

C-655

ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

УДК 621.039.5:541.15+681.3.06

10-85-872

СОСНОВСКАЯ
Елена Владиславовна

ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ДЛЯ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ
О ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИХ ПРОЦЕССАХ
В ЯДЕРНЫХ ЭНЕРГЕТИЧЕСКИХ РЕАКТОРАХ

Специальность: 05.13.11 - математическое и программное
обеспечение вычислительных машин и систем

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1985

Работа выполнена в Институте атомной энергии им. И.В.Курчатова,
Москва.

Научные руководители:

доктор химических наук
профессор

МОСКВИН
Леонид Николаевич

доктор технических наук
старший научный сотрудник

ЦУПКО-СИТНИКОВ
Всеволод Михайлович

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук
профессор

БОЛКОВ
Николай Григорьевич

доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник

ОСТАНЕВИЧ
Юрий Иечиславович

Ведущее научно-исследовательское учреждение -
Радиовый институт им. В.Г.Хлопина, Ленинград.

Защита состоится "___" _____ 198 г. в ___ час. ___ мин. на
заседании Специализированного совета Д-047.01.04 при Лаборатории вы-
числительной техники и автоматизации ОИЯИ, г. Дубна Московской обл.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "___" _____ 198 г.

Ученый секретарь Специализированного совета
кандидат физико-математических наук

Иванченко З.М.Иванченко

I. ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность проблемы. Ускоренные темпы развития атомной энерге-
тики в нашей стране потребовали углубленного исследования физико-
химических процессов в ядерных энергетических реакторах. При решении
этих задач широко применяются спектрометрические методы исследования,
в частности, гамма-спектрометрия, мессбауэровская спектроскопия и оп-
тическая спектрофотометрия в видимой области. Сложный состав радиоак-
тивных изотопов в контролируемых зонах, многообразие оксидных соеди-
нений железа в отложениях конструкционных материалов реактора и нали-
чие примесей, растворенных в теплоносителе, приводят к получению
больших объемов сложных и разных по своей физической природе спектров.
Сбор и обработка этих спектров возможны только на базе измерительно-
вычислительной системы при наличии развитого программного обеспечения,
способного оперативно определять достоверные физические параметры ис-
следуемых явлений с целью обеспечения безопасности эксплуатации АЭС.

Цель работы. Создание единого программного обеспечения для обра-
ботки гамма-спектров, спектров Мессбауэра (или ЯГР-спектров) и опти-
ческих спектров поглощения в соответствии с требованиями современного
уровня прикладных исследований на ядерных энергетических реакторах.

Научная новизна работы. Впервые в практике эксплуатации АЭС в
СССР создано развитое программное обеспечение для обработки разнород-
ной спектрометрической информации, базирующееся на современных мате-
матических методах анализе экспериментальных данных. Обоснована воз-
можность обработки разнородной спектрометрической информации на еди-
ной методической основе. Предложен и разработан новый подход к обра-
ботке сложных ЯГР-спектров, заключающийся в привлечении априорной фи-
зической информации на этапе определения начальных приближений векто-
ра искомых параметров модельной функции ЯГР-спектра. Впервые предло-
жена и апробирована модель для аппроксимации оптических спектров по-
глощения с использованием функции Гаусса для нелинейного фона, при-
сутствующего в оптических спектрах поглощения продуктов гидролиза же-
леза.

Практическая ценность. Создано программное обеспечение для обра-
ботки гамма-спектров, ЯГР-спектров и оптических спектров поглощения,
с помощью которого обеспечивается оперативная и достоверная обработка
спектрометрической информации, получаемой при проведении исследований
на ядерных энергетических реакторах. Программы обработки используются

при исследовании поведения радионуклидов в различных технологических средах с целью оценки герметичности оболочек тепловыделяющих элементов (ТВЭлов) активной зоны реактора, при обосновании метода оперативного контроля радиоактивных аэрозолей по реперным изотопам в выбросах, а также при изучении модели гидролитического образования продуктов коррозии в теплоносителе.

Автор защищает:

1. Проблемно-ориентированную библиотеку программ для обработки разнородной спектрометрической информации о физико-химических процессах на ядерных энергетических реакторах.

2. Новый подход к обработке сложных ЯГР-спектров с использованием априорной физической информации на этапе определения начальных приближений параметров модельной функции.

3. Выбор модельной функции для описания оптических спектров поглощения продуктов гидролиза железа при наличии фона, нелинейно зависящего от длины волны поглощаемого света.

4. Обоснование единого подхода к составлению алгоритма обработки гамма-спектров, ЯГР-спектров и оптических спектров поглощения.

Апробация работы и публикации. По теме диссертации опубликовано 5 работ. Основные результаты докладывались на Международном совещании по ядерной спектроскопии в Алма-Ате в 1978 г., на III Всесоюзном совещании "Термодинамика и структура гидроксокомплексов" в Душанбе (1980 г.), на постоянно действующем тематическом семинаре ("Резонансные методы в физике") в Ленинградском доме научной пропаганды (1982 г.), на Всесоюзной научно-технической конференции "Проблемы водно-химических режимов технологических контуров АЭС" (Киев, 1983), на заседании рабочей группы по координации работ в области обработки спектрометрической информации при секции математического обеспечения Совета по автоматизации научных исследований при Президиуме АН СССР (г. Дубна, 1985 г.).

