНЦИАЛЬНОГО
ВИДА И ВЫЧИТАНИЕ ФОНА ИЗ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОГО СПЕКТРА

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

После определения параметров модели фона^{/1/} экспоненциального вида программа^{/2/} вычитает фон из экспериментального спектра и получает результирующий спектр.

II. ОБРАЩЕНИЕ:

CALL RTPFRC (A, C, F, NA, EPS, ALF, BET) , где

- A - имя массива, содержащего одномерный исходный спектр;
- C - имя массива результирующего спектра, т.е. спектра без фона;
- B - имя массива, содержащего полученный набор значений точек фона;
- NA - размерность массивов A, C;
- EPS - заданная вещественная переменная, характеризующая априорную точность задания данных (рекомендуется $EPS \geq 0.1$);
- ALF, BET - параметры экспоненты модельного фона $\exp(ALF \times j + BET)$.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Перед обращением к программе RTPFRC можно обратиться к программе RPTPFR , которая заданный экспериментальный спектр Y преобразует по формуле:

$$IY(I) = Y(I) + \exp(ALF \times I + BET).$$

Обращение к программе:

CALL RPTPFR(D, A, NA, ALF, BET) , где

- D - имя массива заданного экспериментального спектра;
- A - имя массива исходного спектра для программы RTPFRC ;
- NA - размерность массива A ;
- ALF, BET - параметры экспоненты модельного фона.

Замечание

Рабочие массивы для локальных минимумов имеют фиксированную длину 200. В случае спектров с большим числом локальных минимумов длина этих массивов может оказаться недостаточной. Такие спектры следует обрабатывать по частям.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Печатается значение величины $IERR$, служащей для диагностических сообщений:

- $IERR=1$ - исчерпан рабочий массив локальных минимумов, и последняя точка не вошла в их число;
- $IERR=3$ - малые и отрицательные значения точек спектра положены равными EPS ,
- $IERR=78$ - размерность рабочего массива локальных минимумов недостаточна; выполнение программы прекращено; спектр следует обрабатывать по частям.

Затем печатаются значения ALF, VET .

ЛИТЕРАТУРА

1. Гутер Р.С., Резниковский Б.В. Элементы численного анализа и математической обработки результатов опыта. "Наука", М., 1968.
2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, В1-10-81-394, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА СТАТИСТИЧЕСКОГО СГЛАЖИВАНИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЙ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ ПО ПРАВИЛУ „3 σ ”

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Исходный спектр сглаживается по методике, подробно описанной в ^{1/1/}. При обращении к программе ^{2/2/}, помимо исходного спектра, задается величина PSB [0.6, 1.4], характеризующая жесткость ограничений на точность экспериментальной информации. Чем выше точность, тем меньше должно задаваться значение PSB.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL RTPMRC(A,B,N,PSB,K,P), где

- A - имя массива, содержащего исходный спектр;
- B - имя массива, содержащего сглаженный спектр;
- N - размерность массива;
- PSB - заданная вещественная переменная, из операции [0.6, 1.4];
- K - количество сбитых точек;
- P - номера каналов сбитых точек.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к программе RTPMRC.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Нет.

ЛИТЕРАТУРА

1. Галкин В.Я., Орлин В.Н. Научный отчет, 135-ТЗ(438). Изд-во МГУ, 1970.
2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА ПОСТРОЕНИЯ ГИСТОГРАММ

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа упорядочивает одномерный массив вещественных чисел и строит по нему гистограмму^{/1/}.

Результатом работы программы^{/2/} является одномерный массив, размерность которого равна числу участков гистограммы, а каждый элемент равен числу элементов упорядоченного массива в данном участке.
DELTA - получаемая ширина участка гистограммы.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PTRHR(A, B, N, K, JK) , где

- A - исходный массив;
- B - упорядоченный массив;
- N - размерность исходного массива;
- K - результирующий массив длиной JK ;
- JK - заданное число участков гистограммы, на которые надо разбить исходный массив, $JK \geq 7$.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

В массив A ввести одномерный исходный массив данных.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

На печать выдаются значения DELTA и IERR , где

- DELTA - получаемая ширина участка гистограммы;
- IERR - переменная, служащая для сообщения об ошибках;
- IERR=65 - более половины элементов упорядоченного массива приходится на один участок, в этом случае рекомендуется увеличить число интервалов;
- IERR=1 - число интервалов разбиения меньше 7, рекомендуется увеличить его;
- IERR=2 - число интервалов разбиения больше размерности массива, рекомендуется увеличить его.

ЛИТЕРАТУРА

1. Свешников А.А. Основы теории ошибок. Изд-во Ленинградского ун-та, Л., том I, 1972.
2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА СГЛАЖИВАНИЯ ЗАДАННОЙ ФУНКЦИИ

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Согласно /I/ заданная функция подвергается поэтапному преобразованию (сглаживанию):

$$1. YS_i = \sum_{k=1}^i Y_k, \quad i = 1, 2, \dots, M.$$

$$2. Y1_i = (YS_{i-2} + 3YS_{i-1} + 7YS_i + 3YS_{i+1} + YS_{i+2})/15, \quad i=3, 4, \dots, M-2,$$

$$3. Y1_i = YS_i, \quad i = 1, 2, M-1, M. \quad YS_i = Y1_i - Y1_{i-1}, \quad i=2, 3, \dots, M, YS_1 = Y1_1.$$

Здесь YS - результат сглаживания, $Y1$ - вспомогательный массив.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL PAFSMC(A, B, N), где

- A - имя массива, содержащего значения сглаживаемой функции,
- B - имя массива, содержащего значения сглаженной функции,
- N - размерность массивов A и соответственно B.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

В массив A ввести значения сглаживаемой функции.

