

8162

3-681

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



18/41-74

10 - 8162

4475/2-74

В.Б.Злоказов, Л.П.Кулькина

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ γ -СПЕКТРОВ
ДЛЯ ЦЕЛЕЙ АКТИВАЦИОННОГО АНАЛИЗА

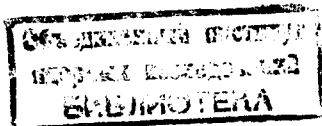
1974

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
ТЕХНИКИ И АВТОМАТИЗАЦИИ

10 - 8162

В.Б.Злоказов, Л.П.Кулькина

ПРОГРАММА ОБРАБОТКИ γ -СПЕКТРОВ
ДЛЯ ЦЕЛЕЙ АКТИВАЦИОННОГО АНАЛИЗА



Класс задач, связанных с обработкой γ -спектров для целей активационного анализа, может быть разбит на следующие категории:

- 1) организация каталога изотопов для оперирования с ним на ЭВМ;
- 2) задачи фильтрации и коррекции γ -спектров;
- 3) поиск пиков в γ -спектрах;
- 4) обработка γ -спектра статистическими методами;
- 5) определение периода полураспада;
- 6) задачи всевозможных калибровок;
- 7) количественный и качественный анализ изотопного состава облучаемого образца.

Ниже излагаются способы решения этих задач, каждый из которых реализуется независимой программой.

1. Каталог изотопов.

Информация о каждом изотопе наносится на перфокарты, с которых она позднее вводится в память ЭВМ и может быть записана на МЛ. Используются 2 способа кодировки информации:

- 1) информация о каждой энергетической линии наносится на перфокарту; множество всех таких перфокарт образует каталог линий, на основе которого с помощью программы может быть сформирован каталог изотопов;
- 2) информация о каждом изотопе (точнее, о каждом изомерном состоянии данного изотопа) наносится на перфокарты и каталог изотопов получается, таким образом, непосредственно.

Информация имеет следующие форматы:

- 1) на карту (с помощью устройств УЦДК "Минск-32" или ICT) наносятся: энергия в Мев, идентификатор изотопа, интенсивность, период полураспада, цифры способов получения данного изотопа или произвольная информация (5 символьных величин и 1 вещественное число).

После каждой величины ставятся запятые, являющиеся разграничителями. Обозначения всех фигурирующих здесь величин заимствованы из справочных таблиц Wakat'a^{1/1}, так что энергии могут иметь признаки: D (дочерний изотоп), A (пик аннигиляции), X (X-луч).

2) на карту пробиваются (на ICT):

количество линий у данного изотопа, идентификатор данного изотопа, распространённость (в%), период полураспада, сечение реакции для данного спектра.

Далее на отдельных картах пробиваются:

- а) список энергетических линий,
- б) список соответствующих квантовых выходов,
- в) список признаков для линий.

Идентификатор изотопа может иметь признак изомерного состояния.

Имеются специальные программы упорядочения карт каталогов, записи каталогов на МЛ, распечатки на АЦПУ, синтаксического контроля правильности шифровки информации об изотопах (проверка энергетического диапазона, соответствия названий изотопов обозначениям таблицы Менделеева, правильности шифров признаков и способов производства изотопов).

II. Коррекция γ -спектров.

I. Поиск выбитых точек.

В качестве оценки дисперсии спектра в каждой точке берется величина: $DS(K) = \frac{1}{2} (S(K-1) + S(K+1)) + 1$, /1/

где $S(K)$ - значение спектра в канале K .

Проверяется, являются ли значения $S(K-1)$ и $S(K+1)$ статистически близкими, т.е. выполняется ли соотношение:

$$|S(K-1) - S(K+1)| < \sigma = 6 \cdot \sqrt{DS(K)}. \quad /2/$$

В случае выполнения соотношения /2/ проверяется условие:

$$S(K) < \frac{1}{2} (S(K-1) + S(K+1)) - \frac{\sigma}{2}. \quad /3/$$

В случае выполнения /3/ $S(K)$ заменяется на полусумму соседних точек. Так корректируются точки, выбитые снизу. Выбитые сверху точки устраняются аналогично, но в этом случае статистически близкими считаются значения $S(K-1)$ и $S(K+1)$, если соотношение /2/ выполняется также и для пар $S(K-2), S(K+2)$ и $S(K-3), S(K+3)$. Таким способом устраняются выбитые точки на фоновой части спектра. При автоматическом поиске пиков используется также фильтр:

$$S(K) = \frac{1}{35} (-3S(K-2) + 12S(K-1) + 17S(K) + 12S(K+1) - 3S(K+2)), \quad /4/$$

но для обработки спектра он не применяется, так как вносит корреляции в спектр.