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, пяти глав и заключения. Работа изложена на 163 страницах, включая 11 рисунков, 9 таблиц, 131 библиографическую ссылку и приложение.

2. СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

2.1. Обзор литературы. (Глава I). Обзор литературы состоит из трех частей, каждая из которых посвящена анализу имеющихся программ и используемых при этом методов обработки гамма-спектров, ЯГР-спектров и оптических спектров поглощения соответственно.

Анализ рассмотренных программ показал не только различие в уровнях существующей автоматизации исследуемых спектров, но и отсутствие программ обработки для оптических спектров поглощения. В результате анализа сделан вывод о том, что, учитывая реальные возможности персонала, обслуживающего АЭС, и характер проводимых на них прикладных исследований, связанных с массовой обработкой разнородной спектрометрической информации, наиболее удобным было бы унифицированное программное обеспечение, которое позволило бы осуществлять "сквозную" обработку спектров вплоть до их физической интерпретации без вмешательства пользователя в сами программы.

2.2. Общая характеристика системы для сбора, накопления и обработки спектрометрической информации (Глава IV)

Для сбора и обработки большого потока сложных и разных по своей физической природе спектров, получаемых при проведении физико-химических исследований на ядерных энергетических реакторах, разработана и внедрена измерительно-вычислительная система, структурная схема которой представлена на рис. I.

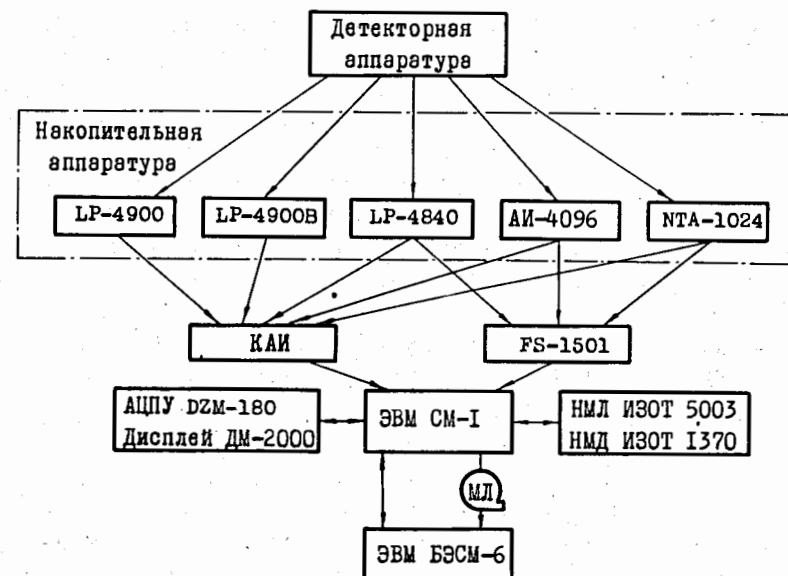


Рис. I. Структурная схема системы.

Базовой ЭВМ для сбора информации является ЭВМ СМ-1, вычислительной - БЭСМ-6. Ввод спектрометрической информации из анализаторов различного типа в ЭВМ СМ-1 осуществляется через специально разработанные контроллеры для связи с анализаторами (КАИ) или через стандартное устройство ввода с перфолент (FS-1501). Последний вариант используется для значительной части информации, которая измеряется на различных объектах атомной энергетики, и на обработку в измерительный центр поступает на перфолентах.

Для обработки накопленной спектрометрической информации автором создана проблемно-ориентированная библиотека программ, написанных на языке Фортран для ЭВМ БЭСМ-6. Библиотека содержит порядка 90 подпрограмм, из которых сформировано 10 программ для обработки гамма-спектров (под общим названием SIMPAC), две программы для обработки ЯГР-спектров (MESSA1 и MESSA2) и две программы для обработки оптических спектров поглощения (FOTOM1 и FOTOM2). В библиотеку включена также программа ARFA для интерпретации результатов обработки гамма-спектров.

Функциональную замкнутость проблемно-ориентированной библиотеки программ в рамках системы "Спектр" обеспечивают программы транспортировки данных, которые осуществляют ввод спектрометрической информации по различным каналам, формирование ее (одновременно со служебной информацией об условиях проведения эксперимента) в виде файлов на МЛ СМ-1, а также доступ к записанной информации (экспериментальной и априорной) из программ обработки на ЭВМ БЭСМ-6. Программы транспортировки данных выполнены на языке MADLEN в соответствии с требованиями, сформулированными автором диссертации.

В рамках проблемно-ориентированной библиотеки программ автором разработан ряд методов и алгоритмов, реализованных в программах с целью достижения необходимого качества обработки и уменьшения затрат при создании программного обеспечения.

