ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ТЕХНИКИ
И АВТОМАТИЗАЦИИ

5 - 6821

АЛЕКСАНДРОВ *Любомир*

РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ РЕШЕНИИ НА ЭВМ НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Специальность 01 008 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Дубна, 1972

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель
доктор физико-математических наук Е.П.Жидков

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук В.Я.Арсенин,
доктор физико-математических наук В.С.Барашенков

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Вычислительный центр МГУ /г.Москва/.

Автореферат разослан " " 1972 года.

Защита диссертации состоится в час.
" " 1972 года на заседании Ученого совета Лаборатории вычислительной техники и автоматизации, г.Дубна, Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета

Е.А. Логинова

АЛЕКСАНДРОВ Любомир

РЕГУЛЯРИЗОВАННЫЕ ИТЕРАЦИОННЫЕ ПРОЦЕССЫ И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ ПРИ РЕШЕНИИ НА ЭВМ НЕКОТОРЫХ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ

Специальность 01 008 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

(Диссертация написана на русском языке)

Физические исследования часто приводят к нелинейным задачам, решение которых на основе классических методов вычислительной математики встречает значительные трудности. К этим задачам относятся и задачи анализа экспоненциальных зависимостей, возникающих, например, при исследовании процессов нейтронного затухания, радиоактивного распада атомных ядер и другие. Обычно такие исследования приводят к выделению экспонент с неизвестными амплитудами и декрементами по конечному числу значений приближенно заданных сумм этих экспонент. В случае, когда присутствуют экспоненты с малыми амплитудами или с близкими декрементами, при решении таких задач проявляется характерная неустойчивость по колебаниям входных данных. Прогресс в решении этих задач стал возможен на основе методов решения некорректно поставленных задач [1-3]. Отметим, что в критике [4] возможностей анализа экспоненциальных зависимостей не делается разграничения алгоритмов по их "регуляризующим" [1] свойствам.

Оказывается возможным создание специальных алгоритмов для решения задач экспоненциального типа путем сочетания метода регуляризации А.Н.Тихонова [2] с некоторыми итерационными процессами для решения нелинейных задач [5-7]. Обобщение этого подхода в случае нелинейных операторных уравнений приводит к рассмотрению "регуляризованных итерационных процессов" (R -процессы) в функциональных пространствах [8-10]. Основной задачей развития теории R -процессов является нахождение законов поведения применяемых аддитивных операторов регуляризации в зависимости от номера итерации.

Для R -процессов ньютоновского типа /на основе методов функционального анализа [11,12] / возможно нахождение общих законов поведения операторов регуляризации, являющихся одновременно согласованными с условиями сходимости и существования решения [8-10].

R-процессы Ньютона - Канторовича можно отнести к классу методов, в которых требование существования обыкновенной обратимости оператора-производной заменяется более слабым /например, "псевдообратимости" /14/ /. Однако применение аддитивных операторов регуляризации придает R-процессам ряд преимуществ при реализации на ЭВМ.

Некоторые из R-процессов уже находят применение при работе на ЭВМ для решения определенных классов нелинейных задач /5–7, 13, 15–19/.

При анализе экспоненциальных зависимостей на ЭВМ /5–7, 15–18/ подтверждаются следующие свойства R-процессов:

1/ ослабление зависимости от начального приближения /в сравнении с аналогами без регуляризации/;

2/ "устойчивость", которую можно изменять /за счет замедления процесса/;

3/ применимость в случае непростого нуля;

4/ возможность решения задачи при увеличении числа неизвестных.

В работе /13/ на ряде численных примеров проведено сравнение наиболее распространенных методов решения нелинейных задач при помощи ЭВМ, и среди них - методам, которые надо понимать как R-процессы ньютоновского типа, отведено первое место.

Таким образом, R-процессы можно рассматривать как универсальные методы решения нелинейных задач с помощью ЭВМ, приобретающие важное значение и в других областях прикладной математики /в первую очередь - в теории управления/.

