

СООБЩЕНИЯ  
ОБЪЕДИНЕННОГО  
ИНСТИТУТА  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ  
ДУБНА



СЗ41, 28

Г-655

25/11-78

11 - 11723

М. Гонусек

5626/2-78

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ

МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

ДЛЯ УТОЧНЕНИЯ ЭНЕРГИЙ УРОВНЕЙ

ЯДЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ

И ДЛЯ РАСЧЕТА СМЕСИ МУЛЬТИПОЛЬНОСТЕЙ

$\gamma$  - ПЕРЕХОДОВ

(Роль корреляций)

**1978**

11 - 11723

М. Гонусек

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ  
МЕТОДА НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ  
ДЛЯ УТОЧНЕНИЯ ЭНЕРГИЙ УРОВНЕЙ  
ЯДЕРНЫХ СОСТОЯНИЙ  
И ДЛЯ РАСЧЕТА СМЕСИ МУЛЬТИПОЛЬНОСТЕЙ  
 $\gamma$  - ПЕРЕХОДОВ

(Роль корреляций)

Учен. зап. Кнгуку  
ядерных исследований  
БИБЛИОТЕКА

Гонусек М.

11 - 11723

Использование метода наименьших квадратов для уточнения энергий уровней ядерных состояний и для расчета смеси мультипольностей  $\gamma$ -переходов (роль корреляций)

Метод наименьших квадратов применен для уточнения энергий уровней ядерных состояний и для расчета смеси мультипольностей  $\gamma$ -переходов. В обоих случаях этот метод записан в матричном обозначении. Показано удобство такой записи. Обращается внимание на то, что при переносе ошибок надо использовать полную матрицу ошибок (включая недиагональные элементы). На примерах показано, что пренебрежение недиагональными элементами матрицы ошибок приводит к неправильным значениям ошибок функций от параметров. Описывается программа для уточнения энергий уровней ядерных состояний.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1978

Gonusek M.

11 - 11723

The Use of the Least Square Method for Calculation of Nuclear Energies and  $\gamma$ -Ray Multipolarity Mixtures (The Part of Correlations)

The least square method used for more precise estimating the nuclear level energies and  $\gamma$ -ray multipolarity mixtures is presented. Matrix notation is employed in both cases. Its advantage is shown. It is emphasized, that during error transfer the total error matrix must be taken into account (containing its off-diagonal elements). It is exhibited on examples that the off-diagonal error matrix element neglecting causes incorrect values of functions of parameters. The computer program for precisising nuclear level energies is described.

The investigation has been performed at the Laboratory of Nuclear Problems, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1978

## 1. ВВЕДЕНИЕ

Для решения задач поиска точных значений энергий уровней ядерных состояний и для расчета смеси мультипольностей  $\gamma$ -переходов, авторы работ <sup>/1,2/</sup> использовали метод наименьших квадратов. При этом они учитывали только диагональные элементы матрицы ошибок и показали, что в таких случаях получаются неправильные значения этих ошибок. Чтобы выйти из положения, авторы <sup>/1,2/</sup> вынуждены были искать другие способы решения таких задач.

В настоящей работе при расчетах ошибок использовалась полная матрица ошибок, что позволило не прибегать к поиску других методов <sup>/1,2/</sup>.

Дается также краткое описание программы для уточнения энергий уровней.

## 2. УТОЧНЕНИЕ ЭНЕРГИЙ УРОВНЕЙ МЕТОДОМ НАИМЕНЬШИХ КВАДРАТОВ

Запишем для метода наименьших квадратов в матричном обозначении уравнения <sup>/3/</sup>

$$Y = A \cdot \Theta + \xi, \quad (1)$$

где  $Y$  - вектор измеренных величин,  $\Theta$  - вектор подгоняемых параметров,  $A$  - структурная матрица,  $\xi$  - вектор случайных ошибок. Предполагается линейная зависимость величин  $Y$  от параметров  $\Theta$ , например, для расчета энергий возбужденных состояний  $\Theta_1, \Theta_2, \Theta_3$  (см. рис.2).

