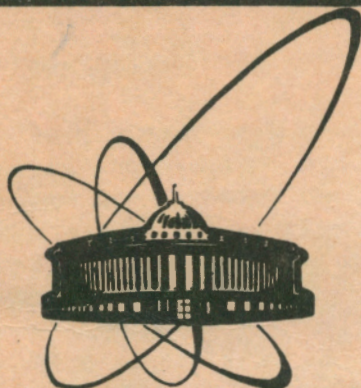


90-315

БИБЛИОТЕКА



**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P10-90-315

В.Б.Злоказов, В.В.Чернышев*

**MR1A - ПРОГРАММНЫЙ КОМПЛЕКС
ДЛЯ ПОЛНОПРОФИЛЬНОГО АНАЛИЗА
ПОРОШКОВЫХ НЕЙТРОННО-ДИФРАКЦИОННЫХ
ВРЕМЯПРОЛЕТНЫХ (ПРЯМЫХ И ФУРЬЕ-)
СПЕКТРОВ**

* Московский государственный университет
им. М.В.Ломоносова

1990

ВВЕДЕНИЕ

Хотя библиотека программ для анализа дифрактограмм достаточно обширна, ряд веских и объективных причин продиктовал необходимость создания программного комплекса MR1A. Эти причины заключаются в том, что необходима программа:

1) ориентированная на самый широкий класс многофазных поликристаллических времяпролетных нейтронно-дифракционных данных, как прямых, так и данных Фурье ^{2,5/};

2) позволяющая одновременный анализ нескольких спектров (например, измеренных под разными углами), снятых при облучении многофазных образцов;

3) максимально независимая от формы пика и позволяющая работать как с регулярными формами (гауссиан, лоренциан и т.д.), так и с самыми экзотическими, заданными в случае необходимости графическим или табличным методом;

4) использующая мощные, полноматричные методы минимизации функционала для подгонки профиля нейтронограммы к данным, как статистически независимым в различных каналах, так и коррелированным с известной матрицей корреляций;

5) работающая как на персональных ЭВМ (где достижимы максимальные удобства для взаимодействия пользователя и программы), так и на мощных ЭВМ для обработки больших объемов данных.

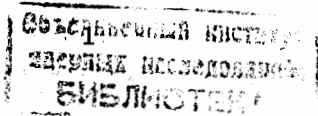
1. МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И АЛГОРИТМ

Поскольку постановка задачи анализа порошковых дифракционных нейтронограмм описана в литературе (см., например, ^{1/}), ниже будет изложена лишь минимально необходимая информация о методе и алгоритме ее решения.

Формально профиль экспериментальной нейтронограммы $y(D)$ может быть записан так:

$$y(D) = f(D) \cdot \left(\sum_{i=1}^{nph} a_i \cdot R_i(D) + \text{back}(D) \right) + E(D), \quad (1)$$

где D — номер канала, $d_1 \leq D \leq d_2$, back — фоновое распределение нейтронов, для которого могут использоваться 2 способа описания:



1) Полиномиальное задание:

$$\text{back}(D) = \sum_{i=1}^5 q_i Q_i(Z),$$

где $Q_i(Z)$ — полином Чебышева степени не больше 5-й.

$$Z = (2 \cdot D - d_1 - d_2) / (d_2 - d_1).$$

$$Q_0(Z) = 1; \quad Q_1(Z) = Z; \quad Q_2(Z) = 3 \cdot Z^2 - 1; \quad Q_3(Z) = 5 \cdot Z^3 - 3 \cdot Z;$$

$$Q_4(Z) = 35 \cdot Z^4 - 30 \cdot Z^2 + 3; \quad Q_5(Z) = 63 \cdot Z^5 - 70 \cdot Z^3 + 15 \cdot Z.$$

q_i = коэффициенты при полиномах.

