

**СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА**

**P10-86-621**

**А.К.Чураков, А.А.Бялко, Н.Г.Волков,  
М.И.Фоминых, Й.Ференцей, В.М.Цупко-Ситников**

**АУТОР-86 - ПАКЕТ ПРИКЛАДНЫХ ПРОГРАММ  
ДЛЯ ОБРАБОТКИ  
СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ  
НА СМ ЭВМ**

**1986**

## ВВЕДЕНИЕ

Широкое применение малых ЭВМ серии СМ и Электроника-60 для автоматизации научных исследований в области спектрометрии стимулирует создание проблемно-ориентированных пакетов программ для обработки получаемой информации. В большинстве случаев это программы, предназначенные для накопления и предварительной обработки спектров. Однако, как показала практика работы по адаптации для СМ-4, программы прецизионной обработки сложных гамма-спектров AUTOS <sup>1/</sup> (созданной первоначально для более мощных ЭВМ), используя преимущества машин этой серии (прямая связь с аппаратурой КАМАК, удобные и надежные операционные системы, развитая периферия, интерактивный режим работы), можно разрабатывать новые методы, в том числе и для прецизионной обработки спектрометрической информации. Один из таких методов - индексный алгоритм формирования аппроксимирующей функции <sup>2/</sup>, значительно расширивший возможности многих программ.

В работах <sup>3,8/</sup> было дано первое описание пакета прикладных программ AUTOP, предназначенного для прецизионной обработки спектрометрической информации на малых ЭВМ. За последние годы, в результате активной совместной работы с физиками-экспериментаторами, использующими отдельные программы, пакет изменился как количественно, так и качественно. В настоящей работе кратко представлены программы, включенные в пакет AUTOP в настоящее время.

## СОСТАВ ПАКЕТА ПРОГРАММ

1. AUTOP - программа автоматического анализа линейчатых спектров, обеспечивающая <sup>3/</sup>:

а) поиск пиков и разделение мультиплетов методом инкрементальной деконволюции <sup>10/</sup>;

б) уточнение параметров пиков (центр пика, площадь, ширина на полувысоте) с помощью аппроксимации участков спектра аналитической функцией вида: несимметричный гауссиан или сумма гауссианов + фон;

в) калибровка спектрометра по энергии и эффективности.

Результаты каждого этапа обработки выводятся на графический и операторский дисплей (см. рис.1).

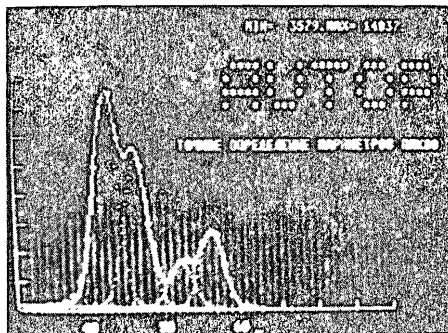
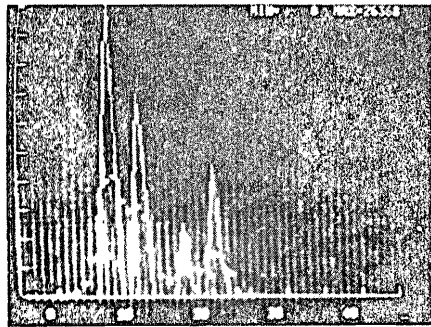
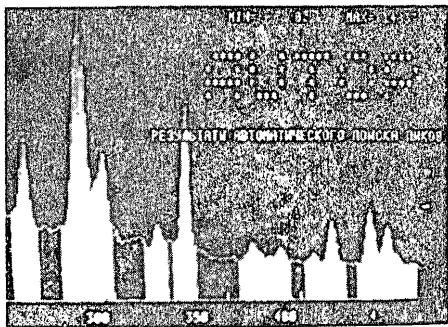


Рис.1. а) Участок спектра с разметкой найденных пиков. б) Разделение мультиплета методом инкрементальной деконволюции. в) Точное определение параметров пиков путем аппроксимации участка спектра автоматически сформированной аналитической моделью.

