

160.  
УЧЕНЫЕ ЗАПИСКИ

КИБЕРНЕТИЗАЦИЯ  
НАУЧНОГО  
ЭКСПЕРИМЕНТА

3

Министерство высшего и среднего специального образования  
Латвийской ССР

Латвийский ордена Трудового Красного Знамени  
государственный университет имени Петра Стучки

Проблемная лаборатория физики полупроводников

CFI-3  
CB. knāj. 2  
Fizmat. 2

Ученые записки

Латвийского государственного университета  
имени Петра Стучки  
том 160

К И Б Е Р Н Е Т И З А Ц И Я  
Н А У Ч Н О Г О Э К С П Е Р И М Е Н Т А

выпуск 3



Редакционно-издательский отдел ЛГУ им. Петра Стучки  
Рига 1972

## КИБЕРНЕТИЗАЦИЯ НАУЧНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Вып. 3, 1972 г., 186 стр.

Сборник посвящен актуальному вопросу - применению системного подхода в задачах автоматизации научного эксперимента в области физики твердого тела; в нем показывается возможность использования идей системного подхода на разных уровнях методических проблем физики твердого тела, сообщается о некоторых научно-исследовательских системах для исследования твердых тел с применением ЭВМ в режиме "реального времени", предлагаются алгоритмы разложения спектров на компоненты.

Выпуск подготовлен на основе материалов, прочитанных сотрудниками проблемной лаборатории физики полупроводников ЛГУ им. П.Стучки на III Всесоюзной школе по автоматизации научных исследований в области физики твердого тела (Латв.ССР г. Сигулда, 22 июня - 6 июля 1971 г.).

Сборник предназначен для научных работников, инженеров и студентов, интересующихся применением вычислительной техники в научном эксперименте.

Первый выпуск вышел в свет в 1968 году, второй в 1971 году.

Главный редактор Ю.Кузьмин,  
зам. главного редактора А.Бернуп.  
Редакционная коллегия: О.Аболыньш,  
И.Эилитис, Я.Страумен, И.Тале,  
Э.Тарденак, Я.Цирулис, М.Штерн.

2.

Ю.Я. КУЗЬМИН

## ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТЬ АВТОМАТИЗАЦИИ ТВЕРДОТЕЛЬНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Существует много факторов, заставляющих физиков - твердотельщиков особенно тщательно анализировать целесообразность автоматизации своих исследований и искать наиболее рациональные способы решения задач автоматизации.

I. Известно, что автоматизация эксперимента позволяет, не увеличивая существенно общего числа специалистов - физиков, значительно повысить производительность их труда. Приведем оценку возможного эффекта. По данным на 1965 год /1/ распределение специалистов по научным направлениям АН СССР было следующим:

- физика твердого тела и полупроводников .....	- 10,5%
- биология .....	- 5,5%
- энергетика .....	- 3,5%
- ядерная физика .....	- 3,1%
- физика земли .....	- 3,1%

Если принять такое соотношение для науки последних лет, то окажется, что физикой твердого тела и полупроводников занимается около 90 тыс. специалистов СССР. Отсюда видно, какое значение имеет каждый процент повышения производительности труда за счет автоматизации

и разумного планирования исследований.

2. Часто против целесообразности автоматизации твердотельных экспериментов выдвигается следующий тезис.

"Автоматизация существенно зависит от веса стандартных экспериментов, в то время как в физике твердого тела основную роль играет масса нестандартных методов, основанных на открытии новых физических явлений".

Для выяснения истинности этого тезиса нами был построен график числа открытых новых методов исследований твердых тел по годам. В качестве исходной информации были взяты /2,3/:

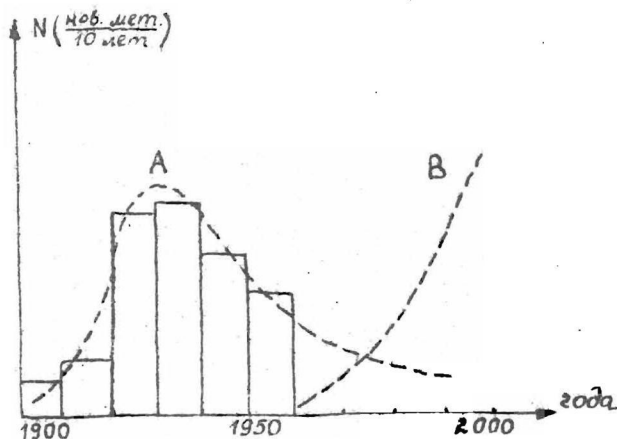


Рис. I.

Оказалось, что кривая открытий явлений и методов имела в 30 + 40-х годах максимум, а в настоящее время мы находимся на скате этой кривой. Ход кривой "А" по-видимому связан с развитием аналоговой электроники и возможностей ручного, в основном качественного, экспе-

риента. Падение "N" с годами не свидетельствует в пользу приведенного выше тезиса, поскольку тогда следовало бы ожидать общее снижение темпов развития физики твердого тела.

Можно предположить, что следующий пик открытий новых методов исследований "В" будет связан с внедрением автоматизации и переходом от качественных методов исследований к количественным.

3. Существует, по крайней мере, шесть возможных направлений поиска таких методов.

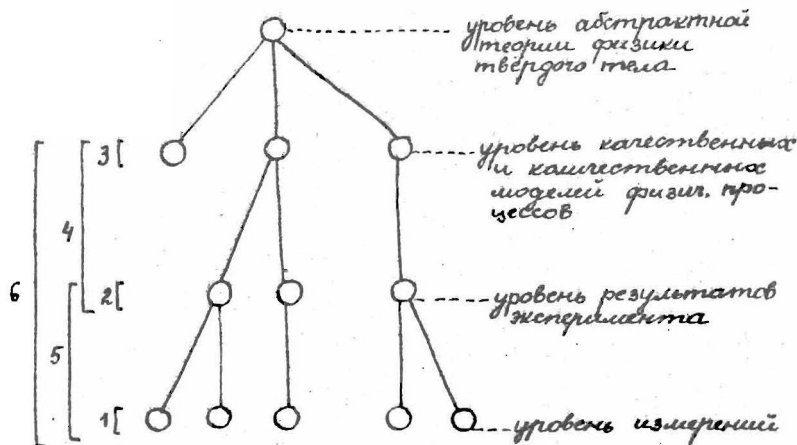


Рис. 2.

На рис. 2 изображен граф связи теоретических и экспериментальных исследований.

Доказательство возможности построения подобного графа для физики твердого тела приводится в /4/. Из графа

следуют возможные направления автоматизации: 1 - автоматизация измерений, 2 - автоматизация обработки результатов эксперимента, 3 - автоматизация моделирования физических процессов на основе теоретических данных, 4 - моделирование на основе экспериментальных данных, 5 - обработка результатов в ходе эксперимента с возможной его оптимизацией, 6 - моделирование в ходе эксперимента, определение параметров модели и оптимальных условий эксперимента.

Следует отметить, что построение конкретных граф-схем физических исследований имеет большое значение для задач автоматизации, поскольку позволяет планомерно создавать комплексы технических средств эксперимента и сформировать наиболее общие требования к математическому обеспечению эксперимента, а также устанавливает связь отдельных фаз исследований твердых тел между собой.

4. Следует еще раз отметить, что до сих пор вся методическая основа физики твердого тела разрабатывалась исходя из возможностей ручного качественного эксперимента. Трудно в несколько лет переделать весь методический подход физиков, созданный в течение многих десятилетий. Поэтому автоматизация в физике твердого тела находится сейчас на этапе освоения традиционных ручных методик, далеко не использующих все возможности средств автоматизации.

Но также как и в случае развития традиционных методов, при решении перспективных задач автоматизации эксперимента, особую роль играет правильный выбор технической идеологии, тем более, что просчеты в задачах автоматизации стоят очень дорого.

Известно, что за рубежом, особенно в США, в основе методов решения подобных задач лежит идеология "систем-

ного подхода" /5,6/.

5. Можно попытаться оценить некоторые параметры эксперимента, которые следует учитывать при автоматизации.

Пусть для некоторого коллектива:

$J_p$  - интенсивность потока измерительной информации до автоматизации эксперимента;

$J_a$  - предполагаемая интенсивность потока измерительной информации после автоматизации эксперимента;

$T_c$  - время на разработку автоматизированной научно-исследовательской системы (НИС);

$T_s$  - время предполагаемой эксплуатации НИС.

Тогда

$T = T_c - T_s$  - полное время занятия проблемой;

$N_p = J_p \cdot T \cdot \eta$  - полный объем полученной научной информации неавтоматизированными методами, где  $\eta$  - КПД использования измерительной информации;

$N_a = J_a (T - T_c) \tau$  - предполагаемый объем полученной научной информации автоматизированными методами за  $T$ ; легко получить следующую формулу:

$$\alpha = \kappa (1 - \beta)$$

Здесь:

$\alpha = \frac{N_a}{N_p}$  - коэффициент изменения продуктивности исследований;

$\kappa = \frac{J_a}{J_p}$  - коэффициент увеличения производительности измерений;

$\beta = \frac{T_c}{T}$  - отношение времени изготовления НИС к полному времени занятия проблемой.

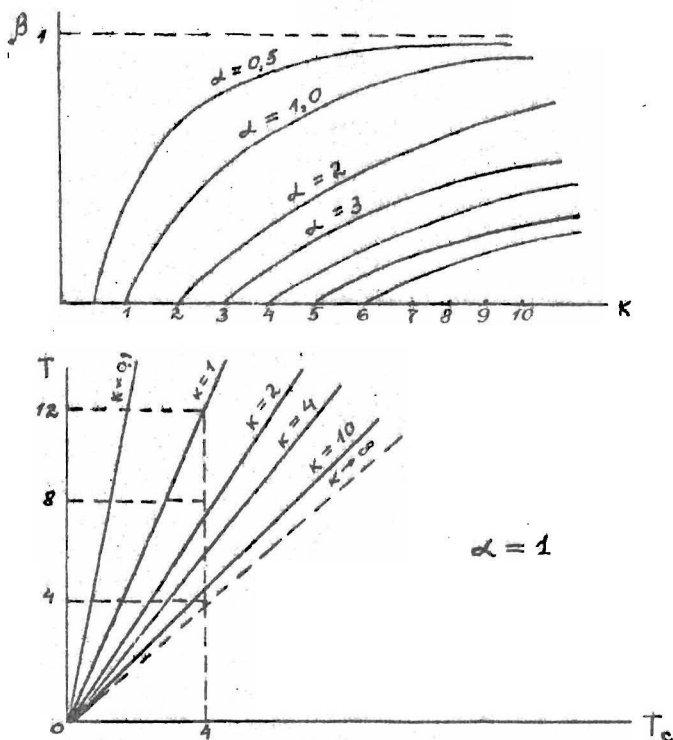


Рис. 3.

На рис. 3 показаны графические зависимости для  $\beta = \beta(\alpha, \kappa)$  и для  $T = T(T_c, \kappa)$

Отсюда легко получить, например, следующие оценки.

Если принять среднее время разработки НИС 2 года, то для того, чтобы не проиграть в результате автоматизации нужно, чтобы проектируемая система при производительности  $\kappa = 3,0$  эксплуатировалась не менее 1 года после изготовления. А при производительности  $\kappa = 1,5$  и времени изготовления в 5 лет система окупится лишь через 10 лет.

Если планируется устроить научную продукцию в ближайшие 3 года, то нужно построить за 2 года систему, которая в 9 раз превышает производительность неавтоматизированного эксперимента.

Выше мы рассмотрели влияние изменения полезности на эффективность автоматизации. Рассмотрим кратко некоторые экономические факторы автоматизации.

Можно показать, что автоматизация оправдывается экономически, если

$$(k S_{э,с}^p - S_{э,с}^a) n + \frac{1}{T} (k S_c^p - S_c^a) n - (\frac{1}{50} S_{э,вм} + S_{э,вм}) > 0$$

Здесь:

$S_{э,с}^p, S_{э,с}^a$  - стоимости эксплуатации оборудования ручного эксперимента и автоматизированной системы (кроме ЦВМ);

$k$  - коэффициент производительности автоматизированного эксперимента;

$n$  - число НИС в режиме системы разделения времени (СРВ);

$S_c^p, S_c^a$  - стоимости аппаратуры ручного и автоматизированного эксперимента (кроме ЦВМ СРВ);

$S_{э,вм}, S_{э,вм}$  - годовая стоимость СРВ и ее эксплуатация;

$T$  - время предполагаемой эксплуатации эксперимента.

Представим типовые значения для известных систем:

$$\sim 11 \text{ т.р.}, S_{э,с}^a \sim 13 \text{ т.р.}, S_c^p \sim 30 \text{ т.р.}, S_c^a \sim 120 \text{ т.р.},$$

$$u \sim 800 \text{ т.р.}, S_{э,вм} \sim 15 \text{ т.р.}$$

$T_3 \sim 5$  лет,  $T_c \sim 2$  года, по-

лучим:

одна автоматизированная НИС без использования системы разделения времени окупается, если  $K > 2,2$ , а четыре НИС, работающих в СРВ экономически окупаются, если  $K > 2,6$ .

Объем научной информации при этом должен возрасти в 1,5 и 1,8 раза, соответственно.

Из имеющихся в Проблемной лаборатории физики полупроводников систем особо эффективной является НИС для исследований образцов методом фракционного высвечивания. Производительность системы равна  $k = 9,0$ . Система дает годовой экономический эффект в 150 тыс. рублей.

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Управление, планирование и организация научных и технических исследований, том 3, стр. 148, ВИНТИ, М., 1970.
2. Физический энциклопедический словарь, т. 1-4, "Советская энциклопедия", М.
3. Бьюб Р. Фотопроводимость твердых тел, ИЛ, М., 1962.
4. Тале И. см. настоящий сборник.

2,

И.А. ТАЛЕ

СИСТЕМНЫЙ АНАЛИЗ И ОЦЕНКА ЦЕЛЕСООБРАЗНОСТИ АВТОМАТИЗАЦИИ СПЕКТРАЛЬНО-КИНЕТИЧЕСКИХ ЛЮМИНЕСЦЕНТНЫХ МЕТОДОВ ИССЛЕДОВАНИЯ ТВЕРДОГО ТЕЛА

Широкий фронт, как фундаментальных, так и прикладных исследований в области физики электронных свойств твердого тела, обусловленный многообразием и сложностью явлений в твердом теле с одной стороны и широким кругом веществ с другой, выдвигает проблемы методического порядка. Актуальными становятся вопросы разработки новых и усовершенствования существующих методов исследования твердого тела, используя успехи измерительной техники, средств автоматизации и современных методов обработки и хранения информации.

Осуществление экспериментальных исследований в области физики твердого тела сопряжено также со все возрастающими затратами труда и средств на работы методического порядка. Особенно ощутимым представляется прирост затрат ресурсов в случае создания автоматизированных систем для экспериментальных исследований. Кроме того, автоматизация, наряду с расширением возможностей исследовательской аппаратуры при решении намеченного круга задач, налагает также ряд ограничений, обусловленных неизбежной специализацией аппаратуры и алгоритмов эксперимента. В частности, автоматизированный эксперимент представляется более консервативным по сравнению с традиционным неавтоматизированным - любые модификации в плане исследований связаны, по крайней мере, с относительно большими затратами труда на подготовку эксперимента. В настоящее время имеются технические возможности автоматизации практически

льбы научных исследований в области физики твердого тела, поэтому на первом плане выступают проблемы оценки целесообразности автоматизации исследований, которые рассмотрены относительно мало.

Автоматизация эксперимента по существу представляет один из подчиненных аспектов общей стратегии деятельности исследователя. Ниже с этой точки зрения рассматриваются некоторые общие вопросы планирования исследований в случае учета возможностей автоматизации, критерии и пути оценки целесообразности автоматизации эксперимента.

Деятельность исследователя подчинена одной главной цели — решению поставленной проблемы. Общие затраты труда при этом должны быть минимальными. Основным результатом и мерой успеха исследователя являются публикации, авторские свидетельства и т.д. Само исследование, методика и работы по автоматизации эксперимента являются лишь способом, одной из альтернатив достижения основной цели. Поэтому не представляется возможным однозначно определить целесообразность автоматизации конкретного метода исследований. Помимо особенностей метода, она зависит от целей работы экспериментатора.

Отправной точкой каждой исследовательской работы в целом и оценки целесообразности автоматизации эксперимента в частности представляется формулировка и анализ целей исследований совместно с рассмотрением альтернатив достижения этих целей (системный подход /1/). Рассмотрим некоторые возможности системного подхода применительно к планированию научных исследований. Цели исследований образуют некоторую иерархическую структуру (граф целей). Высший уровень этой структуры представляет наиболее общую (т.е. глобальная) цель, которая должна быть достигнута в результате планируемой работы. Она может быть осуществлена решением ряда подпроблем, которые таким образом образуют следующий уровень графа целей и одновременно являются альтернативами достижения более общей цели. Если, например, в качестве глобальной цели работы задается всестороннее изучение свойств твердого состояния (рис. 1), подделя-

ми на следующем уровне могут быть исследование электронной подсистемы и исследование ионной подсистемы (адиабатическое приближение). Цель исследования электронной подсистемы в

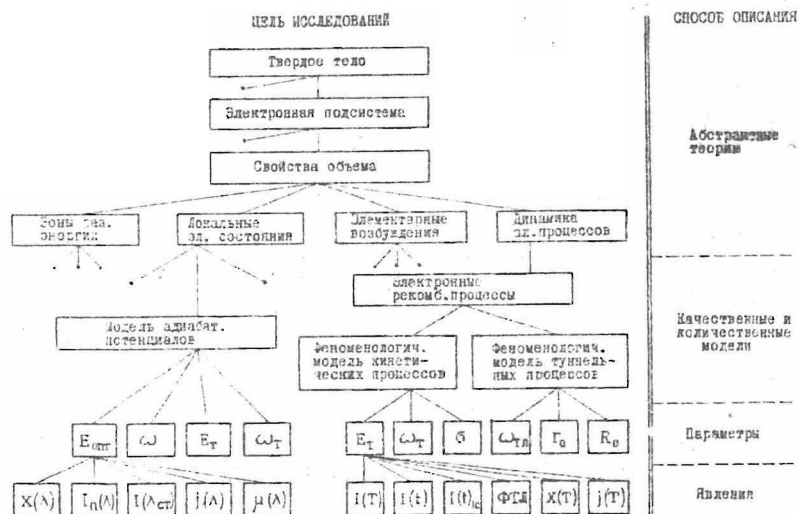


Рис.1.

свою очередь достигается исследованием свойств электронной подсистемы в объеме (циклические граничные условия) и на поверхности (обрыв периодической структуры) и т.д. На низшем уровне графа обязательно находятся цели, которые могут быть достигнуты непосредственно (измерение спектров поглощения  $\chi(\lambda)$ , спектров возбуждения  $\mathcal{J}(\lambda_{стт})$  и излучения  $\mathcal{J}_\lambda(\lambda)$  люминесценции, спектров фотопроводимости  $j(\lambda)$ , спектров возбуждения парамагнитного поглощения  $\mu(\lambda)$  и т.д.).

Представляется интересным, что разным уровням целей исследований соответствуют разные способы, наиболее подходящие "языки" описания проблемы. Общим целям соответствуют абстрактные теории, более конкретные как правило описываются в модельных представлениях с соответствующими параметрами. Конкретным целям соответствует "язык" явлений и параметров.

В результате составления графа целей представляется возможным решить ряд вопросов по планированию исследований:

- 1) планирование научно-исследовательской работы в целом, определение комплекса непосредственных теоретических и экспериментальных исследований, необходимых для решения заданной проблемы;
- 2) определение наиболее общей цели, достигаемой в результате данных исследований;
- 3) определение наиболее перспективных направлений научных и методических работ с учетом существующих методических средств, знаний, результатов исследований по смежным направлениям и др. факторов;
- 4) выяснение путей сопоставления экспериментальных исследований с квантомеханическими расчетами в разных приближениях, феноменологическими моделями изучаемых процессов, представляющих разные уровни на графе целей, а также результатов разных экспериментальных исследований между собой;
- 5) определение возможностей экспериментальных методов и комплексов этих методов (задача, противоположная первой);
- 6) определение границ и объема методических работ;
- 7) определение целесообразности и способов автоматизации отдельных этапов исследовательской работы.

Рассмотрим в рамках системного подхода методику оценки целесообразности автоматизации научных исследований на примере автоматизации спектрально-кинетических исследований электронных рекомбинационных процессов в твердом теле. При оценке необходимо учитывать, что специфика автоматизированных исследований и трудоемкость создания автоматизированных систем исследования в принципе могут повлиять на более общие цели исследований. Поэтому представляются полезными следующие этапы и последовательность анализа:

1. Оценка важности эксперимента:

- формулировка непосредственной цели исследовательской работы, выполнимой путем проведения эксперимента;
- определение метода исследования;
- функциональное определение эксперимента;
- выявление дополнительных методических возможностей исследовательской установки, удовлетворяющей функциональному определению эксперимента;
- определение непосредственных целей, достигаемых реализацией каждой из методик, которые удовлетворяют функциональному определению эксперимента;
- определение наиболее общих целей, достигаемых при реализации рассмотренного комплекса методик;
- анализ соответствия целей экспериментатора и методических возможностей исследовательской установки.

2. Оценка методики эксперимента:

- определение требований к функциональным каналам исследовательской установки;
- анализ альтернатив создания функциональных каналов;
- оценка трудоемкости создания функциональных каналов с учетом возможностей автоматизации;
- анализ альтернатив проведения эксперимента относительно способа управления экспериментом, сбора измерительной информации, обработки результатов.

3. Оценка целесообразности автоматизации эксперимента:

- анализ критериев важности автоматизации;
- анализ полезности автоматизации.

4. Составление блок-схем и определение комплекса работ по созданию исследовательской системы.

Итак, цель исследований: изучить спектр энергий тепловой ионизации (глубины) центров захвата (ЦЗ) в ионных кристаллах. Эти кристаллы обладают рекомбинационным свечением, поэтому для достижения цели могут быть привлечены люминесцентные методы измерения. Существенные преимущества по сравнению с другими имеет метод фракционного термовысвечивания /2/: не требуется предварительных предположений о моноэнергетичности ЦЗ, результатом измерений является функция распределения электронных возбуждений (электронов, дырок) по ЦЗ разной глубины, метод обладает высокой разрешающей способностью. Таким образом в результате анализа возможностей разных методов измерения спектра ЦЗ (альтернативы) выбирается метод фракционного термовысвечивания (ФТВ).

Функциональное определение эксперимента. Сущность метода ФТВ составляет определение высвеченной светосуммы ( $S$ ) как функции средней энергии тепловой ионизации ЦЗ ( $\hat{E}$ ). Для этого проводится измерение зависимости интенсивности рекомбинационной люминесценции предварительно возбужденного кристалла от температуры в осциллирующем (фракционном) режиме нагрева. Функцией распределения возбуждений является первая производная  $S(\hat{E})$ . Средние энергии, при которых первая производная  $S(\hat{E})$  имеет максимумы, характеризуют спектр энергий тепловой ионизации ЦЗ.

Таким образом исследовательская установка должна обеспечить следующие функции:

1. Измерение зависимости интенсивности слабых потоков света (люминесценции) от времени.
2. Измерение зависимости температуры образца от времени.
3. Проведение нагрева и охлаждения образца по заданной зависимости температуры от времени.

Определение остальных методических возможностей исследовательской установки, если не налагаются дополнительные ограничения на функции установки, сводится к следующему:

1. Измерение зависимости интенсивности люминесценции от времени ( $J(t)$ ) при постоянной температуре ( $T = \text{const}$ ) приводит к методу измерения кинетики послесвечения (КП) /3/.

2. Измерение зависимости интенсивности люминесценции ( $J(t)$ ) и температуры ( $T(t)$ ) от времени в режиме линейного нагрева - метод термовнсвечивания (ТВ) /3,4/.

3. Измерение зависимости интенсивности люминесценции ( $J(t)$ ) и температуры ( $T(t)$ ) от времени в режиме осциллирующего нагрева - метод ФТВ.

4. Измерение зависимости температуры от времени ( $T(t)$ ), если интенсивность рекомбинационной люминесценции поддерживается постоянной  $J_{\text{const}}$ , приводит к методу постоянного сигнала (ПС) /5/.

Для определения информативных возможностей этих методов проводилось детальное рассмотрение теории каждого из них. Результаты анализа приведены в таблице рис. 2.

Метод	Качественно исследованы зонных проп.	Диффузия	Туннельная рекомб.		Феноменологическая модель				Туннельная рекомбинация		
			качеств.	колич.	Лорд. проп.	Параметры		$\ln(E)$	Топография дед.	Параметры	
						$E_T$	$\omega_{TO}$			$t_0/R_0$	$\omega_0$
КП	x	xx	xxx	xxx	xx	x	—	—	xxx	xx	x
	1,4	2	—	—	1	1	—	—	—	—	5
ТВ	xxx	x	—	—	x	x	x	xx	—	—	—
	—	2	—	—	1,5	1,2	1,2	—	—	—	—
ФТВ	xxx	xx	x	—	xxx	xxx	x	xxx	—	—	—
	4	—	2	—	—	—	3	—	—	—	—
ПС	—	—	—	—	xxx	xx	xxx	—	—	—	—
	—	—	—	—	1	1	1	—	—	—	—

- |     |                                    |    |  |
|-----|------------------------------------|----|--|
| x   | метод малоэффективен               | 1. | при независимом существовании КП         |
| xx  | метод применим для исследований    | 2. | в специальных режимах измерения          |
| xxx | метод дает высокоточные результаты | 3. | при совместных измерениях с другим мет.  |
|     |                                    | 4. | высокая трудоемкость                     |
|     |                                    | 5. | необходимо сопоставление с расчетом мод. |

Рис. 2.

Методы позволяют непосредственно определить часть феноменологических параметров центров захвата (энергия тепловой ионизации  $E_T$ , частотный фактор  $\omega_{T0}$ , распределение возбуждений по ЦЗ  $n(E)$ ), некоторые параметры электронных рекомбинационных процессов (порядок кинетики рекомбинации с участием зонных состояний, параметры туннельной рекомбинации: частотный фактор ( $\omega_0$ ) и отношение эффективного радиуса рекомбинации к эффективному радиусу функции распределения пар ( $r_0/R_0$ ). Методы ТВ, ФТВ и КП с успехом могут использоваться для качественных исследований механизма электронных рекомбинационных процессов: определения механизмов делокализации (спонтанный, каталитический, вынужденный), механизма переноса (необходимость учета процессов случайного блуждания во время переноса), механизма рекомбинации (рекомбинация подвижных возбуждений одного типа с локализованными возбуждениями противоположного типа, туннельная рекомбинация пространственно разделенных локализованных возбуждений). Методы дополняют друг друга и образуют единый комплекс для спектрально-кинетических люминесцентных исследований электронных неравновесных процессов в твердом теле.

Граф целей по исследованию кинетики электронных процессов с участием локальных состояний (дефекты решетки) представлен на рис. 3.

Видно, что рассматриваемый комплекс спектрально-кинетических люминесцентных методов исследований частично позволяет исследовать неравновесные процессы в представлениях феноменологической модели кинетики электронных рекомбинационных процессов. Желательно дополнить рассматриваемый комплекс по крайней мере измерением неизотермической релаксации спектров поглощения. В случае создания комплекса спектрально-кинетических люминесцентных и абсорбционных методов наиболее общей целью исследований является определение феноменологической модели электронных неравновесных процессов в твердом теле. Если информативные возможности всего комплекса методов удовлетворяют целям исследователя, рассмотренных с учетом дополнительных возможностей эксперимента, проводится оценка

методики эксперимента.