Общая теория R-процессов находится в начальной стадии своего развития. Непосредственной задачей является разработка непрерывных аналогов /20/ R-процессов ньютоновского типа, а для практической работы на ЭВМ - сочетание R-процессов Гаусса - Ньютона с методами, применяющими итерационные шаги $<$ 1 /см., например, /21/ /.

В диссертации изложены результаты по обоснованию R-процессов ньютоновского типа, а также некоторые способы применения конкретных R-процессов к решению задач экспоненциального типа из области ядерной физики.

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения.

Для иллюстрации свойств рассматриваемых методов приведен ряд численных примеров. Большинство из них представляют решения задач, получаемых при исследовании реальных физических явлений. Все примеры, за исключением примера

2.4/12/, нельзя решить с помощью аналогичных методов без регуляризации.

<u>В первой главе</u> рассматривается решение операторного уравнения

$$fx = 0, \qquad /f/$$

где f - нелинейный оператор, действующий из выпуклой области X полного линейного L-суперметрического пространства /12/ S, в S. В предположении существования в X производной Фреше $f'(x)$ решение уравнения (f) проводится на основе итерационного процесса /8/

$$R_{\omega_n}: x_0; \quad x_{n+1} = x_n - (f'(x_n) + \omega_n)^{-1} f_{x_n},$$

$$x_n \in X \ (n = 0, 1, \dots).$$

Здесь ω_n - линейные операторы из X в $f(X)$, которые подбираются так, что операторы $f'(x_n) + \omega_n$ имеют ограниченные обратные операторы /итерационный процесс R_{ω_n} называется " R-процессом Ньютона - Канторовича" /8/ /.

Кроме определения R-процесса Ньютона - Канторовича, в §I.I приводятся два утверждения о возможности построения процессов R_{ω_n} /8/.

В §I.2 рассматривается вопрос о сходимости R_{ω_n} и существовании решения уравнения /f/.

Пусть введены обозначения $\rho(x, y)$, $(x, y \in S)$ - расстояние в S; $\rho_n = \| f x_n \|$; $b_n = \| (f'(x_n) + \omega_n)^{-1} \|$.

Формулируются условия:

а/ в X существует ограниченная вторая производная Фреше $f''(x)$ $(\frac{1}{2} \| f''(x) \| \le M < \infty)$;

б/ для начальных x_0 и ω_0 и некоторой постоянной $N \in [0, \infty)$ выполнены

$$0 \le \phi_0 \le 1 - \beta < 1, \quad \beta < 1, \qquad /б\ 1/$$

$$\beta + \frac{\phi_0}{1-\phi_0} \cdot \frac{\gamma^2}{(\gamma - b_0) b_0} \le 1, \qquad /б\ 2/$$

$$\| \omega_0 \| \le N b_0 \rho_0, \qquad /б\ 3/$$

/здесь $\gamma > b_0$ - фиксированное число, $\nu = (M + N)\gamma^2$,

$\beta = \nu \rho_0$, $\phi_0 = (2M + N)\gamma b_0 \rho_0$/;

в/ для операторов регуляризации имеют место ограничения:

$$\|\omega_n\| \leqslant N b_n \rho_n (n = 1,2,\dots),$$ /в 1/

$$\|\omega_n - \omega_{n+1}\| \leqslant \|\omega_n\| (n = 0,1,\dots);$$ /в 2/

г/ $W = \{x \in S / \rho(x_1, x) \le \frac{\gamma\beta\rho_0}{1-\beta^2}\} \subseteq X$.

В силе следующее основное утверждение:

Теорема 1.3 [8]

Пусть уравнение (f) решается на основе процесса R_{ω_n} и пусть выполнены условия а/-г/. Тогда R_{ω_n} сходится и $\lim\limits_{n\to\infty} x_n = x_\omega \in W$. Предельная точка x_ω является решением уравнения (f). Справедлива оценка

$$\rho(x_n, x_\omega) \leqslant \frac{\gamma\rho_0 \beta^{2^n - 1}}{1-\beta^{2^n}} (n = 1,2,\dots).$$

Доказательство этой теоремы [8] дается по схеме [12.] / k =2/, с необходимыми изменениями.