2) Имеются также программы преобразования спектра к новым координатам, которые, в частности, могут использоваться и для сглаживания спектра. Преимущество такого сглаживания в том, что оно не меняет всей полной суммы отсчётов спектра. Для преобразования используется метод подъячек, сущность которого состоит в том, что, в предположении равномерного распределения отсчётов внутри канала, каждый канал делится на n подъячек, каждая из которых преобразуется независимо от других, и содержимое такой подъячейки переносится при преобразовании в новую ячейку. Такой подход вносит наименьшие корреляции в спектр (по сравнению, например, с фильтрацией). Осциллирующая компонента, которая может добавиться к спектру в новых координатах за счет граничного эффекта, может быть устранена специальной программой пересыпания спектра. Зависимость новых координат от старых может быть задана полиномом 2-й степени или набором дискретных значений новых координат и соответствующих им старых.

III. Поиск пиков в γ -спектре.

Поиск пиков проводится по 2-м алгоритмам:

- 1) поиск гауссианов;
- 2) поиск по таблице изотопов.

1. Предполагается, что по результатам обработки калибровочного спектра известны зависимости:

$$R = R(k) = ak + b \quad /5/$$

$$I = I(k) = ck + d; \quad /6/$$

здесь R - разрешение в каналах, I - эффективность детектора, k - канал. Далее предполагается, что ошибка измерения в каждом канале, разрешение и эффективность детектора таковы, что пики в спектре не подверглись существенным искажениям. Основанием такого предположения служит то обстоятельство, что значение спектра в каждом канале представляет собой сумму случайных величин, распределенных по Пуассону, так что относительная ошибка при больших и средних статистиках невелика:

$$\frac{\sqrt{DS(k)}}{MS(k)} = \frac{1}{\sqrt{MS(k)}}, \quad /7/$$

так как для пуассоновских случайных величин $DS(k) = MS(k)$.

Здесь $DS(k)$ - дисперсия, а $MS(k)$ - математическое ожидание спектра в канале k . И если разрешение превосходит 1 канал, а эффективность не падает слишком быстро, то вероятность, что пик будет отсутствовать из-за случайной флуктуации, будет мала. Третье предположение состоит в том, что фон изменяется плавно и не имеет больших всплесков /2/.

Программа сначала осуществляет поиск и устранение выбитых точек, затем использует фильтр /4/, затем вычисляет разностную 2-ю производную от спектра $s(k) = s(k+1) - 2s(k) + s(k-1)$, /8/ меняет знак на противоположный и отбрасывает отрицательную часть.

В результате исчезает плавный фон, а гауссианы $Ae^{-\frac{2(x-N)^2}{\Gamma^2}}$ переходят в функции:

$$\bar{b}(x) = \begin{cases} \left(\frac{16(x-N)^2}{\Gamma^4} - \frac{4}{\Gamma^2} \right) Ae^{-\frac{2(x-N)^2}{\Gamma^2}}, & \text{если } x \in \left[x - \frac{\Gamma}{2}, x + \frac{\Gamma}{2} \right] \\ Ae^{-\frac{2(x-N)^2}{\Gamma^2}}, & \text{если } x \notin \left[x - \frac{\Gamma}{2}, x + \frac{\Gamma}{2} \right]; \end{cases} /9/$$

здесь A, N, Γ - соответственно, амплитуда, положение и ширина пика, описываемого данным гауссианом; k - канал. Преобразование /8/ одновременно усиливает и шумовую компоненту спектра. Поэтому далее программа ищет изолированные положительные значения и подавляет их. Затем происходит выравнивание спектра по интенсивности с помощью /6/:

$$\bar{S}(k) = S(k) / (ck+d) \quad /10/$$

и преобразование координат с помощью /5/:

$$y = \frac{1}{N(x)} x = \frac{x}{ax+b}. \quad /11/$$

В новых координатах ширина гауссиана (также и функции /9/) равна 1, а относительная дисперсия шума уменьшается за счет эффекта суммирования. Далее программа ищет максимальное значение в преобразованном спектре, после чего начинает поиск пиков. Признаком одиночного пика считается тройка чисел, среднее из которых больше крайних и превосходит некоторый уровень от максимального значения. Признаком дублета является четверка чисел, из которых 2 средние больше крайних и превосходят некоторый уровень от максимального значения.

2. Во втором случае предполагается известным изотопный состав образца и зависимость энергии от канала (по обработке калибровочного спектра): $E = E(k) = ak^2 + bk + c$. /12/ (E - энергия, k - канал).

Программа переводит энергию каждого из заданных изотопов в каналы,

причем дублиеты (отмеченные признаками в каталоге) переводятся в пары пиков. Возможна также и комбинированная методика, состоящая в использовании обоих методов вместе. Пики, обнаруженные по 2-му алгоритму, проверяются на значимость по первому алгоритму.

IV. Обработка χ -спектра статистическими методами.

Задача обработки формально состоит в следующем:

- 1) предполагается, что отдельный пик описывается функцией Гаусса, а фон - плавным полиномом;
- 2) χ -спектр формально рассматривается как дискретный статистический ряд, являющийся выборочной траекторией некоторого некоррелированного гауссовского случайного процесса: $s(k)$, $1 \leq k \leq N$; здесь K - канал, N - максимальная длина спектра.

