

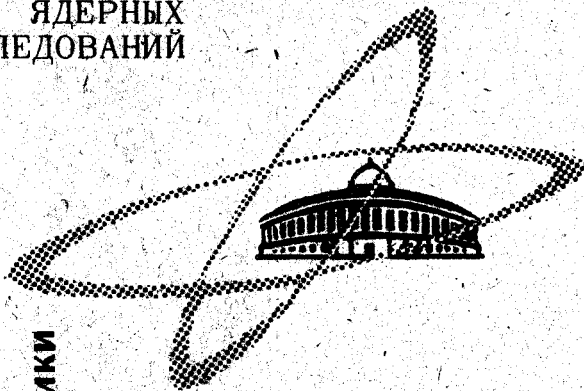
СЗУУ. 1Р

Г-13

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

22/10-74



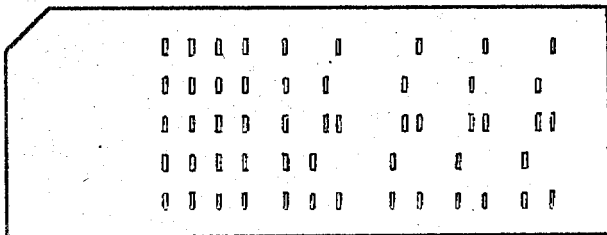
P10 - 5043

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ  
И АВТОМАТИЗАЦИИ

В. Гаджоков, Л. Александров, Ч. Стоянов

О РЕШЕНИИ ОДНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ  
ГАММА-СПЕКТРОСКОПИИ МЕТОДОМ НЬЮТОНА  
С ПРИМЕНЕНИЕМ СГЛАЖИВАНИЯ  
ЛИНЕЙНЫХ ШАГОВ

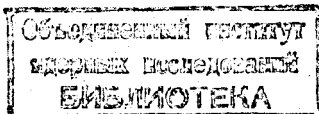
1970



P10 - 5043

В. Гаджиков, Л. Александров, Ч. Стоянов

О РЕШЕНИИ ОДНОЙ НЕЛИНЕЙНОЙ ЗАДАЧИ  
ГАММА-СПЕКТРОСКОПИИ МЕТОДОМ НЬЮТОНА  
С ПРИМЕНЕНИЕМ СГЛАЖИВАНИЯ  
ЛИНЕЙНЫХ ШАГОВ



8353/2 чр

Хорошо известно, что форма фотопика при регистрации гамма-излучения сцинтилляционными детекторами близка к гауссовой. Известно также, что пик обладает асимметрией и несколько более уширен в своей левой части, т.е. в области меньших амплитуд импульсов. В силу ряда физических соображений можно ожидать, что эта асимметрия представляет собой малую добавку к основному пику в виде сопутствующего ему гауссовского пика, смещенного влево. Естественно предположить, что учет сопутствующего пика при обработке экспериментальных данных существенно улучшит расчет параметров основного пика. В ходе такой обработки сталкиваемся с решением нелинейной трансцендентной системы уравнений. Решение подобных систем методами, включающими линейные шаги, затруднено из-за обусловленности последних. В настоящей работе предлагается модификация метода Ньютона, в которой используется регуляризирующий алгоритм<sup>I/</sup> линейных шагов. По программе, реализующей предложенный алгоритм, была решена конкретная задача, результаты которой приведены в качестве иллюстрации.

I. Пусть с помощью сцинтилляционного детектора и многоканального анализатора снят спектр одиночной гамма-линии. Будем рассматривать только фотопик спектра. Если принять за единицу ширину канала анализатора, то зависимость зарегистрированного числа импуль-

сов.  $Y$  от номера канала  $q$  и от параметров спектра можно представить в виде

$$Y(q; N_1, p_1, \sigma_1, N_2, p_2, \sigma_2, a_0, a_1, \dots, a_5) = \frac{N_1}{\sigma_1 \sqrt{2\pi}} \int_{q-1}^q e^{-\left(\frac{x-p_1}{\sigma_1 \sqrt{2}}\right)^2} dx + \frac{N_2}{\sigma_2 \sqrt{2\pi}} \int_{q-1}^q e^{-\left(\frac{x-p_2}{\sigma_2 \sqrt{2}}\right)^2} dx + F, \quad (1.1)$$