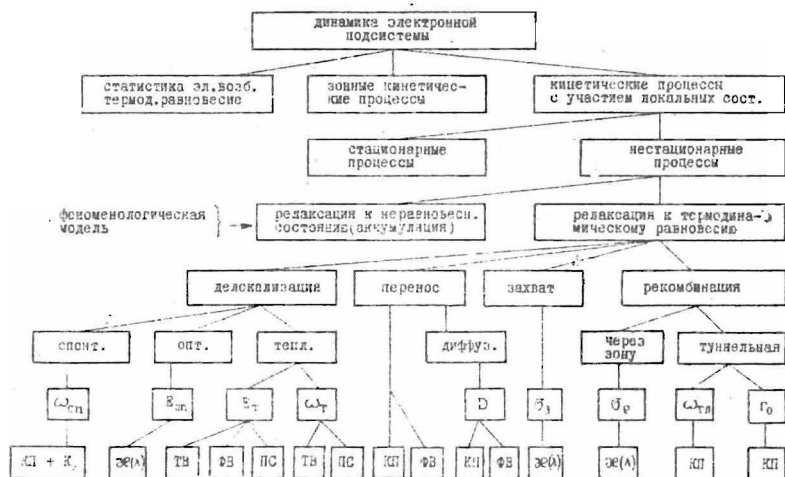


Рис. 3.

Оценка методики при рассмотрении целесообразности автоматизации эксперимента в первую очередь необходима для определения путей и трудоемкости создания исследовательской установки. По существу она также может быть сведена к рассмотрению графа целей и альтернатив достижения этих целей.

В первую очередь на основе рассмотрения теории методов определяются требования к функциональным каналам, в рассматриваемом случае к каналу измерения интенсивности люминесценции, каналу измерения температуры и каналу управления температурой. Приведем в качестве примера сводную таблицу требований к каналу управления температурой (рис. 4). Для осуществления всех рассмотренных методов необходимы три режима управления температурой; термостатирование, импульсный нагрев-охлаждение с последующим термостатированием и слежение по заданной зависимости температуры от времени. Подчеркнутые значения параметров определяют окончательные требования к системе управления температурой.



Параметр	Режим	Термоста- тирование	Импульсный 	Слежение 	Примечания
Максимальное отклонение от средней (заданной) температуры. Колебания температуры.		0,02 %	0,02 %	0,2 %	
Повторяемость установления температуры		0,03 %	0,03 %	—	
Квант задания температуры		0,4 °K	0,4 °K	0,2 °K	<sup>1</sup> Для обеспечения квазилинейности слежения
Скорость нагрева/охлаждения		—	<sup>3</sup> > 3 °K/сек	<sup>3</sup> 0,01 — 0,3 °K/сек	<sup>3</sup> Не допускать нагрева образца выше заданной температуры при импульсном нагреве
Диапазон температур		80 — 550 °K	80 — 550 °K	80 — 550 °K	<sup>2</sup> Хладагент — жидкий азот
Время перехода к термостатированию		—	~ 10 сек	—	

Рис. 4.

В дальнейшем рассматриваются альтернативы построения функциональных каналов, аппаратура, необходимая для изготовления исследовательской установки и возможности автоматизации функциональных каналов. Проводится анализ разных вариантов проведения эксперимента относительно способа управления (неавтоматизированное, специализированный функциональный автомат, УВМ), способа сбора измерительной информации (самописец, перфолента, прямой ввод в УВМ), способа обработки информации (ручное, УВМ). В конечном счете для различных вариантов проведения эксперимента определяются затраты труда и средств на создание исследовательской установки, на автоматизацию эксперимента, на проведение измерений (в расчете на  $I$  кривую) и на обработку результатов.

Результаты анализа информационных возможностей рассматриваемых методов исследований и вариантов осуществления измерений позволяет провести оценку целесообразности

автоматизации всего комплекса методов. При оценке можно выделить две группы критериев:

- а) важность автоматизации;
- б) полезность автоматизации.

При оценке важности автоматизации учитываются критерии, определяющие увеличение возможностей эксперимента благодаря применению средств автоматизации. Наиболее важными представляются следующие критерии:

- 1) возможность осуществления принципиально новых методов исследования;
- 2) осуществление традиционных исследований в режимах, практически невыполняемых без применения средств автоматизации;
- 3) возможность создания новых единых комплексов исследований;
- 4) увеличение информативности эксперимента за счет
  - увеличения точности измерений,
  - увеличения чувствительности аппаратуры,
  - увеличения воспроизводимости эксперимента,
  - увеличения быстродействия эксперимента.
- возможностей динамической оптимизации алгоритма исследований.

При оценке полезности автоматизации в основном учитываются затраты труда на создание исследовательской установки и проведение эксперимента:

- 1) дополнительные затраты труда на автоматизацию;
- 2) повышение производительности эксперимента в результате автоматизации;
- 3) объем исследований, намеченный данным методом;
- 4) возможность заранее формализовать алгоритмы эксперимента;
- 5) возможность привлечения малоквалифицированного персонала (операторы) на обслуживание установки.

Полезность автоматизации может быть оценена количественно, в частности, как количество информации (спектры, кривые) на затраченные средства.

Результаты оценки важности автоматизации комплекса спектрально-кинетических люминесцентных методов сводится к следующему: метод постоянного сигнала (ПС) практически осуществим только при помощи автоматизированной системы исследования, так как управление температурой осуществляется по результатам измерения интенсивности свечения. Метод фракционного высвечивания (ФТВ) в случае изучения материалов, в которых осуществляется диффузионный перенос и туннельная рекомбинация электронных возбуждений, требует применения ступенчатого режима нагрева - охлаждения в течение каждой осцилляции температуры. При этом погрешности установления температуры в методе ФТВ не должны превышать  $\pm 0,1^{\circ}\text{K}$ , поэтому режим фракционного нагрева вручную практически невыполним. Автоматизация спектрально-кинетических методов не приводит к созданию новых комплексов исследований, однако информативность эксперимента увеличивается благодаря увеличению точности измерения интенсивности люминесценции (усреднение результатов, эталонирование и учет дрейфа чувствительности датчика), воспроизводимости условий эксперимента (воспроизводимость по температуре до  $\pm 0,1^{\circ}\text{K}$ ) и оптимизации режимов измерения (метод ФТВ).

Результаты оценки полезности автоматизации метода ФТВ представлены в таблице рис. 5.

Способ управления экспериментом	Способ обработки результатов	Дополнительные затраты труда на вспомогательные задачи (чел.ч.)	Затраты труда на проведение эксперимента (чел.ч.)	Затраты труда на обработку результатов (чел.ч.)	Минимальное число спектров, охватываемых автоматизацией	Качество результатов измерений
Ручной	Ручной	—	30	200	—	<u>Плохо</u> Догрешности в режиме нагрева. Сбой эксперимента
	ЭВМ	—	30	40	—	
Спец. автомат	ЭВМ	~ 9000	10	1	40	<u>Хорошо</u> Жесткий алгоритм эксперимента
					150	
ЭВМ	ЭВМ	~ 7000	10	—	32	<u>Хорошо</u> Возможность варьировать режим эксперимента
					115	

Рис. 5.

Рассмотрены затраты труда на автоматизацию, трудоемкость проведения измерений и обработки результатов в трех основных вариантах управления экспериментом: ручном,

при помощи специализированного автомата с жесткой программой и с использованием ЭВМ. Затраты труда на автоматизацию относительно мало зависят от варианта создания автоматизированной системы исследования, хотя примечательно, что система с ЭВМ в контуре несколько дешевле. Производительность измерений при автоматизации метода ФТВ возрастает примерно в 3 раза. В случае проведения измерений на автоматизированной системе с ЭВМ в контуре обработка результатов проводится во время измерений. Затраты труда на создание автоматизированной научно-исследовательской системы окупаются, если впоследствии проводится измерение по крайней мере 32 спектров ФТВ (115 спектров в случае обработки результатов неавтоматизированных измерений на ЭВМ).

Таким образом анализ целей и альтернатив осуществления эксперимента показывает, что автоматизация рассматриваемого комплекса спектрально-кинетических люминесцентных методов является целесообразной, если обязательными являются измерения методом фракционного термовысвечивания. При достаточно большом объеме исследований этим методом относительная трудоемкость измерения одного спектра уменьшается в случае автоматизации эксперимента.

Рассмотрение общих вопросов планирования экспериментальных работ показывает, что системный анализ исследований позволяет провести планирование научно-исследовательской работы в целом, определить наиболее перспективные

работы по разработке методики исследований и оценить целесообразность автоматизации научных исследований.

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лопухин М.М., Паттерн - Метод планирования и прогнозирования научных работ. "Сов.радио", 1971.
2. Gobrecht H., Hofmann D., J.Phys.Chem.Sol.,27,509,1966.
3. Антонов-Романовский В.В. Кинетика фотолуминесценции кристаллофосфоров, ст.54, 236, 261. Наука, М., 1966.
4. Луцкич Ч.Б. Труды ИФА АН Эст.ССР, 3, 17, 1955.
5. Гайлитис А.А., Янсонс Я.Л., Витол И.К., Изв.АН СССР, сер.физ., 33, 977, 1969.



Ю.Я.КУЗЬМИН

## ПРОЕКТИРОВАНИЕ СОВРЕМЕННЫХ НАУЧНО- ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИХ СИСТЕМ

В /8,9/ отмечалась целесообразность применения идеологии системного подхода при решении задач проектирования научно-исследовательских систем.

Системный подход обычно применяется, если необходимо решить достаточно сложную проблему, например, выбрать лучший способ организации математического обеспечения, определить наиболее подходящую для эксперимента ЦВМ, найти оптимальную структуру системы автоматизации эксперимента, выяснить важность проводимых НИР и в др. случаях.

Системный подход облегчает решение проблемы и помогает избежать многих просчетов. Он позволит не только найти оптимальную в данных обстоятельствах альтернативу, но и поможет в аргументации, если придется отстаивать найденное решение. Кроме того, системный подход облегчает и саму процедуру выбора альтернативы, поскольку весь процесс выбора в конце концов окажется изложенным в систематизированном виде на бумаге, можно легко проверить любой элемент процесса и пересмотреть его при необходимости. При интуитивном подходе к решению проблем все это становится практически невозможным, особенно при большом числе альтернатив и факторов, с которыми трудно оперировать "в уме". Наконец, системный подход помогает выявить ранее не известные цели систем.

Существенным является применимость системного подхода в непараметрических задачах, т.е. там, где невозможно сформулировать математическую модель процесса.

В США идеологией системного подхода владеет исключительно большое число научных, технических и общественных организаций /1, 4/. Разработаны специальные программы для НАСА, Министерства обороны, Министерства здравоохранения. Большинство крупных проблем решается с позиции системного подхода.

### Основные положения системного подхода /I-4/

Центральным понятием системного подхода является понятие системы, взаимодействующей со средой. Большинство исследователей сходится в том, что система - это достаточно сложный объект, который можно расчленить на составляющие элементы. Элементы информационно связаны друг с другом и с окружающей средой. Совокупность связей образует структуру. Всякая система имеет алгоритм функционирования, направленный на достижение определенной цели.

Таким образом систему характеризуют: сложность, элементы связи, структура, алгоритмы, цель, окружающая среда.

В физике твердого тела системы появились с ростом сложности эксперимента и передачей функций измерения, управления, контроля и обработки ЦВИ.

Идеология системного подхода направлена на разработку общих методов синтеза и анализа сложных объектов образующих системы. В основу этой идеологии легло обобщение эвристических методов решения технических задач, однако вскоре выяснилось, что возможные области применения системного подхода выходят далеко за пределы инженерных задач.

Второй гипотезой системного подхода (после гипотезы о существовании системы) является предположение о наличии большого количества возможных решений всякой системной задачи, оптимизация которых зависит от числа и способов учета внешних факторов, влияющих на выбор решений. Таким образом, системный подход утверждает, что не существует абсолютно оптимальных систем; с изменением факторов должно меняться и первоначально принятое решение. Поэтому системщики особое внимание уделяют учету факторов и прогнозированию их возможных изменений.

Системный подход предлагает несколько процедур решения сложных задач. Одна из наиболее распространенных процедур следующая:

1. Постановка проблемы.
2. Решение проблемы.
3. Практическая реализация решения.

### 1-й этап. Постановка проблемы

Определяются основные черты проблемы и совокупность существенных факторов, которые нужно учитывать при решении. Находится место проблемы относительно других проблем. Задаются критерии для оценки качества решений проблемы. Здесь же выясняется, в какую более общую систему будет входить проектируемая проблема. Это важный момент, позволяющий прогнозировать возможные в будущем изменения системы и учитывать их.

### 2-й этап. Решение проблемы

Происходит разработка и анализ возможных вариантов решений проблемы-альтернатив. Определяются необходимые для реализации альтернатив ресурсы (техника, люди, время) и на основе учета факторов находится оптимальная альтернатива.

### 3-й этап. Практическая реализация решения

Здесь по некоторому разработанному плану, например, согласно PERT, происходит практическая реализация оптимальной альтернативы.

Рассмотрим подробнее некоторые варианты синтеза систем

I. В первом варианте разработчику подробно известен граф целой системы, все учитываемые факторы и критерии выбора альтернатив (рис. I).

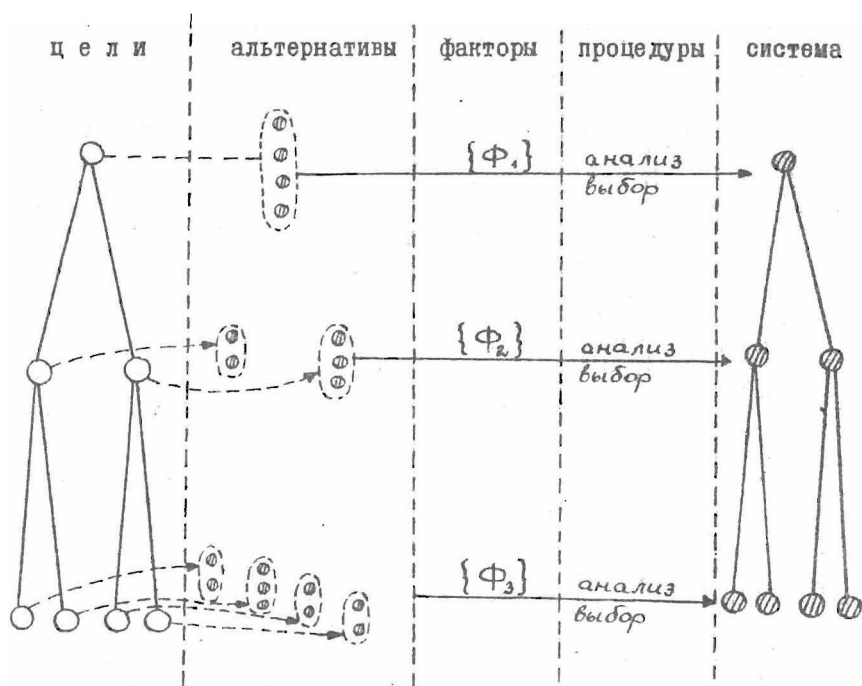


Рис. I.

Здесь для каждой подцели разрабатывается несколько альтернатив и после их анализа по заданным факторам определяется наиболее оптимальная альтернатива. В результате такого последовательного перебора всех подцелей определяется реализующая их система.

Анализ альтернатив заключается в определении относительных оценок /1/, т.е. по каждому фактору определяется насколько данная альтернатива лучше других. Если оценки не могут быть определены непосредственно, то прибегают к "методу экспертных оценок" /5/.

Выбор альтернативы означает сравнение всех оценок альтернатив по некоторому заданному критерию и определение наиболее благоприятной альтернативы.

Если оценки невозможно параметризовать, то используют специальные процедуры выбора альтернатив /6+8/.

2. Другой вариант разработки системы включает в себя случай, когда требуется создать систему, для которой известна лишь одна или несколько подцелей низшего уровня. Например, физик оставит в качестве цели разработку высокоточного измерительного канала. В этом случае инженер должен сформулировать последовательность вопросов, которые позволят точно определить, в какой системе будет этот канал работать, определить соответствующие требования к каналу и принять оптимальное решение.

Процедура построения графа целей может быть описана следующей группой вопросов (рис.2):

физик: ставит цель низшего уровня  $C_1^I$ .

инженер: "что даст выражение  $C_1^I$ ?"

физик: "позволит достичь  $C_1^2$ ".

инженер: "достаточно ли для  $C_1^2$  достичь  $C_1^I$ ?"

физик: "Нет. Для  $C_1^2$  нужно еще достичь  $C_2^I$ ".

инженер: "зачем  $C_2^I$ ?"

физик: "чтобы достичь  $C_1^3$ ".

инженер: "достаточно ли для  $C_1^3$  достичь  $C_2^I$ ?"

физики: "Нет. Для  $C_1^3$  нужно еще достичь  $C_2^2$ ".

инженер: "какие цели нужно достичь, чтобы перейти к  $C_2^2$ ?"

физик: "Эти цели:  $C_3^I$  и  $C_4^I$ ".

инженер: "Зачем  $C_3^I$ ?" и т.д. пока оба специалиста не придут к соглашению, что сформулирована достаточно общая цель системы, чтобы можно было правильно и всесторонне оценить требования к измерительному каналу и не пришлось бы постоянно заниматься переделкой канала.

Следует отметить, что игнорирование необходимости проверки технических заданий физиков - одна из наиболее распространенных и серьезных ошибок. Физик может не знать всех технических последствий слишком узко или слишком расплывчато сформулированного ТЗ. Инженер не знает всех экспериментальных (методических) последствий. Поэтому на всех этапах синтеза системы и особенно при формулировке ТЗ

обязательно должны присутствовать обе стороны.

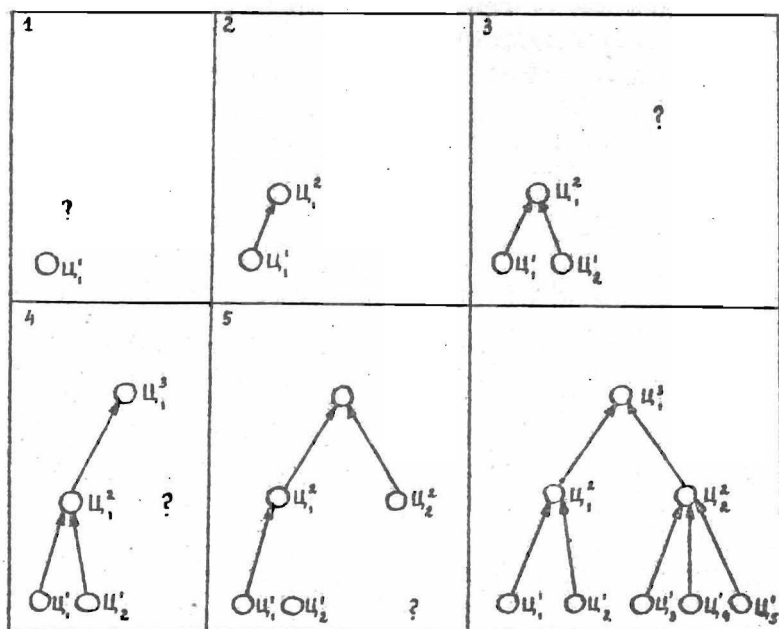


Рис. 2. Индуктивный синтез графа целей (ц<sub>1</sub><sup>1</sup>) системы

### "Метод экспертных оценок"

Этот метод применяется, если нет возможности прямого определения характеристик альтернатив необходимых для обоснованного выбора оптимальной альтернативы. Например, трудно вычислить, что важнее для лаборатории — заниматься автоматизацией эксперимента, либо продолжать только традиционные исследования. Метод экспертных оценок — это процедура, позволяющая количественно оценить мнение специалистов — экспертов по интересующему вас вопросу.

При использовании метода экспертных оценок составляется

перечень вопросов, достаточно полно характеризующих интересующую проблему. Затем этот перечень раздается экспертам, которые должны проставить относительные количественные оценки по каждому вопросу. Далее, на основе собранных ответов вычисляется математическое ожидание оценок экспертов по каждому вопросу, находится дисперсия оценок и другие параметры.

### ОСНОВНЫЕ ПРОЦЕДУРЫ

Ниже приводятся типичные процедуры метода экспертных оценок.

#### А. Определение коэффициентов относительной компетентности экспертов

Заполняется таблица, в которой каждый эксперт  $\mathcal{E}_i$  дает свои оценки  $e_{ij}$  авторитетности всех экспертов. Типичный вопрос: "Эксперты  $\mathcal{E}_j$  участвуют в оценке следующих проблем (задач, тем, разработок и т.п.): ... Какова на Ваш взгляд оценка степени компетентности каждого эксперта по комплексу проблем? Выберите самого компетентного (компетентных) эксперта, его (их) оценка будет 10. Остальным экспертам присвойте оценки от 9 до 0 в порядке убывания компетентности. Если Вы настаиваете, то Ваши оценки будут сохранены в тайне для других экспертов". При опросе предъявляется список экспертов и перечень вопросов представленных на экспертизу. Результат этой процедуры оформляется в виде таблицы I.

Из этой таблицы можно определить коэффициенты относительной компетентности экспертов:

$$\bar{e}_j = \frac{\sum_i e_{ij}}{\sum_i \sum_j e_{ij}}, \quad 0 \leq \bar{e}_j \leq 1$$

Дисперсии этих оценок  $\bar{\sigma}_{ej}$  могут свидетельствовать об однородности мнения коллектива о каждом эксперте в отдельности. Дисперсии  $\bar{\sigma}'_{ei}$  дают информацию о близости оценок каждого эксперта к средним оценкам коллектива  $\bar{e}_j$ .

Таблица I

	$\mathcal{A}_1$	$\mathcal{A}_2$	$\dots$	$\mathcal{A}_j$	$\dots$	$\bar{b}'_{\mathcal{A}k}$
$\mathcal{A}_1$	$e_{11}$	$e_{12}$	$\dots$	$e_{1j}$	$\dots$	$\bar{b}'_{\mathcal{A}1}$
$\mathcal{A}_2$	$e_{21}$	$e_{22}$	$\dots$	$e_{2j}$	$\dots$	$\bar{b}'_{\mathcal{A}2}$
$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$	$\dots$
$\mathcal{A}_i$	$e_{i1}$	$e_{i2}$	$\dots$	$e_{ij}$	$\dots$	$\bar{b}'_{\mathcal{A}i}$
$\bar{e}_k$	$\bar{e}_1$	$\bar{e}_2$	$\dots$	$\bar{e}_j$	$\dots$	$\dots$
$\bar{b}_{\mathcal{A}k}$	$\bar{b}_{\mathcal{A}1}$	$\bar{b}_{\mathcal{A}2}$	$\dots$	$\bar{b}_{\mathcal{A}j}$	$\dots$	

Б. Определение оценок проблем, альтернатив, проектов и т.п.

Как и в первом случае, заполняется таблица относительных оценок. Экспертам предъявляется перечень проблем, либо проектов, либо альтернатив (что подлежит экспертизе). Кроме того каждая проблема (проект, альтернатива и т.п.) сопровождается четким пояснением (определением, описанием и т.п.). Последнее нужно для того, чтобы по возможности устранить неоднозначность вопросов, подлежащих экспертизе. Желательно, наряду с оценками, фиксировать уточнения, дополнения, возражения, высказываемые экспертами.

Типичный вопрос эксперту:

"Дайте относительную оценку  $v_{jk}$  по группе вопросов  $B_k$ . Выберите  $B_k$  с максимальным значением (например, самую важную цель, самый удачный проект и т.п.), его оценка  $v_{jk}$  будет 10, остальным присвойте значения от 9 до 0 (в порядке убывания важности цели, удачности проекта - в зависимости от того, что подвергается экспертизе). Более подробное пояснение вопросов (проблем, задач, целей, проектов, ...) следующее..."

Результат этой процедуры оформляется в виде таблицы 2.

Таблица 2

	$\bar{e}$	$B_1$	$B_2$	...	$B_k$	...	$\bar{\sigma}_{э}$
$э_1$	$\bar{e}_1$	$v_{11}$	$v_{12}$	...	$v_{1k}$	...	$\bar{\sigma}_{э1}$
$э_2$	$\bar{e}_2$	$v_{21}$	$v_{22}$	...	$v_{2k}$	...	$\bar{\sigma}_{э2}$
$э_3$	$\bar{e}_3$	$v_{31}$	$v_{32}$	...	$v_{3k}$	...	$\bar{\sigma}_{э3}$
...	...	...	...	...	...	...	...
$э_j$	$\bar{e}_j$	$v_{j1}$	$v_{j2}$	...	$v_{jk}$	...	$\bar{\sigma}_{эj}$
...	...	...	...	...	...	...	...
		$\bar{v}_1$	$\bar{v}_2$	...	$v_k$	...	
		$\bar{\sigma}_{v_1}$	$\bar{\sigma}_{v_2}$	...	$\bar{\sigma}_{v_k}$		

Из этой таблицы можно получить коэффициенты относительных оценок  $\bar{v}_k$  вопросов  $B_k$ :

$$\bar{v}_k = \frac{\sum_j v_{jk} \cdot \bar{e}_j}{\sum_j \sum_k v_{jk} \cdot \bar{e}_j}, \quad 0 \leq \bar{v}_k \leq 1$$

Дисперсии  $\bar{\sigma}_{эj}$  характеризуют отличие мнения каждого эксперта по вопросам  $B_k$  от среднего мнения коллектива экспертов.

Дисперсии  $\bar{\sigma}_{v_k}$  - показывают единство экспертов в оценке каждого вопроса.

Другая наиболее частая форма таблиц следующая:

Таблица 3

$\Phi$	$\Phi_1$	...	$\Phi_i$	...	$\Phi_n$	$R_j$
	$\rho_1$	...	$\rho_i$	...	$\rho_n$	
$A_1$	$\alpha_{11}$	...	$\alpha_{1i}$	...	$\alpha_{1n}$	$R_1$
$A_2$	$\alpha_{21}$	...	$\alpha_{2i}$	...	$\alpha_{2n}$	$R_2$
...	...	...	...	...	...	...
$A_j$	$\alpha_{j1}$	...	$\alpha_{ji}$	...	$\alpha_{jn}$	$R_j$
...	...	...	...	...	...	...
$A_m$	$\alpha_{m1}$	...	$\alpha_{mi}$	...	$\alpha_{mn}$	$R_m$

здесь:

$A_j$  - альтернативы (способы достижения цели;  $F_i$  - факторы, влияющие на достижение цели;

$\alpha_{ji}$  - коэф. соответствия  $j$ -альтернативы  $i$ -фактору;

$R_j$  - общий показатель качества достижения  $j$ -альтернативой заданной цели.

$$\text{Обычно } R_j = \sum_{i=1}^n F_i \alpha_{ji}$$

В этом случае экспертам предлагается заполнить таблицу (проставить  $F_i$  и  $\alpha_{ji}$ ). После обработки всех таблиц получают, например, усредненные показатели  $R_j$  и выбирается та альтернатива, которая имеет  $\max R_j$  (или  $\min R_j$ ).

### В. Обсуждение оценок

Выявляются аномальные дисперсии  $\sigma'_{\delta_j}$  (например, по критерию Фишера). Следует выслушать соответствующих экспертов, чтобы выявить причину аномальности - оригинальность мнения, либо недостаточная компетентность.

Аналогично анализируются причины аномальных  $\sigma_{\delta_k}$  - недостаточная однозначность сформулированных вопросов  $B_k$ , либо наличие двух мнений у экспертов по предложенным вопросам.

