



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

P10-85-171

Г.Л.Бутцева, Н.Н.Воробьева, Н.Н.Говорун,
А.С.Завьялова, В.Б.Злоказов, Л.С.Нефедьева,
А.А.Расторгуев, Т.С.Рерих, А.И.Салтыков,
В.Н.Стройков, В.Н.Тарасова, В.Н.Ягафарова

ПРОБЛЕМНО-ОРИЕНТИРОВАННАЯ БИБЛИОТЕКА
ПРОГРАММ ОБРАБОТКИ
СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

Направлено в сборник "Предметное
математическое обеспечение"

1985

Библиотека предназначена для обработки потоков аппаратурных спектров и спектроподобных распределений, полученных в физических экспериментах. Основой библиотеки программ обработки спектрометрической информации ^{1/} послужил набор программ, созданный коллективом сотрудников Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ. В дальнейшем библиотека была пополнена программами ^{2/}, разработанными в МГУ, ЛИЯФ, МИФИ, ФЭИ. В разработке ряда программ принимали участие сотрудники институтов из НРБ, ВНР, МНР и ЧССР. Таким образом, библиотека концентрирует коллективный опыт ряда ведущих научных учреждений СССР и других социалистических стран, занимающихся обработкой экспериментальных данных в области ядерной физики.

Библиотека содержит более 50 комплексов программ, обеспечивающих сложную обработку различных видов спектров, а также программы предварительной обработки.

Программы предварительной обработки осуществляют контроль "качества" точек спектра, позволяют вводить необходимые поправки в исходную информацию /поправка на "мертвое время", вычитание фона и т.д./, выполняют простейшие операции над спектрами /сложение, вычитание, умножение, нормировку и т.д./ и осуществляют подготовку спектров для их окончательной обработки.

Программы, реализующие более сложные методы обработки, могут быть разбиты на несколько групп.

1/ Программы обработки γ -спектров, полученных как с помощью полупроводниковых, так и кристаллических детекторов. Они предусматривают следующие этапы анализа спектров:

- калибровку /по форме пиков, энергии и эффективности регистрации измерительной аппаратуры;
- поиск "выбитых" точек в спектре;
- построение модели пика /как симметричной, так и асимметричной/;
- автоматический поиск пиков или выделение пиков в заданных границах;
- разбиение спектра на интервалы, содержащие пики;
- разделение мультиплетов;
- подгонка одиночных пиков и мультиплетов.

Анализ пиков и мультиплетов осуществляется, как правило, с применением метода наименьших квадратов. Допускается автоматическая обработка спектров. Во многих программах заложен принцип умолчания. Некоторые значения управляющих параметров вычисляются самой программой. Если, однако, эти значения не устраивают пользователя, или обработка с ними дает неудовлетворительные результаты, то пользователь может задать свои значения

параметров. Принцип умолчания существенно упрощает и облегчает взаимодействия с программами.

2/ Программы обработки нейтронных спектров. Они предназначены для анализа нейтронно-дифракционных спектров, спектров пропусканий - сечений нейтронных взаимодействий с веществом, и ряд программ исследования механизма нейтронных реакций с помощью моделирования.

3/ Программы анализа α -спектров. Они позволяют осуществлять деконволюцию α -спектров на основе использования быстрых методов преобразования Фурье.

4/ Программы обработки двумерных спектров осуществляют анализ двумерных амплитудных распределений и спектров, полученных на основе методики совпадений.

5/ Программы анализа спектров методов регуляризации А.Н.Тихонова. Эти программы решают системы линейных уравнений с матрицами, близкими к вырожденной.

6/ Прочие программы. Они позволяют выполнять различные операции, необходимые в практике обработки спектров: анализ сумм экспонент, сравнение спектров, вычисление псевдообратной матрицы, быстрое преобразование Фурье, активационный анализ, построение схем уровней и т.д.

Алгоритмы, реализованные в перечисленных программах, отражают современные методы обработки спектрометрической информации.

Все программы библиотеки написаны на языке фортран и оформлены в виде программных модулей^{/3/}. Модуль вызывается посредством оператора CALL. В качестве фактических параметров могут быть имена файлов, имена подпрограмм, целые, вещественные и текстовые константы.

Информация между модулями не может быть передана через COMMON-блоки. Однако каждый модуль может вызывать любые другие подпрограммы и передавать им любую информацию через фактические параметры и COMMON-блоки. Допускается также вызов одних модулей из других. Модульный принцип организации программ обработки упрощает пополнение библиотеки вновь разработанными программами, и создание новых программ из набора уже существующих.

Библиотека первоначально была создана для ЭВМ БЭСМ-6 и является составной частью системы обработки спектрометрической информации /СОС/^{/4/}.

Система СОС обеспечивает работу с файлами^{/5/} и включает в себя транслятор с языка директив^{/6/}. Аппарат работы с файлами прямого^{/7/} и последовательного доступа^{/8/} организует обмен информацией как между пользователем и библиотечными программами, так и между самими программами библиотеки. Язык директив упрощает процесс общения пользователя с системой. Таким образом система СОС обеспечивает эффективную обработку данных физических исследований.

Библиотека^{/9/} в полном объеме адаптирована на ЭВМ ЕС-1010.

Отдельные программные комплексы были поставлены на ЭВМ PDP-11/70, СМ-4, CDC-6500.

Эффективное использование и сопровождение библиотеки обеспечивается ее функциональной замкнутостью и самодокументируемостью.

Под функциональной замкнутостью здесь понимается наполняемость библиотеки программами, обеспечивающими основные операции над спектрами.

Самодокументируемость библиотеки обеспечивается информационно-справочной системой /ИСС/.

Банк справочных данных ИСС содержит описания, инструкции и средства проверки работоспособности всех программных модулей библиотеки /набор тестов/.

Библиотека программ обработки спектрометрической информации нашла широкое применение: она передана более чем 20 организациям СССР и институтам НРБ, ГДР, ЧССР.

ЛИТЕРАТУРА

1. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, Б1-10-80-345, Дубна, 1980, т. 1.
2. Боганч Я. и др. ОИЯИ, Б1-10-81-394, Дубна, 1981, т. 2.
3. Бутцева Г.Л. и др. ОИЛИ, Р10-81-58, Дубна, 1981.
4. Бутцева Г.Л. и др. ОИЯИ, Д10-11-11264, Дубна, 1978, с. 157.
5. Кениг Х., Нефедьева Л.С. ОИЯИ, 10-8556, Дубна, 1983.
6. Нефедьева Л.С., Салтыков А.И. ОИЯИ, Р10-80-861, Дубна, 1980.
7. Бутцева Г.Л. и др. ОИЯИ, Р10-80-856, Дубна, 1980.
8. Нефедьева Л.С. и др. ОИЯИ, Р10-82-217, Дубна, 1982.
9. Аврамов С.Р. и др. ОИЛИ, Б1-10-83-698, Дубна, 1983.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 марта 1985 года.