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Нет.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА СЖАТИИ ДВУМЕРНЫХ СПЕКТРОВ

Адаптацию выполнили: Нефедьева Л.С., Тарасова В.Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа ТЕМРОС ^{/1/} выполняет преобразование действительной квадратной матрицы, называемое разложением по сингулярным значениям. Такое преобразование, применимое к двумерным спектрам, позволяет значительно сократить объем хранимой информации ^{/1,2/}.

В программе используются два алгоритма по выбору: алгоритм преобразования с восстановлением матрицы или алгоритм непосредственного преобразования. Из работы ^{/3/} известно, что любую действительную матрицу можно представить в виде:

$$a_{ij} = \sum_{k=1}^R \Omega_k u_{ik} v_{jk}, \text{ где} \quad (I)$$

- a_{ij} - элемент матрицы (спектра);
 U и V - матрицы, составленные из собственных векторов матриц $A^T A$ и AA^T соответственно, "Т" означает транспонирование;
 Ω_k - сингулярные значения, которые равны квадратам собственных значений матриц $A^T A (AA^T)$;
 R - ранг матрицы.

Подробнее алгоритм конкретной программы описан в ^{/2/}. Он имеет некоторые преимущества по сравнению с ^{/3/} и основывается на методе получения наибольшего собственного значения положительно определенной матрицы.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL ТЕМРОС (NN, NPS, U, V, Q, N, M), где

- NN - спектр-массив из пар событий ($x_1, y_1; x_2, y_2; \dots$ и т.д.), который самой программой преобразуется в двумерный массив;
NPS - длина этого массива;
U, V, Q - массивы, содержащие результирующий спектр (см. формулу (I));
N - размерность матрицы спектра;
M - наибольшее допустимое число линейных зависимостей в спектре (ранг матрицы).

Максимально допустимые значения:

$$N=64, M=32 \text{ и } M < N.$$

Первоначальный вид массива NN сохраняется.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Вся необходимая информация задается через фактические параметры при обращении к программе ТЕМРОС .

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Нет.

ЛИТЕРАТУРА

1. Боганч Я и др. ОИЯИ, Б1-10-81-394, Дубна, 1981.
2. Бялко А.А. и др. ОИЯИ, Р10-80-107, Дубна, 1980.
3. Баглай Р.Д., Смирнов К.К. ЖВМ и МФ, 1975, № 1, с.241.

ПРОГРАММА МИНИМИЗАЦИИ КВАДРАТИЧНОГО ФУНКЦИОНАЛА
(МОДИФИКАЦИЯ FUMILI)

Адаптацию выполнил: Шафранов Е.В.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Подпрограмма FUMILA является модифицированным вариантом подпрограммы FUMILI /I/.

Модификация состоит в том, что в обращении к FUMILA добавлены параметры AR,ARD,FU , где

AR - подпрограмма вычисления функции $Y(X(1), \dots, X(N), A(1), \dots, A(K))$ и производных функции по параметрам $A(i), i=1, \dots, K$,

ARD - внутренняя подпрограмма FUMILA,

FU - подпрограмма-функция для вычисления функции $Y(X(1), \dots, X(N), A(1), \dots, A(K))$.

Формальные параметры, которые совпадают в обращении к FUMILI и FUMILA имеют один и тот же смысл и назначение.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL FUMILA(S,M,N1,N2,N3,EPS,AKAPPA,ALAMBD,IT,MC,AR,ARD,FU)

S,M,N1,N2,N3,EPS,AKAPPA,ALAMBD, IT, MC - параметры, идентичные соответствующим параметрам подпрограммы FUMILI ,

AR - имя подпрограммы пользователя для вычисления функции $Y(X(1), \dots, X(N), A(1), \dots, A(K))$ и ее производных $\frac{\partial Y}{\partial A(i)}$,

где $X(1), \dots, X(N)$ - независимые переменные,
 $A(1), \dots, A(K)$ - подгоняемые параметры.

Первый оператор этой подпрограммы должен иметь вид:

SUBROUTINE AR(U,ARD,FU) , где

U - вещественная переменная, которая после работы программы должна содержать значение функции $Y(X(1), X(2) \dots X(N), A(1) \dots A(K))$ при фиксированных, заданных в COMMON-блоках, значениях $X(1), X(2), \dots, X(N), A(1), \dots, A(K)$.

ARD,FU - имена тех же программ, которые указаны в обращении к FUMILA .

ARD - имя внутренней подпрограммы (введена для возможных последующих модификаций FUMILA). Сейчас она пуста (DUMMY);

FU - имя подпрограммы-функции для вычисления $Y(x(1), \dots, x(N), A(1) \dots A(k))$. Эта функция пишется пользователем в том случае, если он использует стандартный вариант программы AR, имеющийся в пакете FUMILA. В стандартном варианте AR вычисляются численно производные функции $Y(x(1), \dots, x(N), A(1), \dots, A(k))$ по параметрам $A(i)$. Программа AR обращается к FUNCTION FU(x) (см. III).

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

1. Задать значения величин

M, N1, N2, N3, EPS, IT.

2. Написать подпрограмму AR вида:

```

SUBROUTINE AR(U,ARD,FU)
EXTERNAL ARD,FU
COMMON/A/A(100)/DF/DF(100)/X/X(10)

U=Y(X(1),...X(N),A(1),...A(K))
DF(1)=DY/DA(1)
:
DF(K)=DY/DA(K)
RETURN
END

```

} Вычисление функции Y и ее производных по параметрам $A(1), A(2), \dots, A(K)$.