### Г. Проведение нового тура оценок

После анализа оценок может быть проведен новый тур экспертизы. При этом в таблицы заносятся уточненные, либо дополнительные вопросы. Затем повторяются процедуры Б.В.Г. до тех пор, пока не будут получены достаточно устойчивые оценки.

## Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Лопухин М.И. PATTERN - метод планирования и прогнозирования научных работ. "Сов.радио", 1971.
2. Оптнер С.Л. Системный анализ для решения деловых и промышленных проблем. "Сов.радио", 1969. Космическая эра. стр.362-392, "Мир", 1970.

3. Космическая эра. стр. 362-392, "Мир", 1970.
4. Кестенбаум Р. Что такое системный подход ?, Электроника, т. 42, № 9, 1969.
5. Метод экспертных оценок.
6. Диксон Дж. Проектирование систем: изобретательство, анализ и принятие решений. "Мир", 1969.
7. Черчмен И., Акоф Р. и Арнольд Д. Введение в исследование операций. Пер. с англ. "Наука", 1968.
8. Кибернетизация научного эксперимента, № 2, ЛГУ им.П.Стучки, Рига, 1971.
9. Наст.сборник, стр. II-25.

2,

А.А. Бернуп

## ФОРМАЛИЗАЦИЯ ЦЕЛИ ПРОЕКТИРОВАНИЯ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОЙ СИСТЕМЫ

В Латвийском государственном университете им. П. Стучки в настоящее время ведутся работы по созданию измерительного центра в области физики твердого тела на базе ЦВМ /I4/. Центр должен обеспечить автоматизацию нескольких совмещенных во времени физических экспериментов, каждый из которых находится под контролем отдельного исследователя. Параллельно должна решаться не менее чем одна независимая задача вычислительного характера.

Разработка научно-исследовательских систем (НИС) такого центра связана с выбором, конструированием и организацией комплекса измерительной, исполнительной и вычислительно-управляющей техники. Решение задач указанного масштаба следует отнести к методологии проектирования сложных систем, которая в области создания НИС еще недостаточно развита. Цель статьи - рассмотреть один из возможных подходов к методологии проектирования НИС.

За основу ее выбран системный подход, суть которого изложена в литературе - /1,3,13/. Ценность последнего заключается в том, что на каждом этапе принятия решений от разработчика требуется как ясная формулировка возможных альтернатив, так и критериев, согласно которым необходимо их оценить. Это конкретизирует методологию проектирования и позволяет ее контролировать.

В данной статье применяются концепции многоуровневых систем /3,4,12/, согласно которым цель сложной системы формализуется как иерархическое дерево подцелей. Вершину дерева образует глобальная цель системы.

Как отмечает Маккол /2/, цель проектирования сложной системы определяется не для того, чтобы на этапе завершения

убедиться в соответствии системы назначению. Она необходима для сравнения альтернатив системы и начальных оценочных испытаний, которые обязательно должна пройти модель проектируемой НИС. Только после этого можно приступить к разработке материальной базы системы.

Нельзя отрицать, что в процессе проектирования НИС часто еще применяется чисто интуитивный подход. Отдельные узлы систем разрабатываются на основе субъективного понимания глобальной цели НИС или она не ставится вообще. Эти недостатки в значительной мере может устранить параметрическая формулировка цели. Однако на практике она часто еще не находит широкого применения именно потому, что трудно установить количественные соотношения между отдельными иерархическими уровнями цели проектирования НИС.

По этому поводу следует процитировать следующее: "Практически нет метода решения удовлетворяющей универсальной цели сложной системы. Однако возможен приближенный метод решения данной универсальной проблемы, основанный на декомпозиции цели в иерархию подцелей (в дерево подцелей), допускающих определение в операционных терминах /3/.

Разработку дерева цели следует начинать с вершины и как показывает опыт, параметры первого уровня всего лучше задавать в абстрактной форме. На этом этапе требуется ясно формулировать задачу проекта не загромождая понятие цели проектирования НИС тактиками ее реализацией и проблемами структурных альтернатив системы. По мере спуска по дереву локальные критерии приобретают все больше структурный характер. Они формулируются конкретными разработчиками на этапе предварительного проектирования НИС и отражают стратегии, согласно которым решено достичь цели высших уровней. Именно дерево цели фиксирует методологию проектирования и отражает место каждого решения в системе. В настоящей статье формализован верхний уровень дерева цели проекта НИС.

Процесс реализации НИС и  
физического эксперимента

Формулировка цели проектирования начинается с анализа той внешней среды, в которой должна функционировать система. По этому поводу строится модель процессов, в которых может принять участие НИС.

Процесс творческой работы экспериментатора строго сформулировать трудно. Однако изучение коллектива экспериментаторов в определенной лаборатории позволяет разработать его формализованную модель в виде ориентированного графа.

В нашем случае эта весьма грубая модель процесса внедрения отдельной НИС и ее экспериментов задана графом рис. I, который назовем основным графом системы (ОГС).

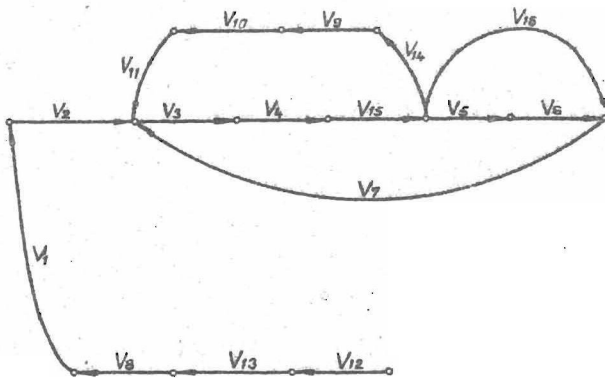


Рис. I

Перечислим дуги, которые отображают соответствующие фазы процесса ОГС:

- ✓<sub>I2</sub> - разработка генеральной гипотезы о характере типовых экспериментов в проектируемой НИС;
- ✓<sub>I3</sub> - разработка и комплектация узлов НИС; определение ее структуры;
- ✓<sub>8</sub> - монтаж системы, разработка тестовых программ ее узлов, проверка узлов в динамическом режиме;
- ✓<sub>I</sub> - поисковый эксперимент, во время которого согласно гипотезе физик находит интересующие его явления в исследуемом объекте.
- ✓<sub>2</sub> - составление и отладка программы эксперимента;
- ✓<sub>3</sub> - автоматизированное управление физическим экспериментом и обработка промежуточных результатов эксперимента;
- ✓<sub>4</sub> - окончательная обработка результатов эксперимента и представление их физики;
- ✓<sub>I5</sub> - разработка гипотезы о принципах следующего локального эксперимента;
- ✓<sub>5</sub> - перекомпиляция структуры аппаратуры на основе набора готовых системных узлов;
- ✓<sub>6</sub> - поисковый эксперимент;
- ✓<sub>7</sub> - внесение изменений в программе эксперимента;
- ✓<sub>I4</sub> - комплектация или разработка дополнительного набора устройств к системе;
- ✓<sub>9</sub> - подключение аппаратуры к НИС, составление ее тестов и отладка агрегатов в динамическом режиме;
- ✓<sub>I0</sub> - поисковый эксперимент;
- ✓<sub>II</sub> - дополнение комплекта программ и отладка;
- ✓<sub>I6</sub> - дуга графа не содержащая работ.

Согласно ОГС (рис. I) следует рассмотреть четыре пути процесса внедрения НИС и осуществления физических экспериментов.

Путь  $S_0 = \{V_{12}, V_{13}, V_9, V_7, V_2, V_3, V_4, V_{15}\}$  начинается с дуги  $V_{12}$  и описывает процесс реализации основной структуры НИС и первый ее эксперимент. Он является весьма трудоемким и обычно выполняется не более одного раза. После  $S_0$  могут следовать:  $S_1 = \{V_{16}, V_7, V_3, V_4, V_{15}\}$  - внесение некоторых изменений в программе и повторение процесса измерений;

$S_2 = \{V_5, V_6, V_7, V_3, V_4, V_{15}\}$  - повторение экспериментов с предварительной перекомплектацией структуры НИС пользуясь стандартными узлами и программами НИС.

$S_3 = \{V_{14}, V_9, V_{10}, V_{11}, V_3, V_4, V_{15}\}$  - повторение эксперимента с предварительной разработкой или комплектацией новых аппаратурных и программных компонентов НИС. Обозначим через  $M(t_i)$  математическое ожидание среднего времени реализации  $i$ -той дуги графа. На основе опыта, полученного Проблемной лабораторией физики полупроводников ЛГУ им. П. Стучки во время работы с научно-исследовательскими системами на базе УВМ "Днепр-1" в настоящее время имеется следующая информация о вероятностях соответствующих путей  $P(S_i)$  и длительностях соответствующих фаз ОГС:

$$P(S_1) = 0,6; \quad P(S_2) = 0,3; \quad P(S_3) = 0,01$$

$$M(t_1) = 40$$

$$M(t_7) = 2,5$$

$$M(t_2) = 450$$

$$M(t_9) = 150$$

$$M(t_3) = 70$$

$$M(t_8) = 50$$

$$M(t_4) = 7$$

$$M(t_{10}) = 40$$

$$M(t_5) = 1$$

$$M(t_{11}) = 75$$

$$M(t_6) = 1,5$$

Параметры  $M(t_i)$  нормированы относительно  $M(t_5)$ .

Время морального старения систем, на которых реализован процесс типа ОГС (рис.1), самими физиками определяется более чем в пять лет.

Приведенные данные позволяют установить приоритеты

$$\mu_j = M(t_j) \sum_{i=1}^3 P_e(S_i) \quad (I)$$

характеризующие целесообразность внедрения автоматизации на  $j$ -том этапе ОГС.

$P_e(S_i)$  - вероятность реализации  $i$ -той пути ОГС, в которой включена фаза  $V_j$  длительностью  $t_j$ .

{ $e$ } - номера тех путей, которые проходят через  $j$ -тую дугу. С учетом того, что  $P(S_0) \ll P(S_3) < P(S_2) < P(S_1)$  путь  $S_0$  можно не рассматривать. Анализ остальных путей согласно формуле (I) устанавливает следующие приоритеты:

$\mu_3 = 63,7$  - фаза управления физическим экспериментом и обработка его промежуточных результатов;

$\mu_4 = 6,37$  - фаза окончательной обработки результатов эксперимента, их представление экспериментатору;

$\mu_7 = 2,25$  - фаза внесения небольших изменений в программу эксперимента;

$\mu_{11} = 0,75$  - дополнение комплекта программ новыми алгоритмами управления экспериментом;

$\mu_9 = 0,50$ ;  $\mu_6 = 0,45$ ;  $\mu_{10} = 0,40$ ;  $\mu = 0,30$

Отсюда можно найти часть графа ОГС, которая подлежит автоматизации.

Относительно модели ОГС следует отметить, что она является весьма грубой. Однако задача синтеза НИС решается в условиях неполной информации. Эта неопределенность вызвана необходимостью свободных действий в творческой работе экспериментатора. Согласно многоуровневому подходу [3] методику конструирования сложных систем в таких случаях принято рассматривать как процесс обучения. Последний невозможен без анализа и обобщения данных предыдущих этапов. Поэтому в аспекте будущих разработок первостепенную важность приобретает формализация параметров тех моделей, на основе которых создаются НИС сегодняшнего дня.

Однако на этом изучение внешней среды НИС не заканчивается. Для формулировки цели НИС следует анализировать

также коллектив теоретиков, который предусматривает пользоваться только вычислительной частью НИС. То же касается коллектива инженеров эксплуатации и среды администрации будущей НИС. Для краткости эта часть внешней среды системы здесь не рассматривается.

Формализацию первого уровня дерева цели проекта НИС можно свести к синтезу следующих пяти критериев:

- $\Pi$  - производительность НИС,
- $C$  - удельная стоимость пользования системой,
- $S$  - удельная сложность обслуживания НИС,
- $D$  - доступность системы,
- $M$  - математическое ожидание среднего времени безотказной работы системы.

### Производительность НИС

Производительность проектируемой НИС определяется компонентой обслуживания физиков экспериментаторов  $\Pi_3$  и компонентой обслуживания теоретиков  $\Pi_T$ . Взаимный их приоритет на обслуживание может быть задан в форме весового коэффициента  $M_0 \leq 1$ . Тогда полная производительность НИС:

$$\Pi = \Pi_3 + M_0 \Pi_T \quad (2)$$

Как отмечается в литературе /6, стр.225/ в настоящее время не разработана общая методика определения производительности вычислительных систем. Критерии эффективного быстрого действия ЦВМ сформулированные В.М.Глушковым /7/, в основном ориентированы на однопроцессорные машины. В данном

случае требуется учесть многопроцессорную структуру современных ЦВМ, особенности организации мультипроцессов и особый вес средств математического обеспечения системы.

Поэтому для определения производительности предлагается многофункциональный подход, который рассматривает интенсивности информационных по-

токов основных функций ЦВМ. Множество функций при этом выбирается с учетом свойств решаемых задач.

Рассмотрим, во-первых, производительность НИС в режиме решения вычислительных задач. Критерий производительности  $\Pi_r$  формализуется с помощью следующих параметров:

$\{L_i\}$  - множество максимальных эффективных интенсивностей информационных потоков в НИС, которые она способна вырабатывать согласно требованиям конкретной решаемой задачи.

$$L_i = \frac{\lambda_i}{t_i + \tau_i} \quad (3); \text{ где}$$

$\lambda_i$  - максимально допустимый объем информационного потока  $i$ -того рода (например, на графопостроитель НИС) измеряемый в байтах.

$t_i$  - агрегатное время, которое необходимо, чтобы поток объемом  $\lambda_i$  реализовать на соответствующем узле НИС.

$\tau_i$  - время внутренней организации НИС, которое тратит решаемая задача на ожидание момента начала потока  $i$ -того типа.

$\{M_i\}$  - множество структурных параметров решаемой задачи, которые определяют, какие должны соблюдаться пропорции между интенсивностями  $\{L_i\}$ , чтобы их повышение дало прирост производительности НИС.

$\{x_i\}$  - параметры качественного соответствия неформализованных свойств  $i$ -того системного потока требованиям решаемой задачи. Их значения в простейшем случае может определить программист в пределах  $0 \leq x_i \leq 1$ . При оценке  $x_i$  интенсивность  $i$ -того потока не должна учитываться.

$S_o; S_i$  - параметры соответствия доступного объема оперативной памяти  $m$ , соответственно, буферной памяти требованиям решаемой задачи.

$q$  - параметр соответствия набора стандартных программ ЦВМ требованиям пользователя.

Значения  $0 \leq q \leq 1$ ;  $0 \leq S_0 \leq 1$ ;  $0 \leq S_1 \leq 1$  также может определить сам программист. Однако существует более объективный способ - так называемый метод экспертных оценок, принципы которого изложены в литературе /8/.

Пользуясь  $n$  совмещенными информационными потоками формализуем критерий

$$P_T = q S_0 S_1 \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{t_i + \tau_i} x_i \quad (4)$$

при следующих дополнительных условиях:

1) в формуле (4) параметры  $L_i = \frac{\lambda_i}{t_i + \tau_i}$  принимают значения удовлетворяющие равенству

$$L_1 \mu_1 = L_2 \mu_2 = \dots = L_i \mu_i = L_n \mu_n$$

2)  $\sum_{i=1}^n \mu_i = 1$

Следует отметить, что все параметры выражения (4) могут нести также смысл математического ожидания соответствующих величин.

В нашем случае  $n = 7$  и  $\{\lambda_i\}$  расшифруется в форме следующих максимально допустимых потоков для НИС:

$\lambda_1$  - объем потока ввода информации в системе в форме программ и данных,

$\lambda_2$  - объем потока вывода информации на печатающее устройство,

$\lambda_3$  - объем потока программ через основной процессор системы (число операций приведенное к размерности байтов),

$\lambda_4$  - объем потока информации выводимый на самопишущий прибор,

$\lambda_5$  - объем потока информации выводимый на экран электронно-лучевой трубки,

$\lambda_6$  - объем двухстороннего потока сообщений через терминал связи пользователя и НИС в режиме

диалога с машиной,

$\lambda_1$  - объем потока программ, создаваемых транслятором системы.

Существенную роль играет также поток обращений задач к буферной памяти. Однако этот вопрос относится в проблемам внутренней организации НИС. Влияние указанного потока на  $\Pi_T$  осуществляется через параметры  $\{\tau_i\}$ .

### Производительность НИС в режиме управления экспериментом

В этом случае производительность НИС, во-первых, определяется качеством информации, которую способна выработать конкретная НИС. Однако теория информации не дает пока общие методы оценки ценности информации. Эта задача связана с определением образа информации и вычислением параметра ее восприятия /9/ в сознании экспериментатора. Ввиду сложности этой задачи производительность  $\Pi_3$  будем определять на основе следующих компонентов:

1. Факторов, которые ограничивают чувствительность метода физического эксперимента и тем самым влияют на ценность ее результатов.
2. Технологической скорости процесса исследований, которую обеспечивает НИС для конкретного метода эксперимента.
3. Многообразие методик исследований в НИС, которое позволяет экспериментатору рассматривать конкретное физическое явление в разных аспектах.

Нельзя отрицать также фактор создания условий для новых методик исследований, однако этот аспект относится к стратегиям, а не к тактикам автоматизации научных исследований.

В процессе синтеза критерия  $\Pi_3$  будем ориентироваться на фазу управления процессом эксперимента в ОГС, которая имеет наибольший приоритет среди остальных. В этом случае,

кроме потоков  $\lambda_1 + \lambda_2$ , перечисленных при формулировке  $\Pi_T$ , следует рассмотреть еще следующие факторы:

$\lambda_8$  - максимально допустимый поток контрольной информации с внешних устройств на ЦВМ (в связи с этим  $n=8$ ).

$\lambda_j$  - максимально допустимый объем потока операций для измерения параметра  $j$ -того типа и засылки результатов в память НИС.

Допустим, что  $j = / 1, 2 \dots S /$

$\lambda_e$  - максимально допустимый объем потока операций установки определенного значения физического воздействия  $e$  - того типа на объект исследований.

Допустим, что  $e = / 1, 2 \dots Z /$ .

Во всех случаях число операций приведено к размерности байтов. Производительность НИС в режиме управления экспериментом вычисляется по формуле.

$$\Pi_3 = q \cdot S_0 \cdot S_1 \left( \sum_{i=1}^n \frac{\lambda_i}{t_i + \tau_i} \cdot \alpha_i + \sum_{j=1}^S \frac{\lambda_j}{t_j + \tau_j} \cdot \alpha_j + \sum_{e=1}^Z \frac{\lambda_e}{t_e + \tau_e} \cdot \alpha_e \right) \quad (5)$$

При следующих дополнительных условиях:

1) для всех значений  $i = 1 \div n, j = 1 \div S, e = 1 \div Z$  соблюдается равенство  $L_i \mu_i = L_j \mu_j = L_e \mu_e$

$$2) \sum_i \mu_i + \sum_j \mu_j + \sum_e \mu_e = 1$$

Параметры  $S_0, S_1, \mu_i, \mu_j, \mu_e, t_i, \tau_i, \alpha_i$  имеют ту же расшифровку, что в формуле (4).

$q$  - коэффициент соответствия многообразия доступных методов исследований с помощью НИС требованиям физика-исследователя. Его значения должен определить сам исследователь в диапазоне  $1 \geq q \geq 0$ .

Особо следует рассмотреть параметры качественного соответствия измерительно-воздействующей аппаратуры  $\alpha_j, \alpha_e$  требованиям эксперимента.

Они должны определить компоненты чувствительности

системы по быстродействию  $x_{j\delta}$ ,  $x_{e\delta}$ , точности агрегата  $x_{j\tau}$ ,  $x_{e\tau}$  и достоверности результатов  $x_{jg}$ ,  $x_{eg}$ . В условиях, когда исследователь перед каждым экспериментом строит определенную стратегию действий, реально требовать, чтобы им был формулирован диапазон допустимых значений этих параметров. Обозначим через  $x_{j\tau}^0$ ,  $x_{eg}^0$ ,  $x_{j\delta}^0$  максимально требуемые значения чувствительности этого диапазона для измерительного канала, а через  $x_{e\tau}^0$ ,  $x_{eg}^0$ ,  $x_{e\delta}^0$  - значения для канала физических воздействий.

$x_{j\tau}$ ,  $x_{jg}$ ,  $x_{j\delta}$ ,  $x_{e\tau}$ ,  $x_{eg}$ ,  $x_{e\delta}$  - значения, которые обеспечивает аппаратура системы.

Введем параметр

$$\Delta = \begin{cases} x^0 - x & - \text{если } x^0 - x > 0 \\ x^0 & - \text{если } x^0 - x \leq 0 \\ 0 & - \text{если } x \text{ недопустимо мал} \end{cases}$$

для соответствующего эксперимента.

Компоненты чувствительности в выражении (5) можно вычислять по формулам:

$$x_j = \frac{\Delta_{jg}}{x_{jg}^0} \cdot \frac{\Delta_{j\tau}}{x_{j\tau}^0} \cdot \frac{\Delta_{j\delta}}{x_{j\delta}^0}; \quad x_e = \frac{\Delta_{eg}}{x_{eg}^0} \cdot \frac{\Delta_{e\tau}}{x_{e\tau}^0} \cdot \frac{\Delta_{e\delta}}{x_{e\delta}^0}$$

Пользуясь формулами (2), (3), (4), (5) можно определить производительность НИС для конкретной методики эксперимента или вычислительной задачи теоретического характера. Если на системе одновременно реализовано  $\Gamma$  методик экспериментов и  $m$  алгоритмов теоретического характера, то производительность системы вычисляется в форме математического ожидания

$$\bar{P} = \sum_{i=1}^{\Gamma} P_i \Pi_{si} + \mu_0 \sum_{j=1}^m P_j \Pi_T \quad (6)$$

где  $P_i$  и  $P_j$  вероятности эксплуатации соответствующих алгоритмов в НИС.

### Математическое ожидание времени безотказной работы системы

В качестве критерия надежности системы можно выбрать

математическое ожидание времени безотказной работы НИС

$$M = \sum_{\theta=1}^n \theta P(\theta) \quad (7)$$

где  $\theta$  - время безотказной работы системы,  $P(\theta)$  - вероятность этого параметра. Обычно работа системы определяется некоторыми ограничениями на  $\theta$  и  $P(\theta)$ . Алгоритм эксперимента определяет минимальное значение параметра  $\theta = q$  при котором требуется  $P(\theta) = 1$ . С противоположной точки зрения экономические соображения показывают, что увеличивать значение  $\theta$  целесообразно только до некоторого значения  $\theta = n$ .

#### Удельная стоимость пользования системой

В связи с тем, что невозможно определить прямой экономический эффект научных исследований, трудно в данном случае установить и срок экономической окупаемости НИС. Поэтому удельную стоимость пользования системой  $C$  определим, учитывая капиталовложения на ее аппаратуру  $\alpha_a$ , капиталовложения на математическое обеспечение НИС  $\alpha_n$  и годовой фонд заработной платы обслуживающего персонала  $F_i$ . Критерий  $C$  может быть построен по принципу, который требует прогноз на время, в течение которого гарантируется целесообразное и эффективное использование затраченных экономических средств. Обозначим:

$\mathcal{N}$  - минимальное время эффективного использования системы, которое прогнозирует заказчик при условии, что в процессе разработки системы будет обеспечена некоторая его стратегия, заключающаяся в минимизации определенного функционала  $B$ .

$\mathcal{N}$  измеряется в годах;

$\kappa_r = \frac{t_a}{t_a + t_p + t_n}$  - коэффициент готовности системы, где

$t_a$  - среднее значение времени готовности системы к эксплуатации,  $t_p$  - среднее значение времени восстановления

ления системы после отказа,  $t_n$  - время профилактических работ.

$\frac{t_3}{365 \cdot 24}$  - среднее значение коэффициента использования системы в течение года.

$t_3$  - приведенное время, в течение которого согласно техническим условиям систему эксплуатирует в среднем  $F$  заказчика ( $t_3$  задается в часах).

Формулируем критерий удельной стоимости пользования системой

$$C = \frac{d_a + d_n + (1-B) \sum_{i=1}^N F_i}{h_{kr} N (1-B)} \left[ \frac{\text{рубл}}{\text{час}} \right] \quad (8)$$

Величина  $h_{kr}$  определяет вероятность эффективной работы системы.

Особо следует рассмотреть стратегию минимизации функционала  $B$ , который должен удовлетворить неравенство  $1 \geq B \geq 0$ . Требуется, чтобы структура критерия  $B$  позволила оценить инвариантность НИС к изменениям свойств ее окружающей среды. Отметим, что способность выжить в изменчивых условиях для биологических систем часто оценивается по критерию лабилизации их функций и устойчивости структуры /10/. Учитывая это, функционал  $B$  может быть формулирован как линейная комбинация нескольких, в нашем случае трех критериев с весовыми коэффициентами  $\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3$ . Последние определяются методами экспертных оценок при условии  $\lambda_1 + \lambda_2 + \lambda_3 = 1$ . Определяем:

$$B = \lambda_1 R + \lambda_2 \frac{M_0 - M_c}{M_0} + \lambda_3 \frac{t_0 - t_c}{t_c} \quad (9)$$

Критерий  $R$  должен показать, на сколько уменьшится интенсивность самого чувствительного информационного потока, обслуживающего типовой эксперимент в системе, если число одновременно обслуживаемых экспериментов увеличить  $q$ , раз. Критерий с весом  $\lambda_2$  предусмотрен для оценки прироста математического ожидания времени безотказной работы самой надежной части системы при условии, что спроектированная

система усовершенствована за счет средств, которые составляют  $q_2$  процентов затраченных капиталовложений ( $\alpha_a + \alpha_m$ ). Критерий с весом  $\lambda_3$  прогнозирует уменьшение времени внедрения нового типа эксперимента  $t_o = t_9 + t_{10} + t_{11}$  (см. рис. I) в системе при условии, что существующая структура НИС будет усовершенствована за счет средств, которые составляют  $q_3$  процентов затраченных капиталовложений. В выражении (9) введены следующие обозначения:

$M_o$  - оптимальное значение математического ожидания времени безотказной работы системы. Ее должен выбирать заказчик, руководствуясь факторами удобства обслуживания НИС.

$t_o$  - оптимальное время внедрения нового типа эксперимента, которое определено равенством  $t_o = t_3 + t_4$ . Последнее согласно ОГС (рис. I) требует, чтобы время внедрения эксперимента  $t_o$  и время одного полного его цикла были сравнимы.

$M_c, t_c$  - значения соответствующих параметров в случае усовершенствованной системы. Параметр  $R$  определяем с помощью интенсивностей информационных потоков одного типового эксперимента  $L_i, L_j, L_e$ . Они вместе со значениями  $i = 1 \div n, j = 1 \div s, e = 1 \div z$  рассмотрены в определении производительности НИС. Через  $L'_i, L'_j, L'_e$  обозначим значения интенсивностей после введения изменений в системе.

$L_i, L_j, L_e$  - значения интенсивностей до изменения числа обслуживаемых заказчиков.

Для всех значений  $i, j, e$  вводим параметры:

$$R_i = \max\left(\frac{L_i - L'_i}{L_i}\right); R_j = \max\left(\frac{L_j - L'_j}{L_j}\right); R_e = \max\left(\frac{L_e - L'_e}{L_e}\right)$$

Формулируем параметр:  $R = \max(R_i, R_j, R_e)$

Будем считать, что параметры  $q_1, q_2, q_3, N_o, M_o, t_o$  заданы правильно, если соблюдается условие  $1 \geq B \geq 0$ . Если оказывается, что  $B > 1$ , это явление будем интерпре-

тировать как убытки, которые вызваны слишком большими ресурсами  $q_1, q_2, q_3$  для реализации цели  $B=0$ .