2. PUCH - программа аппроксимации размеченных участков спектра аналитической функцией вида: несимметричный гауссиан или сумма гауссианов + фон.

Разметка спектров может осуществляться с помощью дисплея со световым карандашом <sup>1/4</sup> (см. рис.2).

3. KATI - программа аппроксимации экспериментальных данных суммой асимметричных гауссианов с использованием индексного алгоритма задания аппроксимирующей функции, позволяющего варьиро-

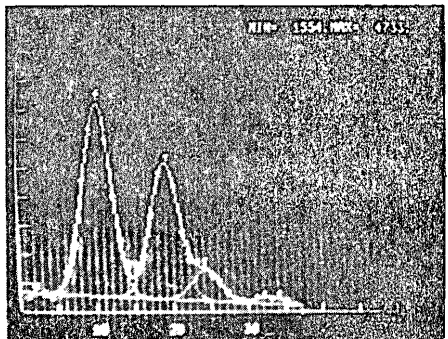


Рис.2. Результаты аппроксимации сложного участка спектра заданным набором гауссианов.

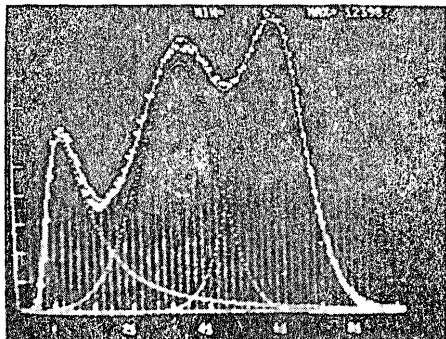


Рис.3. Результаты разложения массового спектра осколков деления на суперпозицию асимметричных гауссианов

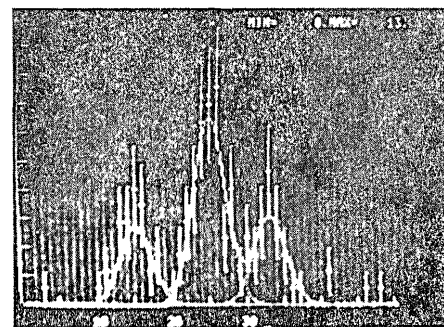


Рис.4. Определение параметров пиков с малой статистикой.

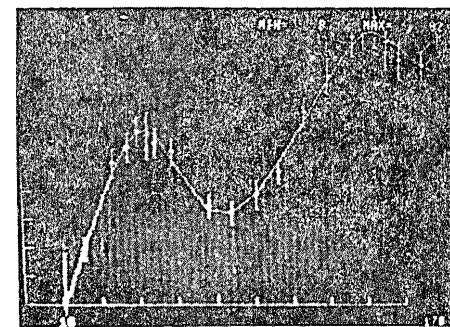


Рис.5. Аппроксимация экспериментальной зависимости сплайн-МНК.

вать несколько параметров как общий параметр для всех гауссианов, а также задавать связи между параметрами или фиксировать их (см. рис. 3).

4. FITFIX - программа анализа пиков со "сверхмалой" статистикой. Параметры фона и площади пиков определяются аппроксимацией участков спектра адаптированным методом максимального правдоподобия, с учетом пуассоновского распределения числа отсчетов в канале <sup>1/5</sup> (см. рис. 4).

5. KALIBR - программа аппроксимации набора точек полиномом заданной степени. Параметры аппроксимирующего полинома определяются линейным методом наименьших квадратов (МНК).

6. SPLINE - программа аппроксимации экспериментальных зависимостей методом сплайн-МНК <sup>1/6</sup> (см. рис. 5). Набор экспериментальных точек разбивается на участки, каждый из которых аппроксимируется полиномом заданного порядка при условии сшивки значений полиномов на границах участков.