где  $N_1$  и  $N_2$  - интенсивности основного и сопутствующего пиков;  $p_1$  и  $p_2$  - их позиции;  $\sigma_1^2$  и  $\sigma_2^2$  - их дисперсии;  $F = a_0 + a_1 q + a_2 q^2 + \dots + a_5 q^5$  - полином необходимой степени, аппроксимирующий фоновую подложку. Номера каналов  $q = 1, 2, \dots, m$  и зарегистрированные в них числа импульсов  $Y_1, Y_2, \dots, Y_m$  заданы. Искомыми являются параметры основного и сопутствующего пиков, а также коэффициенты фоновой подложки. Поскольку можно считать, что стандартные отклонения чисел  $Y_i$  оцениваются как  $\sqrt{Y_i}$ , определим статистические веса  $w_i$  соответствующих уравнений полученной системы как

$$w_i = 1 / Y_i \quad (1.2)$$

Попытка численного решения сформулированной задачи методом Ньютона приводила к расходимости при любом выборе начальных приближений неизвестных из-за плохой обусловленности линейных шагов. Это связано с близостью пар параметров  $p_1, p_2$  и  $\sigma_1, \sigma_2$ , а также с разбросом измеренных величин  $Y_i$ .

2. Рассмотрим общую нелинейную систему

$$f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0; \quad i = 1, 2, \dots, m, \quad (2.1)$$

где  $x = (x_1, x_2, \dots, x_n) \in R^n$ ,  $f(x) = (f_1(x), f_2(x), \dots, f_m(x)) \in R^m$  и  $f(x) \in C^1$ .

Систему (2.1) можно записать в виде

$$f(x) = 0. \quad (2.2)$$

Обозначим через  $J(x)$  матрицу Якоби вектора  $f(x)$  относительно  $x$ , а через  $x^0$  - вектор начального приближения  $x$ . Авторы предлагают искать решение уравнения (2.2) по следующей модификации метода Ньютона:

$$x^{k+1} = x^k - (J^T(x^k)J(x^k) + \alpha E)^{-1} J^T(x^k) f(x^k), \quad \alpha \in [0, \infty), \quad (2.3)$$

где  $k$  - номер итерации, а  $\alpha = const$  для всех  $k$ .

Решением (2.2) будем считать вектор  $x_{\alpha_p}$ , который получается из (2.3) при значении параметра  $\alpha_p$ , удовлетворяющем критерию:

Р: а/ при заданном векторе  $x^0$  итерационный процесс, определяемый формулой (2.3), сходится (в реальном машинном времени);

$$\text{б/ } \varphi \equiv \|f(x_{\alpha_p})\| = \inf_{\alpha \in \Omega} \|f(x_\alpha)\|, \quad /2/, /3/,$$

где  $\Omega$  - множество всех  $\alpha$ , для которого выполнено условие Р:а/.

(Метод предложен Л. Александровым.)

3. Приводим результаты решения конкретной задачи типа, указанного в т.1, методом, изложенным в т.2. В нашем примере  $m=153$  и  $n=8$  (фон предполагается линейным). Поскольку здесь отдельные уравнения системы обладают различными статистическими весами, формула (2.3) применялась в виде

$$x^{k+1} = x^k - (J^T(x^k) W J(x^k) + \alpha E)^{-1} J^T(x^k) W f(x^k),$$

где

$$W = \text{diag}(w_1, w_2, \dots, w_m).$$

Входные данные задачи представлены в таблице 1; статистические веса вычислялись по (1.2). Вектор начальных приближений неизвестных в том порядке, в котором они указаны в левой части (1.1), брался равным