Или воспользоваться стандартной версией подпрограммы AR и тогда написать функцию FU вида:

```

FUNCTION FU(X)
COMMON/A/A(100)
DIMENSION X(10)
FU=Y(X(1),...X(N),A(1),...A(K)) - вычисление функции Y
RETURN
END

```

Замечание по использованию:

Если пользователю достаточно программы AR и нет необходимости писать ARD и FU, то нужно написать фиктивные программы ARD и FU таким образом, например:

```

SUBROUTINE ARD
R=1
RETURN
END

```

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Если задан не нулевой параметр IT , то выдается информация об итерациях в таком виде:

FUNCTION MINIMISATION BY SUBROUTINE FUMILI/LIKELM IN THE
FOLLOWING PRINT-OUT

S=VALUE OF OBJECTIVE FUNCTION, EC=EXPECTED

CHANGE IN S DURING NEXT ITERATION,

KAPPA=ESTIMATED DISTANCE TO MINIMUM,

LAMBDA=STEP LENGTH MODIFIER

ITERATION NO.0, S=0.23612E04, EC=, -0.34614E03

KAPPA=0.56555E02, LAMBDA=0.73665E-01

PARAMETER NUMBER	PARAMETER VALUE	STANDARD DEVIATION	CORRELATION FACTOR
1	0.10050E03	0.38912E00	0.16664E01
2	0.11873E01	0.30754E-02	0.10482E01
3	0.90980E00	0.54638E-02	0.17277E01

ЛИТЕРАТУРА

I. Галактионов В.В. и др. ОИЯИ, Б2-II-98-77, Дубна, 1976, с.265.

НАБОР ПРОГРАММ ПРЕДВАРИТЕЛЬНОЙ ОБРАБОТКИ

Адаптацию выполнили: Завьялова А.С., Нефедьева Л.С.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Набор программ предварительной обработки^{/I/} позволяет вести математический контроль качества всех точек спектра, введение необходимых поправок в отдельные спектры (коррекция на мертвое время, вычитание фона, выделение "плохих" точек и т.д.), сложение, вычитание, умножение, нормировку спектров, нахождение характеристик отдельных участков спектра (положение пика, величина площади под пиком и т.д.), подготовку спектров для окончательной обработки, вывод спектров в удобном виде на АЦПУ.

II. ОБРАЩЕНИЕ

1. Сложение двух спектров $\bar{A} + \bar{B} = \bar{C}$.

CALL SAC2 (A,N,B,N1,C) , $N \geq N1$.

Размерность суммарного спектра $N1$.

2. Вычитание двух спектров $\bar{A} - \bar{B} = \bar{C}$.

CALL SAB2 (A,N,B,N1,C) , где $N \geq N1$.

3. Умножение двух спектров $\bar{A} \times \bar{B} = \bar{C}$.

CALL SAV2 (A,N,B,N1,C) , где $N \geq N1$.

4. Деление двух спектров $\bar{A} / \bar{B} = \bar{C}$.

CALL CAD2 (A,N,B,N1,C) , где $N \geq N1$, если $b_i = 0$, то $c_i = 0$

5. Сложение измерения с константой $\bar{A} + \text{CONST} = \bar{C}$.

CALL SAC1 (A,N,CONST,C) .

Если $a_i = 0$, то $c_i = \text{CONST}$.

CALL SAC1Z (A,N,CONST,C)

Если $a_i = 0$, то $c_i = 0$.

6. Вычитание константы из спектра $\bar{A} - \text{CONST} = \bar{C}$.

CALL SAB1 (A,N,CONST,C)

Если $a_i = 0$, то $c_i = -\text{CONST}$.

CALL SAB1Z (A,N,CONST,C) .

Если $a_i = 0$, то $c_i = 0$.

7. Умножение спектра на константу $\bar{A} \times \text{CONST} = \bar{C}$.
 CALL CAU1 (A,N,CONST,C)
8. Деление спектра на константу $\bar{A}/\text{CONST} = \bar{C}$.
 CALL CAD1 (A,N,CONST,C) .
 Если $\text{CONST}=0$, то программа не срабатывает.
9. Натуральный логарифм спектра $\bar{A} = \bar{C}$.
 CALL CALOG (A,N,C) .
 Если $a_i=0$, то $c_i=0$.
10. Корень квадратный из спектра $\sqrt{|\bar{A}|} = \bar{C}$.
 CALL CSQRT (A,N,C)
11. Первая и вторая производные спектра.
 CALL CPROIZ (A,N,C,D)
 A - массив спектра размерности N ;
 C - массив, содержащий первую производную;
 D - массив, содержащий вторую производную.
12. Нарастающая сумма спектра $\sum_{k=1}^i a_k = a_i$.
 CALL CSUM (A,N,C)
13. Пересылка участка спектра в другой спектр.
 CALL SUMS (A,N,C,NS,KS)
 NS,KS - начальный и конечный номера строк массива C, куда
 будут посланы величины из первых (KS-NS+1) строк
 массива A размерности N .
14. Формирование фонового спектра.
 CALL CFON (A,N,A1,A2,A3,A4,A5,B)
 Фоновый спектр \bar{A} размерности N формируется по формуле

$$a_i = A1(i-B)^{-2} + A2(i-B)^{-1} + A3 + A4(i-B) + A5(i-B)^2$$
 , где
 a_i - содержимое i-го канала,
 A1,A2,A3,A4,A5 - константы, задаваемые физиком,
 B - константа сдвига, зависящая от времени вспышки реактора.
15. Характеристический спектр
 CALL CXAREU (A,N,B)
 Если $a_i=0$, то $b_i=0$.
 Если $a_i \neq 0$, то $b_i=1$.