2) Квазимаквелловское описание:

$$\text{back}(D) = (q_1 + q_2 \cdot Z + q_3 \cdot Z^2)^2 \cdot \exp\left(-\left(\frac{D - q_4}{q_5 \cdot Z + q_6}\right)^2\right),$$

где Z то же, что и выше; E — статистическая ошибка измерения, имеющая нулевое среднее и дисперсию, которая считается известной и равной $y(D)$, и независимая в каждой точке D , либо, в более общем случае, коррелированная; $f(D)$ — эффективный спектр, в качестве такового для прямых спектров берется экспериментально измеренный спектр известного образца, поправленный на уточняемый в ходе анализа множитель

$$e^{-ac^Y}, Y = (D - d_1) / (d_2 - d_1);$$

R_i — вклад i -й фазы вещества в рассеянную интенсивность с коэффициентом a_i , имеющий

$$R_i = \sum_{h=1}^{nr f_i} \eta_{h_i} \cdot |F_{h_i}|^2 \cdot m \left(\frac{D - D_{h_i}}{W_i + c_i \cdot D} \right). \quad (2)$$

Здесь F_{h_i} (структурный фактор) описывается формулой

$$F_{h_i} = \sum_j b_{ij} \cdot N_{ij} \cdot e^{2\pi i(h_i \cdot x_{ji})} \cdot e^{-(B_{ji} \cdot h_i, h_i) \cdot q_i}; \quad (3)$$

h_i = вектор (h, k, l) — индексы Миллера i -й фазы,

x_{ji} = вектор (x_{j1}, x_{j2}, x_{j3}) — координаты j -го атома i -й фазы.

B_{ij} = матрица $(3 \cdot 3)$ — тепловой тензор j -го атома i -й фазы.

q — $(\sin \theta / 2\lambda)^2$ — константа, зависящая от θ — угла брэгговского рассеяния, и λ — длины волны.

Суммирование (по индексу j) ведется по независимым атомам и всем им эквивалентным относительно преобразования симметрии. Если независимый атом имеет вектор координат $X(x, y, z)$ и тепловой тензор B , эквивалентный ему атом будет иметь вектор координат

$$R = U \cdot X + T,$$

а в центросимметричном случае также

$$R = -U \cdot X + T,$$

и тепловой тензор

$$B_i = U' \cdot B \cdot U,$$

где U и T — матрица преобразования и вектор трансляции соответственно.

Остальные величины в выражении (2) имеют следующие значения:

D_h — положение h -го рефлекса i -й фазы, определяемое характеристиками элементарной ячейки;

η_{hi} — множественности h_i -х рефлексов, нормированные на фактор Лоренца (s_h в 4-й степени), а также умноженные на первичную экстинкцию, поправленные на фактор, связанный с преимущественной ориентацией, на геометрию счетчиков, поглощение в воздухе и образце и т.д.;

q_i — модуль вектора обратной решетки i -й фазы;

N_{ij} — заселенность позиции j -го атома i -й фазы;

b_{ij} — амплитуда когерентного рассеяния j -го атома i -й фазы;

s_h — корень квадратный из выражения

$$a^*2 h^2 + b^*2 k^2 + c^*2 l^2 + 2hk \cos(\gamma^*) + 2hl \cos(\beta^*) + 2kl \cos(\alpha^*);$$

(параметры решетки далее будут обозначаться симметричной матрицей A_h , где h обозначает вектор hkl),

и наконец W_i и c_i — переменная ширина дифракционного пика:

$$W = W_i + c_i \cdot Z^n,$$

где n равно 1 или 2.

Положение дифракционного пика D_h вычисляется по следующей формуле

$$D_h = \text{const} \cdot L \cdot \sin(\theta + \theta_0) / s_h - D_0 ;$$

$\text{const} = 505,556 / \tau \cdot C$, τ — цена канала (в мкс), C — корректирующая константа для перевода в D-шкалу, L — времяпролетная база.

Анализируются могут одновременно несколько спектров (например, измеренных при различных углах рассеяния). Задача профильного анализа — непосредственное выделение фазовых вкладов и уточнение характеристик элементарной ячейки кристалла и характеристик ее атомов. Таким образом, определяемыми (или уточняемыми) параметрами являются следующие.

Для каждого спектра:

- 1) времяпролетная база L ;
- 2) смещение угла Брэгга (θ_0) или канальной шкалы D_0 ;
- 3) 6 параметров полинома (не более чем 5-й степени), взятых в форме Чебышева;
- 4) ас-параметр коррекции эффективного спектра.