2.3. Обоснование общего методического подхода к обработке разнородной спектрометрической информации (Глава II)

При обработке гамма-спектров, ЯГР-спектров и оптических спектров поглощения нас интересуют количественные характеристики таких явлений, как разрядка возбужденных ядер, резонансное поглощение гамма-квантов ядрами и возбуждение электронных оболочек атомов растворенного вещества под влиянием света. Нужные характеристики этих явлений недоступны прямому измерению, они определяются на основе своих косвенных проявлений в виде экспериментальных спектров излучений. Физическая интерпретация экспериментальных спектров составляет обратную задачу, решение которой обусловлено моделированием исследуемого объекта и вы-

бором математических методов анализа, устойчивых по отношению к ошибкам наблюдения. Следовательно, алгоритм обработки любого вида этих спектров сводится к трем основным этапам:

- построению модельных функций аппаратурных спектров;
- определению параметров модельных функций путем их подгонки к экспериментальным данным;
- вычислению физических характеристик спектров по найденным параметрам модельных функций и априорной калибровочной информации.

Идеология структуры общего алгоритма обработки гамма-спектров, ЯГР-спектров и оптических спектров поглощения схематично представлена на рис. 2.

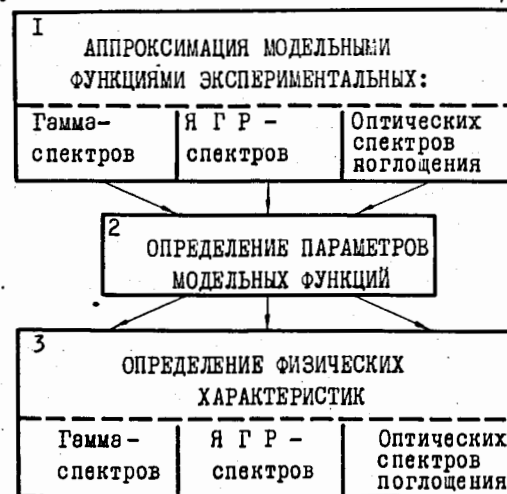


Рис. 2. Основные этапы общего алгоритма обработки разнородной спектрометрической информации

Физические особенности спектров учитываются на первом и третьем этапах обработки. Для решения второго этапа выбран устойчивый математический метод, позволяющий определять параметры нелинейных модельных функций, описывающих разнородные спектры.

Модельные функции спектра или участка спектра выбраны таким образом, чтобы:

- 1) аналитическое выражение модельной функции не менялось в зависимости от структуры спектра;

2) между главными параметрами модели и искомыми физическими характеристиками существовала взаимно-однозначная связь;

3) количество дополнительных параметров формы в модельной функции не усложняло решения и без того сложной нелинейной задачи.

Конкретно для каждого вида спектра выбраны модельные функции, приведенные ниже.

1. Для информативного участка гамма-спектров модельная функция выбрана в виде:

$$f(\vec{p}, x_i) = \sum_{j=1}^k \frac{C_j}{\sqrt{2\pi}} \exp\left\{-\frac{(x_i - x_j)^2}{2\sigma_j^2}\right\} + \sum_{m=0}^{\ell} b_m x_i^m, \quad (1)$$

$j=1, \dots, k; \quad i=1, \dots, n; \quad m=0, \dots, \ell,$

где k - количество пиков на участке, n - количество каналов анализатора на участке, x_i - текущий номер канала анализатора, C_j - площадь j -пика, x_j - положение максимума j -пика в каналах, σ_j^2 - дисперсия, m - степень полинома, аппроксимирующего фон, b_m - коэффициенты полинома фона;

\vec{p} - вектор неизвестных параметров, число которых на участке $\nu = 2k + \ell + 2$, $\nu < n$. В развернутом виде:

$$\vec{p} = p(x_1, C_1, x_2, C_2, \dots, x_k, C_k, \sigma, b_0, b_1, \dots, b_{\ell}).$$

2. Модельная функция ЯГР-спектра имеет вид:

$$f(\vec{p}, x_i) = A_0 - \sum_{j=1}^k A_j \frac{\Gamma_j^2}{\Gamma_j^2 + 4(x_i - x_j)^2}, \quad (2)$$

$i=1, \dots, N; \quad j=1, \dots, k,$

где N - число каналов в ЯГР-спектре, k - число линий поглощения в спектре, A_0 - число импульсов в канале при отсутствии резонансного поглощения (уровень фона), x_i - текущий номер канала анализатора, x_j - положение j -линии поглощения в аппаратурном спектре в каналах, A_j - амплитуда j -линии поглощения, Γ_j - полуширина линии поглощения в каналах, \vec{p} - вектор неизвестных параметров, количество которых $\nu = 3k + 1$, $\nu < N$,

$$\vec{p} = p(x_1, A_1, \Gamma_1, x_2, A_2, \Gamma_2, \dots, x_k, A_k, \Gamma_k, A_0).$$

3. Модельная функция оптического спектра поглощения имеет вид:

$$f(\vec{p}, \lambda_i) = \sum_{j=1}^k D_j \exp\left\{-\frac{(\lambda_i - \lambda_j)^2}{2\sigma_j^2}\right\} + f_{\phi}(\lambda_i), \quad (3)$$

$j=1, 2, \dots, k; \quad i=1, \dots, N,$

где k - количество пиков в спектре, λ_j - положение максимума j -линии поглощения (в нем или каналах), D_j - амплитуда j -линии поглощения, отвечающая максимальному значению оптической плотности данного вещества, σ_j - полуширина j -линии поглощения в каналах, N - количество каналов выходного тракта спектрофотометра, причем каждому номеру канала в соответствие поставлена определенная длина волны измеряемого спектра, $f_{\phi}(\lambda_i)$ - функция фона.