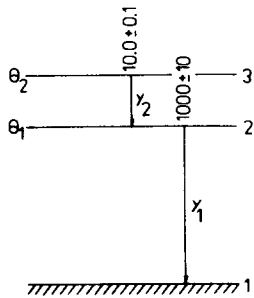


Рис.1.

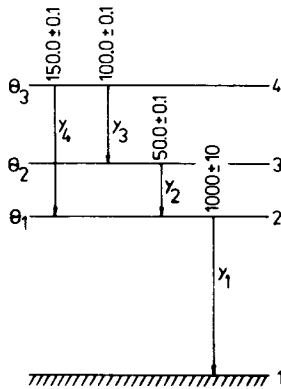


Рис.2.

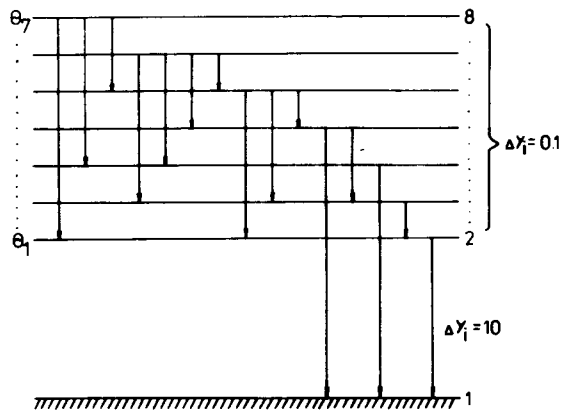


Рис.3.

$$Y = \begin{pmatrix} 1000 \\ 50 \\ 100 \\ 150 \end{pmatrix}, \quad \Theta = \begin{pmatrix} \Theta_1 \\ \Theta_2 \\ \Theta_3 \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ -1 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2)$$

Матрица весов  $W$  имеет элементы  $W_{i,i} = \frac{1}{(\Delta Y_i)^2}$ ,  $W_{i,j} = 0$  (при отсутствии корреляции между  $Y_i$ ). Тогда для МНК получается выражение /3/.

$$\Theta = (A'WA)^{-1} A'WY, \quad (3)$$

где  $A'$  - матрица, транспонированная к  $A$ ).

Матрица  $(A'WA)^{-1}$  (обозначим ее  $D(\Theta)$ ) есть матрица ошибок параметров  $\Theta$  (если известны только относительные веса, она еще умножается на соответствующий коэффициент, см. /3/). Диагональными элементами ошибок являются квадраты ошибок параметров  $\Theta_i$ . Если величины  $\Theta_i$  скоррелированы, то недиагональные элементы матрицы  $D(\Theta)$  не равны 0. При расчете ошибок функций от параметров  $\Theta_i$  это надо учитывать /4/.

Пусть величина  $g$  линейно зависит от параметров  $\Theta_i$ ,  $g = C_1\Theta_1 + C_2\Theta_2 + \dots + C_m\Theta_m$ , или, в матричном обозначении,  $g = C \cdot \Theta$ . Тогда ошибка /4/

$$(\Delta g)^2 = CD(\Theta)C'. \quad (4)$$

Пусть, например, нас интересует ошибка разностей уровней  $\Theta_3$  и  $\Theta_2$  (рис.2). Тогда  $C = (0, -1, 1)$

$$\begin{aligned} (\Delta(\Theta_3 - \Theta_2))^2 &= [D(\Theta)]_{22} + [D(\Theta)]_{33} - 2[D(\Theta)]_{23} \\ &= (\Delta\Theta_2)^2 + (\Delta\Theta_3)^2 - 2[D(\Theta)]_{23}. \end{aligned} \quad (5)$$

В работе /1/ в таком случае имелось в виду, что

$$(\Delta(\Theta_3 - \Theta_2))^2 = (\Delta\Theta_2)^2 + (\Delta\Theta_3)^2. \quad (6)$$

Мы рассчитали все три схемы из работы /1/ (рис.1-3), в которой предполагается разбивать схему на 2 части, с помощью МНК обработать верхнюю часть схемы отдельно и потом "наклеивать" нижнюю часть. Покажем, что этого не надо делать, если для значения ошибки разностей уровней использовать выражение (5).