Для каждой фазы:

- 1) коэффициент (удельный вес) фазы a ;
- 2) 6 параметров обратной решетки a^{*2} , $\cos(\gamma^*)$, $\cos(\beta^*)$, b^{*2} , $\cos(\alpha^*)$, c^{*2} ;
- 3) W , c — параметры ширины дифракционного пика;
- 4) ϵ — параметр первичной экстинкции (по Бэккеру и Коппенсу)^{1/6}. Фактор первичной экстинкции e_h для фазы i и вектора h равен

$$e_{h_i} = 1 / (1 + 2 \cdot X + X^2)^{1/2}, \quad X = \gamma \cdot \epsilon,$$

$$\gamma = vO_i \cdot \lambda O_h^4 \cdot |FO_{h_i}|^2, \quad \lambda O_h = 2 \cdot \sin(\theta) / sO_h,$$

$$X_2 = a \cdot X^2 / (1 + \beta \cdot X),$$

$$a = .2 + 45 \cdot \cos(2\theta), \quad \beta = .22 - .12 \cdot (.5 - \cos(2\theta))^2,$$

a , λO , FO , sO , vO — длина волны, структурный фактор, межплоскостное расстояние и объем элементарной ячейки, вычисленные при начальных значениях параметров;

- 5) N — заполнение заселенности позиций независимых атомов;
- 6) x , y , z — координаты независимых атомов;
- 7) B — 6 коэффициентов теплового тензора (1 коэффициент в изотропном случае).

2. АНАЛИЗ ПАРАМЕТРИЗАЦИИ

Частные производные по параметрам в каждом канале D вычисляются следующим образом:

По общим параметрам для каждого спектра:

$$\frac{\partial}{\partial L} = -Y^a \sum_{i=1}^{nph} a_i \sum_{h_i}^{nrf} \eta_{h_i} |F_{h_i}|^2 m'(z_{h_i}) \left(\frac{1}{W_i + c_i \cdot Z} \right) \left(\frac{\text{const} \cdot \sin(\theta + \theta_0)}{s_{h_i}} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial \theta_0} = -Y^a \sum_{i=1}^{nph} a_i \sum_{h_i}^{nrf} \eta_{h_i} |F_{h_i}|^2 m'(z_{h_i}) \left(\frac{1}{W_i + c_i \cdot Z} \right) \left(\frac{\text{const} \cdot L \cdot \cos(\theta + \theta_0)}{s_{h_i}} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial D_0} = Y^a \sum_{i=1}^{nph} a_i \sum_{h_i}^{nrf} \eta_{h_i} |F_{h_i}|^2 m'(z_{h_i}) \left(\frac{1}{W_i + c_i \cdot Z} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial a} = Y^a \ln(Y) \cdot \left(\sum_{i=1}^{nph} a_i Ph_i(D) + \text{back}(D) \right).$$

По фоновым параметрам для каждого спектра:

$$\frac{\partial}{\partial b_0} = Q_0; \quad \frac{d}{db_3} = Q_3;$$

$$\frac{\partial}{\partial b_1} = Q_1; \quad \frac{d}{db_4} = Q_4;$$

$$\frac{\partial}{\partial b_2} = Q_2; \quad \frac{d}{db_5} = Q_5;$$

По фазовым параметрам для каждого спектра (без суммирования по спектрам):

$$\frac{\partial}{\partial a_i} = Y^a \cdot Ph_i(D, P),$$

$$\frac{\partial}{\partial W_i} = -Y^a a_i \sum_{h_i}^{nrf} \eta_{h_i} |F_{h_i}|^2 m'(z_{h_i}) \left(\frac{D - Dh_i}{(W_i + c_i \cdot Z)^2} \right),$$

$$\frac{\partial}{\partial c_1} = -Y^a a_1 \sum_{h_1}^{nrf} \eta_{h_1} |F_{h_1}|^2 m'(z_{h_1}) \left(\frac{(D - Dh_1)Z}{(W_1 + c_1 \cdot Z)} \right)^2.$$

С суммированием по всем спектрам:

$$\frac{\partial}{\partial A} = Y^a a_1 \sum_{h_1}^{nrf} \eta_{h_1} |F_{h_1}|^2 m'(z_{h_1}) \left(\frac{1}{W_1 + c_1 \cdot Z} \right) \left(\frac{\text{const} \cdot L \cdot \sin(\theta + \theta_0)}{2 \cdot S_{hi}^3} \right) h_1,$$

$$\frac{\partial}{\partial \epsilon} = -Y^a a_1 \sum_{h_1}^{nrf} |F_{h_1}|^2 m(z_{h_1}) \cdot \frac{\partial \eta_{hi}}{\partial \epsilon}.$$