Определение неизвестных параметров модельных функций (1), (2) и (3) на основе экспериментальных данных связано с решением переопределенных систем нелинейных уравнений, правые части которых подвержены статистическому разбросу. Для получения приближенных решений этих систем уравнений в нелинейном методе наименьших квадратов нами используется метод Левенберга-Маркардта^х). С целью повышения устойчивости этого метода при решении спектрометрической задачи, физические особенности которой (наличие в спектре близких по энергии и резко отличающихся по интенсивности линий) приводят к его расходимости, нами применена модификация итерационного процесса Левенберга-Маркардта, отличающаяся от приведенного в литературе наличием матрицы масштабирования и выбором управляющих параметров:

$$P_0; P_{n+1} = P_n - \beta_n D_n [D_n F'(\vec{p}_n) V F'(\vec{p}_n) D_n + \alpha_n I]^{-1} D_n F'(\vec{p}_n) V F(\vec{p}_n), \quad (4)$$

где \vec{p} - вектор неизвестных параметров соответствующих модельных функций, $F(\vec{p}) = [f(x_i, \vec{p}) - f_{\text{эксп}}(x_i)]$, $f(x, \vec{p})$ - выбранная модельная функция исследуемого спектра, $f_{\text{эксп}}(x_i)$ - экспериментальные точки, $F'(\vec{p})$ - якобиан $F(\vec{p})$ относительно \vec{p} , T - знак транспонирования: V - матрица весов, обусловленных ошибками измерения, α_n и β_n - управляющие параметры итерационного процесса, D_n - матрица масштабирования, n - номер итерации. Матрица D_n выбрана нами в виде:

$$D_{n,jl} = \begin{cases} 0, & j \neq l; \\ \frac{1}{\left[\sum_k \frac{\partial F_k}{\partial x_j} V_k \frac{\partial F_k}{\partial x_l} \right]^{1/2}}, & j = l. \end{cases} \quad (5)$$

х) 1. Levenberg K. A method for solution of certain non-linear problems in least squares Quart. Appl. Math. 2 (1944), 164.

2. Marquardt D.M. An algorithm for Least-Squares estimations of non-linear parameters. SIAM J. Appl. Math. v. 11, N 2, 431, 1963.

В диссертации показано, что выбор D_i в виде (5) позволяет свести матрицу, подлежащую обращению, к виду, удобному для обращения, так как диагональные члены матрицы $D_n F'(\beta_n) V F'(\beta_n) D_n$ принимают единичные значения, внедиагональные имеют значения меньше единицы.

В результате вычислительного эксперимента на ряде пробных задач, которые представляют собой предельно сложные участки гамма-спектров, были определены оптимальные выражения для α_n и β_n :

$$\alpha_n = \frac{1}{2} \left[\frac{1}{(1+100/\alpha_n^2)} + \alpha_{n-1} \right], \quad (n=1, 2, \dots), \quad (6)$$

где $\alpha_n = \sum_{i,j} |(z_{n-1}, t_{ij})| / \sqrt{\alpha_0 = 10^{-2}}, z_n = D_n F'(\beta_n) V F'(\beta_n) D_n + \alpha_n I.$

При таком выборе α_n лежит в пределах $(10^{-2}+1)$ и матрица практически всегда обращается. Параметр β_n обеспечивает нелокальную сходимость итерационного процесса (4), если:

$$\beta_n = 10^{-3} + \frac{1-10^{-3}}{6} n, \quad n \leq 6; \quad \beta_n = 1, \quad n \geq 6. \quad (7)$$

При $\alpha_n = 0$; $\beta_n = 1$ используемый нами итерационный процесс (4) переходит в метод Гаусса-Ньютона и, следовательно, обладает высокой скоростью сходимости и возможностью определить статистически обоснованные погрешности параметров с помощью ковариационной матрицы $A = [F'(\beta) V F'(\beta)]^{-1}$. Предложенный единый подход к обработке исследуемых нами спектров позволил унифицировать алгоритмы обработки спектрометрической информации, обеспечил экономичность разработки программного обеспечения, способствовал развитию блочной структуры комплекса программ, которая предоставляет возможность многовариантной обработки спектров без вмешательства пользователя в сами программы. В каждом блоке реализован один алгоритм или набор алгоритмов, способных решить определенную частную задачу обработки спектрометрической информации. В свою очередь каждый алгоритм реализован в виде одной подпрограммы, либо набора подпрограмм, среди которых имеется главная, организующая вызов остальных. Конкретная подпрограмма представляет собой одно из возможных сочетаний имеющихся алгоритмов, выбор которых определяется характером имеющейся предварительной и основной информации и конкретными требованиями эксперимента.