В этом случае указанные параметры определяются заново.

### Доступность системы

Этим критерием определим отношение времени эффективной эксплуатации системы к полному времени, которое согласно ОГС требуется для реализации эксперимента на НИС.

Обозначаем:

$M(t)$  - математическое ожидание времени пользования аппаратурой системы.

$M(\tau)$  - математическое ожидание времени, которое тратится на реорганизацию структуры НИС после очередного эксперимента, программирование и ожидание в очереди на выделение аппаратурных средств по запросу соответствующего эксперимента. Доступность системы определяется выражением:

$$D = \frac{M(t)}{M(\tau) + M(t)}$$

### Удельная сложность обслуживания системы

Критерий удельной сложности обслуживания формализуем с помощью выражения:

$$S = K_r \cdot \frac{a + \sum_{i=1}^N F_i}{d_a + d_N}$$

$Q$  - стоимость комплекта запасных частей, инструмента и принадлежностей системы;

$F_i$  - годовой фонд заработной платы обслуживающего персонала;

$N$  - планируемое время эффективного использования системы в годах;

$(\alpha_a + \alpha_m)$  - капиталовложения в систему.

Понятие коэффициента готовности  $K_r$  пояснено в описании критерия удельной стоимости эксперимента.

### Глобальная цель проекта НИС

Приведенные пять критериев  $\Pi, C, D, S, M$  позволяют сформулировать верхний уровень дерева цели проекта НИС. Учитывая, что все пять критериев не приводимы к общей размерности, глобальная цель проекта системы  $\mathcal{J}$  может быть определена следующим образом. Анализируются требования заказчика и определяются минимально допустимые значения параметров  $\Pi, D$  и максимально допустимые значения критериев  $C, S$ . Обозначаем их через  $\Pi^o, C^o, D^o, S^o$ . Соответствующими символами без индексов обозначаются значения критериев спроектированной системы. Вводится параметр суммарного относительного выигрыша, который подлежит максимизации

$$\mathcal{J} = \mu_1 \frac{\Pi - \Pi^o}{\Pi^o} + \mu_2 \frac{D - D^o}{D^o} + \mu_3 \frac{C^o - C}{C^o} + \mu_4 \frac{S^o - S}{S^o}$$

$\mu_1, \dots, \mu_4$  - весовые коэффициенты соответствующих локальных целей проекта. Они, совместно со значениями  $\Pi^o, C^o, D^o, S^o$  могут быть определены методом экспертных оценок при условии  $\sum_i \mu_i = 1$ .

Заказчик выбирает значения констант  $\{a_i\}$  определяющие цель проекта: планируемое время эффективного использования  $N = a_1$ , которое определено функционалом стратегий  $B$  и требуемое значение критерия времени безотказной работы  $M \geq a_2$ . В дальнейшем не ставится задача максимизации  $M$  как самостоятельной компоненты глобальной цели НИС. Ограничивается параметр  $F_i \leq a_3$ .

Глобальная цель проекта НИС таким образом приобретает форму многомерного вектора:

$$\mathcal{J} = \mathcal{J}(J, N_o, M, F_i)$$

где  $J$  - компонента цели, которую следует максимизировать при дополнительных ограничениях:

$$(\alpha_a + \alpha_m) \leq \alpha_4$$

Заказчик также указывает прогнозируемое значение коэффициента использования системы  $k = \alpha_5$ , которое дано в определении удельной стоимости эксперимента  $C$ , и ресурсы  $q_1, q_2, q_3$ , позволяющие определить функционал  $B$ . Фиксируются те значения параметров в выражениях (4), (5), (6), (7), которые зависят от свойств задач решаемых с помощью научно-исследовательской системы. После этого глобальная цель проектирования определена. Если в нижних уровнях дерева цели не появляются дополнительные ограничения, то остальные параметры критерия  $J$  могут варьироваться.

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Кухтенко А.И., Волжович В.Л., Гичиняк В.Ф.  
О лингвистическом уровне абстрактного описания сложных систем управления.  
Труды семинара "Сложные системы управления", вып.2.  
Киев, 1969.
2. Справочник по системотехнике под ред.Р.Макола.  
Изд. "Советское радио", М., 1970.
3. Месарович М.Д.  
Применение многоуровневых систем в управлении процессами. Труды инженеров по электронике и радиотехнике.  
Том 58, № I, 1970 (перевод с английского).
4. Месарович М.Д. Общая теория систем и ее математические основы. Сб. Исследования по общей теории систем. Изд. "Прогресс", М., 1969.
5. Оптнер С.Д.  
Системный анализ для решения деловых и промышленных проблем. Изд. "Советское радио", М., 1969.

6. Малиновский Б.Н., Янович И.А., Египко В.И. и др.  
Основы проектирования управляющих машин промышленного назначения. Изд. "Машиностроение", М., 1969.
7. Глушков В.М.  
Два универсальных критерия эффективности вычислительных машин. *Доповіді АН УССР*, № 4, 1960.
8. Макаров И.М., Озерной В.М., Ястребов А.П.  
Выбор принципа построения сложной системы автоматического управления на основе экспертных оценок. "Автоматика и телемеханика", № 1, 1971.
9. Полетаев И.А.  
К определению понятия "информация". Сб. Исследования по кибернетике 1970.
10. Сетров М.И.  
О критерии организованности в биологии.  
"Философские науки", 1967, № 1.
11. Волкович В.Л.  
Методы принятия решений по множеству критериев оптимальности. Тр. семинара "Сложные системы управления", Киев, 1968.
12. Башмаков И.А., Кулешов Ю.И.  
Уровни математических моделей в больших системах. МЭИ. Доклады научно-технической конференции по итогам научно-исследовательских работ 1968-69 гг М., 1970.
13. Квейд Э.  
Анализ сложных систем. Изд. "Советское радио", М., 1969.
14. Сб. "Кибернетизация научного эксперимента", в.2, Рига, 1971.

2.

Ю. Я. Кузьмин

## СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД И НИР ЛАБОРАТОРИИ

При решении задач автоматизации в масштабе лаборатории возникает целый ряд проблем; одной из них является определение важности различных направлений научной деятельности лаборатории и соответствующего распределения ограниченных ресурсов. Это связано с тем, что для лаборатории важно иметь некоторые достаточно объективные критерии внутреннего финансирования НИР в целом и работ по автоматизации эксперимента в частности.

В своё время (1962-1964) похожая проблема распределения ресурсов в соответствии с важностью задач - была поставлена фирмой "Хониуелл" в США [1]. Разработанная методика определения важности задач в соответствии с основными целями организации получила название "Паттерн".

В проблемной лаборатории физики полупроводников Латвийского Госуниверситета был поставлен эксперимент с целью выяснения возможностей применения методики "Паттерн".

В данном случае главной задачей было выяснить основные цели лаборатории и направления научной деятельности, определить относительную важность и полезность направлений, установить принцип распределения ресурсов и определить вес работ по автоматизации эксперимента. Взаимосвязь процедур показана на рис. I.

Последнее особенно важно, так как автоматизация в физ. лаборатории является подчиненной проблемой. "Паттерн" позволяет определить целесообразность автоматизации каждого эксперимента и разработать единый план автоматизации всей лаборатории.

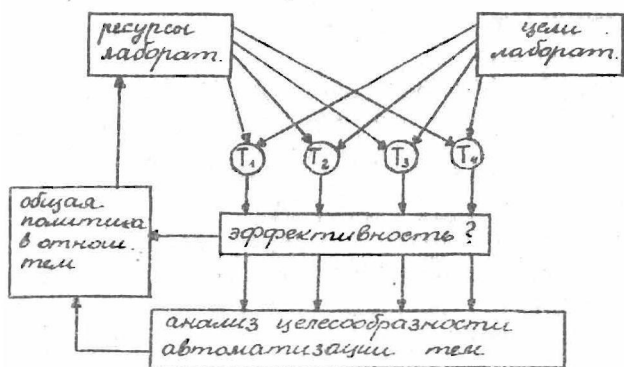


Рис. I

Процедуры анализа целесообразности автоматизации исследований.

Для выяснения важности целей лаборатории был составлен перечень возможных целей (рис.2) и с помощью М.Э.О. определены коэффициенты относительной важности.

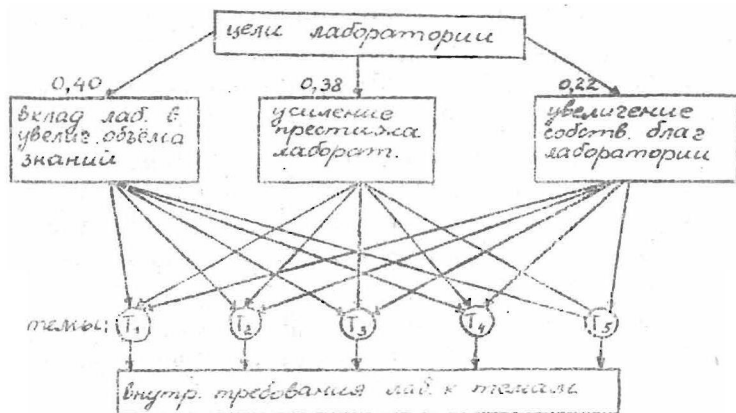


Рис.2

Научные темы должны удовлетворять совокупности внешних факторов (цели лаб.) и внутренних (полезность тем).

Расшифровка целей следующая:

- цель<sup>I</sup><sub>1</sub> - вклад лаборатории в увеличение объема знаний (диссертации, публикации, доклады, отчеты, открытия, авторские свидетельства и т.п.);
- цель<sup>I</sup><sub>2</sub> - усиление престижа лаборатории (соответствие научных направлений государственно важным, научная уникальность направлений, внедрение достижений в народное хозяйство, рост авторитета специалистов, рост интеллектуального уровня и т.п.);
- цель<sup>I</sup><sub>3</sub> - увеличение собственных благ лаборатории (совершенствование эксперимент. базы, улучшение помещений, обеспеченность финансами и т.п.).

Бланк экспертизы показан в виде таблицы I.

Принята 10-балльная оценка коэффициентов относительной важности.

Полученные значения математического ожидания важности этих целей указаны на рис. 2.

Далее были подробно рассмотрены научные задания (темы) лаборатории и определены коэффициенты их относительной важности ( $B_i$ ), полезности ( $\Pi_i$ ), распределения людских ресурсов ( $A_i$ ) и показатель эффективности. Для вычисления коэффициента относительной важности М.Э.О. были найдены коэффициенты соответствия всех тем каждой из трех целей.

Полезность темы оценивалась по прогнозу результативности темы, научной оригинальности, успешности выполнения, полезности темы для других тем лаборатории.

Таблица I

	Эксперты					Средняя нормирован. оценка
	Э1	Э2	Э3	Э4	...	
1. Увелич. объема знаний	10	8	10	10	...	0,40
2. Увеличение престижа	8	10	5	6	...	0,38
3. Увелич. матер. благ.	5	5	5	3	...	0,22
4.						
А. Результативность	10	10	10	10	...	0,32
а) диссертаци.	5	9	7	7	...	0,18
б) публикац.	10	10	10	10	...	0,26
в) доклад.	6	8	8	8	...	0,22
г) авторск.	8	5	4	5	...	0,17
д) внедр.	7	3	4	5	...	0,17
Б. Успешн. выполн.	5	6	5	5	...	0,22
а) технич. обеспеч.	6	6	5	6	...	0,18
б) кадров. обеспеч.	10	8	7	10	...	0,24
в) финанс. обеспеч.	6	9	10	7	...	0,21
г) понимание целей	3	4	7	8	...	0,18
д) независ. от случ. факторов	5	6	5	5	...	0,19
В. Полезность темы						
а) полезность для других тем	5	4	5	5	...	0,16
б) оригинальность	10	10	7	5	...	0,30
в) результативн.	10	10	10	10	...	0,32
г) успешность выполнения	5	6	5	5	...	0,22

Методом экспертных оценок были получены следующие показатели веса факторов:

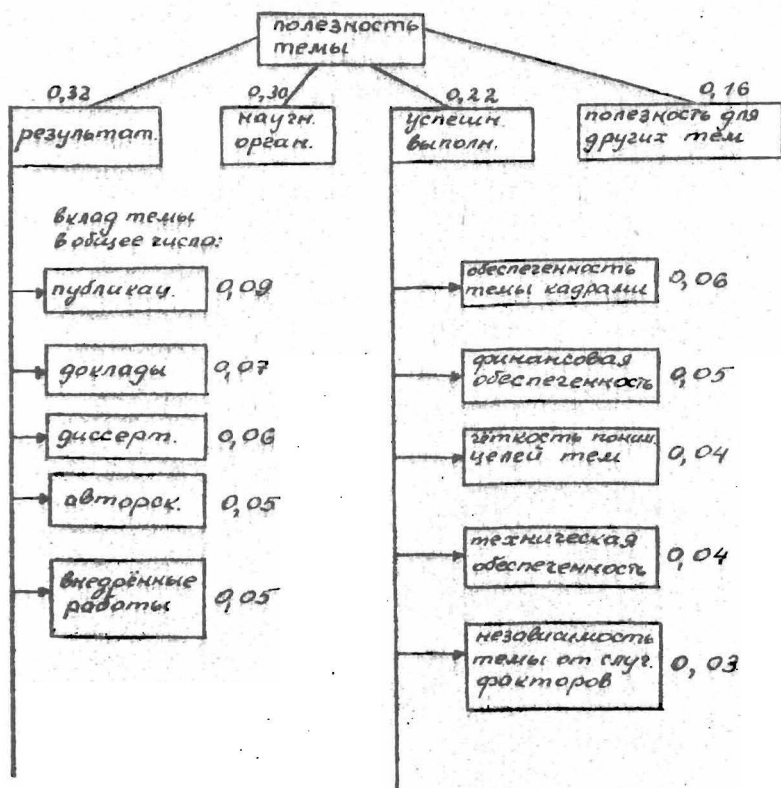


Рис. 3

Распределение коэффициента важности при определении полезности темы

Таблица 2

№	Ф а к т о р	T1	T2	T3	T4	T5
1.	Вклад темы в увеличение объема знаний	3	7	8	4	10
2.	Вклад темы в усиление престижа лаборатории	2	6	10	5	8
3.	Вклад темы в увеличение собственных благ лабор.	1	8	10	6	7
4.	Полезность темы для выполнения др. тем	0	6	10	3	9
5.	Научная оригинальность темы	6	8	10	6	8
6.	Успешность выполнения темы	3	8	10	6	8

Примечание: здесь и далее

- T I - недавно начатая тема, не соответствующая профилю исследований;  
 T2, T4 - темы, представляющие новое направление, соответствующие профилю лаборатории;  
 T5 - традиционная тема по профилю;  
 T3 - тема, связанная с автоматизацией;

В таблице 2 показан типичный бланк опроса экспертов при определении коэффициента соответствия и усредненные оценки экспертов по темам.

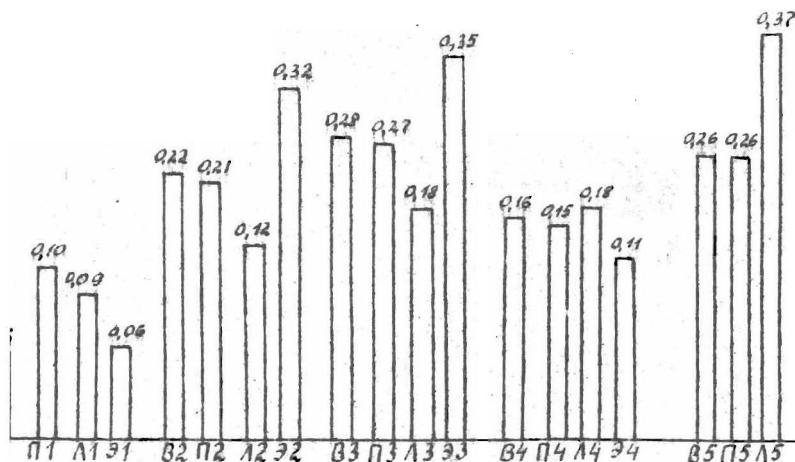
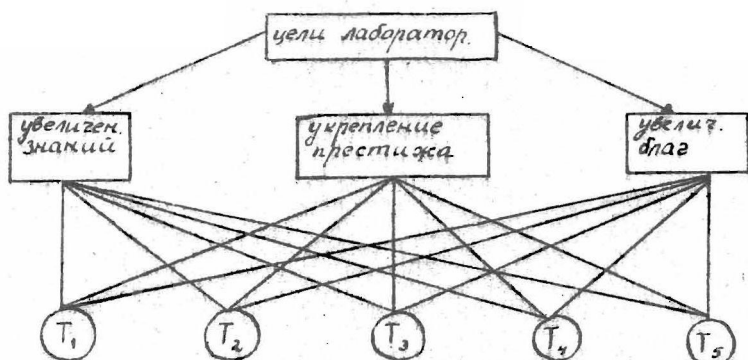


Рис. 4

Результат М.Э.О. по оценке полезности тем приведен на рис. 4. Здесь же показаны относительные распределения специалистов по темам ( $L_i$ ) и коэффициенты относительной эффективности тем ( $\mathcal{E}_i$ ), которые вычисляются по форму-

ле:

$$\mathcal{E}_i = \frac{B_i \Pi_i}{\Lambda_i}$$

При составлении "Паттерна" лаборатории было опрошено 17 ведущих физиков, получено 1026 чисел. Помимо оценок тем, были получены данные по оценке авторитетности экспертов (рис.5,а).

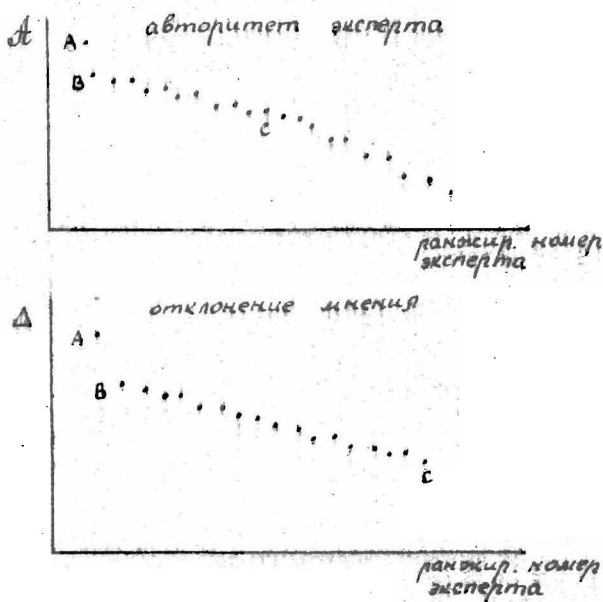


Рис.5

Кривая показывает наличие группы экспертов, недооцениваемых лабораторией (СД) и наличие одного эксперта, авторитет которого коллектив выделил особо.

Для проверки однородности коллективного мнения были построены ранжированные зависимости отклонений мнений экспертов от среднего мнения лаборатории (рис.5,б).

Кривые подтверждают гипотезу о статичности коллектива. Аномальными были мнения только 2-х экспертов.

Объективность полученных оценок подтверждает и тот логически понятный факт, что при сопоставлении авторитетности эксперта с отклонением его мнения от мнения лаборатории, эксперты с высокими показателями имели меньшее отклонение, а с низкими — большее.

Возникшие ранее опасения о возможности "нивелирования" "Паттерном" оригинальных мнений не оправдались. Методика позволяет быстро найти оригинальные мнения (по дисперсии) и даже оценить степень оригинальности. При оценке результатов экспертизы эти мнения должны быть проанализированы особо.

Также можно быстро выявить нечетко сформулированные вопросы анкеты (они имеют небольшую дисперсию). В этом случае следует детализировать, либо уточнить вопрос.

Легко определить наличие двух альтернативных мнений в коллективе и целый ряд других показателей, представляющих интерес при организации НИР.

Следует отметить большую универсальность "Паттерна". Раз составленная программа может быть использована в самых разнообразных случаях.

### Эффективность автоматизации эксперимента

При анализе возможных изменений эффективности исследований по теме в результате автоматизации возможны изменения как в полезности, так и в требуемых для исследований ресурсах. Научную лабораторию, конечно, в первую очередь интересуют положительные изменения в полезности (если негативные применения в ресурсах относительно невелики).

Однако при оценке целесообразности автоматизации необходимо учитывать общую динамику изменения эффектив-

ности исследований.

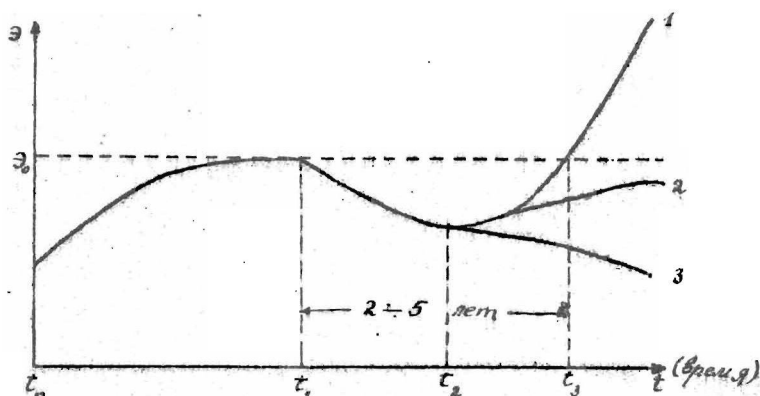


Рис. 6

На рис. 6 показано, что эффективность исследований по какой-либо теме, по мере развития методики, отрезится к насыщению ( $\mathcal{E}_0$ ). В момент  $t_1$  может быть принято решение об автоматизации исследований. При этом эффективность исследований в лаборатории неизбежно начнет падать, поскольку к теме подключаются новые специалисты (автоматики, электроники, программисты) и, потому что физики начнут тратить свое время на разработку, отладку и освоение новой методики.

Далее, после освоения автоматизированной НИС ( $t_2$ ) возможны 3 пути изменения  $\mathcal{E}$ . Автоматизация, конечно, оправдывается, если за время эксплуатации системы ( $t_2, t$ ) удастся покрыть те убытки, которые были вызваны переходом на автоматизированную методику ( $t_1, t_3$ ).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Лоцухин М.М., ПАТТЕРН - метод планирования и прогнозирования научных работ. "Сов.радио", 1971.

2

А. Э. ПЛАУДИС

## ИДЕОЛОГИЯ ПОСТРОЕНИЯ СИСТЕМНЫХ ПРИБОРОВ

При создании автоматизированной системы экспериментирования [2], т.е. системы сбора измерительной информации об объекте, находящемся в регулируемой и контролируемой среде, необходимо четкое представление о правильном решении вопросов сбора измерительной информации и вопросов выдачи и сбора контрольной информации.

В неавтоматизированных системах экспериментирования функции управления и контроля состояния системы выполняет оператор, пользуясь при этом полученной в виде световых и звуковых сигналов контрольной информацией. Большую роль в успешном выполнении функций управления и контроля играет личный опыт оператора.

При создании автоматизированных систем экспериментирования в первую очередь приходят к мысли, что сбор измерительной информации и выполняемые оператором функции управления и контроля можно передать УВМ, дополнив приборы неавтоматизированной системы каким-то грамотным с инженерно-технической точки зрения набором промежуточных элементов. Часто заманчивым кажется включение УВМ в качестве активного элемента в контуры входящих в систему экспериментирования регуляторов.

В оптимальном варианте в каждом канале сбора экспериментальной информации необходимо заменить аналоговую измерительно-регистрационную аппаратуру дискретной измерительной аппаратурой. В худшем случае можно использовать уже имеющуюся в неавтоматизированной системе аналоговую аппаратуру, нормализуя её выходные сигналы до уровня, необходимого для каких-то унифицированных АЦП. При этом надо понимать, что такое построение измерительных каналов при равной степени их сложности часто сводит на нет такие характерные преимущества автоматизированного кана-

ла сбора как точность, повторяемость и интенсивность сбора.

Осуществленная при помощи промежуточных элементов формальная передача на УВМ функций управления и контроля и минимизация набора элементов системы за счет управляющих и вычислительных возможностей УВМ требует работы УВМ с большими объемами избыточной информации. Это динамическая информация о внутренних состояниях регуляторов, информация для работы сложных алгоритмов контроля и управления, моделирующая те потоки информации, с которыми имеет дело оператор неавтоматизированного эксперимента; это измерительная информация, используемая для программного контроля состояний отдельных приборов системы.

В связи с вышеизложенным сильно затрудняется программирование всего эксперимента в целом, особенно при предполагаемом использовании УВМ в режиме реального времени. Опыт эксплуатации построенных по такому принципу автоматизированных систем экспериментирования показывает, что без применения специальных программ контроля, защиты и блокировок их надежность недостаточна. Создание таких программ еще больше усложняет программирование всего эксперимента в целом.

Чтобы избежать указанных трудностей и создать автоматизированную систему экспериментирования, способную к развитию, удобную в программировании и оперативную в управлении, необходимо при ее проектировании пересмотреть принципы построения отдельного прибора системы, выбор совокупности этих приборов и особенно выбор уровней замыкания информационных связей между отдельными приборами системы.

Как пример рассмотрим построение структурной схемы канала управления температурного тракта одной из научно-исследовательских систем (НИС), созданных в проблемной лаборатории физики полупроводников Латвийского государственного университета.

Температурный тракт НИС служит для реализации заданного температурного воздействия (канал управления) и для получения информации о точных параметрах реализованного воздействия (канал измерения). Параметры осуществляемых температурных воздействий таковы, что обязательным становится применение системы автоматического регулирования (САР).

Общим для САР является наличие обратной связи [1]. Рассмотрим систему автоматического регулирования температуры (САРТ), изображенную на рис.1.

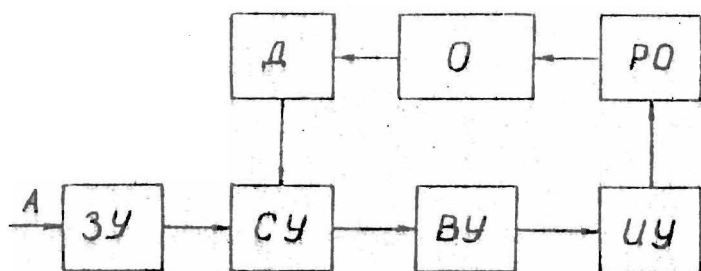


Рис.1

Температура регулируемого объекта (О) контролируется датчиком (Д) и преобразовывается в напряжение, которое поступает на один из входов сравнивающего устройства (СУ). В задающем устройстве (ЗУ) вырабатывается напряжение, соответствующее заданному через вход (А) значению регулируемой температуры. Это напряжение подается на второй вход СУ для сравнения с напряжением Д. В СУ вырабатывается сигналы рассогласования, которые в вычислительном устройстве

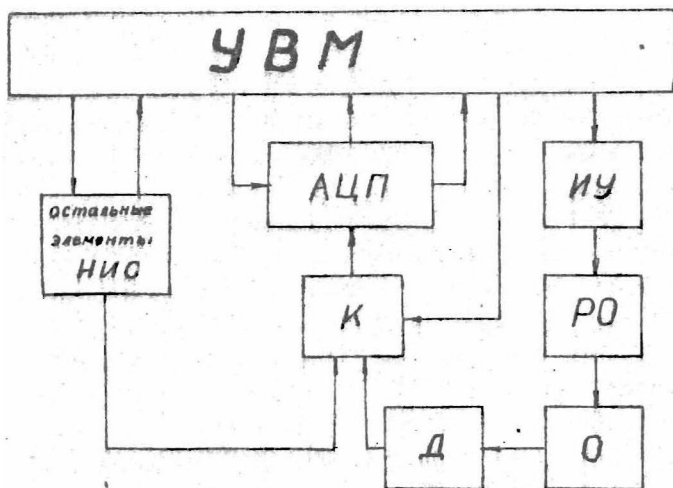
ве (ВУ) преобразовываются по закону выбранного метода регулирования и подаются на исполнительное устройство (ИУ). При помощи регулирующих органов (РО) сигналы с ИУ изменяют регулирующее воздействие на О.