По атомным параметрам:

$$\frac{\partial}{\partial N_{ij}} = 2Y^a a_1 \sum_{h_1}^{nrf} \eta_{h_1} F_{h_1} b_{ij} \cos(2\pi(h_1, x_{ij})) e^{-(B_{ij} \cdot h_1, h_1)} m(z_{h_1}),$$

$$\frac{\partial}{\partial x_{ij}} = -2Y^a a_1 \sum_{h_1}^{nrf} \eta_{h_1} F_{h_1} N_{ij} b_{ij} \sin(2\pi(h_1, x_{ij})) e^{-(B_{ij} \cdot h_1, h_1)} m(z_{h_1}) (2\pi h_1);$$

$$\frac{\partial}{\partial B_{ij}} = -2Y^a a_1 \sum_{h_1}^{nrf} \eta_{h_1} F_{h_1} N_{ij} b_{ij} \cos(2\pi(h_1, x_{ij})) e^{-(B_{ij} \cdot h_1, h_1)} m(z_{h_1}) (h_1, h_1).$$

Здесь $z_{hi} = (D - Dh_i) / (W_1 + c_1 \cdot Z)$.

Анализируя эти выражения, можно сделать следующие выводы о качестве данной параметризации:

1) L , θ_0 и D_0 линейно-зависимы попарно и в совокупности, и следовательно, одновременно быть варьируемыми не могут.

2) Полином степени выше 1 следует употреблять только для описания очень сложных фонов, иначе избыточные коэффициенты фонового полинома будут сильно коррелированы между собой (даже при чебышевской форме записи).

3) Параметр первичной экстинкции ϵ сильно коррелирует с фазовыми коэффициентами: практически его можно надежно определить только после уточнения остальных параметров.

4) Коэффициенты теплового тензора B и заполнение N сильно коррелированы, и поэтому желательна фиксация либо первых, либо второго при подгонке.

5) Коэффициенты фаз a_1 коррелируют между собой тем больше, чем больше перекрываются пики этих фаз; они же могут коррелировать и с фоновыми параметрами: они и все заполнения N_j линейно-зависимы, поэтому при свободных a_1 нельзя расфиксировать все N_j .

Из сказанного следует, что в общем случае оптимальной является стратегия последовательного уточнения параметров: фиксация всех нелинейных параметров, дающих большой фактор корреляции, в начале и их постепенная расфиксация по мере уточнения остальных параметров; при этом следует уменьшать длину шага и увеличивать демпфирующий фактор в процедуре минимизации функционала подгонки.

3. ПРОБЛЕМА ФОРМЫ (КОНТУРА) ПИКА

Для решения проблемы формы пика был применен следующий подход. Форма пика (под этим понимается контур, создающий свои основные геометрические и топологические свойства на протяжении всего спектра за исключением таких характеристик как амплитуда, положение и полуширина) может быть задана или какой-либо формулой, либо графиком, либо таблицей. Последние способы самые гибкие и удобные для реализации, но они выдвигают проблему нелинейной параметризации графиков и таблиц, так как упомянутые выше характеристики: положение и полуширина пика — не могут входить в функцию пика линейно.

Метод нелинейной параметризации произвольных функций (в том числе графических и табличных) описан в работе /3/.

Он состоит в следующем. Пусть $f(x)$ — функция, описывающая пик — задана произвольным образом. Мы можем построить целое семейство параметрических функций с помощью выражения

$$Q_n(x) \cdot f(R_k(x)), \quad (4)$$

где Q_n и R_k — полиномы степеней n и k .

Данное выражение может аппроксимировать любую аналитическую функцию $s(x)$; при этом, если модельная функция $f(x)$ выбрана так, что ее контур с точностью до варьируемых параметров близок к контуру функции $s(x)$, потребуется очень небольшое число параметров. Например, если контур $m(x)$ с точностью до амплитуды, полуширины и центра близок к контуру пиков в спектре $s(x)$, то выражение

$$S \cdot m\left(\frac{x - P}{W}\right), \quad (5)$$

где $Q_0 = S$, $R_1 = -P/W + (1/w) \cdot x$, будет очень хорошей аппроксимирующей функцией пика, зависящей всего от 3 параметров S, P, W , допускающих очень ясную физическую интерпретацию: амплитуда, центр (или положение) и полуширина пика.

Выражение (4) можно обобщить на случай произвольных аппроксимантов Q и P . Это дает возможность использовать в качестве Q и P выражения более общего вида, например, дробно-линейные полиномы. В этом случае в качестве функции пика можно взять, например, такую.

$$S \cdot m \left(\frac{x - P}{C \cdot x + W} \right). \quad (6)$$

Аппроксимационные свойства (6) намного мощнее, чем у (5), а параметров больше лишь на 1. При этом вновь введенный параметр тоже допускает ясную физическую интерпретацию: это коэффициент линейной зависимости полуширины от аргумента x .