Результатами обработки являются физические характеристики исследуемых явлений. Для гамма-спектров - это энергии и интенсивности внутриядерных переходов, а также активности изучаемых радионуклидов. Для ЯГР-спектров - изомерный сдвиг спектральных линий, их квадрупольное

расщепление и напряженность эффективного магнитного поля на ядре. Для оптических спектров поглощения вычисляются концентрации растворенных веществ, если известны их молярные коэффициенты поглощения.

Блочная структура программного обеспечения способствует его развитию, так как добавление какого-либо нового алгоритма в один из его основных блоков приводит к появлению нового набора конкретных комбинаций подпрограмм. Для пользователей, не имеющих специальной подготовки по программированию, к которым относится и технический персонал, обслуживающий АЭС, важно, что при использовании программы созданной библиотеки нет необходимости вмешиваться в сами программы. Имя нужной программы выбирается с помощью инструкции и в соответствии с требованиями и возможностями эксперимента.

2.4. Комплекс программ SIMPAC для обработки гамма-спектров при решении прикладных задач атомной энергетики (Глава III)

Комплекс программ SIMPAC был разработан для удовлетворения разнообразных экспериментов, проводимых на атомных энергетических установках (АЭУ) и связанных как с обработкой серии независимых участков различных гамма-спектров в определенном энергетическом диапазоне, так и серии гамма-спектров неразделенных проб теплоносителя (т.е. содержащих сотни пиков полного поглощения, в том числе десятки неразрешенных). Программы отличаются между собой определенными алгоритмами для решения частных задач, составляющих полную задачу обработки гамма-спектров. Общая схема преобразования гамма-спектрометрической информации на основе метода анализа пиков I/I_0 , реализованного в комплексе программ SIMPAC, представлена на рис. 3.

Схема демонстрирует следующие возможности разработанного комплекса: выделение частных задач в общей задаче обработки гамма-спектров (процедуры I+IO); различную реализацию определенных частных задач обработки (процедуры I+3 показывают, что ввод исходной информации может производиться в различном объеме и при различном соотношении основной и априорной информации). Обработка гамма-спектров программами комплекса SIMPAC завершается процедурой расчета активности изотопов (процедура IO). Для ее осуществления предусмотрен ввод дополнительной априорной информации в виде каталога, содержащего физические свойства изотопов, и служебной информации, отражающей условия проведения экспериментов.

Названия основных программ комплекса, предназначенных для обработки отдельных участков гамма-спектров, отдельных гамма-спектров, серии независимых спектров или серии спектров, относящихся к одному и тому же радиоактивному источнику, представлены в таблице I.

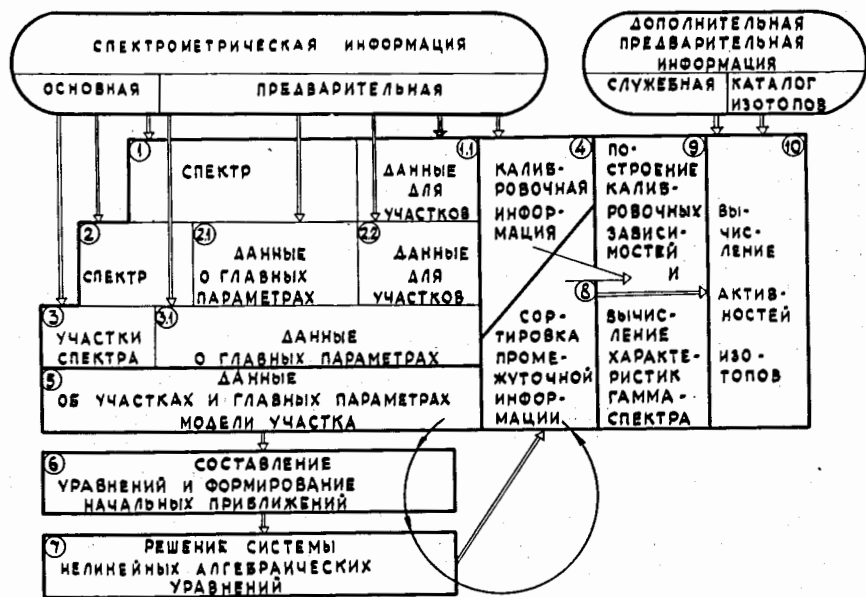


Рис. 3. Общая схема преобразования гамма-спектрометрической информации в программах комплекса SIMPAC

Таблица I

Название основных программ комплекса SIMPAC

Ввод информации	Названия программ	Начальные приближения	Результаты обработки
Ввод независимых участков гамма-спектра с перфокарт или с МЛ	SIMP1A	x, c, δ	Параметры модельной функции
	SIMP1B	x, c, δ	
	SIMP1C	$\{x, \delta\}_n$	
Ввод одного или нескольких γ -спектров с МЛ	SIMP2P	Позиции пиков	Физические характеристики гамма-спектра, активности изотопов
	SIMP2E	Энергии пиков	
Ввод серии γ -спектров с МЛ	SIMP3P	Позиции пиков	Периоды подураспада изотопов
	SIMP3E	Энергии пиков	
	SIMPAC	Поиск пиков осуществляется автоматически	
	SIMP5C	Поиск пиков осуществляется автоматически	

Кроме перечисленных в таблице I, разработана программа ANGA, которая позволяет прогнозировать характер поведения процессов накопления активности контролируемых изотопов при проведении определенных режимов работы реактора и при различных предположениях относительно механизмов выхода продуктов деления из ТВЭлов активной зоны реактора.