3) отсюда среднее данного процесса может быть описано функцией:

$$f(k) = \sum_{i=1}^n A_i e^{-\frac{2(k-N_i)^2}{\Gamma^2}} + F(k), \quad /I3/$$

где A_i - амплитуда i -ого пика, N_i - положение i -ого пика, Γ - зависящая от k полуширина пика, $F(k)$ - фон, n - число пиков.

4) искомые параметры (их оценки и оценки их дисперсий) ищут методом наименьших квадратов, т.е. являются решением задачи минимизации функционала $F(f) = \sum_{k=1}^N \frac{[s(k) - f(k, A_i, N_i, \Gamma)]^2}{DS(k)}$ /I4/ при ограничениях на параметры:

$$B_j \geq \sum_{k_j} \delta_{kj} \cdot p_k \geq \delta_j, \quad 1 \leq j \leq m, \quad /I5/$$

где p - параметры A_i , N_i , Γ или параметры фона.

$DS(k)$ - дисперсия спектра в канале K ; m - число ограничений.

Ограничения /I5/ введены для того, чтобы уменьшить некорректность задачи /I4/ (См. Приложение I). Данная задача является типичной задачей нелинейного программирования. Для ее решения используется модифицированный метод линеаризации /3/, учитывающий ограничения и усиленный регуляризирующим приёмом /4/ (См. Приложение II).

Весь спектр разбивается на участки заданной длины. Программа просматривает очередной участок и если он содержит пики, корректирует границы участка таким образом, чтобы они не приходились на соседние пики и не содержали лишних точек, и после этого обрабатывает участок указанным выше методом. В качестве оценок дисперсии $DS(k)$ используется величина $(s(k)+1)$. Начальные значения для N_i задаются экспериментатором или находятся автоматически (см. пункт III). Начальное значение для Γ берется из результатов обработки калибровочного спектра. Начальные значения для амплитуд и параметров фона вычисляются по приближенным алгоритмам из самого спектра (с использованием начальных значений N_i и Γ). Неравенства /I5/ должны содержать всю информацию о данном спектре, известную априори (из теории, из результатов прежних экспериментов, из обработки калибровочных спектров и т.д.). Чем больше такой информации, тем корректнее постановка задачи /I4/ и надежнее результаты обработки. В частном случае ограничения /I5/ могут иметь вид:

$$g_j \leq p_j \leq G_j, \quad 1 \leq j \leq m, \quad /I6/$$

где p_j - то же, что и выше, а g_j, G_j - константы.

Результатами такой обработки будут: достигнутая точность (т.е. максимальное отношение невязок к соответствующим ошибкам), χ^2 /ст.свободы, уточненные значения параметров и оценка ковариационной матрицы параметров (в частности, оценки дисперсий параметров). Программа далее вычисляет площади обработанных пиков и их ошибки:

$$s_i = \frac{\sqrt{\pi}}{2} A_i \Gamma \quad /I7/$$

$$\sqrt{DS_1} = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \cdot \sqrt{A_1^2 D\Gamma + \Gamma^2 DA_1 + 2A_1 \Gamma \delta_{A\Gamma}}, \quad /I8/$$

где $D\Gamma, DA_1$ - дисперсии A_1 и Γ , а $\delta_{A\Gamma}$ - коэффициент корреляции (A_1, Γ). Вычисляется также площадь фона под пиком

$$SPH_1 = \int_{\alpha}^{\beta} F(K) dK \quad \alpha = H_1 - \frac{3}{2}\Gamma, \quad \beta = H_1 + \frac{3}{2}\Gamma. \quad /19/$$

Она необходима для оценки степени влияния загрузок на пики. Затем по результатам калибровки по энергии, эффективности и полуширины могут быть вычислены величины: энергия пика, интенсивность пика, полуширина в кэВ и соответствующие ошибки.

Вычисляются две ошибки энергии: ошибка с учетом ошибок калибровочной кривой и ошибка без учета ошибок калибровочной кривой. Далее программа может напечатать на АЦПУ совмещенные графики исходного спектра, теоретического и фона. В конце обработки спектра печатается сводная таблица результатов. Одновременно программа смотрит, нет ли в таблице аннигиляционных пиков (т.е. таких, энергия которых равна $511 \pm \Delta$ кэВ или разность между которыми равна или $511 \pm \Delta$ кэВ, или $1022 \pm \Delta$ кэВ, а также смотрит, нет ли среди обработанных пиков двойных (полуширина такого пика превышает расчетную калибровочную полуширину более чем на утроенную ошибку) и сообщает об этом на АЦПУ.

У. Определение периода полураспада.