В программе MRIA пики каждой фазы описываются независимой моделью m_i ; всего не более 4 моделей. По умолчанию могут быть взяты таблично задаваемые самой программой такие широко используемые функции как: гауссиан, лоренциан, фойгтман, свертка функций Гаусса и экспоненты, а также табличная модель пика для GeLi-детекторов γ -линий, опубликованная комиссией МАГАТЭ. Однако самое лучшее описание контура пика дает измерение изолированной линии на достаточно густом числе каналов и с достаточно большой статистикой.

4. ПРОБЛЕМЫ ПОДГОНКИ

Оценки искоемых параметров находятся методом наименьших квадратов, т.е. минимизацией выражения (случай некоррелированных данных):

$$F(p_i) = \sum_D w(D) \cdot (y(D) - f(D, p_i))^2 \quad (7)$$

в пространстве параметров p_i при наличии ограничений

$$p_{il} \leq p_i \leq p_{iu} \quad (8)$$

и (возможных) связей

$$p_j = a_{ji} \cdot p_i + d_{ji}, \quad j > i. \quad (9)$$

Для нахождения минимума (7) используется полноматричный демпфированный процесс Гаусса — Ньютона с возможностью применения методики обобщенных весов для придания процессу робастности^{/3/}. Ограничения (8) учитываются проектированием векторов параметров, получаемых в итерациях, на неравенства (8). Связи (9) вводятся пересчетом i -х строки и столбца МНК-матрицы и вычеркиванием j -х строки и столбца. Равенство

$$P_{il} = P_i = P_{iu}$$

означает фиксацию i -го параметра. Вычеркивая строки и столбцы в МНК-матрице, соответствующие фиксированным и зависимым параметрам, можно очень эффективно сжать МНК-матрицу до небольших размеров. Такая компрессия МНК-матрицы применяется в алгоритме минимизации программы MRIA и она играет большую роль в расширении подгоночных возможностей программы. Полное параметрическое описание многофазного спектра может содержать до 1000 и более параметров, из которых независимыми варьируемыми являются лишь десятки. Благодаря компрессии в память персонального компьютера оказывается возможным поместить, например, матрицу 1000 · 1000, не помещающуюся там непосредственно.

Благодаря принятым мерам обеспечивается большая скорость работы процесса минимизации — обычно для параметров, умеренно взаимно-коррелированных, требуется не более 5-7 итераций, практически независимо от числа этих параметров.

В программе реализован алгоритм использования обобщенных весов^{/3/}, благодаря которому можно строить робастные оценки параметров в случае, когда данные содержат грубые ошибки.

Перейдем теперь к случаю коррелированных данных. Пусть стационарные данные $Y(j)$, $j = 1, 2, \dots, m$ взаимно-коррелированы с симметричной матрицей корреляций M_{ij} . Пусть далее этим данным соответствует модель $F(j, P)$, нелинейно зависящая от n -мерного вектора параметров P .

Тогда нелинейную МНК-оценку параметров P мы получаем из условия минимума функционала:

$$H = (Y - F(P))' \cdot M^{-1} \cdot (Y - F(P)). \quad (10)$$

Линеаризованное уравнение для определения минимума имеет вид

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial H}{\partial P_i} = A_{ik} \cdot dp_k - G_i = 0, \quad (11)$$

где $\partial P_k = k$ -я компонента вектора $P - P_0$, P_0 — априорная оценка P .

$$A_{lk} = D'_{il} \cdot M_{ij}^{-1} \cdot D_{jk}$$

$$D_{ik} = \frac{dF(i, P)}{dp_k}$$

$$G_k = D'_{ik} \cdot M_{ij}^{-1} \cdot (Y_j - F(j, P_0))$$

Решение этого уравнения связано со следующими трудностями.

1) При i, j порядка нескольких тысяч матрицу M трудно разместить в памяти ЭВМ, а тем более обработать; оптимизация процедуры решения уравнения (11) по скорости требует хранения очень многих промежуточных результатов, что еще более усиливает потребность в памяти.

2) Симуляция искусственных распределений для тестирования алгоритма анализа данных требует вычисления квадратного корня из заданной (положительно определенной) матрицы M .