Конструкцией и техническими характеристиками крмоста-та (регулируемый объект) определено техническое решение Д и РО. При выборе технического решения остальных устройств регулятора возможно несколько альтернатив.

САРТ в рассматриваемом случае является одним из приборов автоматизированной НИС, в структуре которой имеется УВМ (см.рис.2). С точки зрения минимальных затрат конструкторского труда и гибкой логики САРТ на первый взгляд заманчивой кажется программная реализация функций ЗУ, СУ и ВУ, используя при этом уже имеющиеся в канале измерения температуры АЦП соответствующей чувствительности и быстродействия и разрабатывая специально для такого варианта ИУ и К.

Имеющийся в лаборатории опыт эксплуатации САРТ, содержащей в цепи обратной связи УВМ, выполняющую также и целый ряд других функций, показал, что надежность такого регулятора без применения специальных программ контроля, защиты и блокировок не достаточна. В свою очередь трудности создания таких программ, а также осложняющиеся программирования всего эксперимента в целом при использовании УВМ в режиме реального времени, указывает на необходимость реализации САРТ при помощи локального автомата (ЛА).

Локальный автомат решает ограниченное число задач по заложенным в нем специализированным и только для определенного класса задач оптимальным алгоритмам. Применение ЛА приводит к определенной иерархии управления в автоматизированной НИС в целом. Увеличивается автономность и надежность регулятора, уменьшаются трудности программирования, появляющиеся из-за больших избыточных потоков управляющей и контрольно-измерительной информации в целях регулятора, содержащего УВМ.



К - коммутатор входа АЦП.

Рис. 2

На наш взгляд каждый из приборов, на основе которых предполагается собирать систему экспериментирования, в том числе и ДА, должен иметь следующие каналы внешних связей [2,3].

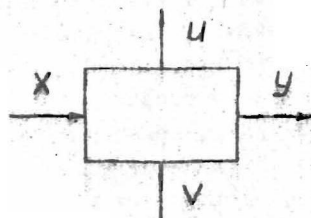


Рис. 3

- X - канал перерабатываемой информации;
- Y - канал переработанной информации;
- V - канал управляющей информации;

U - канал контрольной информации,

Через эти каналы производится обмен информацией с другими приборами, стоящими на том же или на высшем уровне иерархии. В простейших случаях один из каналов V и U может отсутствовать.

Каждый из внутренних элементов такого прибора может быть либо также четырехполюсником - в случае сложной внутренней структуры прибора, или трехполюсником, либо двухполюсником - в случае элементарной структуры прибора.

Если обмен информацией через каналы X, Y, V и U должен производиться между прибором и оператором, то такой прибор с аппаратурной точки зрения является самостоятельным прибором. Это отражается и в его конструктивном и техническом исполнении. Если прибор является элементом какой-то более сложной структуры и обмен информацией через каналы X, Y, V и U должен производиться между прибором и другими элементами того же или высшего уровня иерархии этой структуры, то с аппаратурной точки зрения такой прибор становится системным прибором. Это приводит к необходимости изменения конструктивных и технических решений, по крайней мере, каналов его внешних связей, но иногда в конструкции прибора основательному пересмотру подвергается все, кроме основных принципов алгоритма переработки X и Y.

Например, при создании САРТ было рассмотрено много опубликованных в технической литературе схем автоматического регулирования температуры. Они отличаются между собой как примененными методами регулирования, так и техническим решением отдельных узлов регуляторов. Существуют схемы регуляторов, обеспечивающих в отдельных режимах лучшие параметры, чем те, которые требуются для САРТ. Но ни один из описанных регуляторов без существенных переделок не может быть использован как элемент автоматизированной НИС. Поэтому при технической реализации САРТ из

известных нам описанных в технической литературе конструкций можно перенять методы регулирования, но не конкретные решения отдельных устройств регулятора.

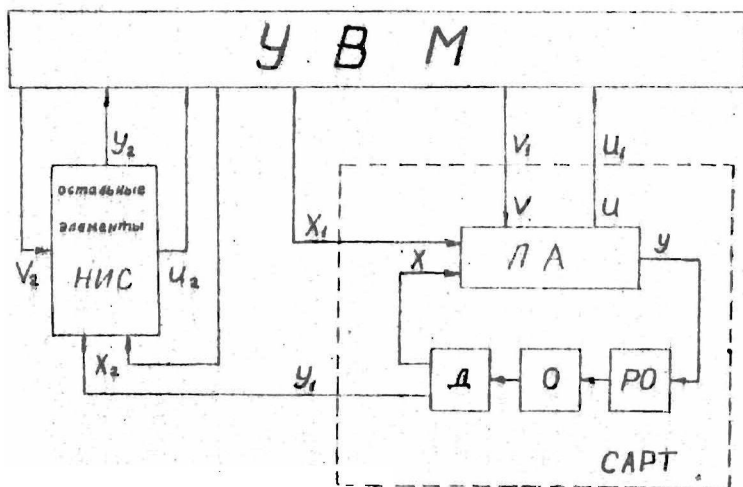


Рис. 4

Замыкая обратную связь САРТ локальным автоматом, регулируемый объект  $O$  подключается к одному из входов канала  $X$  через датчик  $D$  и к каналу  $U$  через регулирующие органы  $PO$ . САРТ, являясь системным прибором по отношению к УВМ, подключается к ней при помощи уже рассмотренных четырех каналов связей. Благодаря замыканию обратной связи регулятора локальным автоматом, а не УВМ, информационные потоки на УВМ через каналы типа  $X$ ,  $U$ ,  $V$  и  $U$

сильно уменьшаются. Через канал X в САРТ передается информация о требуемой температуре; через канал  $V_1$  - режим работы САРТ; через канал  $U_1$  УВМ получает информацию о внутреннем состоянии САРТ. Канал  $U_1$  используется для получения точной информации о состоянии регулируемого объекта O только после получения информации через канал  $U_1$ .

Необходимость создания САРТ как надежного и удобно обслуживаемого элемента автоматизированной НИС является вопросом такой же степени важности, как реализация требуемых температурных режимов. Для этого дополнительно к основной части структурной схемы САРТ создано несколько вспомогательных устройств. Они предназначены для обеспечения тест-контроля перед работой и для обеспечения полной автономности САРТ как в нормальном режиме работы, так при аварийных ситуациях.

При импульсном режиме изменения температуры в криостате САРТ сильно увеличивается расход азота, причем время между двумя заливками азота в криостат является неопределенной величиной, так как зависит главным образом от частоты повторения температурных импульсов. Для автономности САРТ в рабочем режиме необходимо устройство подачи азота, автоматически поддерживающее необходимый режим уровня азота в дьюаре криостата и освобождающее оператора от этих обязанностей.

Автономность САРТ в аварийных режимах обеспечивает устройство индикации и блокировок. Основной задачей его является выключение нагревателей криостата при любых режимах работы САРТ, когда температура определенных точек криостата достигает критического значения. Устройство индикации и блокировок производит также контроль и индикацию состояния нагревателей криостата и не разрешает их включения при выключенной высоковакуумной системе НИС. Об аварийном режиме САРТ оператор оповещается световыми и звуковыми сигналами.

Распространено мнение, что в системах, содержащих

УВМ, большую часть тест-контроля рациональнее всего реализовать программным способом, но так как на начальном этапе развития НИС еще не создан достаточно полный комплект тест-программ для проверки отдельных ее элементов, в том числе и САРТ, более выгодным для выполнения этих функций оказывается инженерный пульт (ИП).

При помощи его возможно моделирование обмена информацией между проверяемыми и остальными элементами НИС, так реализуя проверку работы отдельного элемента в целом и не требуя при этом рабочего режима остальных элементов НИС. Кроме того ИП позволяет удобно задавать постоянные параметры и начальные условия эксперимента, так как на данном этапе развития НИС связь оператора с системой осуществляется посредством программ, довольно неудобных в пользовании. В инженерном пульте предусмотрено переключение режима управления "оператор - УВМ". ИП делает удобным наблюдение динамики работы САРТ с помощью световой индикации.

По ходу дальнейшего развития НИС функции контроля и индикации все более перейдут от ИП к специальным программам УВМ, но пока необходимость ИП в сильной мере определяется недостатком хорошо разработанных тест-программ и психологией оператора, привыкшего к несвтоматизированному эксперименту и возможности непосредственного наблюдения за ходом эксперимента.

Таким образом видно, что передача функций экспериментирования УВМ даже в простых операциях (измерение, контроль и управление) приводит к целому ряду специфичных требований к приборам, предназначенным для использования в автоматизированных системах экспериментирования.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Круг Е.К., Александрини Т.М., Дилигенский С.Н.  
Цифровые регуляторы. Изд. "Энергия", 1966.
2. Сб. "Кибернетизация научного эксперимента". Изд. ЛГУ  
им.П.Стучки, Рига, 1968.
3. Сб. "Кибернетизация научного эксперимента". Вып.2,  
изд. ЛГУ им.П.Стучки, Рига, 1971.

2.

Г.К.ЛИМЕЖ

ОБЗОР СИСТЕМНЫХ ПРИБОРОВ, РАЗРАБОТАННЫХ  
В ПРОБЛЕМНОЙ ЛАБОРАТОРИИ ФИЗИКИ ПОЛУПРОВОДНИКОВ  
ЛАТВИЙСКОГО ГОСУДАРСТВЕННОГО УНИВЕРСИТЕТА ИМ.П.СТУЧКИ

На сегодняшний день промышленностью выпускается огромное количество разнообразных приборов, среди них немало с цифровым отсчетом, предназначенных для неавтоматизированного эксперимента. Но среди этого широкого ассортимента приборов не найти почти ни одного, который можно было бы по праву назвать системным прибором.

Что же собой представляют системные приборы? Это новый класс приборов, отличающихся от приборов индивидуального пользования, рядом свойств и вспомогательных устройств. Эти отличия обуславливаются условиями работы приборов в измерительной системе, где прибор управляется другими приборами системы и информация о результатах действия, состоянии прибора и о полученном результате передается другим приборам системы. То-есть все функции, которые в несистемном приборе выполняются оператором - выполнение различных манипуляций, согласно программе эксперимента, с органами управления прибора, оценивание правильности выбора режима работы, контроль работоспособности прибора и считывания показаний прибора после окончания процесса передаются другому прибору системы, например, ЦВМ.

Исходя из вышесказанного мы можем сформулировать первое требование, предъявляемое к системным приборам:

- системный прибор должен быть сопрягаемым с ЦВМ и с другими приборами системы - т.е. системный прибор должен иметь цифровые входы управления и цифровые выходы, полностью характеризующие состояние прибора, как, например, : включенный режим, разрешение считывать показания прибора, ответы о выполнении поданных команд и т.д.

Во-вторых, к системным приборам предъявляются более

жесткие требования по надежности. Это объясняется тем, что выход из строя одного прибора системы влечет за собой невыполнение предназначенных функций всей системой. Требования по надежности включают также требование к повышенной помехоустойчивости, т.е. прибор должен надежно работать в условиях сильных помех. Вышесказанное особенно важно потому, что значительно увеличивается общий уровень помех в связи с введением электрических цепей передачи информации и электрических и электромагнитных исполнительных органов. И одновременно увеличивается общее количество чувствительных цепей за счет цепей управления и передачи информации.

В-третьих, быстродействие приборов приобретает новый смысл, так как считывания показаний и подачи команд изменения режима сокращаются в тысячи и миллионы раз и фактически больше не ограничивают длительность цикла измерения или управления.

И, в-четвертых, часто появляются повышенные требования по точности и чувствительности приборов в целях более полного использования возможностей преимуществ измерительных систем.

При разработке системных приборов может быть использовано несколько подходов, каждый из которых обладает своими преимуществами и недостатками. Первый и иногда простейший подход заключается в приспособлении приборов выпускаемых промышленностью. Но этот путь имеет существенные недостатки. Так, например, у большинства приборов не имеются входные устройства для телеуправления выходов ответов о выполнении поданных команд, о соблюдении режима работы и шин вывода результатов измерений. Большинство выпускаемых промышленностью приборов - универсальные, в узком специализированном режиме работы они по своим параметрам - быстродействию, точности, чувствительности, помехоустойчивости и надежности уступают узко специализированным приборам. В результате качественные показатели изме-

рительной системы получаются довольно низкие. Часто готовые приборы с необходимыми характеристиками вообще промышленностью не выпускаются.

Второй подход, связанный с разработкой специализированных системных приборов, обеспечивает наилучшие результаты, так как каждый прибор разрабатывается и используется согласно своему узкому назначению. Главный недостаток этого подхода - сравнительно высокая стоимость приборов, так как каждый прибор является более или менее уникальным.

Суть третьего подхода заключается в создании набора унифицированных блоков - узлов приборов, таких как, например, операционных усилителей, преобразователей аналог-код и код-аналог, счетчиков, регистров, таймеров, дискриминаторов уровня, источников эталонных напряжений и р.д., предусмотренных для работы в системе. С помощью набора таких блоков - кассет и базового блока с источниками питания экспериментатор может в короткий срок собрать необходимый ему комплект приборов или перестроить уже существующий комплект для выполнения других функций. Процесс сборки сводится к соединению выходов и входов разных блоков согласно схемы и требует только элементарных знаний по радиоэлектронике. Такое решение предлагается некоторыми зарубежными приборостроительными фирмами, например, "Princeton Applied Research", "SEN Electronique" и другими.

По всей видимости будущее принадлежит третьему подходу, так как он позволяет с помощью унифицированных блоков в короткий срок собрать специализированный, уникальный прибор и измерительную систему в целом. Стоимость приборов, собранных из таких унифицированных блоков будет значительно ниже стоимости специализированных приборов, разработанных без применения унифицированных узлов-блоков. Широкое распространение интегральных схем еще более облегчит создание подобных функциональных блоков. В отдельных случаях функции блока может выполнять одна БИС. Необходимой предпосылкой реализации этого подхода является разработка

и выпуск промышленностью унифицированных блоков с необходимыми характеристиками. Конечно, этот подход не исключает применения готовых приборов, например, цифровых вольтметров и других.

На сегодняшний день наиболее результативным является вариант разработки специализированных приборов, которые могут содержать в себе имеющиеся унифицированные узлы и по возможности выпускаемые промышленностью приборы. В таком направлении в проблемной лаборатории физики полупроводников Латвийского госуниверситета им. П. Стучки при создании измерительных систем для исследования электронных свойств твердого тела разработан ряд специализированных приборов. Разработанные системные приборы можно группировать, более или менее условно, по их назначению в приборы измерительные, приборы для управления процессами и приборы для связи с ЦВМ.

### Измерительные приборы

I. Интегрирующий цифровой вольтметр высокой чувствительности для измерения малых напряжений постоянного тока в цепях с высоким уровнем помех.

Основные технические данные:

- Разрешающая способность (на пределе 2 мВ) - 1 мкВ.
- Пределы измерений: 2 мВ, 20 мВ, 200 мВ, 2 В, 20 В, 200 В.
- Входное сопротивление: 100 ком на пределе 2 и 20 мВ, 1 мом на пределе 200 мВ, 10 мом на остальных диапазонах.
- Погрешность измерения:  $\pm 0,1\%$   $\pm 2$  отсчета.
- Время измерения - 1 сек.
- Управление ручное или от ЦВМ.
- Выход результата в двоичном коде, индикация в десятичном коде.

2. Фотонный счетчик для измерения слабых световых потоков, например, люминесценции.

Основные технические данные:

- Регистрация результатов измерения в ЦВМ в двоичном коде.
- Управление режимом измерений от ЦВМ или ручное.
- Временное разрешение не хуже 10 нсек.
- Максимальная скорость счета электронов при погрешности менее 1% -  $3 \cdot 10^5$  фотоэлектронов в сек.

Предусмотрены два режима работы:

- а) подсчет фотоэлектронов в определенное время: 0,03; 0,1; 0,3; 1,3; 10 сек.
  - б) измерение времени, в котором сосчитываются определенные числа электронов:  $2^5$ ;  $2^7$ ;  $2^{10}$ ;  $2^{13}$ ;  $2^{16}$ ;  $2^{17}$ .
- Максимальное число сосчитанных фотоэлектронов  $2^{19} - 1 = 524287$ .
  - Максимальное время измерения равно 13,98 сек.

3. Преобразователь угол-код для кодирования положения компенсационного клина двухканальной спектрометрической установки "UR-20" фирмы ГДР "Карл Цейс", Иена.

Кодирование в коде Грея (в циклическом коде) с последующим преобразователем в двоичный код. Количество ступеней (дискретность)  $2^{10}$ .

4. Установка для измерения пропускания света с выдачей результата в процентах.

Данная установка представляет собой вычисляющий преобразователь аналог-цифра, выполняющий функции:

$$n = \frac{J_{одр} - J_{т}}{J_{эм} - J_{т}} \cdot 100\%$$

где  $J_{т}$  - темновой ток анода фотоэлектронного умножителя (ФЭУ),

$J_{\text{эм}}$  - ток ансда ФЭУ, создаваемый падающим на образец светом,

$J_{\text{обр}}$  - ток ФЭУ, создаваемый проходящим через образец светом.

- Чувствительность установки 0,1%.
- Погрешность установки не более 0,3%.
- Время измерения : 3-4 сек (определяется в основном временем механических передвижений оптического затвора и образца).

### Приборы управления

I. Блок регулировки температуры. Предусмотрен для управлений температурным режимом образца в малоинерционном криостате.

Необходимый режим температуры: температура стабилизации, нагрев или охлаждение до определенной температуры задается ЦВМ.

- Пределы регулировки температуры от 80°К до 480°К.
- Точность стабилизации заданной температуры  $\pm 0,1^{\circ}\text{К}$ .
- Максимальная скорость изменения температуры не менее 3 °/сек.
- Обеспечивается автоматическая регулировка уровня жидкого азота в дьюаре криостата.

Разработан также автоматический вариант терморегулятора для работы в неавтоматизированных измерительных системах. Задание температуры с пульта управления. Автомат обеспечивает регулировку и стабилизацию температуры при вышеприведенных характеристиках. Дополнительно предусмотрен режим линейного нагрева от 80°К до 480°К со скоростью нагрева от 0,01 град/сек до 0,2 град/сек. Нелинейность нагрева менее 1% и менее 1°К.

2. Устройство для автоматической развертки спектра монохроматора "СРМ-1" фирмы "Карл Цейс", ГДР. Устройство обеспечивает установку длины волны спектра по команде от ЦВМ или от руки и непрерывную развертку в пределах двух заданных граничных точек спектра.

Шаг поворота лимба - 1,5 градусов.

Скорость вращения - 240; 120; 60; 24; 6 и 1 шаг/сек.

Количество шагов 4800, соответствует 2000 делению на лимбе.

3. Стабилизаторы для источников эталонного света:

а) стабилизатор напряжения для кинолампы. Напряжение стабилизации устанавливается 10-11 в.

Ток нагрузки до 8 А.

Пульсация напряжения на выходе не более 0,5 мв.

Нестабильность выходного напряжения: при сетевом напряжении 220 в  $\pm 10\%$ , при температурном диапазоне от  $+15^{\circ}\text{C}$  до  $+35^{\circ}\text{C}$  менее 1 мв.

б) стабилизатор тока для дейтериевой лампы ДДС-250.

Ток нагрузки устанавливается от 1 А до 3 А.

Напряжение на нагрузке - от 50 до 150 в.

Нестабильность тока при сетевом напряжении 220в  $\pm 10\%$ , в температурном диапазоне от  $+15^{\circ}\text{C}$  до  $+35^{\circ}\text{C}$  не более 1 мА.

Пульсации тока не более 0,5 мА.

#### Приборы для связи с ЦВМ.

1. Блок управления перфоратором. Блок управления предусмотрен для согласования выхода цифрового измерительного прибора с перфоратором ПЛ80/8.

Предусмотрены два режима работы:

а) с запуском от внешнего генератора,

б) с запуском после поступления сигнала разрешения

считывать информацию с измерительного прибора.

В стадии разработки находится блок алфавитно-цифрового и графического вывода информации из вычислительной машины на экран электронно-лучевой трубки типа "Меридиан". Блок вывода работает совместно с ОЗУ "Днепр-1". Вывод информации из ОЗУ производится автоматически. Частота регенерации изображения на ЭЛТ не ниже 30 гц. Количество точек (символов) в изображении до 512. Предусматривается возможность дальнейшего усовершенствования - клавишный ввод символов в ОЗУ, ввод графической информации при помощи светового пера, возможности выделения отдельных участков выводимого графика, возможность изменения масштаба изображения и др.

2, Тарденак Э.Э.

## ПРОЕКТ СИСТЕМЫ ДЛЯ ИССЛЕДОВАНИЙ РЕЛАКСАЦИИ СПЕКТРОВ ОПТИЧЕСКОГО ПОГЛОЩЕНИЯ

Измерение спектра поглощения позволяет непосредственно определить концентрации возбуждений на всех дефектах кристалла, поэтому измерение релаксации спектра поглощения в отличие от интегральных кинетических методов, делает возможным наиболее полное изучение динамики релаксационного процесса: делокализацию, повторный захват и рекомбинацию возбуждений на всех дефектах решетки.

Основным недостатком абсорбционных методов, по сравнению с люминесцентными, является относительно малая чувствительность. Промышленные спектрометры, как правило, измеряют оптическое пропускание до 99,9%, что при силе осциллятора I соответствует чувствительности  $10^{15}$  деф./см<sup>3</sup>. Для увеличения чувствительности абсорбционного спектрометра, очевидно, необходимо осуществить измерения по возможности небольших поглощений. Однако проблема увеличения чувствительности абсорбционных методов усложняется тем, что в образце, как правило, имеет место достаточно сильное фоновое поглощение. Поэтому основная задача - увеличение чувствительности аппаратуры - может быть достигнута лишь одновременным увеличением точности. Иными словами задача сводится к измерению возможно малых изменений пропускания на фоне малых пропусканий.

Однако при изучении релаксации спектров поглощения фотоактивных дефектов имеется верхний предел точности измерения: с одной стороны, для увеличения точности измерений необходимо увеличить количество фотонов, падающих на образец и регистрируемых фотоприемником, а с другой стороны - увеличение числа падающих, следовательно, поглощенных образцом фотонов приводит к увеличению изменений поглощения из-за изменения концентрации возбуждений на дефектах. Подсчет показывает, что верхним пределом точности измерения является погрешность  $10^{-5}$ , что соответствует чувствительности метода  $10^{13}$  деф./см<sup>3</sup>.

Эта точность была принята за исходную при формулировке техзадания на проект научно-исследовательской системы.

Измерение оптического поглощения или, что технически проще, связанной с ним величины оптического поглощения, независимо от оптической и электронной измерительной схемы, состоит из двух последовательно производимых операций: измерения падающего на образец потока и измерения прошедшего потока. Так как определяется отношение этих двух потоков, то снижаются требования к абсолютной точности измерения. Требования к стабильности системы ограничиваются временем проведения серии измерений в одной точке спектра.

Основными источниками ошибок измерения являются:

1. Источники света, в качестве которых в видимой части спектра применяют лампы накаливания.

Из [1] следует, что для получения стабильности яркости нити  $10^{-5}$  достаточно стабилизировать напряжение с точностью  $10^{-4}$ , что всегда выполнимо. Конструктивно требуется обеспечить равномерное охлаждение баллона лампы, что значительно сложнее. Современные специальные измерительные лампы с сапфировыми окнами успешно могут применяться в спектральном диапазоне от 280 нм до ближней ИК части спектра. В УФ-части спектра применяются дейтериевые, ксеноновые и др. газоразрядные лампы со значительно худшей стабильностью, поэтому повышение точности измерения в этом диапазоне спектра весьма проблематично.

2. К монохроматору предъявляются три основных требования: большая дисперсия, хорошая повторяемость установки длины волны и возможно большая светосила. Сущность двух первых требований ясна, если рассмотреть измерение на крутом склоне пика абсорбции - результат измерения здесь сильно зависит от точности установки длины волны.

Для обеспечения требуемой чистоты спектра, желательно последовательное включение двух монохроматоров, что возможно только при их высокой светосиле.

3. В механической конструкции оптической системы стабильность должна быть обеспечена путем устранения источников вибраций и создания жесткой системы с массивными опорами и легкими движущимися частями.

Как показал эксперимент, наличие пыли и конвекция воздуха в оптической системе, приводят к появлению нестабильности превышающей  $10^{-4}$ , поэтому оптический канал должен быть вакуумирован.

4. В качестве датчиков в УФ и видимой части спектра традиционными являются ФЭУ. С точки зрения достигаемой точности измерения особо важными характеристиками ФЭУ являются: шум, т.е. пороговая чувствительность, стабильность коэффициента усиления и линейность характеристик.

Из данных /2/ видно, что при больших фототоках ФЭУ не имеет преимуществ перед ФЭ. Отсюда вытекает требование необходимости работать при больших световых потоках и достаточно узкой полосе пропускания. При работе на частотах модуляции ниже 200 гц положение ухудшается присутствием значительных фликкершумов, превышающих дробовой шум ФЭУ.

Применение ФЭУ в конкретном случае ухудшает до 10 дб отношение сигнал/шум, по сравнению с ФЭ, и может быть оправдано лишь в тех случаях, когда это необходимо для получения малого выходного сопротивления с целью уменьшения постоянных времени и облегчения согласования со входом электронной измерительной схемы.

С точки зрения линейности световой характеристики необходимо работать с катодами, нанесенными на проводящей подложке. Эти катоды отличаются хорошей линейностью, вплоть до катодных токов, достигающих десятков мка. Катоды, нанесенные непосредственно на стекло, нелинейны. Положение с ФЭУ приблизительно такое же, кроме того, при увеличении выходного тока возникают объемные заряды на последних динодах и снижается коэффициент эмиссии динодов.

Что касается нестабильности характеристик катодов, так называемого утомления фотокатода, то этот вопрос детально

исследован как длительный процесс: известно, что установление чувствительности катода после его освещения мощным световым потоком длится в течение часов, столько же длится восстановление катода после снятия засвечивающего потока.

Как уже упоминалось выше, измерение пропускания осуществляется в виде двух последовательных измерений, отношение которых дает искомую величину пропускания образца. Оба измерения занимают не более 1-2 секунд - это время в основном определяется механическими перемещениями. В этом случае длительные процессы установления чувствительности играют маловажную роль, первостепенно важными являются имеющиеся быстропротекающие процессы утомления катода. Если измеряется также темновой ток, катод работает в наихудшем режиме, когда изменения падающего светового потока максимальны - от максимальной освещенности до темноты. Знание кратковременных - импульсных характеристик ФЭУ или ФЭ очень важно как для выбора самого датчика, так и для правильного построения всей научно-исследовательской системы. Например, если вследствие изменения чувствительности катода сигнал в течение одного цикла измерения меняется как показано на рисунке I измерение интегрирующим цифровым вольтметром с периодом интегрирования 1 сек дает явно неверный результат, более верный результат можно получить быстродействующим прибором, выполняя оба измерения по возможности быстро одно за другим. Отсюда явно видна необходимость знания качественных и количественных характеристик утомления в короткие интервалы времени. В настоящее время в ЛГУ создана измерительная аппаратура для исследования этих характеристик.