7. LIFT - программа анализа временных характеристик экспериментальных процессов. Уточняет параметры экспонент и аппаратной функции для процессов, описываемых как интегральная свертка суммы экспонент с аппаратной функцией гауссова вида (см. рис.6).

8. SUMEX - программа аппроксимации (по МНК) экспериментальной зависимости суммой экспонент. Определяется вклад отдельных экспонент при известных периодах полураспада.

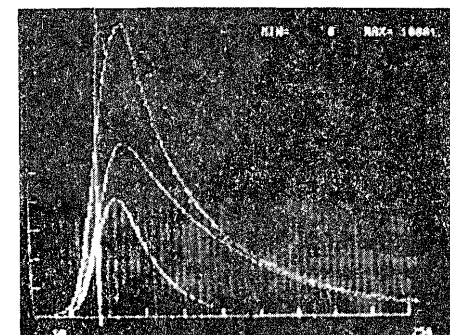


Рис.6. Определение времени высвечивания в гамма-флуоресцентном спектре.

9. YILT - программа уточнения периодов полураспада экспонент с учетом мертвого времени и конечности времени измерения (для гамма-спектрометра).

10. SVD - программа разложения матриц по сингулярным значениям. Определяет спектр сингулярных значений матрицы. Используется для псевдообращения матриц, решения плохо обусловленных систем уравнений, линейного программирования.

11. MNK - подпрограмма определения параметров линейной модели по методу наименьших квадратов (МНК)<sup>/9/</sup>.

12. RANFIT - подпрограмма минимизации произвольного функционала методом случайного поиска. Применяется для минимизации сложных функционалов, имеющих разрывы производных в исследуемой области.

13. FITDEV - подпрограмма аппроксимации экспериментальных зависимостей нелинейными функциями. Нелинейная минимизация осуществляется методом переменной метрики (метод Девидона)<sup>/5/</sup>.

14. MESS - программа анализа спектров ядерного гамма-резонанса (ЯГР). Предназначена для уточнения параметров пиков ЯГР путем аппроксимации экспериментального спектра аналитической функцией вида: фон + сумма  $\alpha$ -лоренцианов<sup>/7/</sup>. Использует индексный алгоритм формирования аппроксимирующей функции, позволяющий фиксировать параметры или варьировать несколько параметров как общий параметр для всех пиков (см. рис. 7).

15. MES6 - программа анализа спектров ЯГР. Отличается от MESS возможностью использовать при аппроксимации кроме отдельных  $\alpha$ -лоренцианов сикстеты  $\alpha$ -лоренцианов с заданной связью параметров внутри шестерки (см. рис. 8).

16. MESGRP - программа графического вывода (на дисплей или АЦПУ) результатов разложения спектров ЯГР. По результатам MESS или MES6 программа рассчитывает значения  $\alpha$ -лоренцианов,

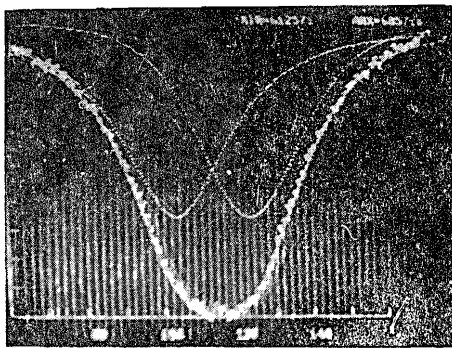


Рис.7. Аппроксимация спектров ядерного гамма-резонанса (ЯГР) суперпозицией  $\alpha$ -лоренцианов.

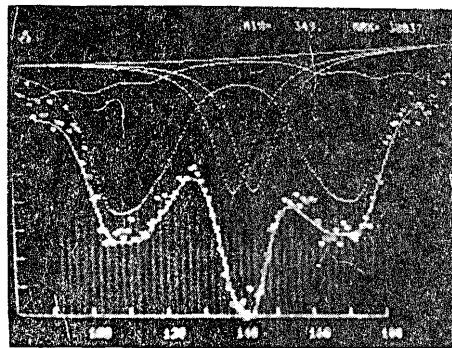


Рис.8. Аппроксимация спектров ЯГР суперпозицией  $\alpha$ -лоренцианов и сикстетов  $\alpha$ -лоренцианов.