Если дискретный статистический ряд $\{y_k\}$ имеет среднее:

$$f(k) = \sum_{i=1}^n A_i e^{-\frac{k}{T_i}} + c, \quad /20/$$

то определение параметров A_i, T_i и c (при известном n) осуществляется, как и в случае гауссианов, методом наименьших квадратов, т.е. путем минимизации квадратичного функционала при заданных линейных ограничениях. Задача эта также неустойчива (см. Приложение I). Начальные значения и ограничения задаются пользователем, затем осуществляется минимизация с помощью вышеупомянутого алгоритма (см. Приложение II). Результатом работы программы являются уточненные значения параметров A_i, T_i, c , их дисперсии и коэффициенты корреляций и значения статистических индикаторов.

VI. Задачи калибровок.

Под калибровочным спектром понимается спектр с хорошо изученными линиями и их интенсивностями (например, спектр Ra-226). Такой спектр снимается в начале серии измерений по возможности с загрузками такого же порядка, что и рабочие измерения. По результатам обработки такого спектра вычисляются методом наименьших квадратов следующие зависимости:

$$E = E(K) = aK^2 + bK + c \quad /21/$$

$$\epsilon = \left(\sum a_i L_i(E) \right)^2 \quad /22/$$

$$\Gamma = \Gamma(E) = dE^2 + eE + f \quad /23/$$

(E - энергия, K - канал, ϵ - эффективность детектора, $L_i(E)$ - функции Лагерра от E , Γ - полуширина (в кэВ или каналах)). Зависимость /22/ применима не всегда, поэтому в сложных случаях программа может калибровать также с помощью интерполяции по заданным дискретным зависимостям.

VII. Количественный анализ.

В результате обработки получается сводная таблица результатов: каждая линия характеризуется энергией, интенсивностью, разрешением и их ошибками. Программа просматривает введенную библиотеку изотопов. Различаются 2 режима работы программы:

I) Просматривается каждая линия для каждого изотопа и с ней сравниваются все линии из таблицы результатов. Для всех тех линий из таблицы результатов, расстояние от которых до линии из библиотеки не превосходит (в кэВ) утроенной ошибки или наперед заданной величины, вычисляется количество исследуемого изотопа в облученном образце по формуле:

$$N = (2,4 \cdot I \cdot T_{1/2} \cdot A \cdot 10^4) / (\delta \cdot \theta \cdot \alpha \cdot T_{1/2} \cdot V \cdot F \cdot \exp(-0,693 \cdot T_{0x} / T_{1/2})). \quad /24/$$

Здесь I - интенсивность линии, $T_{1/2}$ - период полураспада исследуемого изотопа, A - атомный вес его, δ - сечение реакции, θ - распростра-

ненность изотопа, $T_{из}$ - время измерения (поправленное на мертвое время), v - вес образца, F - нейтронный поток, α - квантовый выход, $T_{ох}$ - время охлаждения. Программа также вычисляет отношение интенсивности, нормированной на вес и время измерения к квантовому выходу, и выводит все эти величины на АЦПУ. Если несколько линий оказываются близкими к данной, то /24/ вычисляется для всех.

2) Так как линии в таблице результатов могут оказаться сильно смещенными по сравнению с истинными (напр. за счет неточной калибровки), то предусмотрен 2-ой режим работы, а именно: энергии и интенсивности обработанного спектра корректируются, наносятся на перфокарты и вводятся в память; далее проводятся вычисления по формуле /24/, но уже не для всех линий, а для истинных.

Качественный анализ изотопного состава может быть проведен на основе анализа таблиц результатов вычислений по формуле /24/ для тех изотопов, наличие которых в образце предполагается.

Указанные выше программы написаны на стандартной версии ФОРТРАН'a-IV и использованы при обработке γ -спектров на ЭВМ "Минск-32"/5/, /6/

В заключение авторы выражают благодарность за полезные советы и обсуждения Е.П.Жидкову, О.Д.Маслову, Л.П.Челнокову.

П Р И Л О Ж Е Н И Е I .

Функционал /14/ есть частный случай более общего функционала /7, 8/

$$F(f) = \int_{-\infty}^{+\infty} g(x) \{ \bar{f}(x) - f(x) \}^2 dx, \quad /25/$$

где $g(x)$ - весовая функция, $\bar{f}(x)$ - измеренная (с ошибкой) функция, которую можно представить как $\bar{f}(x) = f_0(x) + S(x)$ /26/

($f_0(x)$ - "истинная" функция, $S(x)$ - шум; $f(x)$ - искомая функция, моделирующая $f_0(x)$ (гауссиан, напр; для экспонент пределы интегрирования в /25/ будут $0, +\infty$)).

Пусть $\psi(x)$ - функция, представляющая собой форму идеальной линии в спектре (в частности, гауссиан). Пусть далее реальная линия связана с идеальной соотношением:

$$\varphi(x) = A \psi\left(\frac{x-N}{\Gamma}\right). \quad /27/$$

Смысл этой зависимости в том, что реальная линия получается из идеальной преобразованиями сдвига, уширения и подобия.