16. Поиск нулей, отрицательных чисел и "выбитых" точек в спектре.
CALL SPOISK(A,N)

На печать выдаются номера каналов, содержащие нули, отрицательные числа и "выбитые" точки.

Точка считается "выбитой", если выполняется условие:

$$\left| \left| a_i / \frac{a_{i-1} + a_{i+1}}{2} \right| - 1 \right| > \frac{1}{2}$$

17. Правка нулей, отрицательных чисел и "выбитых" точек в спектре.

C - исходный спектр, A - результирующий спектр.

1. Правятся нули, отрицательные числа и выбитые точки.

CALL SPRAV(C,N,A)

2. Правка "выбитых" точек.

CALL SPRAVB(C,N,A)

Если c_i - "выбитая" точка, то $a_i = \frac{c_{i-1} + c_{i+1}}{2}$.

3. Правка нулей.

CALL SPRAVO(C,N,A)

Если $c_i = 0$, то $a_i = \frac{c_{i-1} + c_{i+1}}{2}$.

4. Правка отрицательных чисел.

CALL SPRAVM(C,N,A)

Если $c_i < 0$, то $a_i = 0$.

18. Сдвиг спектра на заданное число каналов.

CALL CSNIFP(C,N,K2,K1,A)

Массив C размерности N сдвигается на K1 каналов влево (K2=0) или вправо (K2=1).

19. Выбор участка спектра.

CALL SPART(A,N,L,K,C)

Из массива A размерности N выбирается участок с L по K строку и засылается в массив C с первой строки.

20. Нахождение положения, ширины, площади и энергии пика.

CALL SPIK(A,N,L,K,D,B,C)

Из массива A размерности N вырезается пик с L по K каналы. Константы D, B, C задаются пользователем.

Энергия пика находится по формуле:

$$E = D * M^2 + B * M + C, \quad \text{где } M - \text{положение пика.}$$

21. Занесение $a_i = S \times c_i + \text{CONST}$.
 CALL CZANES(C,N,L,K,S,CONST,A)
 В массив А с L по K строку заносятся вычисленные по данной формуле a_i . В остальные элементы заносятся $c_i \rightarrow a_i$.
 N - размерность массивов А, С.
22. Суммирование по кускам $\text{SUM} = \sum_{i=L}^k a_i$.
 CALL CAREA(A,N,L,K)
 N - размерность массива А.
23. Печать участка спектра по строкам.
 CALL CPRINT(A,N,L,K)
 Из массива А размерности N печатается участок с L по K строки.
24. Печать участка спектра по столбцам.
 CALL SPRINC(A,N,L,K)
25. Графическое изображение спектра на АЦПУ.
 CALL CGRAFI(N1,Z1,Z2,Z3,Z4,Z5,Z6,Z7,K,N)
 N1 - количество графиков,
 Z1,Z2,Z3, Z4, Z5, Z6, Z7 - имена массивов, из которых надо выбрать участок с K по N строку и напечатать график.
 Длина участка ≤ 256 строк. Каждому участку массива поставлен в соответствие символ (x, +, *, x, o, I, =).
 Можно вычеркивать одновременно от 1 до 7 графиков.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Спектры засылаются в исходные массивы размерностью N. При работе всех программ исходное состояние этих спектров сохранится, если при обращении будут заданы два разных имени массива (исходный, результативный).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Все программы информируют пользователя о своей работе и выдают в случае необходимости результаты обработки. В случае неверного задания информации в обращении выдается соответствующая диагностика. Для распечатки всех видов информации используется специальная программа CERROR, содержащая все необходимые фразы, закодированные специальным образом.

ЛИТЕРАТУРА

- I. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, БИ-ИС-80-345, Дубна, 1980.

ПРОГРАММА РАЗМЕЩЕНИЯ γ -ЛИНИЙ СРЕДИ ИЗВЕСТНЫХ УРОВНЕЙ

Адаптацию выполнил: Расторгуев А.А.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа SCHEME предназначена для автоматического размещения γ -линий среди известных уровней, с отсеком уровней, не имеющих связей с нижележащими уровнями^{/I/}.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL SCHEME (NG, A, DA, AIN, DAIN, NY, EY, DEY, BCL, N, NOT, IZ, IA, F)

Смысл параметров подробно объясняется в^{/I/} (символика сохранена).

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Для ввода данных необходимо обратиться к подпрограмме WORK :

CALL WORK (NG, A, DA, AIN, DAIN, NY, EY, DEY, BCL, N, NOT, IZ, IA, F)

Данные во входном наборе должны быть представлены в свободном формате через запятую. Порядок следования данных:

IZ, IA, F, N, NG, NY, A[1:NG], DA[1:NG], AIN [1:NG], DAIN [1:NG],
EY [1:NY], DEY [1:NY], BCL [1:NY], NOT [1:N] (при N \neq 0) .

IV. ВИД ПЕЧАТИ

На АЦПУ выводится схема распада изучаемого изотопа и таблица данных по каждому уровню^{/I/}.

ЛИТЕРАТУРА

I. Калмыкова Л.А., Бурмистров В.Р. ОИЯИ, IO-9809, Дубна, 1976.

ПРОГРАММА ВОССТАНОВЛЕНИЯ СХЕМ УРОВНЕЙ ЯДЕР

Адаптацию выполнил: Расторгуев А.А.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

По измеренным энергиям γ -переходов и их интенсивностям, используя предварительную информацию об известных энергиях возбужденных уровней, программа строит новые уровни^{/I/}.