Таким образом, возникают проблемы обращения большой матрицы и извлечения квадратного корня из нее в условиях ограниченного ресурса памяти на ЭВМ.

Были постулированы следующие предположения о матрице M .

1) Корреляции равномерно для всех строк быстро затухают вдоль столбцов по абсолютной величине, так что матрицу M можно считать ленточной.

2) Мы можем представить матрицу M следующим образом:

$$M = I + (M - I) = I + B,$$

где матрица B равна нулю на диагонали и элементам M вне ее. Будем считать, что норма B достаточно мала, так что имеет место следующее:

$$M^{-1} \approx I - B; \quad (12)$$

$$\sqrt{M} \approx I + B/2; \quad (13)$$

Выражение (12) мы можем использовать в качестве матрицы весов, а выражение (13) нам поможет сформировать из вектора случайных нормально-распределенных независимых величин X вектор Y .

$$Y = (I + B/2) \cdot X,$$

который будет нормально-распределенным с матрицей ковариаций, равной приближенно M .

5. ЯЗЫК ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ С ПРОГРАММОЙ

Краткое описание алгоритмов программы и инструкция оформлены в специальный модуль M.HLP, входящий в пакет в качестве составной части.

MRIA функционирует следующим образом.

Входные данные представляют собой последовательность команд, сопровождаемых числовой или/и текстовой информацией. Каждая команда есть указание супервизору пакета совершить какое-либо элементарное действие, на которые разбит весь суммарный алгоритм MRIA. Последовательность команд не фиксирована и определяется лишь логикой решения основной задачи. Эти входные данные могут быть подготовлены с помощью любого текстового редактора или с помощью специальной программы-посредника MHELP. Аппарат команд позволяет пользователю очень широко вмешиваться в управление алгоритмом. Одновременно очень последовательно претворена концепция умолчания, в силу чего все управляющие данные имеют начальные значения, определяющие некоторый типовой характер работы алгоритма в автоматическом режиме. Поэтому объем входного потока может варьироваться в очень широких пределах: от минимального до очень большого.

Команда синтаксически представляет собой развернутую фразу, поясняющую смысл команды и снабженную подробным комментарием, и лишь ключевые слова данной команды должны начинаться с заглавной буквы; комментарий имеет признак — символ * в первой позиции строки.

Таким образом, команда

Set-up the Mode for Reaction on Inconvergency

* M (M = 0: no reaction M = 1: repeat the fitting, damping enforced)

* (M = 2: dialog)

1

предписывает установить следующий режим реакции на несходимость процесса минимизации — повторить минимизацию, усилив демпфирование. Кратчайшая форма записи этой же команды

SMRI

1

Все команды описаны в модуле M.HLP.

Выходные данные представляют собой последовательность промежуточных или окончательных результатов работы алгоритма. Объем их тоже регулируется пользователем.

MRIA содержит специальный модуль симуляции данных соответствующего типа при заданных характеристиках из того же диапазона, что и реальные данные. Симулированные данные могут стандартным образом анализироваться как и реальные данные, и давать таким образом представление как о точности анализа, так и эффективности стратегии пользователя по использованию программы.

Для помощи пользователю при построении файла входных данных создана на языке TurboPascal-5 специальная программа-посредник MHELP, которая в режиме диалога строит этот файл, запрашивая информацию у физика в понятных ему терминах и освобождая его, таким образом, от необходимости знать полный синтаксис файла входных данных.

Для графической интерпретации результатов подгонки служит программа MGRAPH, написанная на языке TurboPascal-5. Она строит совмещенные цветные графики исходного спектра, фитированного, и их разности и снабжает их необходимой комментирующей информацией (надписи, указатели пиков и т.д.). Это изображение имеет формат, используемый обычно в кристаллографических публикациях, и с экрана может быть командой Print Screen перенесено на бумагу принтера или плоттера.

В пакет MRIA входит также текстовый файл SPACE.ASC, содержащий информацию о всех 230 группах преобразований симметрии.

6. ХАРАКТЕРИСТИКИ ПРОГРАММЫ MRIA

Программы основного пакета MRIA написаны на стандартном множестве языка Fortran-77 и могут транслироваться компилятором RMFORTH или MSFORTH77. Скорости работы RM-версии и MS-версии приблизительно одинаковы.

Если в модуле INIT.FOR заменить вызов подпрограммы выдачи времени GETTIM на вызов соответствующей подпрограммы выдачи времени в трансляторе NDP (для 32-разрядных PC), то тогда можно получить и версию программы для 32-разрядных PC, работающую существенно быстрее, чем в 16-битном режиме.