Аналогично, измеренную функцию представим в виде:

$$f(x) = f_0(x) + S(x) = \sum_{i=1}^n \bar{A}_i \varphi\left(\frac{x-\bar{N}_i}{\bar{\Gamma}_i}\right) + S(x), \quad /28/$$

где $\bar{A}_i, \bar{N}_i, \bar{\Gamma}_i$ - истинные значения параметров A_i, N_i, Γ_i .

Для нахождения минимума /25/ составляется система уравнений:

$$\text{grad } F = 0. \quad /29/$$

Истинный минимум будет равняться

$$\min F = \int_{-\infty}^{+\infty} S^2(x)g(x)dx, \quad /30/$$

т.е., когда параметры будут равны истинным значениям. Однако решение системы /29/ может дать и ложный минимум функционала (например, решение, при котором $F=0$), т.е. в общем случае решение задачи будет содержать ошибку.

Рассмотрим теперь вопрос об ошибке и способе ее оценки, что особенно важно в случае, когда система /29/ неустойчива (а это может быть, например, в случае перекрывающихся пиков). Если система /29/ устойчива, то, грубо говоря, малой ошибке входных данных будет соответствовать малая ошибка решения, и, таким образом, для повышения точности решения достаточно повысить точность входных данных. Иная ситуация в случае неустойчивой задачи. Здесь, наоборот, малой ошибке входных данных будет соответствовать огромная ошибка в решении и,

таким образом, повышение точности входных данных не приведет к адекватному повышению точности решения.

Рассмотрим случай малой ошибки. Разложим решение в ряд Тейлора в окрестности истинного значения параметров и возьмем линейную часть

$$\bar{F}(x) \approx f_0(x) + \sum_{i=1}^N \Delta p_i \frac{\partial f(x)}{\partial p_i}, \quad /31/$$

здесь $\bar{F}(x)$ - решение системы /29/, $f_0(x)$ - истинное решение, Δp_i - возмущения параметров, $\frac{\partial f}{\partial p_i}$ - частные производные истинного решения по параметрам.

Подставим /31/ в /25/ и выпишем систему /29/ в явном виде. Предварительно заметим, что функция $g(x)$ обычно полагается равной

$$g(x) = \frac{1}{s^2(x)}, \quad /32/$$

так что имеем:

$$0 < \xi \leq g(x) \leq M < +\infty. \quad /33/$$

Таким образом, выражение $g(x)dx$ задает элемент меры dy , эквивалентной обычной мере на оси $(-\infty, +\infty)$, так что интеграл /25/ мы можем считать берущимся по мере y . Имеем:

$$\sum_{i=1}^N \Delta p_i \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial p_i} \cdot \frac{\partial f}{\partial p_j} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} s(x) \frac{\partial f}{\partial p_j} dy \quad 1, j=1, 2, \dots, 2n+1. \quad /34/$$

Проанализируем систему /34/.

Ее детерминант есть детерминант Грама и если функции $\frac{\partial f}{\partial p_i}$ линейно независимы, то он всегда отличен от нуля. Производные можно разбить на три группы:

$$\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial A_1} &= \varphi\left(\frac{x-N_1}{\Gamma}\right); & \frac{\partial f}{\partial N_1} &= -\frac{A_1}{\Gamma} \varphi'_x\left(\frac{x-N_1}{\Gamma}\right); \\ \frac{\partial f}{\partial \Gamma} &= -\sum_{i=1}^n \frac{A_i(x-N_i)}{\Gamma^2} \varphi'_x\left(\frac{x-N_i}{\Gamma}\right). \end{aligned} \quad /35/$$

В нашей работе производные от гауссовской функции линейно независимы.

Матрица в /34/ используется также и при минимизации функционала /25/, поэтому равенства /35/ говорят также и о том, что, вообще говоря, не обязательно брать в качестве φ аналитически заданную функцию; можно задавать форму линии и в виде таблицы; при этом производные и промежуточные значения могут вычисляться с помощью интерполяции. Это может существенно ускорить МНК - процедуру при реализации ее на ЭВМ. Кроме того, такая таблично заданная функция может точнее учесть подлинную структуру линии в гамма-спектре.

Таким образом, можно видеть, что если система /34/ неоднородна, то вектор $\bar{\Delta p}$ всегда отличен от нуля, т.е. решение всегда возмущено. Рассмотрим вопрос, когда система /34/ будет однородной.

Здесь возможны 2 случая:

1) $S(x) \equiv 0$ т.е. когда помеха отсутствует вообще.