II. ОБРАЩЕНИЕ

```
CALL LEVEL (PE, IZ, IA, NG, Q, VM, LB, RE, IH, AM, C, NY, N, A, DA, AIN,  
            DAIN, EY, DEY, EIN, NCT, X)
```

Смысл параметров подробно объясняется в^{/I/}.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Для ввода данных необходимо обратиться к подпрограмме WORK1 :

```
CALL WORK1 (PE, IZ, IA, NG, Q, VM, LB, RE, IH, AM, C, NY, N, A, DA, AIN,  
            DAIN, EY, DEY, EIN, NOT, X) .
```

Данные во входном наборе должны быть представлены в свободном формате через запятую. Порядок следования данных:

```
PE, IZ, IA, NG, Q, VM, DB, RE, IH, AM, C, NY, N, A [1:NG], DA [1:NG],  
AIN [1:NG], DAIN [1:NG], EY [1:NY], DEY [1:NY], EIN [1:NY],  
NOT [1:N] (при N≠0), X (1:300) .
```

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Печатается исходные данные и результаты работы программы^{/I/}.

ЛИТЕРАТУРА

I. Калмыкова Л.А., Бурмистров В.Р. ОИЯИ, IO-9808, Дубна, 1976.

ПРОГРАММА УТОЧНЕНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНОЙ ЯЧЕЙКИ МЕТОДОМ
НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Адаптацию выполнил: Расторгуев А.А.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Методом сопряженных градиентов минимизируется функция

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^L w_i (F_{i \text{эксп.}} - F_{i \text{выч.}})^2, \text{ где}$$

$$F_{i \text{выч.}} = \frac{c_1}{|\vec{H}_i|} + c_2,$$

$$\vec{H}_i = h_i \vec{a}^x + k_i \vec{b}^x + l_i \vec{c}^x,$$

$\vec{a}^x, \vec{b}^x, \vec{c}^x$ - вектора обратной решетки,

h_i, k_i, l_i - миллеровские индексы, соответствующие i -той отражающей плоскости в обратной решетке,

c_1 и c_2 - величины, характеризующие условия эксперимента,

$F_{i \text{эксп.}}$ - величина, пропорциональная измеренной интенсивности отражения от i -той плоскости,

w_i - вес ($= 1/\Delta F_{i \text{эксп.}}^2$),

L - число измерений.

Варьируются параметры обратной решетки и величина c_2 .
Подробнее см. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ в [1].

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL MINI (FIG, FA, W, L, X, N)

FIG(3, L) - массив миллеровских индексов h_i, k_i, l_i ,
FA(L) - массив $F_{i \text{эксп.}}$,
W(L) - массив весов, соответствующих каждому измерению,
L - число измерений,
X(N) - массив варьируемых параметров,
N - число варьируемых параметров,

$$\begin{aligned}
 x(1) &= |\vec{a}^*|, & x(2) &= |\vec{b}^*|, & x(3) &= |\vec{c}^*|, \\
 x(4) &= \cos(\vec{a}^* \wedge \vec{b}^*), & x(5) &= \cos(\vec{a}^* \wedge \vec{c}^*), \\
 x(6) &= \cos(\vec{b}^* \wedge \vec{c}^*), & x(7) &= c_2
 \end{aligned}$$

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Для ввода данных необходимо обратиться к подпрограмме RMIN :

CALL RMIN(FIG,FA,W,L,X,N) .

Входной поток должен иметь следующие параметры:

RECFM = FB, LRECL = 80 .

Порядок следования данных:

Первая запись - число измерений L и константа c_1 в формате

(I3,X,F8.3) ;

I+1 -ая запись- FIG(1,I),FIG(2,I),FIG(3,I),FA(I),

DRA(I) (ΔR_i эксп.) в формате

(3(2X,F2.0), 2(2X,F8.3));

$1 \leq I \leq L$

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Распечатываются условия минимизации, входные данные и окончательный результат - уточненные параметры для прямой решетки (подробнее см. /1/).

ЛИТЕРАТУРА

I. Боганч Я. и др. ОИЯИ, БИ-10-81-394, Дубна, 1981.

ПРОГРАММА МОДЕЛИРОВАНИЯ НЕЙТРОННЫХ СЕЧЕНИЙ ДЛЯ ТРАНСАКТИНИЕВЫХ ЯДЕР В ОБЛАСТИ НЕРАЗРЕШЕННЫХ РЕЗОНАНСОВ

Адаптацию выполнили: Бутцева Г.Л., Нефедьева Л.С., Украинцев В.Ф.
Янева Н.

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Набор программ предназначен для моделирования энергетического хода сечения, расчета функций плотности распределения сечений и корреляций сечений, а также средних характеристик резонансной структуры. Моделирование производится на основе средних резонансных параметров с использованием статистических законов распределения этих параметров методом Монте-Карло. Данный набор программ выполняет последовательно следующие функции:

1. Генерацию случайных чисел равномерно распределенных на интервале (0,1) и превращает их в параметры резонансов $\Gamma_{\lambda c}^{J\pi}$, D_{λ} , распределенные по законам Портера-Томаса^{/1/} и Вигнера^{/2/}.

2. Рассчитывает энергетическую зависимость полного и парциальных сечений σ_t и σ_{α} с помощью одного из двух приближений R -матричной теории или одноуровневого приближения Брейта-Вигнера^{/3/}, или многоуровневого приближения Райха-Мура^{/4/}.