Программы комплекса SIMPAC обеспечивают оперативное и достоверное определение активности широкого круга радионуклидов при изучении механизма их поведения в теплоносителе реактора, при оптимизации контроля герметичности оболочек ТВЭлов и разработке средств контроля аэрозольных выбросов в окружающую среду.

2.5. Обработка ЯГР-спектров (Глава П,Ш)

Спектры ЯГР, получаемые в ходе исследований на АЭС, чаще всего представляют собой суперпозиции спектров 3-4 оксидных соединений железа и содержат порядка 18-24 линий поглощения (см. рис. 4). Для об-

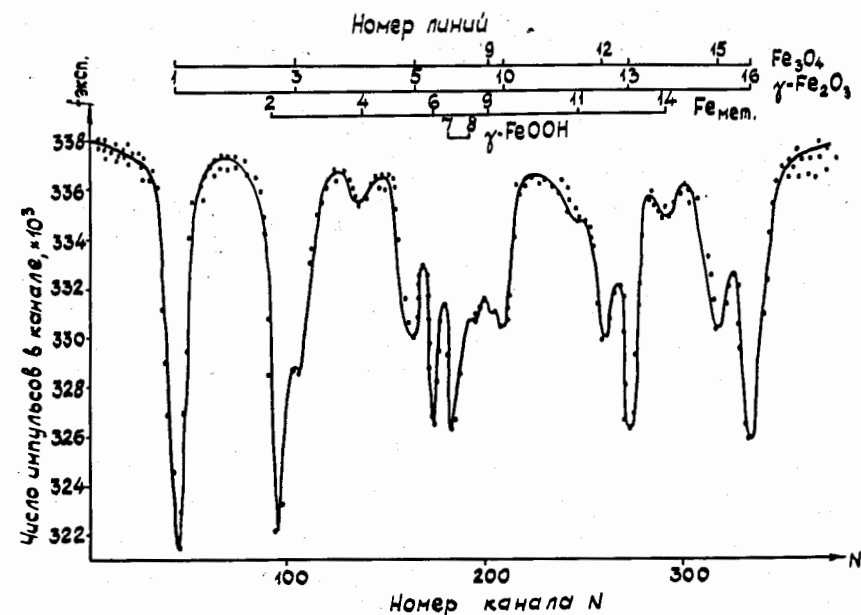


Рис. 4. Вид ЯГР-спектра коррозионных отложений реакторного оборудования

работки многокомпонентных спектров разработана программа MESSA^{12/} с двумя модификациями MESSA1 и MESSA2^{13/}, которые отличаются между со-

бой способом задания начальных приближений искоемых параметров. В программе MESSA1 задаются начальные приближения для всех искоемых параметров модельной функции. Она используется при обработке спектров неизвестных продуктов коррозии. В случае, когда качественный состав продуктов коррозии известен, применяется программа MESSA2, где предусмотрено вычисление начальных приближений на основе априорной физической информации, в качестве которой служат некоторые практические следствия из ЯГР-спектроскопии и данные об ожидаемом качественном составе продуктов деления.

Использование априорной физической информации на этапе вычисления начальных приближений является новым приемом в обработке ЯГР-спектров. С его помощью удается значительно уменьшить количество и повысить качество задаваемых начальных приближений, что улучшает сходимость применяемого математического метода. Кроме того, не нужно менять математическую модель ЯГР-спектра при изменении его структуры, что необходимо делать в других программах и что препятствует их использованию персоналом без специальной подготовки.

С помощью программы MESSA удалось повысить информативность ЯГР-спектроскопии, применяемой для изучения продуктов коррозии. Об этом свидетельствуют, например, сравнительные результаты для ЯГР-спектра, представленного на рис. 4. При обработке данного спектра, содержащего 16 линий поглощения, программе ОИЯИ^{х)} разрешает только 10 линий (пики 1, 2, 5, 7, 8, 10, 12, 13, 15, 16), несмотря на наложение ограничений на искоемые параметры, в то время как программа MESSA уверенно разрешает в спектре все 16 линий и тем самым дает возможность определить все химические соединения, имеющиеся в продуктах коррозии.

2.6. Автоматизация обработки оптических спектров поглощения (Главы II, III)

Трудность интерпретации спектров поглощения продуктов гидролиза трехвалентного железа (железа III) заключается в том, что возбуждение d-уровней электронных оболочек под действием света сопровождается явлением переноса заряда $o^{2-} \rightarrow Fe^{3+}$, которое создает в спектре поглощения нелинейный фон. Визуально (см. рис. 5) оптический спектр поглощения растворами железа (III) представляется в виде слабых пиков d-d переходов, наложенных на правый край мощного пика поглощения, который отвечает явлению переноса заряда кислороду к железу. Этот пик поглощения, как и пики d-d переходов (см. формулу (3)), описывается функ-

х) Алфименков В.П., Останивнич Ю.М., Стрелков А.В. и др. Установка для исследования эффекта Мессбауэра. ОИЯИ, 13-2988, Дубна, 1966, 26 с.