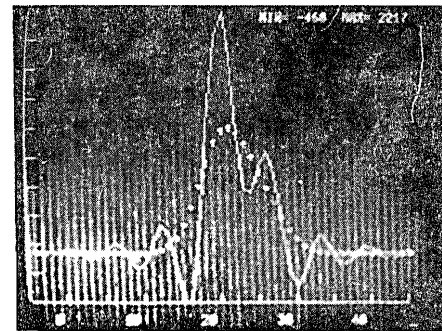


Рис.9. Разделение модельного дуплета методом регуляризации решения интегрального уравнения Фредгольма I рода, описывающего искажение "истинного" спектра аппаратурой.

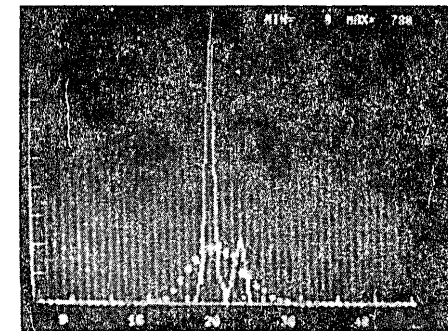


Рис.10. Разделение модельного дуплета методом инкрементальной деконволюции.

суммирует компоненты в соответствии с задаваемым индексным вектором и выводит в виде таблицы и графика.

17. RETIX - подпрограмма решения методом регуляризации интегрального уравнения Фредгольма I рода типа свертки. Применяется для расчета экспериментальных зависимостей до искажения их аппаратурой и аппаратурных функций (см. рис. 9).

18. RFCON - подпрограмма разделения мультиплетов методом инкрементальной деконволюции<sup>/10/</sup> (см. рис. 10).

19. GSSTS - библиотека подпрограмм для работы с графическим дисплеем на базе набора блоков КАМАК — "Динамо". Обеспечивает вывод осей координат, текстов и графиков (в том числе трехмерных изображений в изометрии) на экран графического дисплея (см. рис. 11).

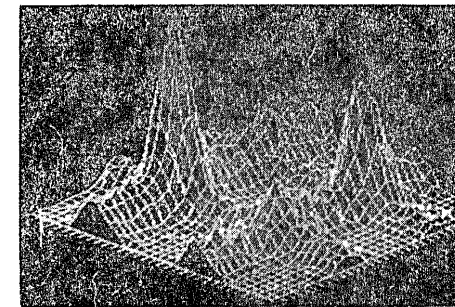


Рис.11. Графическое представление фрагмента двумерного спектра  $\gamma$ - $\gamma$ -совпадений.

## ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Практически все программы (за исключением части программ в GSSTS) написаны на ФОРТРАНе и работают в режиме диалога под управлением операционных систем РАФОС, RTII, TSX, RSX, NTS на

ЭВМ СМ-3, СМ-4 и Электроника-60. Обработка контролируется с помощью графиков, выводимых на операторский или телевизионный графический дисплей на базе блоков КАМАК "Динамо".

Одной из частей пакета АУТОР являются записанные на машинном носителе описания и инструкции для пользователей программ, данные для тестовых испытаний и контрольные результаты.