Расчет в одноуровневом приближении Брейта-Вигнера идет по формулам:

$$\sigma_t(E) = 4\pi R^2 + 4\pi \lambda^2 \sum_{J,\pi} g(J) \frac{\Gamma_n^{J\pi}}{\Gamma_{\lambda c}^{J\pi}} \left[\Psi(x, \xi) \cos 2\varphi^{J\pi} + \chi(x, \xi) \sin 2\varphi^{J\pi} \right] \quad (Ia)$$

$$\sigma_{\alpha}(E) = 4\pi \lambda^2 \sum_{J,\pi} g(J) \frac{\Gamma_n^{J\pi} \Gamma_{\alpha}^{J\pi}}{(\Gamma_{\lambda c}^{J\pi})^2} \Psi(x, \xi), \text{ где}$$

λ - длина волны нейтрона;

J, π - полный момент и четность составного ядра;

$g(J)$ - статистический фактор;

R - радиус рассеяния;

$\Gamma_n^{J\pi}$, $\Gamma_{\lambda c}^{J\pi}$, $\Gamma_{\alpha}^{J\pi}$ - ширины (нейтронная, полная и процесса " α ");

$\varphi^{J\pi}$ - фазы рассеяния.

Эффект теплового движения ядер учитывается с помощью функций Ψ и χ от аргументов:

$$x = \frac{E - E_{\lambda}}{\Gamma_{\lambda c}^{J\pi}/2} \quad \text{и} \quad \xi = \frac{\Gamma_{\alpha}^{J\pi}}{2\Delta};$$

где E_λ - положение резонанса, Δ - Допплеровская ширина.

Расчет в многоуровневом приближении Райха-Мура идет по следующей схеме:

а) рассчитывается матрица $\langle c c' \rangle$ перехода из канала реакции "с" в канал "с'".

$$K_{cc'}^{j\pi}(E) = \frac{1}{2} \sum_{\lambda} \frac{(\Gamma_{\lambda c}^{j\pi})^{1/2} (\Gamma_{\lambda c'}^{j\pi})^{1/2}}{E_\lambda - E - i \frac{\bar{\Gamma}}{2}}, \quad \text{где} \quad (2)$$

E_λ - энергия резонанса с номером λ ;
 $\bar{\Gamma}$ - средняя радиационная ширина;
 $\Gamma_{\lambda c}$ - ширина резонанса λ в канале "с"

б) считается матрица столкновений

$$S_{cc'}^{j\pi}(E) = [(1 + iK_{cc'}) / (1 - iK_{cc'})] e^{-2i\varphi^{j\pi}} \quad (3)$$

в) вычисляется зависимость сечений

$$\sigma_t = 2\pi \lambda^2 \sum_{j,\pi} g(j) (1 - Re S_{nn}^{j\pi}) \quad (4a)$$

$$\sigma_\alpha = \pi \lambda^2 \sum_{j,\pi} g(j) |S_{n\alpha}^{j\pi}|^2 \quad (4б)$$

$$\sigma_{nn} = \pi \lambda^2 \sum_{j,\pi} g(j) |1 - S_{nn}^{j\pi}|^2 \quad (4в)$$

г) рассчитывается эффект уширения резонансов за счет теплового движения ядер

$$\sigma_\alpha(E) = \int_0^\infty f(E', E) \sigma_\alpha(E') dE', \quad (5a)$$

где $f(E', E)$ - функция Допплера, равная

$$f(E', E) = \frac{1}{\sqrt{\pi} \Delta} \exp[-(E' - E)^2 / \Delta^2] \quad (5б)$$

3. Рассчитываются функции плотности вероятности полного сечения $P(\sigma_t)$, корреляции сечений $\sigma_\alpha(\sigma_t)$ и их дисперсии $D[P(\sigma)]$, $D[\sigma_\alpha(\sigma)]$.

4. Происходит вычисление функционалов сечений вида:

$$T_\alpha(n) = \int_0^\infty P(\sigma_t) \sigma_\alpha(\sigma_t) e^{-\sigma_t \cdot n} d\sigma_t / \int_0^\infty P(\sigma_t) \sigma_\alpha(\sigma_t) d\sigma_t \quad (6a)$$

$$M_k(\sigma_0) = \int P(\sigma_t) \sigma_\alpha(\sigma_t) [\sigma_t + \sigma_0]^k d\sigma_t, \quad (6б)$$

зависящих от параметров n - толщина исследуемого образца (ядро/ δn) и σ_0 - сечение разбавления в δn для $k=0, -1, -2$.

5. Так как расчет всех величин вида (6) производится в интер-

вале ΔF несколько раз, то можно определить среднее по N реализациям значение любого функционала F , его дисперсию и ошибку:

$$\bar{F} = \sum_{i=1}^N F_i / N \quad (7a)$$

$$D(F) = \overline{F^2} - \bar{F}^2 \quad (7б)$$

$$\Delta F = \sqrt{D(F)/N} \quad (7в)$$

6. Расчетные величины сечений $\langle \sigma_t \rangle$, $\langle \sigma_f \rangle$, пропусканий $T_t(n)$ и самоиндикации $T_f(n)$ сравниваются с их экспериментальными значениями и вычисляются величины отклонений:

$$\chi_i = \left[(y_{\text{эксп.}} - y_{\text{расч.}}) / \Delta y_{\text{эксп.}} \right]^2 \quad (8a)$$

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL MNCARL

Если пользователь хочет в дальнейшем использовать полученную в процессе работы программы MNCARL информацию^{/5/} о структуре сечений в виде функций плотности вероятности $p(\sigma_t)$ и $\sigma_\alpha(\sigma_t)$, то в головной программе надо задать