Обсудим в качестве примера схему уровней, показанную на рис.1. Энергии уровней  $\Theta_1 = 1000 \pm 10$ ,  $\Theta_2 = 1010 \pm 10$ . В работе /1/ утверждается, что при замене  $Y_1, Y_2$  на  $\Theta_1, \Theta_2$  теряется информация о разности энергий  $\Theta_2 - \Theta_1$ .

При нашем расчете схемы (рис.1) получилась следующая матрица ошибок

$$D(\Theta) = \begin{pmatrix} 100.000 & 100.000 \\ 100.000 & 100.010 \end{pmatrix}$$

и ошибка разности энергий  $\Theta_2 - \Theta_1$

$$\Delta(\Theta_2 - \Theta_1) = \sqrt{100.000 + 100.010 - 200.000} = 0.1.$$

Видно, что никакая информация не теряется. При этом, конечно, ошибки энергий уровней  $\Theta_1$  и  $\Theta_2$  являются корнями соответствующих диагональных элементов матрицы и равны 10.

Для расчета энергий возбужденных состояний и их разностей (с учетом полной матрицы ошибок) используем программу LEVEL1 (см. приложение 1), по которой рассчитаны схемы на рис.1-3.

В схеме рис.2 все энергии уровней вычислены с ошибкой 10, а разности уровней  $\Theta_3 - \Theta_2, \Theta_3 - \Theta_1, \Theta_2 - \Theta_1$  - с ошибкой 0,082. Для схемы рис.3 ошибки энергий уровней равны 5,77, а ошибки разностей уровней в верхней полосе - в пределах 0,062-0,1. Видно, что использование формул переноса ошибок (4), (5) приводит к

непротиворечивым результатам. Использование только диагональной части матрицы ошибок (6) привело к завышению ошибок разностей уровней на два порядка.

Значит, если в какие-то расчеты входят комбинации энергий уровней (их разности, ротационные формулы и т.д.), необходимо использовать полную матрицу ошибок. Следует напомнить, что для следующего расчета по МНК, в который бы входили полученные параметры  $\Theta_1$  в качестве величин  $Y_i$ , уже нельзя принимать матрицу весов диагональной /3/.

### 3. РАСЧЕТ СМЕСИ МУЛЬТИПОЛЬНОСТЕЙ

Пусть имеется  $\gamma$ -переход мультипольности  $M1+E2$ . Наша задача - найти параметр смеси  $a$  по измеренным интенсивностям конверсионных электронов  $K \pm \Delta K, L_1 \pm \Delta L_1, \dots, i \pm \Delta i$ . Тогда можно написать систему уравнений

$$\begin{aligned} \epsilon \{ (1-a) a \frac{M1}{K} + a a \frac{E2}{K} \} &= K \pm \Delta K \\ \epsilon \{ (1-a) a \frac{M1}{L_1} + a a \frac{E2}{L_1} \} &= L_1 \pm \Delta L_1 \\ \dots & \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \epsilon \{ (1-a) a \frac{M1}{i} + a a \frac{E2}{i} \} &= i \pm \Delta i. \end{aligned} \quad (7)$$

Можно перейти к системе линейных уравнений относительно параметров  $\epsilon$  и  $x$

$$\begin{aligned} \epsilon \cdot a \frac{M1}{K} + x(a \frac{E2}{K} - a \frac{M1}{K}) &= K \pm \Delta K \\ \dots & \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ \epsilon \cdot a \frac{M1}{i} + x(a \frac{E2}{i} - a \frac{M1}{i}) &= i \pm \Delta i \\ a &= x/\epsilon. \end{aligned} \quad (8)$$