Итак, пакет для персонального компьютера типа IBM PC AT включает в себя следующие программы:

- 1) MRIA — основной модуль;
- 2) MHELP — модуль подготовки входных данных;
- 3) MGRAPH — модуль высвечивания результатов подгонки на экране в графическом виде;
- 4) SPACE.ASC — модуль, содержащий в текстовом виде описание всех 230 групп симметрии;

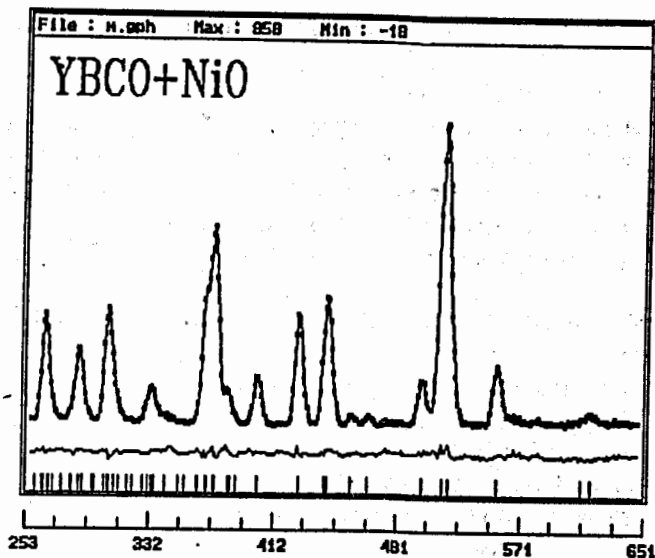


Рис. 1. Иллюстрация подгонки прямого порошкового нейтронно-дифракционного спектра.

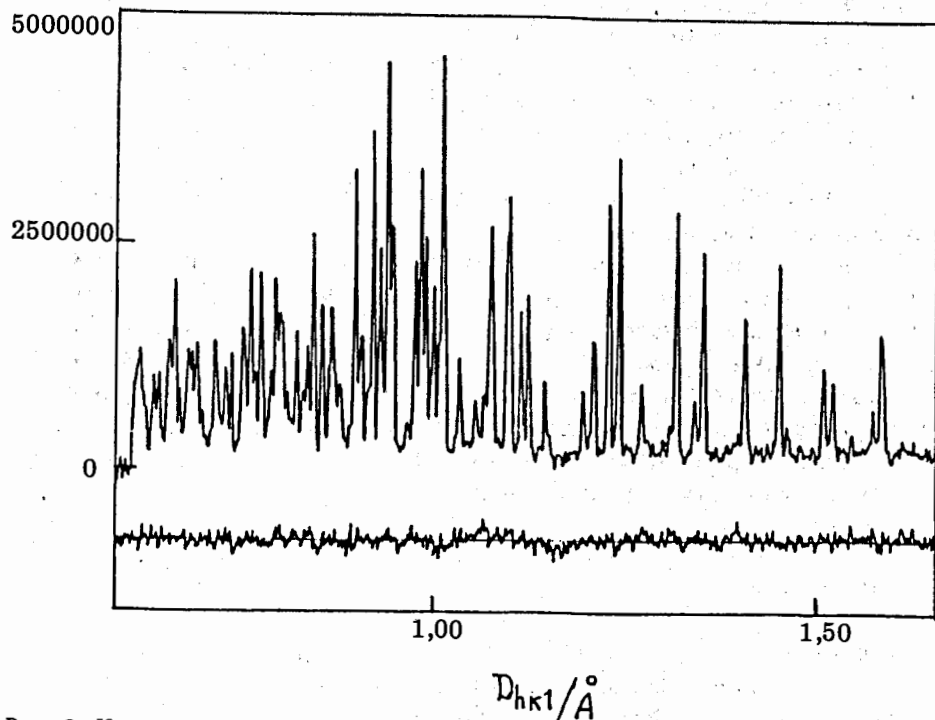


Рис. 2. Иллюстрация подгонки порошкового нейтронно-дифракционного спектра (Фурье) формата самария.

5) M.HI.P — модуль, содержащий краткое описание программы MRIA;

6) M.BAT, M.LNK, Mi.DAT — вспомогательные файлы для копирования, линкирования и тестовые примеры входных данных.