COMMON/PS/PS(250),PF(250),PC(250),PF(250)/NZN/NZN ,NZP, где

PS содержит значения функции $p(\sigma_t)$,
 PF содержит значение функции $\sigma_1(\sigma_t)$,
 PC содержит значение функции $\sigma_c(\sigma_t)$,
 PF содержит значение функции $\sigma_n(\sigma_t)$,
 NZN - их размерность.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

I-я карта - LEVEL,IPRI,IPUN,NZP (формат 4I10), где

LEVEL	$\left\{ \begin{array}{l} \text{если } 0, \text{ то расчет ведется по формулам Брейта-Вигнера}^{/3/}, \\ \text{если } 1, \text{ то по формулам Райха-Мура}^{/4/}; \end{array} \right.$
IPRI	
IPUN	- ключ перфорации $p(\sigma)$, $\sigma_\alpha(\sigma)$ с дисперсиями, если 1 - перфорация выдается;
NZP	- ссылочный номер набора $p(\sigma)$, $\sigma_\alpha(\sigma)$ на магнитной ленте (формат записи F10.3), если 0 - запись не проходит.

2-я карта - JS, JP, NST, NZN, IN (формат 5I4), где

- JS - число состояний составного ядра с орбитальным моментом $l=0$;
- JP - число состояний составного ядра с орбитальным моментом $l=1$;
- NST - общее число состояний составного ядра;
- NZN - число точек разбиения шкалы сечений σ_t при получении $P(\sigma_t)$, $\sigma_\alpha(\sigma_t)$;
- IN - число "холостых" прогонов генератора случайных чисел, необходимых для исчезновения корреляций с предыдущими расчетами;

3-я карта - массив значений $g^{(J)}$ (формат 6E10.4);

4-я карта - величины R, T радиуса рассеяния и температуры образца (формат 2E10.4);

5-я карта - массив толщин образцов n размерностью 7 (формат 7E10.4);

6-я карта - величины UTA, UIN -- границы энергетического интервала (формат 2E20.10);

7-я карта - IMAX, N1 (формат I10, E10.4), где

IMAX - число реализаций метода Монте-Карло,

N1 - шаг превращения $\sigma_t \rightarrow P(\sigma_t)$ в шкале летаргии нейтронов $U = \ln E/E_0$ и интегрирования по $f(E', E)$.

Далее следуют NST перфокарт, которые содержат средние резонансные параметры состояний составного ядра:

DS, GG, SN, GF, CONT(1), CONT(2), COR, KANAL , (формат 7E10.4, I1), где

DS - среднее расстояние между уровнями \bar{D}^J ;

GG - средняя радиационная ширина $\bar{\Gamma}_\gamma^J$;

SN - средняя нейтронная силовая функция $S_n^J = \bar{\Gamma}_n^J / \bar{D}^J$

GF - средняя делительная ширина $\bar{\Gamma}_\alpha^J$;

CONT(1), CONT(2) - взвешенные вклады первого и второго каналов деления в среднюю делительную ширину $\bar{\Gamma}_f^J$;

COR - число степеней свободы (состояний) в нейтронном канале ν_n ;

KANAL - число степеней свободы (каналов деления) ν_f .

Затем следуют две перфокарты со значениями экспериментальных величин: $\langle \sigma_t \rangle$, $\langle \sigma_f \rangle$, семь величин T_t , пять величин T_f и две перфокарты с их ошибками (формат 7E10.3). Последняя перфокарта - значения параметров флуктуации:

SN(1), SN(2), GF(2) (формат 3E10.4).

IV. ВИД ПЕЧАТИ

На печать выдается вся вводимая информация с соответствующими комментариями. Затем печатается рабочая информация: реальное число Γ_{\max} , число точек в разбиении функции $f(E', E)$, скорректированный шаг n_1 , доплеровская ширина Δ , скорректированные значения U_{TA} , U_{IN} и массив средних резонансных параметров с учетом изменений $SN(1)$, $SN(2)$, $GF(2)$. Выдаются значения средних сечений на каждом шаге реализации, значения пропусканий моментов и факторов блокировки усредненных по способу $F(p(\sigma))$.

Печатается заголовок

AVERAGE CHARACTERS,

затем значения средних сечений и величины $\alpha = \langle \sigma_c \rangle / \langle \sigma_f \rangle$ с дисперсиями. Печатаются значения пропускания и самоиндикации, дисперсии вычисленные по формуле (76), значения факторов блокировки и их дисперсии.

Выдаются по строкам сопоставимые величины сечений, пропусканий $\bar{T}_t(n)$ и самоиндикации $T_f(n)$ в следующем порядке: аргумент, расчетное значение с ошибкой, экспериментальное значение с ошибкой, величины χ^2 -расхождения. Выдается χ^2 -критерий для характеристик полного сечения $\langle \sigma_t \rangle$, $T_t(n)$ и сечения деления $\langle \sigma_f \rangle$, $T_f(n)$, а также полный χ^2 -критерий.

ЛИТЕРАТУРА

1. Porter C.E., Thomas R.G. Fluctuations of Nuclear Reaction Width. Phys. Rev., 1956, v.104, p.483.
2. Wigner E.P. Statistical Properties of Real Symmetric Matrices. In. Proceedings Conference of Applied Mathematics in Toronto. 1959, Univ. Toronto Press p.174.
3. Breit G., Wigner E. Capture of Slow Neutrons Phys. Rev. 1936, v.43, p.519.
4. Reich C.W., Moore M.S. Multilevel Formula for the Fission Process. Phys. Rev., 1958, v.111, p.929.