С помощью МНК можно получить /3,4/ значения параметров  $\Theta_1 = \epsilon$  и  $\Theta_2 = x$  и матрицу ошибок  $D(\Theta)$ . Задача расчета параметра  $a$  является нелинейной относительно  $x$  и  $\epsilon$ , причем нельзя использовать выражение (4). Используем следующий алгоритм /4/:

Пусть величина  $g$  есть нелинейная функция от параметров  $\Theta_i$ ,  $g = f(\Theta)$ . Тогда

$$(\Delta g)^2 = FD(\Theta)F'; F_s = \left. \frac{\partial f}{\partial \Theta_s} \right|_{\Theta} \quad (9)$$

Используя (9), можно посчитать <sup>/4/</sup> относительную ошибку величины  $x/\epsilon$  и получить  $\Delta a/a$ .

$$\begin{aligned} \left(\frac{\Delta a}{a}\right)^2 &= \frac{[D(\Theta)]_{11}}{\epsilon^2} + \frac{[D(\Theta)]_{22}}{x^2} - \frac{2[D(\Theta)]_{12}}{x \cdot \epsilon} = \\ &= \left(\frac{\Delta \epsilon}{\epsilon}\right)^2 + \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2 - \frac{2[D(\Theta)]_{12}}{x \cdot \epsilon}. \end{aligned} \quad (10)$$

В работе <sup>/2/</sup> используется выражение

$$\left(\frac{\Delta a}{a}\right)^2 = \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2 + \left(\frac{\Delta \epsilon}{\epsilon}\right)^2 \quad (11)$$

Оно справедливо только в случае независимости  $\epsilon$  и  $x$ , что здесь не выполняется. В приложении 1 работы <sup>/2/</sup> на примере показано, что использование выражения (11) для расчета ошибки ведет к неправильному ее значению. В приложении 2 настоящей работы на том же примере показано, что замена выражения (11) выражением (10) устраняет это противоречие.

Для получения правильной ошибки параметра  $a$ , в работе <sup>/2/</sup> использован при решении задачи (7) метод последовательных приближений. (Уравнения (7) линеаризуются, и на каждом шагу с помощью МНК вычисляются значения параметров  $\epsilon$  и  $a$ ). В приложении 3 настоящей работы показано, что решение МНК уравнений (8) и использование выражения (10) для ошибки  $\Delta a$  даст то же самое значение ошибки, что и метод после-

довательных приближений. Из этого вытекает, что в такой задаче МНК для уравнений (8) применим.

## ПРИЛОЖЕНИЕ 1

### Программа LEVEL1 - уточнение\* энергий уровней

Программа является вариантом программы LEVEL1 (см. <sup>/5/</sup>). Расчет схемы уровней проводится с помощью формул (1)-(5). Предполагается, что уровни пронумерованы следующим образом (индексом уровня): основное состояние - 1, первое возбужденное - 2 и т.д. В качестве входных вводятся данные о переходах, размещенных в схеме - энергия перехода с ошибкой, его полная интенсивность с ошибкой, индексы уровней, между которыми он размещен.

Если переход размещен между возбужденными состояниями  $i$  и  $j$ , то в соответствующей строке матрицы  $A$  на месте  $i-1$  будет 1, на месте  $j-1$  - 1, а на остальных 0. Если переход идет с уровня  $i$  на основное состояние, то на месте  $i-1$  ставится 1, на остальных местах соответствующей строчки - 0.

Считаются и печатаются энергии уровней и величина остаточной суммы квадратов. Далее рассчитываются, упорядочиваются по величине и печатаются все разности энергий уровней с ошибками. При этом особо отмечаются уже размещенные переходы. Считается баланс интенсивностей отдельных уровней. Если задано время полураспада материнского ядра, то рассчитывается также парциальное время бета-распада на отдельные состояния.

Программа написана на языке FORTRAN для машины CDC-6500. Типичное время счета одной схемы, включающей 30-40 возбужденных состояний, составляет десятки секунд.