2) $\int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \frac{\partial f}{\partial p_j} dy = 0$ для любого j , или:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \frac{\partial f}{\partial A_1} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \varphi\left(\frac{x-N_1}{\Gamma}\right) dy = 0 \quad /36/$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \frac{\partial f}{\partial N_1} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \varphi'_x\left(\frac{x-N_1}{\Gamma}\right) dy = 0 \quad /37/$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \frac{\partial f}{\partial \Gamma} dy = \int_{-\infty}^{+\infty} S(x) \sum_{i=1}^n A_i(x-N_i) \varphi'_x\left(\frac{x-N_i}{\Gamma}\right) dy = 0. \quad /38/$$

Интегралы в /36-38/ можно трактовать как свертки функции $S(x)g(x) = S(x) \varphi\left(\frac{x}{\Gamma}\right), \varphi'_x\left(\frac{x}{\Gamma}\right)$ и $\frac{x}{\Gamma} \varphi'_x\left(\frac{x}{\Gamma}\right)$. Отсюда, взяв преобразования Фурье от /36-38/, получим:

$$\hat{F}\bar{S} \cdot \hat{F}\varphi = 0 \quad /39/$$

$$\hat{F}\bar{S} \cdot \hat{F}\varphi'_x = 0 \quad /40/$$

$$\hat{F}\bar{S} \cdot \hat{F}\left(\frac{x}{\Gamma} \varphi'_x\left(\frac{x}{\Gamma}\right)\right) = 0. \quad /41/$$

Это означает, что множества, на которых преобразования Фурье от ука-

занных функций отличны от нуля, не должны пересекаться. Так как физический смысл преобразования Фурье функции φ состоит в том, что оно характеризует вклад каждой частоты в φ , то отсюда следует вывод: система /34/ будет однородной, если шум $\bar{S}(x)$ образован частотами, которые не входят в функции $\varphi, \varphi'_x, x\varphi'_x$.

Часть компонент вектора $\bar{\Delta p}$ может равняться нулю лишь в случае, если $S(x)$ будет линейной комбинацией некоторых $\frac{\partial f}{\partial p_i}$, что маловероятно.

Часто система /34/ интерпретируется в статистическом смысле, т.е. $S(x)$ понимается как выборочная траектория некоторого случайного гауссовского процесса. Тогда возмущения Δp_i будут случайными величинами с нулевым средним и дисперсиями, оценкой которых служат элементы обратной матрицы в /34/.

Наконец, матрица в /34/ характеризует степень устойчивости задачи, а именно: если матрица в /34/ плохо обусловлена, задача неустойчива; если она обусловлена хорошо, задача устойчива. Ограничения /15/ могут улучшить параметризацию задачи и тем самым уменьшить ошибки искомым параметров. Если это связи, налагаемые на параметры, то они улучшают непосредственно обусловленность матрицы в /34/.

Далее отметим следующее важное обстоятельство: если при подгонке мы не угадали число линий в спектре, то формальное решение задачи по МНК будет существовать и в этом случае; система /34/ будет невырожденной, если такие линии не будут иметь совпадающие центры; в этом случае при любом n вектор возмущений будет отличен от нуля; с ростом n обусловленность матрицы будет ухудшаться и ошибка возрастает. Аналогична ситуация и с экспонентами - число компонент в $f(x)$ не может быть (для неоднородной системы /34/) надежно определено минимизацией функционала /25/.

Ошибки, которые здесь рассматривались, носят объективный характер - они вызваны свойствами регистрирующих приборов и наличием помехи. При реализации решения задачи на ЭВМ возникает, кроме того, дополнительная ошибка за счет недостатков вычислительных процедур. Особенно велика эта добавка будет для неустойчивых задач, но если даже ограничиться случаем теоретической ошибки, то можно видеть, что не всегда удастся описанным выше методом идентифицировать линии. В частности, оказывается невозможным различение линий с близкими характеристиками, а в случае сильной неустойчивости и линии с не очень близкими характеристиками. Если при этом спектр обрабатывается для целей аквизионного анализа, то здесь может оказать помощь исследование периодов полураспада. Если есть наборы интенсивностей линий, снятых через различные промежутки времени, то периоды полураспада могут быть вычислены также с помощью метода наименьших квадратов, а именно: найти величины A_i и T_i такие, что

$$F = \int_0^{\infty} \left\{ f(t) - \sum_{i=1}^m A_i \exp\left(-\frac{t}{T_i}\right) + S(t) \right\}^2 g(t) dt = \min. \quad /42/$$

Здесь $f(t)$ - интенсивность линий как функция времени, $S(t)$ - ошибка $f(t)$, $g(t)$ - весовая функция.

Все, что говорилось по поводу минимизации функционала /25/, будет справедливо и здесь. Но задача анализа экспонент существенно более неустойчива в силу худшей обусловленности матрицы в /34/.

П Р И Л О Ж Е Н И Е II.