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Аврамов С.Р. и др. ОИЯИ, Б1-10-80-345, Дубна, 1980, т.1, с.56.
2. Чураков А.К. и др. ОИЯИ, Р11-82-459, Дубна, 1982.
3. Бялко А.А., Волков Н.Г., Чураков А.К. В сб.: Аппаратное и программное обеспечение систем автоматизации ядерно-физического эксперимента. Энергоатомиздат, М., 1982, с.61-65.
4. Вылова Л. и др. ОИЯИ, Р10-7061, Дубна, 1973.
5. Булла Ф. и др. ОИЯИ, Р10-80-104, Дубна, 1980.
6. Волков Н.Г., Чубченко В.Г., Белов О.Х. Прикладная ядерная спектроскопия, вып.4, М., Атомиздат, 1974, с.177-181.
7. Новиков Г.В., Егоров В.К., Попов В.И., Безмен Н.И. Геохимия, 1975, №7, с.1107-1111.
8. Чураков А.К. и др. ОИЯИ, 10-83-852, Дубна, 1983.
9. Бух К. Введение в теорию вероятностей и математическую статистику. ИЛ, М., 1951.
10. Коваленко В.В. В сб.: Автоматизация физических исследований. Энергоатомиздат, М., 1985, с.173-177.

Рукопись поступила в издательский отдел  
16 сентября 1986 года.

#### ЕСТЬ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги, если они не были заказаны ранее.

Д2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области реплицистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
Д9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
Д3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.
Д11-83-511	Труды совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1982.	2 р. 50 к.
Д7-83-644	Труды Международной школы-семинара по физике тяжелых ионов. Алушта, 1983.	6 р. 55 к.
Д2,13-83-689	Труды рабочего совещания по проблемам излучения и детектирования гравитационных волн. Дубна, 1983.	2 р. 00 к.
Д13-84-63	Труды XI Международного симпозиума по ядерной электронике. Братислава, Чехословакия, 1983.	4 р. 50 к.
Д2-84-366	Труды 7 Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1984.	4 р. 30 к.
Д1,2-84-599	Труды VII Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1984.	5 р. 50 к.
Д17-84-850	Труды III Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1984. /2 тома/	7 р. 75 к.
Д10,11-84-818	Труды V Международного совещания по проблемам математического моделирования, программированию и математическим методам решения физических задач. Дубна, 1983	3 р. 50 к.
	Труды IX Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1984 /2 тома/	13 р. 50 к.
Д4-85-851	Труды Международной школы по структуре ядра, Алушта, 1985.	3 р. 75 к.
Д11-85-791	Труды Международного совещания по аналитическим вычислениям на ЭВМ и их применению в теоретической физике. Дубна, 1985.	4 р.
Д13-85-793	Труды XII Международного симпозиума по ядерной электронике. Дубна 1985.	4 р. 80 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:  
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79  
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ  
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Чураков А.К. и др.

P10-86-621

AUTOR 86 - пакет прикладных программ для обработки спектрометрической информации на СМ ЭВМ

Описывается состав и возможности пакета программ AUTOR для малых ЭВМ, предназначенного для решения исследовательских и прикладных задач, связанных с обработкой спектрометрической информации. Пакет насчитывает 19 программ (в том числе обработка энергетических, временных и ЯГР-спектров), охватывающих различные аспекты обработки и анализа спектрометрических данных: от сглаживания, поиска пиков и минимизации сложных функционалов различными методами с использованием нескольких модельных функций - до калибровок и вывода графической информации на дисплей. Все программы написаны на языке ФОРТРАН-4, адаптированы на ЭВМ СМ-3, СМ-4 и Электроника-60 и могут работать в интерактивном режиме. Одной из частей пакета являются описания и инструкции для пользователей, данные для тестовых испытаний и контрольные результаты.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод О.С.Виноградовой

Churakov A.K. et al.

P1-86-621

AUTOR-86 Programme Package for Spectrometric Data Processing on SM Computer

A composition and capabilities of the AUTOR programme package for mini-computers are described. The package is intended for research and applied tasks related to the processing of spectrometric information. It consists of 19 programmes (including analysis of energy, time and NGR-spectra) and includes various aspects of processing and analysis of spectrometric data from smoothing, search for peaks and minimisation of complex functionals by different methods, using several model functions, to gauging and display of graphic information. All programmes are written in FORTRAN-4, language adapted for СМ-3, СМ-4 and Electronika-60 computers, and may operate in an interactive mode. The package also includes descriptions and instructions for users, checking data and reference results.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986