\* Конечно, при таком методе энергии уровней рассчитываются непосредственно, и в этом смысле часто используемое понятие "уточнение" является неправильным; мы его применяем в силу привычки.

ПРИЛОЖЕНИЕ 2

Будем решать систему уравнений для параметров  $x$  и  $xy$  из работы /2/

$$\begin{aligned} ax + bxy &= A \pm \Delta A, \\ cx + dxy &= B \pm \Delta B. \end{aligned} \tag{12}$$

В работе /2/ приводится решение

$$\begin{aligned} x &= \frac{Ad - Bb}{ad - cb}; \quad xy = \frac{Ac - Ba}{bc - ad}; \quad y = \frac{-Ac + Ba}{Ad - Bb}; \\ \left(\frac{\Delta y}{y}\right)^2 &= \left(\frac{c}{n} - \frac{d}{m}\right)^2 (\Delta A)^2 + \left(\frac{b}{m} - \frac{a}{n}\right)^2 (\Delta B)^2, \end{aligned} \tag{13}$$

где  $n = Ac - Ba$ ;  $m = Ad - Bb$ . Там же показано, что если для ошибки использовать выражение

$$\left(\frac{\Delta y}{y}\right)^2 = \left(\frac{\Delta xy}{xy}\right)^2 + \left(\frac{\Delta x}{x}\right)^2, \tag{14}$$

то она (см. 14) будет завышена на  $2(cd(\Delta A) + ab(\Delta B)^2)/n \cdot m$  по сравнению с (13).

Введем следующие обозначения:  $a_1 = x$ ;  $a_2 = xy$ ;  $x_1 = b/a$ ;  $x_2 = d/c$ ;  $y_1 = A/a$ ;  $y_2 = B/c$ ;  $\sigma_1 = \Delta A/a$ ;  $\sigma_2 = \Delta B/c$ ;  $w_i = 1/\sigma_i^2$ . Тогда можно систему уравнений (12) записать в виде /4/

$$\begin{aligned} y_1 &= a_1 + a_2 x_1 \\ y_2 &= a_1 + a_2 x_2. \end{aligned}$$

Используя выражение (9), получим

$$\left(\frac{\Delta y}{y}\right)^2 = \frac{1}{Q} \left( \frac{\sum x_i^2 w_i}{a_1^2} + \frac{\sum w_i}{a_2^2} + 2 \frac{\sum x_i w_i}{a_1 a_2} \right), \tag{15}$$

где  $Q$  есть определитель матрицы системы /4/. После небольших преобразований получается выражение для  $\left(\frac{\Delta y}{y}\right)^2$ , как и в (13).

Значит, если использовать полную матрицу ошибок (вместо выражения (14) взять (9)), то никакого изменения ошибки не произойдет.

ПРИЛОЖЕНИЕ 3

Наша цель - сравнить ошибку  $\Delta a_0$ , полученную методом последовательных приближений при решении уравнений (7), и ошибку  $\Delta a$ , полученную МНК для задачи (8).

Коротко повторим метод последовательных приближений из работы /2/. Здесь на каждом шагу приходится решать с помощью МНК систему уравнений (полученных линеаризацией уравнений (7)) для  $\delta \epsilon$  и  $\delta a$

$$\delta \epsilon + \delta a \cdot \frac{\epsilon_0 (a_i^{E2} - a_i^{M1})}{(1-a_0) a_i^{M1} + a_0 a_i^{E2}} = \frac{\Delta_i}{(1-a_0) a_i^{M1} + a_0 a_i^{E2}} - \epsilon_0 \tag{16}$$

Матрицу системы (см. стр. 200 /4/) обозначим  $B$

$$B = \begin{pmatrix} \sum_i \frac{\{(1-a_0) a_i^{M1} + a_0 a_i^{E2}\}^2}{\Delta_i^2}; & \sum_i \frac{\epsilon_0 (a_i^{E2} - a_i^{M1}) \{(1-a_0) a_i^{M1} + a_0 a_i^{E2}\}}{\Delta_i^2} \\ \sum_i \frac{\epsilon_0 (a_i^{E2} - a_i^{M1}) \{(1-a_0) a_i^{M1} + a_0 a_i^{E2}\}}{\Delta_i^2}; & \sum_i \frac{(a_i^{E2} - a_i^{M1})^2 \cdot \epsilon_0^2}{\Delta_i^2} \end{pmatrix} \tag{17}$$

и  $(\Delta a_0)^2 = \frac{B_{11}}{\det B}$ . Получим то же значение ошибки\*, что и в /2/.