Вычислительная схема метода состоит в следующем:

I) предполагается, что ограничения /15/ задают достаточно малую область, в которой функцию $f(x, \bar{p})$ можно считать приближенно линейной, непрерывно дифференцируемой по параметрам \bar{p} , и начальное значение \bar{p}_0 принадлежит этой области;

2) строится система уравнений относительно приращений параметров:

$$A\Delta\bar{p} = \bar{g}, \quad /45/$$

где A - матрица Грамма (положительно определенная), $\Delta\bar{p}$ - приращение параметров, \bar{g} - антиградиент функционала /14/;

3) анализируется обусловленность матрицы A , т.е. вычисляются её наибольшее и наименьшее собственные значения λ_{\max} и λ_{\min} и отношение $\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ сравнивается с заранее заданным уровнем обусловленности K (о выборе K см. ниже). Если $\frac{\lambda_{\max}}{\lambda_{\min}}$ больше K , то матрица A в /45/ заменяется на $A + \xi I$, где ξ выбирается из условия:

$$\frac{\lambda_{\max} + \xi}{\lambda_{\min} + \xi} = K \quad \text{т.е.} \quad \xi = \frac{\lambda_{\max} - K\lambda_{\min}}{K - 1} > 0; \quad /46/$$

4) решается система /45/, и найденные приращения \bar{p} проектируются на множество в пространстве числовых значений параметров, определяемое неравенствами /15/;

5) выбирается обрезающий множитель β ($0 < \beta \leq 1$) так, чтобы значение функционала /14/ не возрастало.

6) изменяется значение параметров $\bar{p}_{k+1} = \bar{p}_k + \beta\Delta\bar{p}_k$, где \bar{p}_k - старое, а \bar{p}_{k+1} - новое значение параметров \bar{p} . $\Delta\bar{p}_k$ - проекция приращения на k -ой итерации;

7) процесс повторяется до тех пор, пока максимальное отношение компонент приращения к корням квадратным из соответствующих диагональных элементов обратной матрицы A^{-1} не станет меньше указанной точности, или пока не будет исчерпано заданное множество итераций.

Докажем сходимость метода. Ограничимся случаем глобальной минимизации. Сходимость с учетом ограничений /15/ доказывается внесением изменений в схему доказательства аналогично тому, как это сделано в /9/.

Схематически процесс записывается как

$$\bar{a}_{k+1} = \bar{a}_k - \beta_k A \bar{g}, \quad /48/$$

где A - матрица, \bar{g} - градиент функционала /14/, \bar{a}_k - значение параметров. Процесс /48/ можно рассматривать как обобщенно-градиентный метод с положительно определенной весовой матрицей A .

Пусть \bar{a}^* - точка n -мерного пространства значений параметров, дающая минимум функционала /14/. Очевидно, $\bar{g}(\bar{a}^*) = 0$

ТЕОРЕМА . Если:

- 1) \bar{a}_k принадлежит при любом k достаточно малой окрестности \bar{a}^* , в которой $\bar{f}(x, \bar{a})$ приближенно линейна по \bar{a} ;
- 2) если матрица A положительно определена и не зависит от \bar{a} , то при надлежащем выборе множителей β_k процесс /48/ сходится.

Доказательство. Имеем:

$$\begin{aligned} \|\bar{a}_{k+1} - \bar{a}^*\| &= \|\bar{a}_k - \bar{a}^* - \beta_k A \bar{g}(\bar{a}_k)\| = \|\bar{a}_k - \bar{a}^* - \beta_k A (\bar{g}(\bar{a}_k) - \bar{g}(\bar{a}^*))\| = \\ &= \|\bar{a}_k - \bar{a}^* - \beta_k A C(\bar{y}_k)(\bar{a}_k - \bar{a}^*)\| = \|(I - \beta_k A C(\bar{y}_k))(\bar{a}_k - \bar{a}^*)\|. \end{aligned}$$

Здесь $\bar{y}_k = \bar{a}^* + t(\bar{a}_k - \bar{a}^*)$ $0 \leq t \leq 1$, $C(\bar{y}_k)$ - матрица производных градиента \bar{g} , и мы воспользовались теоремой о среднем; I - единичная матрица. Далее:

$$\begin{aligned} \|(I - \beta_k A C)(\bar{a}_k - \bar{a}^*)\| &\leq \|\bar{a}_k - \bar{a}^*\| \cdot \|I - \beta_k A C\| \\ \|I - \beta_k A C\| &= \max_i |1 - \beta_k M_{ik}| = q_k, \end{aligned}$$

где M_{ik} - собственные числа произведения матриц A и C . Очевидно, q_k будет наименьшим, если

$1 - \beta_k M_{\min} = -(1 - \beta_k M_{\max})$
или если $\beta_k = 2/(M_{\min} + M_{\max})$, где $M_{\min} = \min_i M_{ik}$, $M_{\max} = \max_i M_{ik}$.
В этом случае $q_k = (M_{\min} - M_{\max}) / (M_{\min} + M_{\max}) < 1$ в силу положительной определенности матриц A и C и мы имеем:

$$\|\bar{a}_{k+1} - \bar{a}^*\| \leq q_k \|\bar{a}_k - \bar{a}^*\| \quad q_k < 1.$$

