

3-681

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



971/2-79.

19/III 79  
P10 - 12075

В.Б.Злоказов

**DOMUS -ПРОГРАММА**

**ДЛЯ АНАЛИЗА ДВУМЕРНЫХ СПЕКТРОВ**

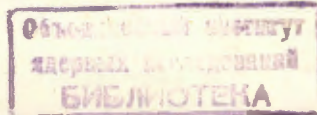
**1978**

P10 - 12075

В.Б.Злоказов

**DOMUS -ПРОГРАММА  
ДЛЯ АНАЛИЗА ДВУМЕРНЫХ СПЕКТРОВ**

*Направлено в "Computer Physics Communications"*



Злоказов В.Б.

P10 - 12075

DOMUS - программа для анализа двумерных спектров

Описана программа для разложения двумерных спектров на двумерные пики и фон. В качестве моделей пиков могут быть взяты либо аналитическая двумерная функция, выведенная из теоретических соображений, либо двумерная гистограмма с большой статистикой, полученная из эксперимента и дополненная до гладкой функции. Полезные параметры оцениваются методом наименьших квадратов.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Zlokazov V.B.

P10 - 12075

DOMUS - A Program for the Decomposition of the Two-Dimensional Spectra

A program for the decomposition of the two-dimensional spectra into two-dimensional peaks and background is described. A two-dimensional analytical function, derived from theoretical considerations, or a two-dimensional histogram with a large statistics, obtained from an experiment and completed to a smooth function, can be taken as models. Further the parameters of interest are evaluated by using a least-square estimator.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research.

Dubna 1978

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Целью программы DOMUS является разложение двумерного спектра на компоненты, из которых спектр состоит. Такими компонентами являются двумерные пики и двумерный фон. DOMUS обобщает программу UPEAK на двумерный случай и имеет аналогичную структуру <sup>1, 2</sup>.

Двумерный спектр  $s(x, y)$  формально записывается так:

$$s(x, y) = \sum_{i=1}^n f_i(x, y) + b(x, y) + e(x, y),$$

где  $f_i(x, y)$  -  $i$ -ый пик,  $b(x, y)$  - фон,  $e(x, y)$  - статистическая ошибка с нулевым средним и дисперсией  $D(x, y)$ .

## 2. ОПИСАНИЕ МЕТОДА

Каждая компонента спектра  $f_i(x, y)$  рассматривается как результат преобразования ее модели  $m(x, y)$ . В качестве модели можно взять двумерную аналитическую функцию, выведенную из теоретических соображений, либо двумерную гистограмму с большой статистикой, полученную из эксперимента и дополненную до гладкой функции, например, с помощью интерполяции. Аналогично программе UPEAK параметризация компонент определяется выбором группы преобразований, которая лучше всего подходит для описания отношений между реальными компонентами и их моделями. Данная версия программы использует подгруппу проективной группы для параметризации.

Соответственно этому каждая функция реального пика связана с его моделью следующим соотношением:

$$f(x, y, P_x, P_y, W_x, W_y, S_1, S_2, C_x, C_y) = Am(Z + S_1 V, S_2 Z + V), \quad /1/$$

где  $m(x, y)$  является нормализованной моделью пика,

$$Z = (x - P_x)/(C_x z + W_x), \quad V = (y - P_y)/(C_y v + W_y),$$

$$z = (2x - x_1 - x_2)/(x_2 - x_1), \quad v = (2y - y_1 - y_2)/(y_2 - y_1),$$

$x_1, y_1$  и  $x_2, y_2$  - левые и правые границы анализируемого участка. Довольно сложная форма введения параметров /1/ более предпочтительна по сравнению с простой формой вследствие соображений вычислительного характера, а также ввиду большей легкости в интерпретации этих параметров в терминах физики, а именно:  $A$  - амплитуда пика,  $P_x, P_y$  -  $x$ - и  $y$ -координаты центра пика,  $W_x, W_y$  -  $x$ - и  $y$ -компоненты полуширины пика,  $S_1, S_2$  - коэффициенты поворота пика в плоскости  $(x, y)$ ,  $C_x, C_y$  - коэффициенты линейной зависимости полуширины пика от  $x$  и  $y$  соответственно. Фон описывается поверхностью 2-го порядка, взятой в виде:

$$b(x, y) = c_0 + c_1 z + c_2 v + c_3 (2z^2 - 1) + c_4 (2v^2 - 1) + c_5 zv, \quad /2/$$

где  $z$  и  $v$  определены выше.