Будем использовать МНК для определения величин  $\epsilon$  и  $x$  из (8). Матрица системы

$$A = \begin{pmatrix} \sum_i \frac{(a_i^{M1})^2}{\Delta_i^2}; & \sum_i \frac{a_i^{M1} (a_i^{E2} - a_i^{M1})}{\Delta_i^2} \\ \sum_i \frac{a_i^{M1} (a_i^{E2} - a_i^{M1})}{\Delta_i^2}; & \sum_i \frac{(a_i^{E2} - a_i^{M1})^2}{\Delta_i^2} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Матрица ошибок параметров  $\epsilon$  и  $x$

$$D = \frac{1}{\det A} \begin{pmatrix} A_{22} & -A_{21} \\ -A_{21} & A_{11} \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Используя (10), получаем

$$(\Delta a)^2 = \frac{1}{\det A \cdot \epsilon^2} \sum_i \frac{\{a_i^{M1}(1-a) + a a_i^{E2}\}^2}{\Delta_i^2} = \frac{B_{11}}{\det A \cdot \epsilon^2}. \quad (20)$$

Если предположить (будет доказано ниже), что  $\det B = \det A \cdot \epsilon^2$ , то выражение для  $\Delta a_0$ , полученное в (17), даст то же значение, что и в (20). Значит, оба метода дают ту же самую ошибку  $\Delta a$ .

Осталось доказать, что  $\det B = \det A \cdot \epsilon^2$ .

Видно, что  $\det \begin{pmatrix} a & b \cdot \epsilon \\ b \cdot \epsilon & c \cdot \epsilon^2 \end{pmatrix} = \epsilon^2 \cdot \det \begin{pmatrix} a & b \\ b & c \end{pmatrix}$ . Опустим из матрицы  $B$  члены  $\epsilon$  и  $\epsilon^2$ , получим матрицу  $B'$  и

\* В работе /2/ в ошибку включается и ошибка табличных КВК; наша цель - принципиально показать взаимозаменяемость обоих методов при расчете  $\Delta a$ .

докажем, что  $\det B' = \det A$ . Введем

$$r_i = \{(1 - a_0) a_i^{M1} + a_0 a_i^{E2}\}^2 - (a_i^{M1})^2.$$

Можно записать

$$B'_{11} = \sum_i \frac{1}{\Delta_i^2} \{(a_i^{M1})^2 + r_i\} = A_{11} + \sum_i \frac{r_i}{\Delta_i^2},$$

$$B'_{12} = A_{12} + \sum_i \frac{1}{\Delta_i^2} \{a_0 (a_i^{E2} - a_i^{M1})^2\}; \quad B'_{22} = A_{22},$$

$$\det B' = \det A.$$

Весь расчет проводился в предположении, что методом последовательных приближений уже получены "точные" значения  $\epsilon_0$  и  $a_0$  ( $\epsilon_0 = \epsilon$ ,  $a_0 = a$ ).

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Желепов Б.С., Назаров В.В. Препринт РИ-43, Ленинград, 1976.
2. Желепов Б.С., Назаров В.В. Препринт РИ-42, Ленинград, 1976.
3. Дополнение Гамильтона У.К. в кн.: Д.Худсон. "Статистика для физиков", "Мир", 1970.
5. Adam I., Dragoun O., Honusek M. UIF 2979F, Rez, 1973.

Рукопись поступила в издательский отдел  
3 июля 1978 года.