Кроме вышеназванного, влияние на точность измерения пропускания может оказать, например, стабильность высоковольтного источника питания ФЭУ и ряд других факторов, которые однако не являются решающими для данной проблемы.

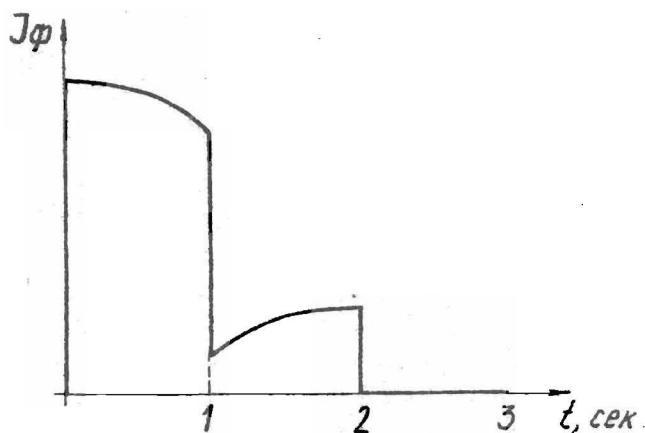


Рис. I

Таблица I

Источники ошибок	
Источник света, лампы накаливания	$10^{-5}$
УФ лампы	$10^{-3}$
Монохроматор и оптическая система типа "конструктор"	$10^{-4}$
жесткая система в вакууме	$10^{-5}$
Фотодатчик	
Источник питания фотодатчика	$10^{-5}$
Электронная измерительная схема	$10^{-5}$

В таблице I обобщены вышеприведенные данные об источниках ошибок измерения пропускания. Как видно, точность  $10^{-5}$  является недостижимой величиной. Однако значительное увеличение точности измерения вполне возможно, конкретно в видимой части спектра до показателя  $10^{-4}$ .

Из двух возможных вариантов создания оптической части: одноканальной или двухканальной, предпочтение следует отдавать одноканальной - два идентичных канала с большой светосилой труднее создавать чем один, нет зеркал и упрощается криостат.

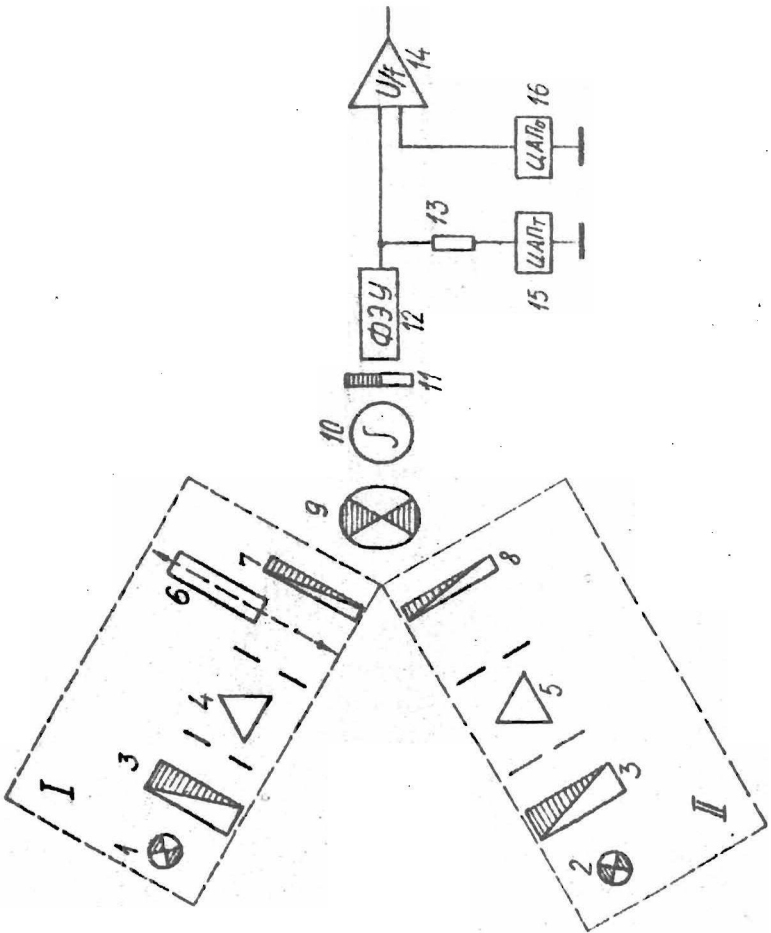
Если чувствительность датчика в процессе работы меняется, то она должна постоянно контролироваться: для этого целесообразно ввести опорный оптический канал и модулятор, поочередно подключающий измерительный и оптический каналы к фотокатоду с частотой модуляции, определяемой из соображений устранения влияния усталости и фликкершумов - видимо несколько сотен гц.

В звете вышесказанного можно представить НИС следующим образом. (Рис.2).

Имеются опорный и измерительные каналы, через модулятор и смесительный сумматор, работающие на фотодатчик, и электронная измерительная схема.

Перед циклом измерений закрывается затвор II - измеряется темновой ток. Величина темнового тока запоминается и компенсируется ЦАП-15 в течение дальнейшего цикла. Весьма вероятно, что при достаточно большой светосиле системы, необходимость в измерении темнового тока отпадает.

При удаленном из измерительного канала образце 6 происходит калибровка системы. На требуемую длину волны устанавливаются монохроматоры 4 и 5. Одновременно, по заданной программе, определяемой спектральными характеристиками источников света и катода, устанавливаются оптические клины 3, приблизительно нормирующие выходной сигнал ФЭУ. Затем, путем перемещения одного из точных клинов 7, 8 выравниваются ин-



тенсивности в обоих каналах. Фотокатод работает как сравнивающий элемент.

Далее существуют две альтернативы.

1. Если датчик достаточно линейный - измерение может вестись чисто электронными средствами.

После того, как в измерительный канал введен исследуемый образец, на нагрузочном сопротивлении появляются приблизительно прямоугольные импульсы, верхний уровень которых характеризует опорный световой поток (равный падающему), а нижний - соответствует прошедшему через образец потоку. Если бы мы обладали АЦП со временем измерения порядка  $1 \mu\text{сек}$  и ошибкой измерения не более  $10^{-5}$  - задачу можно было бы считать решенной. Так как такого АЦП в настоящее время нет - следует искать иное решение.

На наш взгляд возможным решением является использование опорного ЦАП<sub>0</sub> с разрешающей способностью  $1:10^3$ , т.е. на 1000 ступеней, но с точностью установки каждой ступеньки не хуже  $10^{-5}$ , совместно с АЦП весьма низкого класса (0,1%), измеряющего разность напряжений на сопротивлении нагрузки и ЦАП-е. Работа ЦАП<sub>0</sub> и АЦП синхронизованы с модулятором, кроме того ЦАП работает в следящем режиме, т.е. в начале каждого из двух полупериодов в регистр (или регистры) управляющий ЦАП-ом засылается предыдущее значение компенсационного напряжения для данного полупериода, а в течение полупериода осуществляется только коррекция этого значения.

В таком режиме оптимизируются требования к быстродействию и точности АЦП, в качестве которого можно использовать ПНЧ. Возможно усреднение на выходе по нескольким периодам модулятора, например, с целью борьбы с наводками, возможно цифровое синхронное детектирование.

2. Если же датчик не является линейным, то единственным способ его использования - включение в качестве оптического "нульиндикатора". Так как свет нельзя компенсировать светом - речь может быть только о сравнении двух оптических потоков, т.е. в данном случае после введения такого же калиброванного ослабителя в опорном канале. Это

возможно только при наличии оптического ослабителя, калиброванного для любой рабочей длины волны. Так как изготовить такой ослабитель на  $10^4$  градаций невозможно, стоит ограничиться разумным числом градаций, т.е. 100-200. При этом не будет обеспечено полное равенство потоков, но будет достигнуто, по крайней мере, равенство, в пределах которого нелинейность датчика не влияет на точность измерения. Требование фиксации коэффициента ослабления при данной  $\lambda$  с точностью порядка  $10^{-5}$  остается в силе. В основном электронная часть измерителя может работать как в первом случае.

Такие задачи как управление монохроматором, оптико-механическими приборами и контроль за их состоянием способны выполнять локальные автоматы. Накопление результатов измерения можно осуществить на перфоленте.

Как видно из приведенного выше алгоритма, здесь невозможно получить результат измерения в виде готового числа - кода на выходе АЦП. Результат может быть получен только путем применения ЭВМ для управления экспериментом и обработки результатов измерения.

Применение ЭВМ позволит также варьировать режимы измерения, тут очень легко осуществляется усреднение по нескольким периодам модулятора, можно, например, реализовать режим цифрового синхронного детектирования и, что очень важно, значительно повышается надежность, без которой не может быть и точности измерения.

#### Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Эдмин С.Я., Наумов В.В. Оптико-механическая промышленность, № 1, стр. 80, 1960.
2. Соболева Н.А., Берховский А.Г., Чечик Н.О., Елисеев Р.Е. Фотоэлектронные приборы, "Наука", Москва, 1965.

4,

Я. П. ЦИРУЛИС, Е. А. КОТОМИН, И. А. ТАЛЕ

## РАЗДЕЛЕНИЕ СЛОЖНЫХ СПЕКТРОВ НА ЭЛЕМЕНТАРНЫЕ КОМПОНЕНТЫ

### В В Е Д Е Н И Е

В физике кристаллофосфоров при изучении центров захвата (ЦЗ) широкое применение находит метод термовысвечивания (ТВ). Обычно экспериментально наблюдаются неэлементарные полосы ТВ, значительный интерес представляет разложение этих полос на элементарные компоненты. Такое разложение дает ценную информацию о происходящих процессах (по выделенным элементарным компонентам можно, например, определить дискретный спектр энергии активации ЦЗ /I/.

Аналогичная проблема появляется при анализе сложных спектров самой различной природы.

Существующие методы разделения сложных спектров на элементарные компоненты принадлежат к одной из двух групп:

I. Методы, аппроксимирующие искомые элементарные компоненты гауссианами, лоренцианами и другими функциями известного аналитического вида (например, /2-7/);

II. Методы, в которых форма элементарных компонент определяется в результате применения алгоритма, а не как исходное предположение /9-II/.

Рассмотрим эти группы поближе.

I. Аппроксимация элементарных компонент гауссианами и лоренцианами в спектрах применяется широко. Как правило, в качестве исходного используется единственный сложный спектр с хорошо разрешенными компонентами, число элементарных компонент определяется по числу разрешенных пиков в исходном спектре (редкое исключение составляет

/2/). Аппроксимация, на наш взгляд, принципиально неприменима в тех случаях, когда форма компонент неизвестна или заведомо негауссова, а также если неизвестно заранее число компонент. Параметры компонент, как правило, определяются квадратичной минимизацией. При этом нельзя оценить точность определения параметров. В частности, показано /7/, что выбор нулевого приближения может существенно влиять на результат в случае сильно перекрывающихся компонент. При этом один и тот же спектр одинаково хорошо аппроксимируется различным числом гауссиан. Например, в ЭПР спектроскопии для такого случая перекрывающихся гауссиан и лоренциан составлен специальный атлас спектров /8/.

П. Применяются разложения и без аппроксимации компонент гауссианами; например, при анализе спектров ЭПР используется разложение с учетом физического смысла компонент<sup>1</sup> /9/.

Существует, однако, более последовательный чем /9/, но не нашедший еще широкого применения метод, использующий вместо предположения о форме компонент и их числе лишь некоторые качественные предположения о взаимном расположении и связи компонент и их поведения в серии спектров. В математической форме метод предложен Я.П.Цирулисом /10/ и независимо - М.Н.Аленцевым и М.В.Фоком /11/. В настоящей работе в наглядной форме рассматривается теория и сущность метода и вопросы применения метода для разложения экспериментальных спектров на ЭВМ.

---

<sup>1</sup> Подбираются такие линейные суперпозиции двух исходных спектров, которые удовлетворяют ожидаемой форме компонент.

## § I. МЕТОД ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ ИСКЛЮЧЕНИЙ

А. При аппроксимации компонент гауссианами достаточно задаться одним спектром  $\tilde{F}(\lambda)$ , интервал изменения параметра:  $\lambda \in (a, b)$ . Если же отказаться от предположений об аналитическом виде компонент, то очевидно, информации, содержащейся в одном спектре, недостаточно, поэтому требуется знание поведения спектра при изменении двух параметров:  $F(\mu, \lambda), \lambda \in (a, b), \mu \in (c, d)$ . Фактически приходится ограничиться конечным числом ( $n$ ) измерений параметра  $\mu$ ;  $F(\mu, \lambda)$  превращается в серию спектров  $F_k(\lambda) = F(\mu_k, \lambda), k=1, n$ . Далее параметр  $\lambda$  называем внутренним, а параметр  $\mu$  - внешним.

В спектрах поглощения  $\lambda$  означает длину волны, а  $\mu$  - характеризует исходные условия возбуждения или де возбуждения (температура, время). Отсюда ясно, почему мы разделяем параметры на внутренние и внешние. В спектрах ТВ параметру  $\lambda$  соответствует температура образца, смысл параметра  $\mu$  - тот же, что и в предыдущем случае.

В этом параграфе всюду рассматривается идеализированный случай незашумленных спектров с непрерывно меняющимися внутренним параметром  $\lambda$ ; реальный случай рассмотрен в § 2.

В пункте В излагаются исходные предположения метода, из них первые пять относятся к характеру компонент в  $F(\mu, \lambda)$ , последнее - к задаваемой серии спектров  $F_k(\lambda)$ . В пункте С дается краткий анализ каждого предположения, в пункте Д приведен простой пример работы алгоритма исключения. В пункте Е анализируются некоторые особые случаи работы алгоритма.

В. Исходные предположения метода.

Г<sup>0</sup>. Условие суперпозиции.

При фиксированном  $\mu = \mu_0$  спектр  $F(\mu, \lambda)$  является линейной суперпозицией конечного (заранее неизвестного)

числа искомых компонент  $\mathcal{Y}_j(\lambda)$ ,  $j=1, m$ ; форма компонент  $\mathcal{Y}_j$  не зависит от  $\mu$ <sup>1</sup>.

2<sup>0</sup>. Условие эквивалентности.

Физический смысл имеет только вклад компонент в спектре, так что форма каждой из них определена лишь с точностью до постоянного множителя; различие  $\mathcal{Y}_j(\lambda)$  и  $c\mathcal{Y}_j(\lambda)$  в физических задачах не проявляется.

3<sup>0</sup>. Условие нормальности.

Элементарные компоненты не поглощают друг друга, т.е. для любых двух компонент имеются интервалы изменения  $\lambda$ , где только первая и только вторая из них обращается в нуль<sup>2</sup> (см. рис. I).

4<sup>0</sup>. Условие связности.

Каждая элементарная компонента отлична от нуля во всех точках некоторого подинтервала области изменения  $\lambda$  и равна нулю всюду вне его (см. рис. I).

5<sup>0</sup>. Условие амплитуд.

В области изменения внешнего параметра  $\mu$  амплитуды  $a_j(\mu)$ ,  $j=1, m$  линейно независимы.

6<sup>0</sup>. Условие достаточности.

Исходная система  $F_x(\lambda)$  содержит максимально возможное число линейно-независимых спектров.

Последнее предположение относится не к искомым компонентам, а к конечному числу исходных спектров  $F_x(\lambda)$ . В исходной серии спектров в силу  $\Gamma^0$  от спектра к спектру могут меняться только амплитуды компонент.

<sup>1</sup> Для случая дискретного  $\mu$  (серия спектров) это означает, что форма каждой компоненты  $\mathcal{Y}_j$  не меняется от спектра к спектру. Сдвиг компоненты вдоль оси  $\lambda$  также считается изменением ее формы.

<sup>2</sup> Аналогичное условие используется в /6/ для определения параметров элементарных гауссиан.

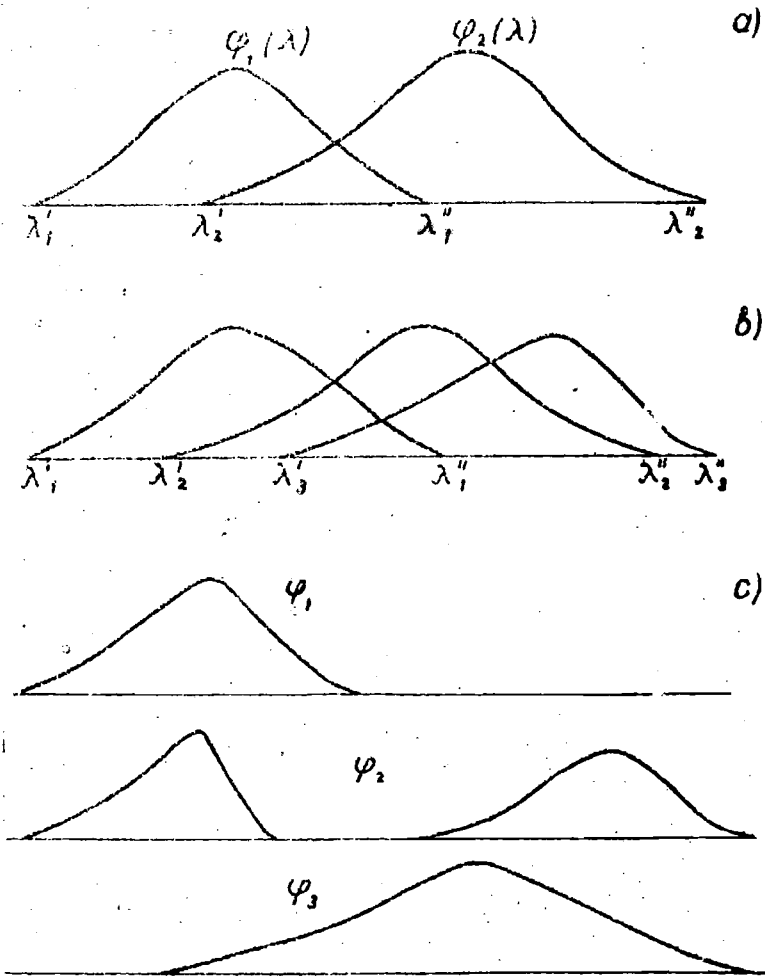


Рис. I. а), в) - нормальная система двух (соответственно трех) компонент, с) - система нормальных компонент, из которых  $\varphi_2$  несвязана

### С. Обсуждение исходных предположений.

I. Условие суперпозиции играет решающую роль в решении задачи разложения. Оно означает, что для всех  $\lambda \in (\alpha, \beta)$ ,

$$\mu \in (c, d) \quad F(\mu, \lambda) = \sum_{j=1}^m a_j(\mu) \mathcal{Y}_j(\lambda), \quad (I)$$

$\mathcal{Y}_j(\lambda)$  -  $j$ -ая компонента,  $a_j(\mu)$  - ее амплитуда.

Произвольную систему  $\mathcal{Y}_j$ , удовлетворяющую (I), назовем разложением  $F(\mu, \lambda)$  (или  $F_\mu(\lambda)$ ). Только из-за постоянства формы компонент ( $\mathcal{Y}_j$  только функция  $\lambda$ !) удается извлечь информацию о них из  $F(\mu, \lambda)$ . Однако, если не добавить каких-то предположений к условию I<sup>0</sup>, задача остается весьма неопределенной, т.к. неизвестны  $\mathcal{Y}_j$ ,

$a_j$  и даже  $m$ . Соблюдение остальных условий 2<sup>0</sup>-6<sup>0</sup> гарантирует адекватность выделенных компонент.

2. Но даже привлекая все эти условия, можно точно определить лишь вклад  $a_j(\mu) \cdot \mathcal{Y}_j(\lambda)$  каждой компоненты в спектр (для любого  $\mu$ ), но по отдельности все компоненты  $\mathcal{Y}_j$  и их амплитуды  $a_j$  определяются с точностью до постоянного множителя (зависящего только от номера компоненты  $j$ )<sup>I</sup>, что достаточно для большинства физических задач. Разложения, различающиеся только этими множителями, назовем эквивалентными.

3. Роль условий нормальности (рис. I) выявляется на следующем примере. Пусть имеются две компоненты  $\mathcal{Y}_1, \mathcal{Y}_2$ , такие, что условие 3<sup>0</sup> нарушено (рис. 2). Легко видеть, что тогда компоненты  $\mathcal{Y}'_1, \mathcal{Y}'_2$  ( $\mathcal{Y}'_1 = \mathcal{Y}_1 + c \mathcal{Y}_2$ ,  $c$  - отличная от нуля произвольная постоянная), также как и  $\mathcal{Y}_1, \mathcal{Y}_2$  удовлетворяют условиям I<sup>0</sup>, 4<sup>0</sup>, 5<sup>0</sup>, т.е. могут считаться искомым разло-

<sup>I</sup> т.е. находится лишь форма компонент. Легко проверить, что система  $c_1 \mathcal{Y}_1, \dots, c_m \mathcal{Y}_m$  (все  $c_j \neq 0$ ) одновременно с системой подчиняется или нет предположениям I<sup>0</sup>-5<sup>0</sup>. Этой неопределенности можно избежать, например, нормируя амплитуды всех компонент в первом спектре:  $a_{11} = a_{12} = \dots = a_{1m} = 1$

жением. Поэтому при отказе от условия нормальности единственности не будет даже с точностью до эквивалентности, и в таких случаях форма не всех компонент может быть восстановлена. Например, в частном случае двух компонент (рис. 2) можно определить форму поглощенной компоненты  $\varphi_2$ ; форму  $\varphi_1$ , как показано, нельзя определить однозначно (такая ситуация наблюдается при выделении полосы поглощенной фоном и при разделении спектров добавочного поглощения).

Разложение, подчиняющееся  $3^0$ , назовем нормальным.

Можно показать, что если  $\varphi_1, \dots, \varphi_m$  нормальная система связанных компонент, то всякое другое разложение спектра  $F(\mu, \lambda)$ , обладающее теми же свойствами, эквивалентно  $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ . Таким образом, условие нормальности (при наличии остальных) является необходимым и достаточным для восстановления формы компонент.

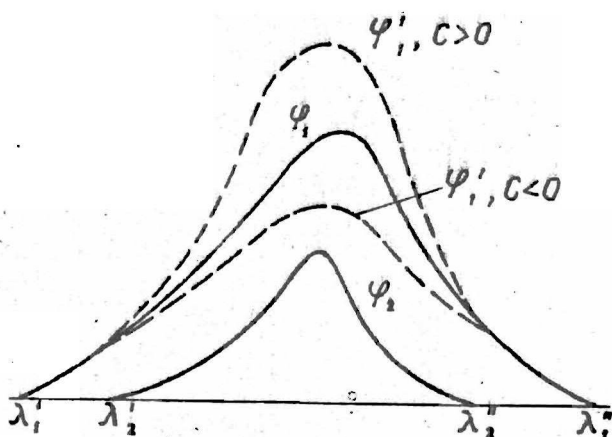


Рис. 2.

Ненормальная система двух компонент

4. В подавляющем большинстве случаев компоненты бывают связанными в том смысле, что точки, в которых каждая из них не обращается в нуль, образуют сплошной промежуток ( $4^0$ ). Это условие весьма важно для адекватности разложения и существенно для работы алгоритма (см. Е.4). Подчиняющиеся этому условию компоненты назовем связными (при этом, очевидно, форма компоненты может быть негауссовой). Интервал, в котором  $j$ -ая компонента отлична от нуля, обозначим  $(\lambda'_j, \lambda''_j)$ . Нормальность для связных компонент означает<sup>1</sup>, что  $\lambda'_1 < \lambda'_2 < \dots < \lambda'_m$ ,  $\lambda''_1 < \lambda''_2 < \dots < \lambda''_m$

Исходя из физических соображений, можно было бы указать, кроме связности, и другие ограничения на компоненты. Например, обычно и спектры, и компоненты бывают знакопостоянными (неотрицательными), в более частных случаях  $\chi_j$  имеет плавно меняющиеся производные, определенное число экстремумов<sup>2</sup>, и т.д. Трудно предложить математические средства использования такой информации, однако эта информация полезна при качественной оценке правдоподобия полученного результата, особенно в случае неэквивалентного разложения при нарушении нормальности.

Среди дополнительных ограничений весьма естественно предложить следующее, называемое условием простоты: на любом подинтервале интервала изменения параметра  $\lambda$  все тождественно не обращающиеся в нуль компоненты линейно независимы /10/. Это условие выражает то важное свойство элементарных компонент, что ни одну из них нельзя линейно скомбинировать из других; в этом смысле компоненты независимы. Условие простоты весьма существенно: оно необходимо для адекватности разложения в случае отказа от связности, а также в одном случае нарушения нормальности (см. Е.4). Это условие имеет значительную аналогию с  $5^0$

<sup>1</sup> В силу конечной точности компоненты типа гауссовых отличны от нуля на конечном интервале.

<sup>2</sup> Один максимум и непрерывные производные - в полосах ТВ.

(симметрия внутреннего и внешнего параметров). Нам неизвестно ни одного случая нарушения простоты в физических задачах.

5. Условие амплитуд означает, что элементарность компонент, кроме сохранения их формы, проявляется в том, что амплитуда каждой из них линейно не зависит от других в диапазоне изменения внешнего параметра  $\mu^I$ .

Если это не так, то форму компонент нельзя правильно восстановить. Пусть, например, амплитуда  $a_1(\mu)$  пропорциональна  $a_2(\mu)$  на всем интервале  $(c, d)$ . Ясно, что тогда спектр  $F(\mu, \lambda)$  содержит недостаточно информации о каждой из компонент  $\mathcal{Y}_1(\lambda)$ ,  $\mathcal{Y}_2(\lambda)$ . На основе имеющейся информации нет никаких оснований считать, что имеются две компоненты, а не одна вида  $c_1 \mathcal{Y}_1 + c_2 \mathcal{Y}_2$ , которую и следует признать элементарной, т.к. ее форма не меняется при изменении  $\mu$ . Обобщая это соображение, получаем 5<sup>0</sup>.

Если условие 5<sup>0</sup> опустить, то каждую компоненту формально можно считать суммой произвольного числа пропорционально меняющихся подкомпонент.

6. В случае конечной серии из  $n$  исходных спектров уравнение (I) перепишется:

$$F_k(\lambda) = \sum_{j=1}^m a_{kj} \mathcal{Y}_j(\lambda), \quad k = 1, n; \quad (I')$$

$a_{kj} = a_j(\mu_k)$  - амплитуда  $j$ -ой компоненты в  $k$ -ом спектре. В силу 3<sup>0</sup>, 4<sup>0</sup> все  $\mathcal{Y}_j$  линейно независимы. Из линейной алгебры известно, что число линейно независимых

---

<sup>I</sup> Поскольку это рассуждение не зависит от выбора интервала изменения  $\mu(c, d)$ , то можно прийти к требованию линейной независимости всех  $a_j(\mu)$  на любом подинтервале  $\rho(c, d)$ ; однако оно не требуется для алгоритма (пункт D).

функций среди  $F_1, \dots, F_n$  равно в этом случае числу линейно независимых столбцов в матрице амплитуд  $A = (a_{kj})$ . С другой стороны, при выполнении 5<sup>0</sup> (и только в этом случае!) серия может быть выбрана так, чтобы независимыми оказались все столбцы. Следовательно, максимально возможное число линейно независимых спектров в серии равно числу компонент  $m$ .

Разумеется, не в любой серии из  $n \geq m$  спектров находятся  $m$  независимых. Если их окажется меньше (скажем,  $m^+$ ), то не все компоненты можно выделить, число же выделяемых равно  $m^+$ . В этом случае невозможна адекватность: не все компоненты разделятся. Если же число независимых спектров равно  $m$ , то (при выполнении условий 1<sup>0</sup> - 5<sup>0</sup>) компоненты разделяются адекватно.