Программа предъявляет следующие требования к ЭВМ и данным:

1) занимаемая оперативная память не более 520 Кбайт;

2) необходим копроцессор 80287 или выше;

3) модуль подготовки входных данных MHELP требует 101 клавишную доску;

4) графический модуль MGRAPH требует цветной монитор и EGA-адаптер;

5) обрабатываются до 4 спектров длиной до 1024 канала или 1 спектр в 4096 каналов;

6) не более 4 фаз одновременно;

7) каждая фаза обрабатываемого участка спектра должна содержать не более 500 рефлексов (или, если 1 фаза, не более 2000) и не более 100 независимых атомов.

Время работы программы сильно зависит от числа каналов спектра, от числа рефлексов и числа атомов, от числа требуемых итераций и объема выдач в выходные файлы. Тестовый пример (файл M2.DAT), в котором обрабатывался 1 спектр, содержащий 2 фазы, 240 каналов, 75 рефлексов и 15 атомов для обеих фаз, с помощью 6 итераций и делался полный объем выдач, потребовал 10 мин общего времени на PC ARC-286 (12 МГц).

На ARC-386 (16 МГц) этот же пример требует 2-3 минуты, а NDP-версия работает лишь 1-2 минуты.

Расширенный на большие размеры данных вариант программы MRIA работает также и на ЭВМ MicroVax (VMS 3.7). Отличия от описанной версии состоят в способе подготовки входных данных. Файлы входных данных PARA.DAT и STRUC.DAT подготавливаются с помощью фортранных программ ALPHA и AT04. Либо, подготовив входной файл M.DAT описанного типа на PC, можно передать его на MicroVax и работать в описанном режиме.

Работа метода иллюстрируется рис. 1, 2.

ЛИТЕРАТУРА

1. Von Dreele R.B., Jorgensen J.D., Windsor C.G. — J. Appl. Cryst., 1982, 15, p.581.
2. Niismaeki P., Poeyry H., Tiita A. — J. Appl. Cryst., 1988, 21, p.349.
3. Zlokazov V.B. — Comp. Phys. Commun., 1989, v.54, p.371.
4. Балагуров А.М., Бескровный А.И., Попа Н. — Препринт ОИЯИ Р3-84-765, Дубна, 1984.

5. Трунов В.А. и др. — Препринт ЛИЯФ, №1277, Л., 1987.

6. Александров Ю.А., Шарапов Э.И., Чер Л. — Дифракционные методы в нейтронной физике. М.: Энергоиздат, 1981.

Рукопись поступила в издательский отдел
7 мая 1990 года.

Злоказов В.Б., Чернышев В.В.

P10-90-315

MRIA – программный комплекс для полнопрофильного анализа порошковых нейтронно-дифракционных времяпролетных (прямых и фурье-) спектров

Описывается универсальный программный комплекс MRIA для полнопрофильного анализа порошковых нейтронно-дифракционных времяпролетных прямых и фурье-спектров. Минимальная конфигурация программы MRIA, рассчитанная на обработку до 4 спектров, 4 фаз, 500 индексов Миллера каждой фазы и 100 независимых атомов, может работать на PC типа IBM AT. Расширенный вариант программы, ориентированный на анализ данных большего размера, работает на ЭВМ типа MicroVax. Сервисная часть MRIA, обеспечивающая необходимый комфорт взаимодействия пользователя с программой на PC, написан на языке TurboPascal 5.0. Программы основного пакета MRIA написаны на стандартном множестве языка Fortran-77 и могут транслироваться компиляторами RMFORT или MSFORT77, а на 32-разрядной PC компилятором NDP.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1990

Перевод авторов

Zlokazov V.B., Chernyshov V.V.

P10-90-315

MRIA — a Program for Full Profile Analysis of Powder Neutron-Diffraction Time-of-Flight (Direct and Fourier) Spectra

A universal program MRIA for the full profile analysis of powder neutron-diffraction time-of-flight direct and Fourier spectra is described. The minimum configuration of MRIA, oriented to the analysis of up to 4 spectra, 4 phases, 500 Miller indexes for every phase, and 100 independent atoms, can run on a PC IBM AT or any compatible one. The extended variant of the program, oriented to the analysis of data of larger size, runs on the MicroVax computer. The part of MRIA, providing for necessary service functions for a user of PC, is written in TurboPascal 5.0. The basic programs of MRIA are written in the standard Fortran-77 and can be compiled by RMFORT or MSFORT77, and by NDP compiler on a 32 bit PC.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1990

05-20-4

201