Отсюда методом индукции можно показать, что

$$\|\bar{a}_{k+1} - \bar{a}^*\| \leq \left(\prod_{i=1}^{k+1} q_i \right) \|\bar{a}_0 - \bar{a}^*\| \quad q_i < 1.$$

В случае корректной параметризации матрица C , по крайней мере, в малой окрестности решения имеет число обусловленности ν ($\nu < \infty$), так что существуют M и m такие, что $0 < m \leq m_k$, $M = \max_k (M_k)$, и тогда $\| \bar{a}_{k+1} - \bar{a}^* \| \leq ((M-m)/(M+m))^{k+1} \| \bar{a}_0 - \bar{a}^* \|$, /51/ и процесс /48/ сходится.

ПРИМЕЧАНИЕ. Если $A = C$, то сходимость будет особенно быстрой. Плохая обусловленность и применение регуляризации замедляют сходимость, но, как видим, не отменяют ее совсем.

Рассмотрим, как влияет использование регуляризации на матрицу, обратную C , т.е. на ковариационную матрицу.

Пусть C - исходная матрица, а B - регуляризованная, т.е. $B = C + \epsilon I$. Рассмотрим матрицу $D = (C^{-1} - B^{-1})$ и возьмем ее квадрат D^2 . Собственные числа матрицы D^2 равны:

$$\eta_i = \left(\frac{1}{\lambda_i} - \frac{1}{\lambda_i + \epsilon} \right)^2 = \frac{\epsilon^2}{\lambda_i^2 (\lambda_i + \epsilon)^2}, \quad /52/$$

где λ_i - собственные числа матрицы C , n - размерность C .

Далее можно заметить, что след матрицы D^2 есть не что иное, как сумма квадратов элементов матрицы D :

$$\text{spur } D^2 = \sum_{i,j=1}^n (c_{ij}^{-1} - b_{ij}^{-1})^2 = \sum_{i=1}^n \frac{\epsilon^2}{\lambda_i^2 (\lambda_i + \epsilon)^2}.$$

Отсюда выводится такая оценка:

$$\sqrt{n} \frac{\epsilon}{\lambda_{\max} (\lambda_{\max} + \epsilon)} \leq \max_{i,j} |c_{ij}^{-1} - b_{ij}^{-1}| \leq \frac{\sqrt{n}}{\lambda_{\min} (\lambda_{\min} + \epsilon)}. \quad /53/$$

И, наконец, рассмотрим вопрос о выборе K - уровня допустимой обусловленности матрицы C .

Дана система $A\bar{x} = \bar{b} + \bar{\delta}$, где $\bar{\delta}$ - вектор погрешностей.

Разложим $\bar{\delta}$ по собственным векторам матрицы A :

$$\bar{\delta} = \sum a_i \bar{e}_i, \quad /54/$$

$$\text{Тогда } \bar{x} = A^{-1} \bar{b} + A^{-1} \bar{\delta} = \bar{x}^* + \bar{\xi} = \sum \frac{b_i}{\lambda_i} \bar{e}_i + \sum \frac{a_i}{\lambda_i} \bar{e}_i,$$

где \bar{x}^* - истинное решение, λ_i - собственные значения A , $\bar{\xi}$ - погрешность решения, \bar{e}_i - собственные векторы матрицы A .

Наибольший вклад в погрешность решения будет, очевидно, даваться компонентой $\frac{a_i}{\lambda_{\min}}$. Отсюда наименьшее собственное значение μ регуляризированной матрицы должно быть таким, чтобы норма вектора погрешности в правых частях, деленная на μ , была значительно меньше нормы \bar{x} :

$$\frac{\|\bar{\delta}\|}{\mu \|\bar{x}\|} \ll 1. \quad /55/$$

Определив наибольшее собственное значение для матрицы A λ_{\max} , можно вычислить и K .

ЛИТЕРАТУРА

1. C.M.Lederer, J.M.Hollander, I.Pearlman. Table of Isotopes. John Wiley, New York (1967).
2. M.A.Mariscotti. Nucl.Instr.& Meth., 50,309, (1967).
3. С.Н.Соколов, И.Н.Силин. Препринт ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961.
4. Л.Александров. Препринт ОИЯИ, Р5-7258, Дубна, 1973.
5. Математическое обеспечение ЭВМ "Минск-32". Вып.9, Минск, 1973.
6. Математическое обеспечение ЭВМ "Минск-32". Вып.10, Минск, 1974.
7. А.Н.Колмогоров, С.В.Фомин. Элементы теории функций и функционального анализа. М., Наука, 1972, с.284.
8. И.С.Березин, Н.П.Жидков. Методы вычислений. т.1. М., Наука, 1966.
9. Б.Т.Поляк. ЖВМиМФ, 3, 643 (1963).

Рукопись поступила в издательский отдел
31 июля 1974 года.