

Р и с. 2. Структурная схема ППП

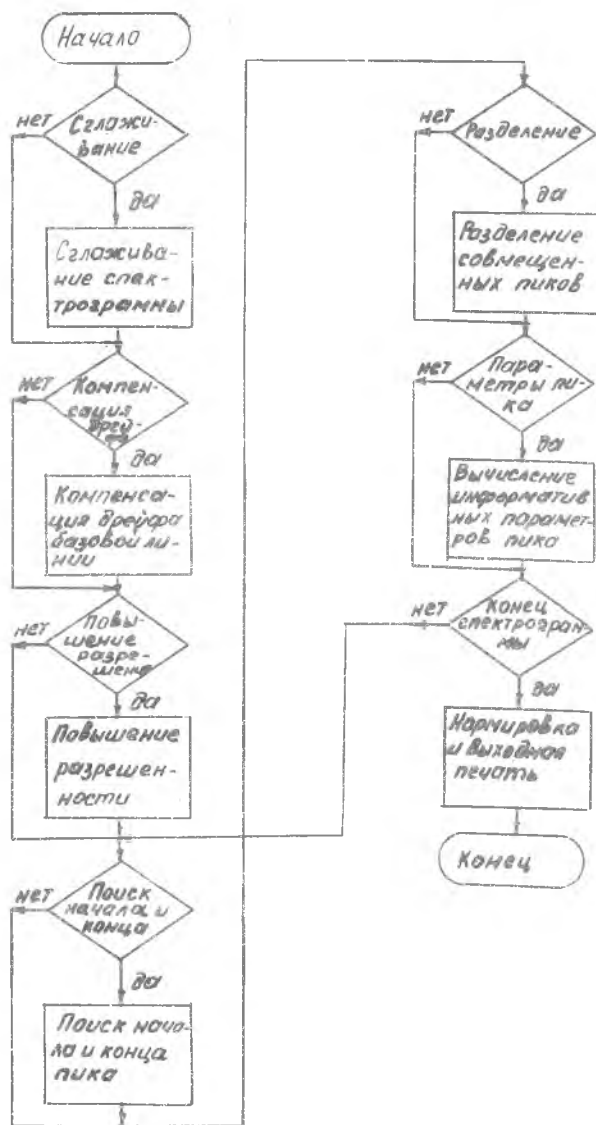
После ввода в ЭВМ спектральных данных с помощью процедур ввода, моделирования или чтения с НМД спектрограммы распечатываются и производится анализ на необходимость их выдачи в графическом виде, в виде записи данных на архивную магнитную ленту или же выдачи спектральных данных и в графическом виде, и в записи на архивную магнитную ленту. После выбора одного из перечисленных выше блоков производится анализ на конец работы ППП. В случае подтверждения анализа управление передается на процедуру окончания, в противном случае анализируется необходимость обработки для введенных, смоделированных или прочитанных с НМД данных. Если анализ на необходимость обработки подтверждается, то управление передается в блок обработки спектрограмм, в противном случае этот блок обходится, но в любом случае управление передается на очередной блок анализа, где анализируется необходимость записи полученной информации на личную магнитную ленту. Если анализ не подтверждается, то управление передается на процедуру окончания работы ППП, если подтверждается, то управление передается в блок записи на личную магнитную ленту (МЛ), а затем на процедуру окончания работы ППП.

Рассмотрим коротко основные блоки. Блок *WWOD PK* предназначен для ввода данных с перфокарт по нескольким спискам, по правилам, определенным оператором *NAMELIST*. По списку с именем *NAM 1* вводится паспорт спектра, *NAM 2* - паспорт области, *NAM 3* - значения интенсивностей Y_c , т.е. сама спектрограмма.

Блок *MTIA* предназначен для ввода данных с перфоленты. Структура данных совпадает с блоком *WWOD PK*, но сам ввод спектрограммы является более удобным, так как исключаются операции ручного кодирования, необходимо только набить на перфокартах справочные и вспомогательные данные (паспорт спектра и паспорт области). Однако перфолента может содержать две группы ошибок: ошибки связанные со сбоем перфоратора и допущенные исследователем при работе на приборе. Поэтому блок *MTIA* производит контроль перфоленты (п/л) и выдает сообщение о ситуациях сбоя. Контроль правильности осуществляется по следующим ситуациям:

1. Неформатный кадр (т.е. ошибка перфорации).
2. Ситуация, когда в строках 2,3 и 6...11 стоит "не число" (ошибка перфорации).
3. Ситуация пропущенного измерения (методическая ошибка).
4. Ситуация повторного измерения (методическая ошибка).

Если исследователь заметил ошибку при съеме I-го измерения, он снова может провести это измерение, причем столько раз, сколько потребуется. Тогда на п/л будет фигурировать группа следующих подряд кадров с одним номером, из которых только последний вводится в ЭВМ, а остальные отбрасываются.



Р и с. 3. Структурная схема блока обработки спектрограммы

Кадр, содержащий ситуацию 1,2,3, аннулируется, на печать выдается сообщение, содержащее причину дефектности и номер кадра. Исключенные или отсутствующие на п/л (ситуация 3) кадры восстанавливаются.

Если необходимо провести тестирование программы обработки или определить их возможности, то в ППП используется блок *MOD DIF*- моделирование спектрограммы. Блок *MOD DIF* позволяет моделировать спектр из ряда спектральных линий гауссовской формы с наложенным пуассоновским шумом и дрейфом базовой линии, а также разбивать спектр на области.

Блок *IAX* обеспечивает просмотр активной магнитной ленты, поиск на ней нужных магнитов данных, терпаться их на ленте магнитной ленте. Поиск спектров осуществляется по любой совокупности референсов: шифру и дополнительному шифру; фамилии или паролю; дате.

Программа *IAXL* обеспечивает просмотр личной МЛ и поиск научной информации. Поиск идет по тем же референсам, что и в *IAX*.

Блок *OBASP* служит для обработки данных и состоит из следующих программ (рис.3):

- сглаживание спектрограмм *SGL* ;
- компенсация дрейфа базовой линии *KDL* ;
- повышение разрешенности *PRS* ;
- поиск начала и конца *PNK* ;
- разделение совмещенных пиков *RSP* ;
- вычисление информативных параметров пика *WIP* ;
- нормировка и выходная печать *NORMP* .

В блоке ведется анализ на необходимость использования каждой из перечисленных программ.

ППП написан на языке Фортран, программа ввода с перфоленты - на языке Ассемблер.

Л и т е р а т у р а

И. С и л и с Я.Я., К о ф м а н А.М., Р о з е н б л и т А.Б.
Первичная обработка хроматограмм и спектров на ЭВМ.-Рига:Зинатне,
1980.