$$(446_{10}^4, 98.9, 18.7, 25_{10}^4, 61.0, 16.5, 0.0, 0.0).$$

Процедура решения обнаружила сходимость в  $\mathfrak{R} = [2^{-17}, 2^{-5}]$ . Для всех  $\alpha \in [0, 2^{-18}]$  вычислительный процесс был расходящимся, причем при  $\alpha = 2^{-19}$  скорость расходимости примерно в 2 раза меньше, чем при  $\alpha = 0$ . Скорость сходимости в  $\mathfrak{R}$  была примерно одинаковой - после 3-4 итераций удовлетворялись допустимые отклонения. Для  $\alpha_p$  получилось значение  $2^{-15}$ . Вектор квазирешения для  $\alpha_p$  и двух соседних значений  $\alpha$  представлен в таблице 2. Зависимость  $\varphi$  от  $\alpha$  показана на рис.1. На рис.2 нанесены наблюдаемый спектр и выделенный из него сопутствующий пик. В масштабе рисунка невозможно изобразить отличия между экспериментальными точками и расчетной кривой, так как разности между ними незначительны. Следует отметить, что попытка аппроксимировать спектр симметричной кривой, т.е. при  $N_2=0$  (без сопутствующего пика), приводит к увеличению  $\varphi$  более, чем в 5 раз. Приведенный пример показывает, что предложенным в т.2 методом можно успешно решить задачу распознавания скрытого пика, который "тонет" в большом основном пике и не

подлежит выделению классическим методом Ньютона.

Расчеты велись по программе, реализующей предлагаемый алгоритм на машине "Минск-22". Программа оформлена как стандартная и может работать с различными нестандартными блоками, задающими конкретный вид функций решаемой задачи и их производных. Параметр  $\alpha$  является входным и подбирается вычислительно-экспериментально для каждого типа рассматриваемых задач.

Авторы выражают благодарность Хр. Камбурову и С. Аврамову за предоставление экспериментальных данных для примера.

#### Литература:

1. Тихонов А.Н., Доклады АН СССР, т.163, №3.
2. Philips D.L., J.Assoc.Comput.Machinery, 1962, v.9, No 1, p.p. 84-97.
3. Морозов В.А., Вычислительные методы и программирование, вып.8, изд. МГУ, 1967, стр. 77.

Рукопись поступила в издательский отдел  
16 апреля 1970 года.

Таблица I

$q$	$Y_q$	$q$	$Y_q$	$q$	$Y_q$	$q$	$Y_q$
I	4I38	4I	6I39	8I	66785	I2I	54IIO
2	4086	42	6360	82	697II	I22	505I3
3	4II7	43	66I8	83	73I37	I23	47654
4	4I24	44	6593	84	75984	I24	44500
5	4009	45	7278	85	7906I	I25	4I364
6	4073	46	733I	86	8I265	I26	38I25
7	4I08	47	779I	87	84397	I27	35728
8	40I8	48	8328	88	87392	I28	33243
9	4064	49	8850	89	89576	I29	30462
IO	4I36	50	9I09	90	9I8I5	I30	28I20
II	4097	5I	9823	9I	94I47	I3I	25495
I2	4295	52	IO4OI	92	96075	I32	23380
I3	4I26	53	II068	93	97470	I33	2I638
I4	4I85	54	II720	94	9837I	I34	I9369
I5	4I9I	55	I272I	95	IO0334	I35	I77I5
I6	4234	56	I3595	96	IOI793	I36	I6042
I7	435I	57	I4368	97	IO2346	I37	I47I2
I8	4I63	58	I5360	98	IO2745	I38	I3245
I9	437I	59	I6487	99	IO258I	I39	II823
20	4346	60	I7750	IO0	IO3350	I40	IO340
2I	4243	6I	I9064	IOI	IO3393	I4I	9740
22	434I	62	20502	IO2	IOI638	I42	8595
23	4538	63	22I87	IO3	IO24I7	I43	7560
24	4480	64	23656	IO4	IO0675	I44	6845
25	4572	65	25366	IO5	99067	I45	6263
26	4485	66	27I60	IO6	96898	I46	5395
27	4629	67	29083	IO7	94783	I47	4880
28	4748	68	3I594	IO8	933I8	I48	4496
29	4794	69	33350	IO9	9IOII	I49	3958
30	48I6	70	36004	II0	88879	I50	3588
3I	4987	7I	38II2	III	86063	I5I	32I4
32	4980	72	4I308	II2	826I8	I52	2826
33	4948	73	4346I	II3	8022I	I53	2572



Таблица I (продолжение)

$q$	$Yq$	$q$	$Yq$	$q$	$Yq$
34	5076	74	45749	114	76396
35	5322	75	49024	115	73436
36	5283	76	51629	116	70645
37	5592	77	54729	117	67028
38	5607	78	57814	118	63895
39	5888	79	60779	119	60506
40	5941	80	63982	120	57737