Таким образом, из-за конечности числа компонент необходимо и достаточно иметь конечную серию с  $m$  линейно независимыми спектрами, которые содержат всю возможную информацию о  $Y_1, \dots, Y_m$ . Ясно, что всякий другой спектр является линейной комбинацией предыдущих и не несет новой информации о компонентах. Если мы интересуемся также и динамикой изменения амплитуд  $a_{kj}$ , количество спектров  $F_k(\lambda)$  можно увеличить. Это приходится делать в реальном случае для уменьшения ошибок (см. § 2. А).

Подведем некоторые итоги. Условие суперпозиции 1<sup>0</sup> является основным. Вместе с условиями нормальности 3<sup>0</sup> и связности 4<sup>0</sup> оно принципиально необходимо для хода описанного ниже алгоритма (пункт В). Добавление к ним условий амплитуд 5<sup>0</sup> и достаточности 6<sup>0</sup> гарантирует адекватность (с точностью до эквивалентности 2<sup>0</sup>) разделения спектров на элементарные компоненты  $Y_1, \dots, Y_m$  (независимо от того, как это разложение найдено).

Условия 1<sup>0</sup>, 3<sup>0</sup>, 5<sup>0</sup> выражают принятое нами представление об элементарности компонент: элементарная компонента

сохраняет свою форму, ни одну из них нельзя линейно комбинировать из остальных<sup>1</sup>, взаимодействие компонент сводится только к возможному перераспределению амплитуд, амплитуды меняются независимо (5<sup>0</sup>).

Условие 1<sup>0</sup> налагается на природу исследуемых объектов, 5<sup>0</sup> - на динамику происходящих в них процессов.

Условие 4<sup>0</sup> нужно только для рассматриваемого способа разделения<sup>2</sup>. Последнее условие 6<sup>0</sup> характеризует необходимый для применения метода исходный материал - систему используемых спектров.

Перечисленные предположения охватывают значительно более общие ситуации, чем предположения при аппроксимации спектров гауссианами, поэтому метод, несомненно, имеет гораздо более широкую область применения. В частности, легко видеть, что исходным предположениям удовлетворяют полосы ТВ<sup>3</sup>, поглощения ЦЗ, спектры ЭПР и др. При изучении электронных неравновесных процессов изменения амплитуд компонент в этих спектрах достигается изменением условий возбуждения или девозбуждения. Спектры поглощения должны сниматься при одинаковой температуре, иначе меняется форма полос.

---

<sup>1</sup> Это следует из 1<sup>0</sup>, 3<sup>0</sup>.

<sup>2</sup> и его можно заменить на условие простоты (С.З).

<sup>3</sup> Строго говоря, только первого порядка. Форма полос при процессе второго порядка зависит от начальной заселенности (т.е. амплитуды компоненты). При этом на изучаемый процесс опустошения ЦЗ налагается процесс изменения концентрации центров люминесценции; это и является причиной изменения формы полос. Очевидно, спектры ТВ нельзя аппроксимировать гауссианами из-за заведомой негауссовости их форм.

### D. Алгоритм исключения компонент.

В IO, II изложен алгоритм, позволяющий найти компоненты  $\mathcal{Y}_1, \dots, \mathcal{Y}_m$ , если они подчиняются исходным предположениям<sup>I</sup>. Он очень похож на метод Гаусса (метод последовательных исключений) для решения системы линейных алгебраических уравнений. Незнание элементов матрицы  $(a_{kj})$  в уравнении (I) удается обойти благодаря нормальности системы компонент. Полное описание алгоритма было бы слишком громоздким и ненаглядным. Проследим его работу на простейшем примере трех компонент.

I. Пусть заданы три исходные спектра  $F(\lambda), F_2(\lambda), F_3(\lambda)$  (рис. 3, а) являющихся линейными комбинациями компонент, число и форму которых необходимо найти. Поскольку по предположениям 3<sup>0</sup>, 4<sup>0</sup> компоненты связаны и нормальны, то должен существовать интервал  $(\lambda'_1, \lambda'_2)$ , в котором отличается от нуля лишь первая компонента  $\mathcal{Y}_1$ . Тогда в этом интервале отношения

$\frac{F_2(\lambda)}{F_1(\lambda)}, \frac{F_3(\lambda)}{F_1(\lambda)}$  постоянны (и равны  $\frac{a_{21}}{a_{11}}, \frac{a_{31}}{a_{11}}$  соответственно) - см. рис. 3 в. Постоянство отношений позволяет определить интервал  $(\lambda'_1, \lambda'_2)$  и неизвестные отношения амплитуд, а это дает возможность исключить первую компоненту  $\mathcal{Y}_1$  из второго и третьего спектров. Строим новую систему вместо  $F_1, F_2, F_3$  (первый шаг алгоритма):

$$\begin{aligned} F'_1(\lambda) &= F_1(\lambda), \\ F'_2(\lambda) &= F_2(\lambda) - \frac{F_2(\lambda')}{F_1(\lambda')} \cdot F_1(\lambda), \\ F'_3(\lambda) &= F_3(\lambda) - \frac{F_3(\lambda')}{F_1(\lambda')} \cdot F_1(\lambda), \end{aligned} \quad (2)$$

где  $\lambda' \in (\lambda'_1, \lambda'_2)$ ,  $\frac{F_2(\lambda')}{F_1(\lambda')}$ ,  $\frac{F_3(\lambda')}{F_1(\lambda')}$  - коэффициенты для получения компоненты  $\mathcal{Y}_1$ . Получаем рис. 3, с.

<sup>I</sup> Точнее, удается найти разложение, эквивалентное  $\mathcal{Y}_1, \dots, \mathcal{Y}_m$

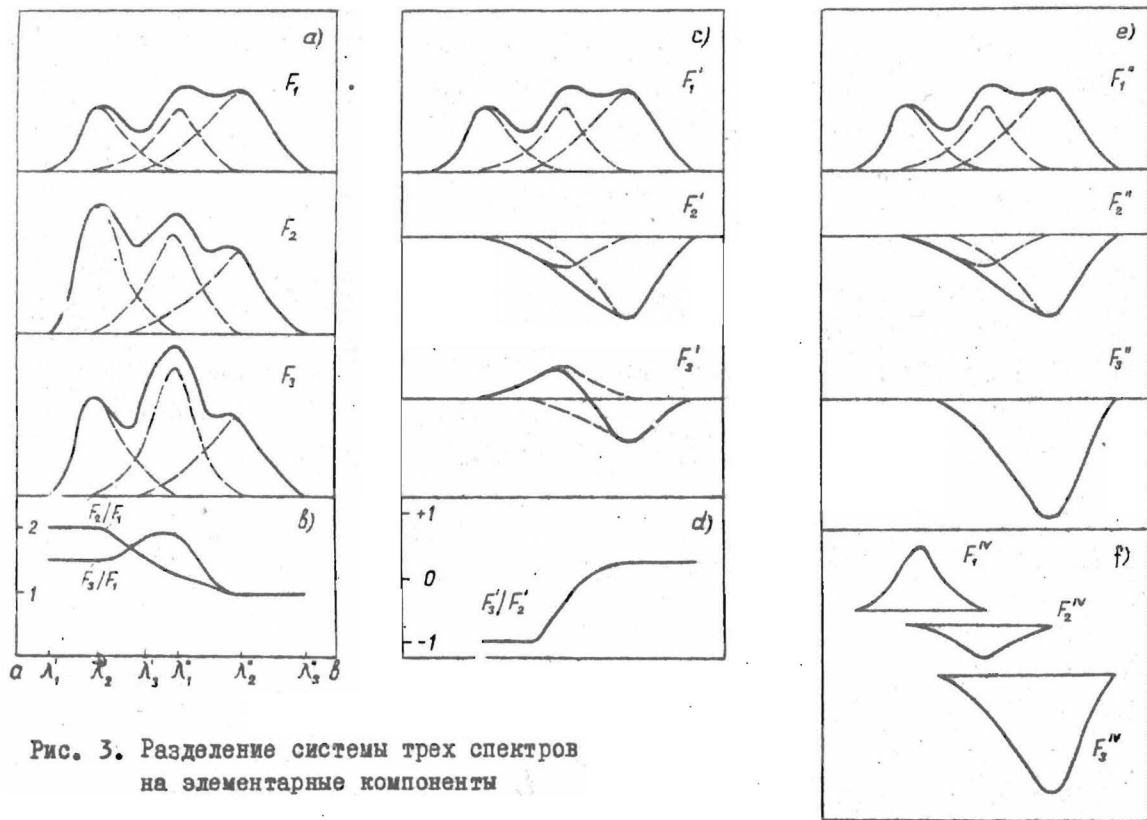


Рис. 3. Разделение системы трех спектров на элементарные компоненты

Опять замечаем, что  $F_3'(\lambda)$  пропорционален  $F_2'(\lambda)$  (рис.3, d), на этот раз в интервале  $(\lambda'_2, \lambda'_3)$ . Как и выше, это позволяет исключить  $\mathcal{Y}_3$  из третьего спектра, строя систему (второй шаг алгоритма):

$$\begin{aligned} F_1''(\lambda) &= F_1'(\lambda) = F_1(\lambda), \\ F_2''(\lambda) &= F_2'(\lambda), \\ F_3''(\lambda) &= F_3'(\lambda) - \frac{F_3'(\lambda'')}{F_2'(\lambda'')} \cdot F_2'(\lambda), \end{aligned} \quad (3)$$

где  $\lambda'' \in (\lambda'_2, \lambda'_3)$ . Получаем рис.3, e.

После исключения  $\mathcal{Y}_1, \mathcal{Y}_2$  третий спектр  $F_3$  содержит только одну компоненту; таким образом выяснено, что имеется три компоненты<sup>1</sup>. Кроме того восстановлена форма последней из них ( $F_3''(\lambda)$ ). Этим завершается прямой ход. Теперь уже не трудно, используя постоянство отношений на правом конце интервала, исключить  $\mathcal{Y}_3$  из  $F_1'', F_2''$  и т.д.

(обратный ход). В результате в каждом спектре остается по одной компоненте (рис.3, f), а полученное разложение  $F_1'', F_2'', F_3''$  оказалось эквивалентным исходному разложению  $\mathcal{Y}_1, \mathcal{Y}_2, \mathcal{Y}_3$ . Отрицательность некоторых компонент ( $F_2'', F_3''$ ) допускается условием эквивалентности  $2^0$ , но в каждый из исходных спектров рис.3, a  $F_1, F_2, F_3$  все компоненты вносят положительный вклад (все  $a_{kj} \mathcal{Y}_j > 0$ ).

В общем случае алгоритм работает совершенно аналогично: дело сводится к подбору определенных коэффициентов<sup>2</sup>.

<sup>1</sup> Наличие большего числа исходных спектров не изменило бы ситуации: все спектры, начиная с четвертого из-за линейной зависимости оказались бы теперь пропорциональными третьему на всем оставшемся участке интервала  $(\alpha, \beta)$ , и их можно было бы отбросить. В этом и проявляется избыточность системы линейно зависимых спектров.

<sup>2</sup> Коэффициенты подбираются и в /9/, но там используется априорная информация (ожидаемая форма полос), здесь коэффициенты определяются из условий  $3^0, 4^0$ .

Амплитуды  $a_{kj}$  можно вычислить различными путями:

- используя вычисленные в ходе алгоритма отношения амплитуд,
- решая уравнение (I) относительно  $a_{kj}$ , т.к.  $\varphi_j$  теперь известны,
- минимизируя по  $a_{kj}$  функцию

$$M_{1k} = \int_a^b [F_k(\lambda) - \sum_j a_{kj} \varphi_j(\lambda)]^2 d\lambda = \min = 0 \quad (4)$$

В рассматриваемом идеализированном случае все способы дают, очевидно, одинаковые результаты.

2. Для нашей системы из п. I уравнение (I') имеет вид:

$$\begin{aligned} F_1 &= \varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 \\ F_2 &= 2\varphi_1 + 1,5\varphi_2 + \varphi_3 \\ F_3 &= 1,5\varphi_1 + 2\varphi_2 + \varphi_3 \end{aligned} \quad (5)$$

Разумеется, элементы матрицы ( $a_{kj}$ ) заранее неизвестны.

Интересно проследить изменения матрицы при указанных выше преобразованиях системы  $F_1, F_2, F_3$ . Исходная матрица амплитуд имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1,5 & 1 \\ 1,5 & 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

После первого и второго шага получаются соответственно матрицы  $A'$ ,  $A''$ :

$$A' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -1,5 & -1 \\ 0 & 0,5 & -0,5 \end{pmatrix}, \quad A'' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -0,5 & 1 \\ 0 & 0 & -1,5 \end{pmatrix}.$$

Итак, в конце прямого хода получается треугольная матрица

$A''$ . В конце обратного хода получается диагональная матрица

$$A''' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -0,5 & 0 \\ 0 & 0 & -1,5 \end{pmatrix}$$

которой соответствует разложение  $F_1''', F_2''', F_3'''$  (рис. 3 f) (диагональность означает, что каждый спектр  $F_i''', i=1,2,3$  содержит по одной компоненте).

Возможно выбрать и другой (нежели описанный в D. I) порядок исключения компонент; например, исключая компоненты в прямом ходе справа:  $\mathcal{Y}_m, \dots, \mathcal{Y}_2$  и в обратном ходе  $\mathcal{Y}_1, \mathcal{Y}_2, \dots, \mathcal{Y}_{m-1}$ . Легко убедиться, что результаты разделения не зависят от принятого (прямого или обратного) порядка исключения компонент.

### Е. Работа алгоритма в особых случаях.

Везде в этой части Е предполагается выполнение I<sup>0</sup>.

I. Если в ходе алгоритма не находится участка постоянства отношения спектров, то это означает нарушение нормальности системы (3<sup>0</sup>) или связности (4<sup>0</sup>). В этом случае алгоритм обрывается (кроме одного случая - см. Е. 3).

Рассмотрим подробнее нарушения 3<sup>0</sup>, 4<sup>0</sup> на наглядных примерах.

а). Пусть надо разделить две компоненты, одна из которых поглощает другую (рис.2). Из отношения спектров можно найти лишь один коэффициент ( $a_{21}/a_{11}$ ), в конце прямого хода определяется форма поглощенной компоненты  $\mathcal{Y}_2$ .

В начале обратного хода алгоритм обрывается, т.к. из-за нарушения нормальности нельзя найти второй коэффициент и, следовательно, форму полос. Незвестный коэффициент можно подбирать, используя дополнительные соображения<sup>I</sup>.

б). Рассмотрим систему компонент, изображенную на рис. I, С. Она нормальна, но  $\mathcal{Y}_2$  несвязна. Можно видеть, что если система является разложением некоторой серии спектров (причем выполнены 5<sup>0</sup>, 6<sup>0</sup>), то это единственное нормальное разложение этой серии. Тем не менее понятно, что разложение не может быть найдено нашим алгоритмом, т.к. несмотря на нормальность отсутствуют участки постоянства отношения

---

<sup>I</sup> Например, из физических соображений, аналогично /9/.  
См. также С.3 и С. 4.

спектров<sup>1</sup>. На этом примере проиллюстрирована роль условия связности (4<sup>0</sup>). Итак, в ходе алгоритма проверится выполнение условий 1<sup>0</sup>, 3<sup>0</sup>, 4<sup>0</sup>.

2. Если в ходе алгоритма выделится компонента, которую по дополнительным соображениям следует считать неэлементарной<sup>2</sup>, то нарушено или 5<sup>0</sup>, или 6<sup>0</sup> (или оба). Эти нарушения проявляются в том, что ранг матрицы амплитуд оказывается меньше, чем число компонент, поэтому различить обе причины, не привлекая дополнительной информации, невозможно. В случае нарушения 6<sup>0</sup> после добавления новых спектров неэлементарная компонента может разделиться.

Заметим еще раз (ср.С.6), что даже при выполнении 5<sup>0</sup> в случае серии с менее, чем  $m$  линейно независимыми спектрами в матрице  $(a_{kj})$  столбцы окажутся линейно зависимыми. С другой стороны, при нарушении 5<sup>0</sup> в любой серии спектров число линейно независимых меньше, чем  $m$ , но тем не менее условие 6<sup>0</sup> может быть выполнено.

Покажем, как преобразуется матрица  $A$ , когда число линейно независимых спектров меньше, чем число компонент. Если бы в рассмотренном (в  $D$ ) примере матрица  $A$  имела вид:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1,5 & 1 \\ 1,5 & 2 & 2,5 \end{pmatrix},$$

то после первого шага получилось бы:

$$A' = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & -0,5 & -1 \\ 0 & +0,5 & +1 \end{pmatrix}.$$

<sup>1</sup> Более того; здесь неприменим никакой алгоритм, использующий идею покомпонентного исключения.

<sup>2</sup> Например, в полосе ТВ обнаружатся два пика (ср.§2.С.3).

Видно, что третий спектр пропорционален второму, их отношение - постоянная на всем интервале  $(\lambda'_2, \lambda'_3)$  и при попытке исключить  $\varphi_2$  из  $F_3$  получим, очевидно, тождественный нуль<sup>1</sup>. Это значит, что нельзя разделить все компоненты; в конце обратного хода получаем разложение из двух компонент  $-(\varphi_1 + 0,5\varphi_2), (0,5\varphi_2 + \varphi_3)$ , неэквивалентное  $\varphi_1, \varphi_2, \varphi_3$ . При обратном порядке исключения компонент получается разложение  $(0,5\varphi_2 + \varphi_3), (\varphi_2 + 0,5\varphi_2)$ , отличающееся от предыдущего только порядком компонент.

3. В некоторых случаях, при сочетании нарушений простоты и нормальности, нарушение нормальности не может быть обнаружено алгоритмом. Например, в случае двух спектров, если  $\lambda'_1 = \lambda'_2$  и спектры пропорциональны на промежутке  $(\lambda'_1, \lambda_0)$ , где  $\lambda'_1 < \lambda_0 < \lambda''_1$ , алгоритм пройдет до конца и выдаст нормальное разложение, в котором вторая компонента начинается только с  $\lambda_0$ . Полученное разложение не адекватно  $\varphi_1, \dots, \varphi_m$ , но без дополнительной информации судить об этом нельзя.

4. Иногда ход алгоритма может быть существенно упрощен; например, если на некотором подинтервале  $(a, b)$  отлична от нуля только одна компонента  $\varphi_s$ , ( $s \neq 1, s \neq m$ ), то задача разделения сводится к двум независимым задачам: разделение спектров на участке, содержащем  $\varphi_1, \dots, \varphi_s$ , и на участке  $\varphi_s, \dots, \varphi_m$ . При этом число шагов алгоритма значительно уменьшается (по сравнению с общим случаем<sup>2</sup>). То обстоятельство, что только  $\varphi_s$  отлично от нуля на некотором подинтервале  $(a, b)$  обнаружится по постоянству отношения спектров на этом подинтервале. Однако такое по-

<sup>1</sup> Т.е. спектр, являющийся линейной комбинацией других, не несет новой информации.

<sup>2</sup> В общем случае необходимо сделать, очевидно,  $2 \cdot (m^+ - 1)$  шаг, где  $m^+$  - число полученных компонент; при нарушении  $5^0, 6^0$   $m^+ < m$ .

стоянство может быть обусловлено не только отличием от нуля лишь одной компонентой, но и линейной зависимостью спектров (нарушение условия простоты  $\gamma^0$ ). В последнем случае при решении общей задачи ( п. D.) нарушение простоты не повлияет на адекватность разложения; если же пытаться общую задачу разделить на несколько независимых, то получится неадекватное исходному разложение (ситуация совершенно аналогичная Е.3).

## § 2. РЕАЛЬНЫЙ СЛУЧАЙ

### А. Специфика задачи.

1. При снятии экспериментальных спектров приходится ограничиваться конечным числом измерений не только по  $\mu$ , но и по  $\lambda$ . Уже одно только это обстоятельство усложняет задачу; строго говоря, она становится некорректной. Например, если при переходе от идеального случая к дискретному  $\lambda$  "интервал нормальности"  $(\lambda'_j, \lambda'_{j+1})$  содержит не менее двух точек, то нормальность еще проявится, если же точек менее двух, то систему нельзя считать нормальной.

2. Кроме дискретности измерений по  $\lambda$  и по  $\mu$  в реальных спектрах координаты точек определяются с конечными погрешностями. Наличие погрешностей приводит к тому, что для истинных спектров  $F_k(\lambda)$  (которые мы бы определили в идеальном случае) известно лишь некоторое реальное приближение  $F_k^0(\lambda)$ . Очевидно, сглаживание функции не может точно восстановить функцию  $F_k(\lambda)$ . В такой ситуации существует некоторая неопределенность информации, которую принципиально нельзя полностью исключить - ни задавая избыточное число спектров, ни другими путями. Неопределенность информации обуславливает то, что в ходе алгоритма уже нельзя точно проверить выполнение исходных предположений:  $\Gamma^0$ ,  $3^0$ ,  $4^0$  ( ср. § I, Е. I). В отношении спектров уже нет строгого участка постоянства и возникает вопрос - наблюдается ли

зашумленная постоынная (т.е.  $1^0, 3^0, 4^0$  выполнено), или нет. Очевидно, чем спектры зашумленнее и сильнее перекрываются, тем неопределеннее информация и труднее принять решение о выполнении указанных исходных предположений<sup>1</sup>. Вместо исходного разложения  $\varphi_1, \dots, \varphi_m$  получается реальное приближение к нему -  $\varphi_1^0, \dots, \varphi_m^0$ .

Описанный выше алгоритм для идеального случая непосредственно неприменим для разложения реальных спектров; укажем основные специфические затруднения<sup>2</sup>.

2.1. Все исходные спектры  $F_k^0$ , предназначенные для разделения, заданы в одних и тех же точках  $\lambda_t, t=1, T$ .

2.2. Погрешности в исходных спектрах обуславливают два типа ошибок:

- а) локальные - ошибка в спектре  $F_k(\lambda)$  (при его замене на  $F_k^0$ ) в точке  $\lambda \in (a, b)$  обуславливает ошибки в этой же точке во всех отличных от нуля компонентах;
- б) из-за зашумленности отношения спектров точно определить коэффициенты не удается.

2.3. Неточно определенные коэффициенты в свою очередь приводят к:

- а) ошибкам определения амплитуд компонент;
- б) компоненты в ходе алгоритма исключаются не полностью: в спектрах остаются хвосты не точно вычтенных компонент;
- в) искажаются те участки спектров, где исключаемая компонента отлична от нуля. Это может привести к еще большим ошибкам при определении следующего коэффициента и т.д.;
- г) в конце концов вместо отдельных компонент  $\varphi$  в результате разделения получаются линейные комбинации всех

---

<sup>1</sup> Решение может приниматься, используя априорную информацию; например, если заранее известно выполнение исходных условий.

<sup>2</sup> Реализация на ЭВМ алгоритма для реального случая описана в § 2.В.

компонент, в которых коэффициенты  $c_{e \neq j}$  при  $\varphi_e$  уже отличны от нуля (хотя и значительно меньше, чем сам  $c_j$ ). В идеализированном случае, очевидно,  $c_{e \neq j} = 0$ ,  $c_j \neq 0$ .

2.4. В ходе алгоритма в остающихся спектрах ошибки накапливаются; если число разделяемых спектров велико, то даже при сравнительно небольших исходных ошибках алгоритм может не пройти до конца или выдать неверный результат, т.е. выдать разложение существенно отличающееся от  $\varphi_1, \dots, \varphi_m^I$ .

2.5. Результаты разделения могут зависеть от порядка исключения компонент (даже при выполнении  $I^0 - 6^0$ ).

2.6. Появляются значительные трудности при оценке погрешностей вклада  $\alpha_{kj} \cdot \varphi_j$  отдельных компонент в спектре.

3. Опыт разделения спектров на ЭВМ показал, что все-таки задача не столь безнадежна, как может показаться; имеет смысл ограничиться только случаем небольших ошибок<sup>2</sup> (в случае больших ошибок информация столь неопределенна, что достаточно грубо разделить спектры от руки на глаз, и это лучше, чем использовать тонкий метод и ЭВМ).

Если число снятых спектров велико, можно уменьшить ошибки в исходных спектрах, суммируя их. Суммировать спектры можно, например, следующим образом<sup>3</sup>:

$$F_k(\lambda) = \sum_{t \neq k}^n F_t^0(\lambda_t), \quad \begin{matrix} k = 1, n \\ t = 1, T \end{matrix} \quad /6/$$

<sup>1</sup> Например, алгоритм может обрываться из-за отсутствия участка постоянства отношения. Если алгоритм даже проходит до конца, то в пределах ошибок два спектра могут восприниматься как линейно зависимые, следовательно две зашумленные компоненты могут восприниматься за одну и не разделяться.

<sup>2</sup> относительные ошибки  $\leq 5\%$  (эта оценка зависит от числа разделяемых спектров).

<sup>3</sup> аналогично идее повторных экспериментов при неизменных внешних условиях /12/.

Так получатся  $l$  новых спектров, которые теперь принимаются за исходные. Случайные ошибки в одних точках в разных спектрах при суммировании частично компенсируются (если среднее значение ошибок близко к нулю), а компоненты суммируются<sup>1</sup>. Реализация метода на ЭВМ показала эффективность этого приема.

Надо учитывать, что при произвольном суммировании полученные спектры могут оказаться близкими к линейной зависимости (т.е. матрица  $A$  близка к вырождению). Если суммировать такие спектры, где соотношения между амплитудами компонент сохраняется во всех спектрах<sup>2</sup>, то разрешение компонент в полученных спектрах возрастет и подобной неприятности не будет.

#### В. Программа ЭВМ.

На основе предложенного /I0, II/ метода написана программа ЭВМ, определяющая форму и амплитуды элементарных компонент в вводимых спектрах. Блок-схема приведена на рис.4.

I. Перед решением задачи в ЭВМ вводится исходная информация - серия спектров, снятых в одинаковых точках  $\lambda_t, t = 1, T$ . Вводятся только значения функций - аргументами служат номера точек. После введения исходной информации для уменьшения шумов спектры суммируются (см.А.З.). В программе это реализовано в виде умножения матриц:

$$\begin{pmatrix} F_1'(\lambda) & \dots & F_1'(\lambda_T) \\ \dots & \dots & \dots \\ F_n'(\lambda_1) & \dots & F_n'(\lambda_T) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 01 & \dots & 1 \\ 10 & \dots & 1 \\ \dots & \dots & \dots \\ 1 & \dots & 01 \\ 1 & \dots & 10 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} F_1^0(\lambda_1) & \dots & F_1^0(\lambda_T) \\ \dots & \dots & \dots \\ F_n^0(\lambda_1) & \dots & F_n^0(\lambda_T) \end{pmatrix} \quad (7)$$

<sup>1</sup> Очевидно, при этом существенно используется неотрицательность вкладов компонент в спектрах.

<sup>2</sup> Например, если (в случае трех компонент) во всех спектрах сохраняется неравенство типа  $a_{k1} < a_{k2} < a_{k3}$ ;  $k=1, n$ .