ПРОГРАММА ВВОДА ДАННЫХ В СВОБОДНОМ ФОРМАТЕ

А.А.Расторгуев

I. ОБЩЕЕ ОПИСАНИЕ

Программа UREAD является аналогом программы /I/. Программа UREAD читает данные - числа и текстовые константы, записанные в свободном формате через запятую, и размещает их последовательно в указанный массив, упаковывая каждое число или текстовую константу в одно слово. Признаком конца числа или текстовой константы во входном потоке является запятая. Максимальная длина текстовой константы - 4 символа. Целые числа (I - формат) упаковываются как двоичные с фиксированной точкой, вещественные (F - и E - формат) - как нормализованные двоичные с плавающей точкой.

II. ОБРАЩЕНИЕ

CALL UREAD(A,K,N) , где

- A - массив, в который будут упаковываться данные из входного потока;
- A(K) - первый заполняемый элемент массива;
- A(N) - последний элемент, т.е. вводится N-K+1 чисел или текстовых констант.

III. ПОДГОТОВКА ИНФОРМАЦИИ

Входной поток должен быть описан в DD-карте с именем INPUT. В частном случае ввода с перфокарт:

```
//GO.INPUT DD *
```

IV. ВИД ПЕЧАТИ

Для вывода сообщений на АЦПУ необходимо предусмотреть карту:

```
//GO.DIAGN DD SYSOUT=A.
```

Возможны следующие сообщения:

НЕ ХВАТАЕТ КАРТ.

Попытка ввести больше данных, чем есть во входном потоке. Формирование массива заканчивается, происходит возврат в вызывающую программу.

НЕДОПУСТИМЫЙ СИМВОЛ.

Внутри числа встретился символ, отличный от десятичной цифры, точки, E, +, - . Символ игнорируется.

НЕПРАВИЛЬНЫЙ СИНТАКСИС.

Допустимый символ встретился в недопустимом месте. Символ игнорируется.

ПЕРЕПОЛНЕНИЕ МАНТИССЫ

Слишком длинная мантисса числа. Младшие разряды мантиССы обрезаются.

ПЕРЕПОЛНЕНИЕ ПОРЯДКА.

Очень большое или очень маленькое число. В результате сформированное число не соответствует заданному.

НЕПРАВИЛЬНО ЗАДАНЫ ПАРАМЕТРЫ.

Второй параметр в обращении к UREAD больше третьего. Чтение не выполняется, происходит возврат в вызывающую программу.

ЛИТЕРАТУРА

1. Лукстиня Л.А. и др. ОИЯИ, Б2-11-98-77, Дубна, 1976.

Hyman

W. M. ...

...

...

...

...

...

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Стр.
1. Система программ для обработки γ -спектров	2
2. Обработка спектров с гауссовской формой одиночной линии.....	6
3. Программа обработки сложных гамма-спектров	8
4. Набор программ для обработки β -спектров (SAMPO).....	10
5. Обработка γ -спектров с фиксированным положением пиков	12
6. Набор программ для обработки γ -спектров для целей акти- вационного анализа (АКТИАН)	15
7. Программа обработки γ -спектров для целей активационного анализа (АКТИВ)	17
8. Спектроориентированная программа разложения смесей	19
9. Программа калибровки по эффективности	22
10. Программа калибровки по энергии	24
11. Программа анализа 2-мерных амплитудных спектров	26
12. Программа обработки α -спектров различных типов методом деконволюции	28
13. Программа определения пробегов α -частиц в многокомпонентных веществах	32
14. Сравнение спектров	33
15. Программа сравнения двух спектров по частотам и дисперсиям...36	36
16. Решение задачи оценивания параметров нелинейной модели в рамках метода наименьших квадратов с использованием принципа минимальных поправок к начальному приближению	39
17. Программа определения параметров в экспоненциальном представ- лении функции с оценкой числа компонент	42
18. Программа оценки числа компонент в экспоненциальном представ- лении функции	44
19. Решение задачи оценивания параметров нелинейной модели в рамках метода наименьших квадратов	46
20. Программа вычисления решения одномерного линейного интеграль- ного уравнения Фредгольма первого рода	49
21. Программа решения линейного интегрального уравнения Фредголь- ма первого рода методом регуляризации А.Н.Тихонова	51
22. Программа решения системы линейных алгебраических уравнений методом регуляризации А.Н.Тихонова	54
23. Программа вычисления нормального решения (псевдорешения) совместных алгебраических уравнений с действительной прямо- угольной (возможно плохо обусловленной) упорядоченной матри- цей	56

24. Программа упорядочивания прямоугольной матрицы по строкам в порядке возрастания их линейной зависимости от предыдущих строк	58
25. Программа вычисления псевдообратной матрицы A^+ по МУРУ-ПЕНРОЗУ для прямоугольной плохо обусловленной матрицы A ...	60
26. Программа вычисления устойчивых оценок математического ожидания по выборке	61
27. Программа браковки "выбитых" точек в массиве экспериментальных данных и вычисления математического ожидания и дисперсии	63
28. Программа определения параметров для модели фона экспоненциального вида и вычитание фона из экспериментального спектра	65
29. Программа статистического сглаживания экспериментальной спектрометрической информации по правилу "3 σ "	67
30. Программа построения гистограмм	68
31. Программа сглаживания заданной функции	69
32. Программа сжатия двумерных спектров	70
33. Программа минимизации квадратичного функционала (модификация FUMILI)	72
34. Набор программ предварительной обработки	75
35. Программа размещения γ -линий среди известных уровней.....	79
36. Программа восстановления схем уровней ядер	80
37. Программа уточнения параметров элементарной ячейки методом наименьших квадратов	81
38. Программа моделирования нейтронных сечений для трансактивных ядер в области неразрешенных резонансов	83
39. Программа ввода данных в свободном формате	88