цией Гаусса:

$$G_o(\lambda_i) = D_o \exp\left[-\frac{(\lambda_i - \lambda_o)^2}{2\delta_o^2}\right], \quad (8)$$

положение максимума которой λ_o находится за пределами диапазона измеряемого в данном случае спектра.

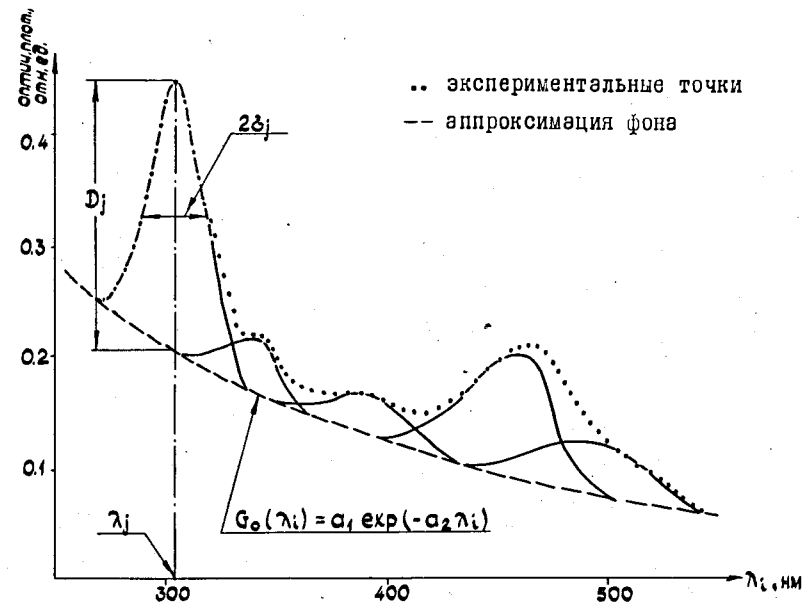


Рис. 5. Вид оптического спектра поглощения растворенных продуктов коррозии железа в теплоносителе

В связи с этим функция фона $G_o(\lambda_i)$ для $\lambda_o \ll \lambda_i$ с хорошей точностью аппроксимируется экспоненциальной зависимостью, т.е.

$$G_o(\lambda_i) = a_1 \exp(-a_2 \lambda_i), \quad (9)$$

где $a_1 = D_o$, $a_2 = \frac{1}{2\delta_o^2}$.

Математическая модель оптического спектра поглощения продуктов коррозии железа выбрана нами^{14/} в виде:

$$D(\lambda_i) = \sum_{j=1}^n G_j(\lambda_i) + a_1 \exp(-a_2 \lambda_i^2), \quad (10)$$

где $G_j(\lambda_i)$ - функция Гаусса, описывающая форму j-линии поглоще-

ния, отвечающей $d \rightarrow d$ переходу электронов центрального иона Fe^{3+} ; a_1 и a_2 — коэффициенты функции фона.

Математическая модель оптических спектров, в которых присутствует линейный фон (например, для растворов O_3 и Fl), описывается функцией:

$$D(\lambda_i) = \sum_{j=1}^n G_j(\lambda_i) + a_1 + a_2 \lambda_i. \quad (II)$$

Модельные функции (II) и (IO) реализованы в программах FOTOM1 и FOTOM2. С их помощью впервые удалось обеспечить автоматизированную обработку оптических спектров поглощения, встречающихся на практике при изучении существующих форм химических соединений в водном растворе теплоносителя и в перекиси водорода H_2O_2 , которая является одним из конечных продуктов радиолиза водного теплоносителя.

2.7. Внедрение разработанного комплекса программ в практику прикладных исследований (Глава V)

Разработанная библиотека программ широко применяется в настоящее время для решения задач, связанных с оптимизацией радиационного контроля на АЭУ при поиске методов снижения скорости коррозии реакторных материалов и идентификации форм существования коррозионных продуктов в теплоносителе АЭУ. Комплекс SIMPAC используется в ходе исследований закономерностей формирования активности аэрозолей на АЭУ, при обосновании метода реперного контроля радионуклидов в выбросах. Применялся он и при разработке системы непрерывного контроля радионуклидов в водном теплоносителе. Программы комплекса SIMPAC обеспечили идентификацию изотопов цезия и теллура, представляющих интерес при исследовании процессов разрушения топлива в случае разгерметизации оболочек ТВЭЛов^{/5/}.

Программы MESSA1 и MESSA2 широко используются для идентификации фазового состава образцов продуктов коррозии на Ленинградской АЭС им. В.И.Ленина. Активно использовалась программа MESSA2 для обработки ЯГР-спектрометрической информации о преобразовании исходных продуктов атмосферной коррозии оборудования 4-го блока Чернобыльской АЭС имени В.И.Ленина в период подготовки его к энергопуску в 1983 году. Кроме анализа реальных продуктов коррозии с действующих АЭС программы MESSA1 и MESSA2 нашли применение в лабораторных исследованиях перспективных реакторных материалов и условий эксплуатации с точки зрения защиты от коррозии.