Вычисление значений параметров осуществляется с помощью метода наименьших квадратов: надо минимизировать

$$F(\bar{p}) = \sum_{x, y} \left\{ \frac{1}{D(x, y)} (s(x, y) - \sum_{i=1}^n f_i(x, y, \bar{p}) - b(x, y, \bar{q}))^2 \right\},$$

где  $\bar{p} = (\bar{p}_1, \dots, \bar{p}_n, \bar{q})$  - вектор параметров, определенных в /1/, /2/. Следующие ограничения накладываются на параметры:

$$A_i \geq s_i, \quad s_i > 0 \quad /амплитуды не меньше, чем чувствительность/$$

$$W_{xi} = W_{xj}, \quad W_{yi} = W_{yj}, \quad S_{1i} = S_{1j}, \quad S_{2i} = S_{2j}, \quad C_{xi} = C_{xj}, \quad C_{yi} = C_{yj}$$

/параметры полуширины и вращения являются общими для всех пиков в данном участке спектра/,

$$p_{il} \leq p_i \leq p_{iu} \quad /границы параметров/.$$

Может быть наложено ограничение на параметры поворота:

$$S_1 = RS_2. \quad /3/$$

Частные производные по параметрам функций /1/, требуемые в методе наименьших квадратов, вычисляются на основе соотношения /1/:

$$\frac{\partial f}{\partial A} = m(u, w), \quad \frac{\partial f}{\partial P_x} = -\frac{A}{L_x} (m'_u + S_2 m'_w),$$

$$\frac{\partial f}{\partial P_y} = -\frac{A}{L_y} (S_1 m'_u + m'_w), \quad \frac{\partial f}{\partial W_x} = \frac{\partial f}{\partial P_x} Z, \quad \frac{\partial f}{\partial W_y} = \frac{\partial f}{\partial P_y} V,$$

$$\frac{\partial f}{\partial S_1} = AV m'_u, \quad \frac{\partial f}{\partial S_2} = AZ m'_w, \quad \frac{\partial f}{\partial C_x} = \frac{\partial f}{\partial W_x} z, \quad \frac{\partial f}{\partial C_y} = \frac{\partial f}{\partial W_y} v.$$

Здесь использованы следующие обозначения:

$$u = Z + S_1 V, \quad w = S_2 Z + V, \quad L_x = C_x z, \quad L_y = C_y v + W_y.$$

Объем двумерного пика вычисляется интегрированием полученной функции  $f(x, y, p)$  по двумерной области, содержащей соответствующий пик:

$$V_i = \iint A_i m_i(u, w) dx dy.$$

Оценки наименьших квадратов получают с помощью демпфированного процесса Гаусса-Ньютона с проектированием всех промежуточных оценок на область /3/, /3'/. Подобно UPEAK, здесь используются некоторые процедуры /двумерное сглаживание, поиск выбитых точек и т.д./, способствующие повышению качества оценок параметров. Алгоритмы этих процедур представляют собой расширения на двумерный случай тех же самых идей, которые были реализованы в аналогичных процедурах UPEAK.

### 3. СТРУКТУРА ПРОГРАММЫ

Структура DOMUS аналогична структуре UPEAK. DOMUS есть подпрограмма, которая должна вызываться основной программой /MP/. Возможны 2 режима взаимодействия DOMUS и MP /так же, как и для UPEAK /:

1/ нет обмена информацией /простой вызов/: в этом случае входные данные читаются с карт;

2/ активный обмен информацией /диалог/: в этом случае входные данные читаются из памяти /из специального массива ONL/, выходные данные по желанию посылаются в память /в специальный массив TAB / и/или выдаются на печать.

Структура программы и организация обработки данных в DOMUS и UPEAK аналогичны /см. /2/ /. Поэтому ниже изложены лишь наиболее существенные отличия:

1/ Список подпрограмм, не принадлежащих программе UPEAK:

DOMUS, PREPM, FITPM, OUTPM, CAMOM, ARITM, BOUCA,

CALF2, CHEPM, CORBM, INIPM, INPU2, MOPR2, PRIN2,

PRANM, PRIPM, PROPМ, PROM1, PROM2, PROM7, WHDEM.

Каждая из них содержит поясняющие комментарии.

2/ Подпрограммы, принадлежащие программе UPEAK:

INPUT, CHELI, DAPP, RINCO, SEMAT, WIPRO, LSM76, OUTIN,

PODEM, SMXIN.

3/ Список помеченных общих блоков:

COBLM, MODD2, SBLOCM, RBUNM, COBLC, ADICO.

Эти блоки являются двумерными аналогами соответствующих блоков в UPEAK.

4/ DOMUS вызывается следующим образом:

CALL DOMUS(SP, D, ONL, ANP, TAB, AM1, AM2, RM, NM),  
где SP(L1, L2) - двумерный массив, содержащий спектр;  
D, RM - фиктивные идентификаторы; NM - размерность массива ADICO в DATA9. Если интервал спектра вводится

не через DATA3, NM задает размерность L2 в массиве SP (L2=NM). Все остальные массивы те же, что и в UPEAK.

Байесовские оценки в программе не реализованы; только одна модель пика может быть использована. Ряд физических аспектов использования программы DOMUS дан в работе /3/.

### 4. ВХОДНЫЕ И ВЫХОДНЫЕ ДАННЫЕ

Все входные данные вводятся по формату 10E8.0. Полное описание всех 15 групп входных данных входит в пакет в качестве комментариев.

### ЛИТЕРАТУРА

1. Zlokazov V.B. *Nucl. Instr. and Meth.*, 1977, 143, p.151.
2. Zlokazov V.B. *Comp. Physics Comm.*, 1978, 13, p.389-398.
3. Балагуров А.М. и др. *Conference on Diffraction Profile Analysis and Open Meeting of the Commission on Neutron Diffraction, Cracow, Poland, August 14-15, 1978, p.19.*

Рукопись поступила в издательский отдел  
12 декабря 1978 года.