2. Ход алгоритма в целом ясен (см. § I.D), ниже разъясняются некоторые изменения, внесенные в реальном случае. Для нахождения коэффициентов при исключении очередной компоненты  $\mathcal{Y}_j$  необходимо составить отношение спектров. Удобнее при программировании начинать с той точки, где исключаемая компонента выделяется из шумов. Считается, что  $j$ -ая компонента начинает выделяться из шумов в точке  $A_j$ , если начиная с нее имеются точки, в которых функция меняется монотонно<sup>1</sup>. После нахождения начала очередной компоненты<sup>2</sup>, начиная с  $A_j$  составляется отношение двух очередных спектров и выясняется, нормальна ли система компонент (выполнение условия суперпозиции подразумевается), т.е., есть ли участок постоянства отношения спектров. Конкретно это реализовано так: через заранее задаваемое число  $N$  точек  $A_{j+1}, \dots, A_{j+N}$  отношения спектров проводится полином первого порядка, наилучший в смысле наименьших квадратов

$$\sum_{A_{j+1}}^{A_{j+N}} [y(\lambda) - (\alpha\lambda + \beta)]^2 = \min, \quad (8)$$

здесь  $y(\lambda)$  - отношение спектров,  $(\alpha\lambda + \beta)$  - полином. Если на участке  $(A_{j+1}, A_{j+N})$  отлична от нуля лишь одна компонента и среднее значение ошибок - нуль, то можно ожидать, что на этом интервале  $\beta$  близко к искомой постоянной,  $\alpha$  близко к нулю (в пределе в идеальном случае  $\alpha = 0$ ,  $\beta$  равно искомому коэффициенту).

Полученное  $\alpha$  сравнивается с небольшой константой  $\varepsilon$ . Если  $|\alpha| > \varepsilon$  - считается, что нет точек постоянства отношения спектров, система признается ненормальной

<sup>1</sup> Точка  $A_j$  в идеальном случае совпадает с  $\lambda'_j$ . Как показано, получающиеся в ходе алгоритма спектры и компоненты могут быть и отрицательными. Первая компонента может начинаться со спадающей ветви, последняя - с возрастающей.

<sup>2</sup> Программа написана в предположении, что все  $\alpha_{kj} \neq 0$ .

<sup>3</sup> в частности, система воспринимается как ненормальная, если интервал, где данная компонента отлична от нуля, содержит менее  $N$  точек.

и алгоритм обрывается; если же  $|\alpha| \leq \varepsilon$  - система нормальна.

Понятно, что такая методика весьма примитивна; используемые константы-критерии  $N, \varepsilon$  зависят от условия снятия спектров (числа точек, зашумленности). Однако можно подобрать значения этих параметров, которые будут хорошо работать при разделении обычных спектров среднего качества<sup>I</sup>.

Если система оказывается нормальной, то, поскольку отношение спектров зашумлено, желательно определить длину участка постоянства, чтобы возможно было более точно определить коэффициент. За левый конец принимается, очевидно, точка  $A_j$ , за правый - точка  $L_{j+1}$ , начиная с которой следуют 4 точки, в которых  $y(\lambda)$  меняется монотонно. Такой монотонный (регулярный) ход точек означает появление отличной от нуля другой компоненты. За величину коэффициента принимается

$$\overline{y(\lambda)}|_{(A_j, L_{j+1})} = \frac{\sum_{A_j}^{L_{j+1}} y(\lambda)}{(L_{j+1} - A_j + 1)} \quad (9)$$

3. Поскольку коэффициент определяется неточно, то при вычитании спектров на интервале  $(A_j, L_{j+1})$  вместо беспорядочного шума остается хвост неточно исключенной компоненты  $\varphi_j$  в тех спектрах, откуда она исключалась. Поэтому начало  $A_{j+1}$  следующей компоненты  $\varphi_{j+1}$  ищется начиная с  $L_{j+1}$  (иначе ЭВМ воспримет хвост  $\varphi_j$  за новую искомую компоненту  $\varphi_{j+1}$ ). Ясно, что в идеализированном случае  $A_{j+1} = L_{j+1} = \lambda'_{j+1}$ , однако в реальном случае это не обязательно так. Так как компонента  $\varphi_j$  исключена неполностью, то искажаются те участки оставшихся спектров, где  $\varphi_j \neq 0$ . Это приводит к возрастанию погрешности определения следующего коэффициента и т.д. То обстоятельство, что на  $(A_j, L_{j+1})$  после полного исключения  $j$ -ой компоненты

<sup>I</sup> Нами выбрано  $\varepsilon = 2$ ,  $N = 5$ .

(при правильно определенном коэффициенте) должен оставаться беспорядочный шум, а не хвост полосы  $\mathcal{Y}_j$ , можно использовать для коррекции коэффициента<sup>I</sup>.

Прямой ход заканчивается или  $(n-1)$ -ым шагом (когда все спектры исчерпаны), или раньше - шагом, в котором два очередных спектра пропорциональны на всем интервале  $\lambda$ , где они отличны от нуля. Поскольку результат может зависеть от порядка исключения компонент, исключение проводится обоими способами.

4. Амплитуды ищутся двояко: из уравнения (I), обращая матрицу значений функций  $\mathcal{Y}_j$ , или минимизируя по  $a_{kj}$  функцию

$$M = \sum_{k=1}^r [F_k^{\circ} - \sum_j a_{kj} \mathcal{Y}_j^{\circ}(\lambda_t)]^2 = \min, k=1, n. \quad (10)$$

Этот прием аналогичен минимизации при аппроксимации исходных спектров гауссианами, но теперь известно число компонент и их форма, поэтому минимизация проводится по  $m$  параметрам, а не по  $3m$ , как в случае аппроксимации.

Два способа определения амплитуд позволяют критически оценить полученные значения. Если алгоритм проходит до конца, то вы печатаются полученные компоненты, координаты их максимумов и разности первого порядка. Если алгоритм обрывается, то вы печатаются разделяемые спектры в момент обрыва.

5. Рационально увеличить участие оператора в работе программы (контролируя работу программы при помощи осциллоскопа):

- а) при оценке нормальности системы в каждом ходе алгоритма;
- б) при выборе порядка спектров (если в некоторых

---

<sup>I</sup> В нашем варианте коррекции не введены; для этого требуется контроль оператора за работой программы при помощи осциллоскопа.

спектрах амплитуда очередной исключаемой компоненты нулевая);

в) при выборе интервала усреднения  $(A_j, L_{j+1})$ ;

г) при коррекции коэффициентов;

д) при принятии решений в не предусмотренных заранее ситуациях. При принятии решений оператор использует недоступную ЭВМ априорную информацию.

Программировать метод легче на языках, в которых удобны и логические, и арифметические операции - FORTRAN, ALGOL, но не в числовых кодах.

Программа написана на языке FORTRAN для машины GE-415 и содержит  $\sim 300$  команд, занимает объем памяти  $[5600]_8$  ячеек, среднее время работы (без трансляции) - десятки секунд.

При небольшом объеме вычислений (несколько спектров с небольшим числом точек) все необходимые вычисления могут быть проделаны при помощи логарифмической линейки.

### С. Разделение экспериментальных спектров термовысвечивания.

Для разделения на элементарные компоненты была выбрана серия спектров ТВ для образца  $KV_r-Te$ . Все спектры сняты с равным шагом в одинаковых точках (70 спектров по 180 точек). Изменение амплитуд компонент в разных спектрах достигалось изменением температуры возбуждения образца.

Общий вид одного из спектров приведен на рис.5.

Поскольку на интервале изменения температуры (рис.5) есть подинтервалы, где отлична от нуля только одна компонента (это обнаруживается по отношению спектров - возможное нарушение простоты исключено в данном случае; т.к. компоненты имеют гауссообразную форму), то общую задачу разде-

ления 1-5 пиков<sup>I</sup> можно разбить на несколько независимых простых задач.

Разделялись как серия спектров, содержащих 1-5 пики, так и отдельные участки общего спектра (1-2, 4-5 пики, 6 пик). Было перепробовано много различных вариантов разделения пиков; например, при разделении пика 6 задавались как 2, так и 3 спектра, эти спектры также менялись, применялось суммирование спектров. Все различные исходные варианты дали одинаковые результаты.

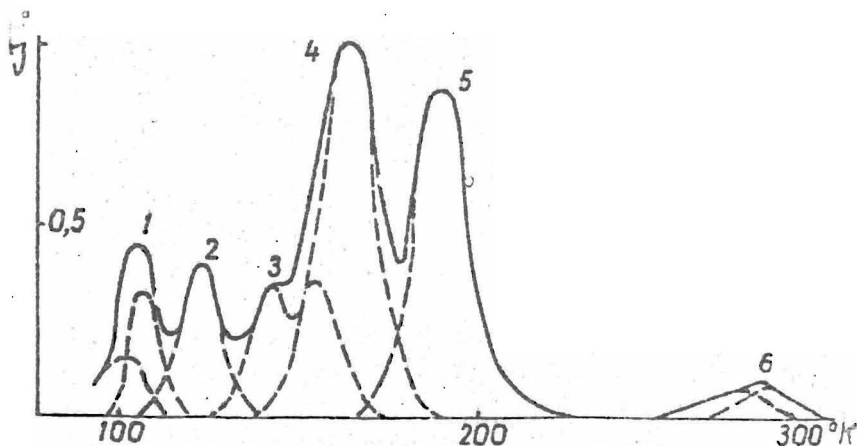


Рис. 5. Спектр термолюминесценции образца (сплошная линия) и выделенные компоненты (пунктир). Цифрами обозначены номера разрешенных пиков. Сложная структура 1, 3, 6 пиков в исходных спектрах не разрешена.

I. Пик 1 состоит как минимум из двух компонент. Вторая выделенная компонента  $\gamma_{12}$  элементарна, т.к. отношение спектров на интервале, где только она отлична от нуля, постоянно

<sup>I</sup> Пик 6 можно разделять отдельно, т.к. он изолирован от остальных.

- это верный признак элементарности компоненты, Первая же компонента, возможно, неэлементарна - отношение спектров вначале первого пика, где  $\varphi_{12} \equiv 0$ , имеет регулярный (систематический) ход точек, т.е. на этом интервале отлична от нуля не только одна компонента. Вторая компонента влиять не может (т.к.  $\varphi_{12} \equiv 0$ ), т.е. или первая выделенная компонента сама состоит из нескольких подкомпонент, образующих нормальную систему, или влияет посторонний фон (например, туннельная люминесценция).

2. Второй пик оказался элементарным.

3. Слабо разрешенный в исходных спектрах пик 3 является линейной суперпозицией двух неразделенных компонент по следующим соображениям. При разделении выделена двугорбая компонента; однако известно, что элементарные пики ТВ имеют один максимум. Повидимому, это тот случай, когда амплитуды двух компонент меняются пропорционально (в пределах ошибок) в разделяемых спектрах - этот случай обсуждался в §1,С.5, Е.2); эти компоненты можно пытаться разделить, подбирая такие спектры, где их амплитуды меняются непропорционально.

4. Пики 4, 5 разделены; они элементарны.

5. Пик 6 состоит как минимум из двух компонент - случай совершенно аналогичный первому пику.

Эти результаты представляют физический интерес и хорошо согласуются с данными, полученными другими методами (в частности, методом постоянного сигнала А.Гайлитиса).

Итак, при помощи нового метода выделены три неразрешенные в исходных спектрах компоненты, показана возможная неэлементарность двух из них и элементарность всех остальных компонент. Эти результаты свидетельствуют о высокой эффективности метода, который, повидимому, найдет вскоре широкое применение при анализе спектров самой различной природы и поможет извлечь из них информацию, недоступную другим методам.

Л И Т Е Р А Т У Р А

- I. Антонов-Романовский В.В., "Кинетика фотолуминесценции кристаллофосфоров", М., 1966.
2. Гайлитис А.А., Сборник "Кибернетизация научного эксперимента", вып. I, 100, Рига, 1968.
3. Bell J.T., Biggers R.E., *Jorn. Mol. Spectr.*, 15, 247, 1965.
4. Pita J., Jones R., *Canad. Journ. Chem.*, 44, 24, 3031, 1966.
5. Mariscotti M.A., *Nucl. Instr. and Meth.*, 50, 309, 1967.
6. Тяжелова В.Г., ЖПС, том X, вып. I, 23, 1969.
7. Антипова-Каратаева И.И. и др., ЖПС, том X, вып. 3, 481, 1969.
8. Атлас спектров ЭПР, изд. АН СССР, М., 1962, 1964.
9. Лундин А.Г. и др., Информ. бюлл. Совета по автом. научн. исследов., № 2, 61, 1970.
10. Цирулис Я.П., "Труды I Всесоюзного симп. по вычисл. системам", т. VI, стр. 84. Новосибирск, 1967. См. также "Кибернетизация научного эксперимента", вып. I, 103, Рига, 1968.
- II. Фок М.В., ЖПС, том XI, выи. 5, 927, 1969.
12. Klein M.P., Barton G.W., *Rev. Scient. Instr.*, 34, 7, 754, 1963.

Ю.Р. Закис, Ю.Я. Кузьмин, Л.М. Кузьмине,  
А.О. Москальонов, Л.Р. Пуце

### АНАЛИЗ СПЕКТРОВ В СИСТЕМЕ "ЧЕЛОВЕК-МАШИНА"

Разложение спектров на "элементарные полосы" - одна из наиболее распространенных задач обработки спектроскопической информации. Обычно задача сводится к определению числа и основных параметров полос. При решении этой задачи, в связи с большим объемом вычислительных работ, находят широкое применение цифровые вычислительные машины (ЦВМ). Известен целый ряд алгоритмов, позволяющих полностью автоматизировать весь процесс обработки спектров /1,2,3/. Однако эти алгоритмы достаточно сложны, работают лишь при наличии четкого критерия качества разложения спектра на "полосы", требуют детального знания моделей "элементарных полос" и "фона", а также весьма чувствительны к степени зашумленности спектров. Наиболее общий алгоритм /4/, не предполагающий предварительного знания моделей "полос", все же требует специальной организации эксперимента.

В настоящей работе сообщается о простом алгоритме разложения спектров, свободном от ряда перечисленных недостатков. Оригинальность метода состоит в том, что процесс обработки ведется при непрерывном взаимодействии экспериментатора с ЦВМ. Во время этого взаимодействия ЦВМ выполняет наиболее рутинные и длительные для экспериментатора вычислительные процедуры, а экспериментатор, согласно полученным результатам вычислений, осуществляет операции качественного характера, трудно программируемые на ЦВМ. Такое решение задачи позволяет использовать опыт экспериментатора и учитывать индивидуальные особенности экспериментов без постоянной переделки программ, а также осуществлять во время обработки спектров быстрый переход от одного критерия качества разложения к другому.

Предлагаемый алгоритм похож на известный "метод шаблонов" /5/, однако применение ЦВМ позволяет находить решение значительно скорее и с лучшим качеством, чем дает "метод шаблонов".

Сущность алгоритмов состоит в следующем. В память ЦВМ вводится анализируемый спектр с помощью перфоленты, на которой закодированы измерения, или непосредственно по каналам связи с экспериментальной установкой. Затем спектр программно выдается на экран осциллоскопа, подключенного к машине. Экспериментатор "на глаз" определяет число и параметры "элементарных полос" и на специальном пульте, соединенном с ЦВМ, устанавливает движки потенциометров в соответствующие положения. Машина с помощью цифрового вольтметра определяет положения движков потенциометров, находит по ним параметры "шаблонов" - функций наиболее близких к "элементарным полосам", а затем вычисляет сами "шаблоны". Кроме того, чтобы экспериментатору было проще искать нужное разложение, ЦВМ синтезирует из найденных "шаблонов" спектр. Этот, построенный по заданным с пульта параметрам, спектр, а также исходный спектр и разность между ними выводятся одновременно на экран осциллоскопа. Задача экспериментатора состоит в том, чтобы подобрать параметры "шаблонов", соответствующие положениям потенциометров на пульте, таким образом, чтобы кривая невязок обратилась в определенную функцию (фон, константу и т.п.), зависящую от условий проведения эксперимента. Опрос всех параметров, просчет функций и вывод кривых на осциллоскоп происходят циклически и занимают всего 2 секунды. Все это позволяет экспериментатору оперативно вводить необходимые изменения параметров, а также просмотреть различные варианты разложения спектра и выбрать из них наиболее оптимальный. Специальная система тумблеров, которая также циклически опрашивается машиной, делает возможным исключение из учета любой "элементарной полосы". Комбинации найденных параметров могут быть по желанию экспериментатора отпечатаны.

На рис. I изображена общая блок-схема обработки спектров.

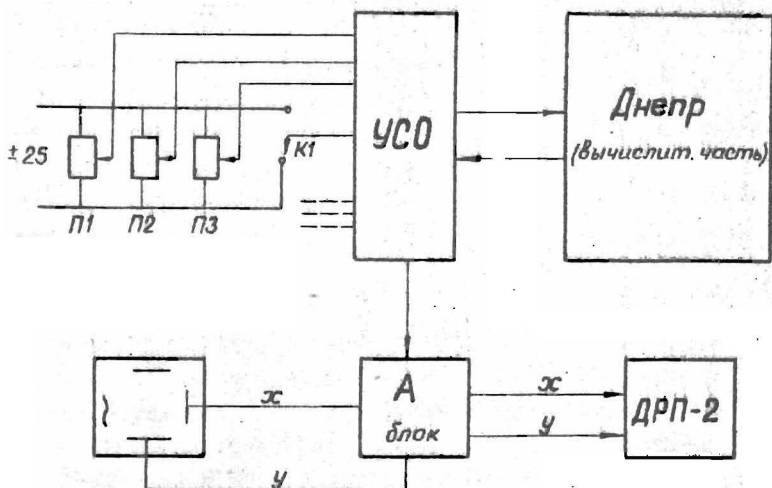


Рис. I.

Восемь групп, содержащих по три потенциометра и тумблер, подсоединены к 32 каналам опроса аналоговых сигналов устройства связи с объектом "Днепр-1". К двум каналам блока аналоговых выходов "Днепр-1" подсоединен ХУ-осциллоскоп. К двум другим каналам подключен двухкоординатный

самописец ДРП-2, позволяющий зафиксировать результат на бумаге в виде графика.

В память машины вводится программа, блок-схема которой показана на рис. 2. После просмотра исходного спектра и выполнения по ключам ряда предварительных операций типа отбрасывания крайних точек и выделения фона, экспериментатор определяет число полос и закрепляет за каждой полосой по группе в три потенциометра и одному тумблеру. Программа в это время закичивает показ исходного спектра на осциллооскопе. По ключу программа уходит на определение включенных тумблеров. Если все тумблеры выключены, то на осциллооскоп выводится только исходный спектр и последовательно опрашиваются тумблеры. Если какой-нибудь тумблер окажется включенным, то программа уходит на опрос потенциометров, соответствующих включенному тумблеру, по положению которых определяются значения параметров. После каждого опроса программа вычисляет значения нового спектра и выводит его на экран осциллооскопа, наряду с исходным спектром и кривой невязок. Наблюдая за кривой невязок, экспериментатор последовательно подгоняет параметры всех полос. Система тумблеров позволяет выводить на экран осциллооскопа как каждую полосу отдельно, так и их сумму. Если для дальнейшего счета требуются не все элементарные полосы, то включением тумблера, соответствующего данной полосе, ее можно исключить из дальнейших расчетов.

В качестве практического эксперимента разлагались спектры, полосы которых описывались гауссовыми функциями, а фон аппроксимировался линейной функцией. Каждую полосу характеризовали три параметра:  $a$  — амплитуда,  $b$  — положение максимума,  $c$  — полуширина. После опроса пульта программа вычисляет значения спектра:

$$y(x_i) = \sum_j a_j e^{-\frac{(x_i - b_j)^2}{2c_j^2}}$$

где число  $j$  равно числу включенных тумблеров.

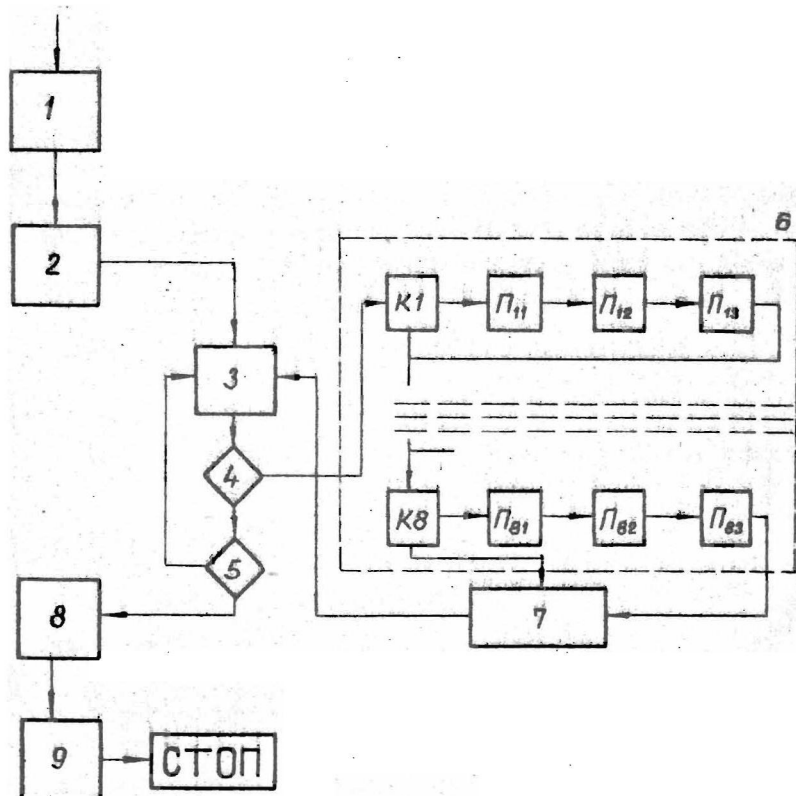


Рис.2

Блок-схема программы; 1 - просмотр исходного спектра на осциллооскопе; 2 - предварительная обработка; 3 - вывод на осциллооскоп трех кривых; 4-5 -ключи перехода; 6 - опрос тумблеров и потенциометров; 7 - вычисление нового спектра; 8 - вычисление интегралов, отношений между ними; 9 - печать и вывод на самописец результатов.

Программа позволяет также определить площади элементарных полос и отношение сумм площадей полос в определенной последовательности. Вычисление площадей элементарных полос ведется по формуле трапеций для неравноотстоящих значений.

Результаты обработки спектров, полученные этим методом сравнивались с результатами, полученными другими способами. Точность метода оказалась достаточно хорошей. На рис. 3 показан типичный спектр и его разложение вышеописанным методом.

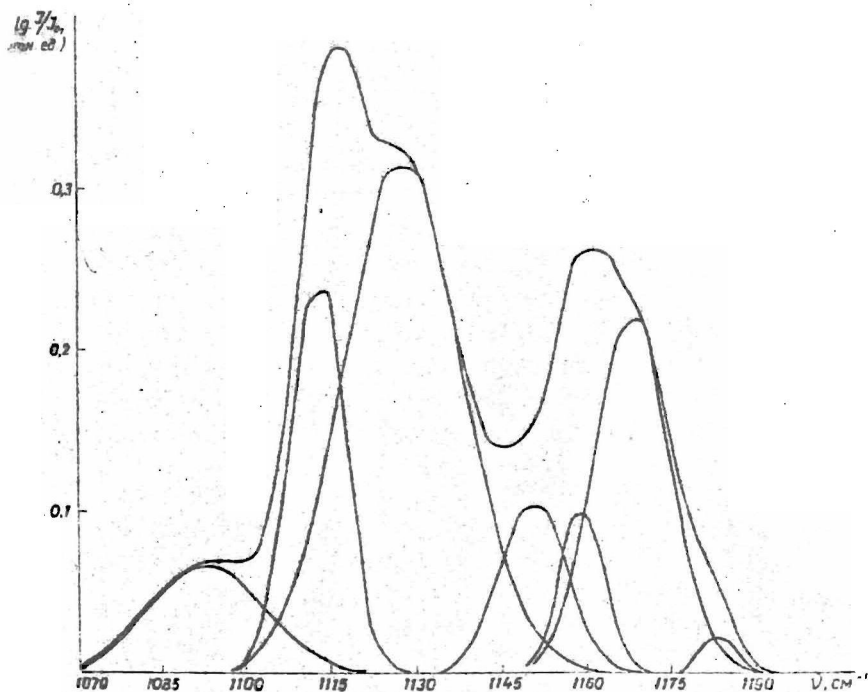


Рис. 3

## Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Bell J.T. and Biggers R.E., The absorption spectrum of the uranyl ion in perchborate media, *Journal of Molecular Spectroscopy*, 18, p.247-275, 1965.
2. Mariscotti M.A., A method for automatic identification of peaks in the presence of background and its application to spectrum analysis, *Nucl. Instrum. and Methods*, 50, N 2, p. 309-320, 1967.
3. Гайлитис А.А. Разложение сложных кривых на составляющие типа гауссовских, Кибернетизация научного эксперимента, ЛГУ, Рига, 1968, стр. 94-103.
4. Цирулис Я.П. Разложение кривых на независимые компоненты. Труды I Всесоюзной конференции по вычислительным системам. Новосибирск, вып. 6, 1968.
5. Костромина Н.А., Гананаева Н.Н., Исследование комплексообразования европия с этилентриаминпентаацетатом спектрографическим методом. *Журнал прикладной спектроскопии*, том XIV, вып. 2, февраль 1971.

## СО Д Е Р Ж А Н И Е

Стр.

### ЧАСТЬ I. СИСТЕМНЫЙ ПОДХОД В ФИЗИЧЕСКИХ ИССЛЕДОВАНИЯХ

1. Ю.Я.Кузьмин. Целесообразность автоматизации  
твердотельного эксперимента ... 3
2. И.А.Тале. Системный анализ и оценка целесооб-  
разности автоматизации спектраль-  
но-кинетических люминесцентных  
методов исследования твердого  
тела ..... II
3. Ю.Я.Кузьмин. Проектирование современных науч-  
но-исследовательских систем ... 26
4. А.А.Бернуп. Формализация цели проектирования  
научно-исследовательской системы 37
5. Ю.Я.Кузьмин. Системный подход и НИР лаборато-  
рии ..... 56

### ЧАСТЬ 2. СИСТЕМЫ ЭКСПЕРИМЕНТИРОВАНИЯ

6. А.Э.Плаудис. Идеология построения системных  
приборов ..... 66
7. Г.К.Лимех. Обзор системных приборов, разрабо-  
танных в Проблемной лаборатории  
физики полупроводников Латвийс-  
кого госуниверситета им.П.Стучки 76
8. Э.Э.Тарденак. Проект системы для исследований  
релаксации спектров оптического  
поглощения ..... 84

ЧАСТЬ 3. МАТЕМАТИЧЕСКОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ЭКСПЕРИМЕНТА

9. Я.П.Цирулис, Е.А.Котомин, И.А.Тале. Разделение сложных спектров на элементарные компоненты ..... 93
10. Ю.Р.Закис, Ю.Я.Кузьмин, Л.М.Кузьмина, А.В.Москальонов, Л.Р.Пуце. Анализ спектров в системе "Человек-машина" ..... 123

Ученые записки, том 160

КИБЕРНЕТИЗАЦИЯ НАУЧНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

Вып. 3

Редактор И.Зилитис  
Технический редактор М.Гада  
Корректор О.Аболтыньш

Редакционно-издательский отдел ЛГУ им. Петра Стучки  
Рига 1972

---

Подписано к печати 31/XII 1971 ЯТ 04233, Зак. № 125.  
Ф/О, 60x84/16. Офсетная. Физ.п.л. 8,5, Уч.-и.л. 6,3  
Тираж 500 экз. Цена 69 коп.

---

Отпечатано на ротационте, Рига-50, ул.Вейденбаума,5  
Латвийский государственный университет им. П.Стучки

135554

*Handwritten:* m. sp  
+ m. sp

ЦЕНА 88 коп.

44 / 399

3

LATVIJAS UNIVERSITĀTES BIBLIOTĒKA



0508048466

Учен. зап. (ЛГУ им. П.Стучки), 1972, т. 160, I-130