При моделировании в лабораторных условиях внутриконтурных процессов с участием H_2O_2 применяется программа FOTOM2 для обработки оптических спектров поглощения растворов $Fe(III)$ в перекиси водорода^{/4/}.

Таким образом, созданное программное обеспечение для обработки разнородной спектрометрической информации позволило значительно повысить информативность и точность исследований и обеспечило более эффективное выполнение практических задач на современном уровне развития атомной энергетики.

В В В О Д Ы

1. Автором разработаны основные требования к созданию и программному обеспечению системы сбора, накопления и обработки большого потока сложных и разных по своей физической природе спектров, получаемых при проведении физико-химических исследований на ядерных энергетических реакторах, проводимых с целью поддержания оптимальных условий эксплуатации АЭС.

2. Создана проблемно-ориентированная библиотека программ, которая включает в себя комплекс программ для обработки гамма-спектров (SIMPAC), программы обработки ЯГР-спектров (MESSA1 и MESSA2) программы обработки оптических спектров поглощения (FOTOM1 и FOTOM2) и программу для интерпретации результатов обработки гамма-спектров (ARFA).

3. В рамках проблемно-ориентированной библиотеки программ автором разработаны методы и алгоритмы, реализованные в этих программах и, в частности, сформулирован единый подход к составлению алгоритма обработки исследуемых разнородных спектров.

4. Для определения параметров модельных функций различных спектров в разработанном комплексе программ реализована устойчивая модификация метода Левенберга-Марквардта. Повышенная устойчивость итерационного процесса достигнута за счет введения матрицы масштабирования и учета особенностей спектрометрической задачи при выборе управляющих параметров.

5. Впервые в практику решения прикладных задач атомной энергетики внедрен развитый комплекс программ SIMPAC для обработки гамма-спектров, базирующийся на устойчивом алгоритме для определения параметров спектра в сочетании с алгоритмом расчета активностей изотопов и необходимым для этой процедуры каталогом изотопов, а также алгоритмом интерпретации результатов обработки гамма-спектров.

6. Применен новый прием при обработке сложных ЯГР-спектров, который максимально использует априорную физическую информацию для вычисления (программным образом) начальных приближений искомых параметров модельной функции с целью повышения их качества и упрощения работы пользователя (программа MESSA2).

7. Предложен и реализован подход к автоматизированной обработке оптических спектров поглощения как при наличии линейного, так и не-

линейного фона, зависящего от длины волны поглощенного света (программы FOTOM1 и FOTOM2).

8. Созданная проблемно-ориентированная библиотека программ внедрена в практику научных исследований на ядерных энергетических реакторах для обработки разнородной спектрометрической информации. С ее использованием проводится:

- исследование поведения изотопов в различных технологических зонах реактора с целью оценки герметичности оболочек ТВЭЛов активной зоны (SIMPAC);

- изучение закономерности формирования радиоактивных выбросов в окружающую среду (SIMPAC);

- определение качественного и количественного состава продуктов коррозии на поверхности конструкционных материалов и в теплоносителе реакторов АЭС (MESSA).

Кроме того, с использованием этих программ был обоснован метод оперативного контроля радиоактивных аэрозолей по реферным изотопам в выбросах (SIMPAC), а также сформулирована модель гидролитического образования продуктов коррозии в теплоносителе реактора (MESSA, FSTOM).

Основное содержание диссертации отражено в пяти работах:

1. Аврамов С.Р., Сосновская Е.В., Цупко-Ситников В.М. Система программ SIMP для обработки гамма-спектров. Сообщение ОИЯИ, РЮ-9741, Дубна, 1976.
2. Ефимов А.А., Сосновская Е.В., Томилов С.Б. Реализация метода Левенберга-Маркардта в программе MESSA для обработки ЯГР-спектров. Сб. Прикладная ядерная спектроскопия. (Под ред. В.Г.Недовесова, вып. 9, М.: Атомиздат, 1979, с. 134-143).
3. Москвин Л.Н., Ефимов А.А., Сосновская Е.В., Гусев Б.А., Томилов С.Б. Применение ЯГР-спектроскопии для определения фазового состава мелкодисперсных продуктов коррозии реакторных материалов в водном теплоносителе. - Атомная энергия, т. 51, вып. 6, 1981, с. 383-385.
4. Сосновская Е.В., Белозерский Г.Н., Ефимов А.А., Бредихина Э.П., Томилов С.Б. Программа FOTOM для статистической обработки оптических спектров поглощения продуктов гидролиза железа (III). Тезисы докладов III Всесоюзного совещания, г. Душанбе. Октябрь 1980, Л., "Наука", с. 107.
5. Москвин Л.Н., Леонтьев Г.Г., Мельников В.А., Мирошников В.С., Орленков И.С., Сосновская Е.В. Определение Zr, Nb, Tc, Te в водном теплоносителе ядерных энергетических установок. - Атомная энергия, т. 39, вып. 5, II, 1975, с. 363-365.

Рукопись поступила в издательский отдел

3 декабря 1985 года.