Таблица 2

$\alpha$	$2^{-16}$	$2^{-15} \alpha_p$	$2^{-14}$
$N_1$	$4.517_{10^6}$	$4.544_{10^6}$	$4.543_{10^6}$
$P_1$	99.30	99.28	99.29
$\sigma_1$	18.60	18.63	18.62
$N_2$	$4.207_{10^5}$	$3.929_{10^5}$	$3.933_{10^5}$
$P_2$	77.63	76.26	76.23
$\sigma_2$	26.00	25.68	25.59
$a_0$	$4.378_{10^3}$	$4.376_{10^3}$	$4.381_{10^3}$
$a_1$	-17.82	-17.77	-17.76
$\varphi_\alpha$	1.715	1.650	1.686

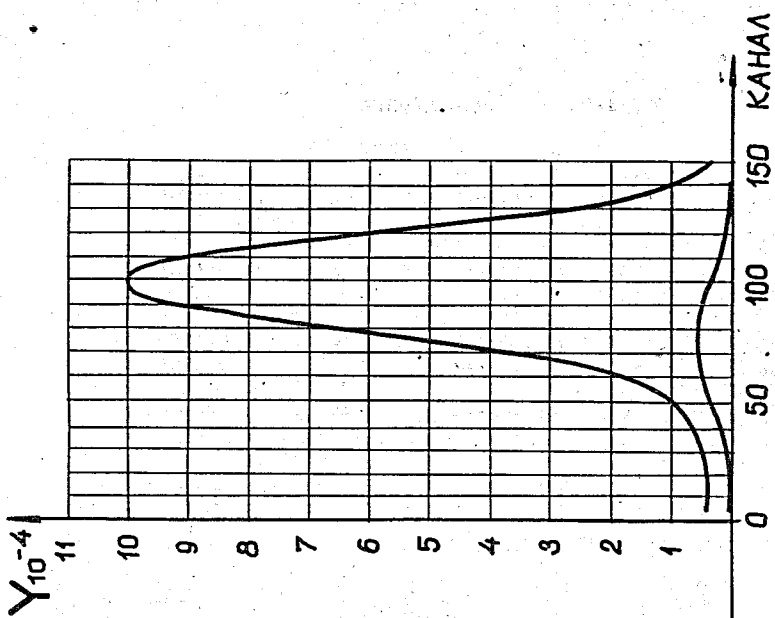


Рис.2.

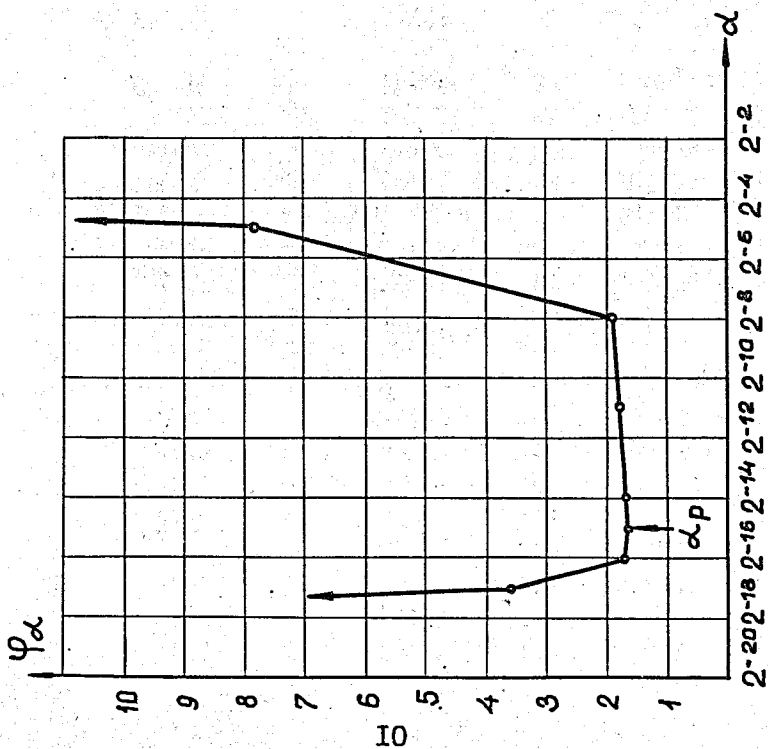


Рис.1.