В §I.3 приводится следующее следствие теоремы 1.3 /для случая, когда S - банахово пространство/.

Теорема 1.4 [8]

Пусть при решении (f) на основе R_{ω_n} выполнены условия а/-г/, где вместо соотношения /б 3/ и /в 1/ в силе

$$\|\omega_0\|^2 + r_0 \|\omega_0\| \le N\rho_0,$$ /б 3′/

$$\|\omega_n\| \le \frac{1}{2}(\sqrt{r_n^2 + 4N\rho_n} - r_n)(n = 1,2,\dots),$$
$$(r_n = \|f'(x_n)\|, \quad n = 0,1,\dots).$$ /в 1′/

Тогда справедливы утверждения теоремы 1.3.

При доказательстве этой теоремы [8] используется неравенство $\|f'(x_n) + \omega_n\| \, \|(f'(x_n) + \omega_n)^{-1}\| \ge 1$.

Соотношение /в 1′/ имеет некоторое преимущество перед соотношением /в 1/, состоящее в том, что является разрешенным относительно $\|\omega_n\|$.

На основе теоремы 1.4 доказывается существование ненулевых ω_0 и N, для которых неравенства /б 1/ и /б 2/ всегда выполнимы /теорема 1.5 [8] /.

<u>Вторая глава</u> диссертации посвящена R-процессам Гаусса - Ньютона.

В §2.1 на основе понятия "ϵ-квазиобратный оператор" [9], для решения уравнения / f / приводится общее определение регуляризации итерационных процессов, содержащих линейные шаги [9].

В §2.2 /в случае S -гильбертова пространства/ рассматривается R-процесс Гаусса - Ньютона [9]

$$R_{GN}: x_0; \; x_{n+1} = x_n - (f'^*(x_n) f'(x_n) + \omega_n)^{-1} f'^*(x_n) f x_n,$$

$$x_n \in X \qquad (n = 0, 1, \dots),$$

где $\omega_n (: X \to f(X))$ - положительно определенные линейные операторы для всех конечных n.

При решении уравнения

$$f'^*(x) f x = 0$$ /f'^*f/

на основе процесса R_{GN} имеет место утверждение о сходимости, подобное теореме 1.3 /теорема 2.1 [9] /. Для операторов регуляризации ω_n в этой теореме имеют место неравенства /2.2.Б3/, /2.2.В1/, /2.2.В2/, аналогичные неравенствам /б 3/, /в 1/ и /в 2/ из приведенной выше теоремы 1.3 . При использовании неравенств /2.2.В1/ и /2.2.В2/ предлагается простой для реализации на ЭВМ процесс типа R_{GN}, имеющий экспоненциально убывающие операторы регуляризации [9]:

$$\omega_n = \epsilon_n E, \qquad \text{где} \quad \epsilon_n = a e^{-bn},$$

$a \in (0, \infty), b \in [0, \infty)$ - подбираемые постоянные.

В §2.3 на основе идеи об обратной связи между операторами регуляризации ω_n и невязками уравнения (f'^*f) вводятся "авторегуляризованные итерационные процессы“ Ньютона - Канторовича и Гаусса - Ньютона /10/ / AR -процессы/.

Подробно рассматривается AR -процесс R_{ϵ_n} /10/, получаемый из R_{GN} при $\omega_n = \epsilon_n E$ с числами ϵ_n, задаваемыми формулой

$$\epsilon = a_2 \left(\sqrt{\frac{\|f'(x_n)\|^4}{4} + \frac{a_1}{\rho_0}\left(\|f'(x_0)\|^2_{\epsilon_0} + \epsilon_0^2 \right) \|f'^*(x_n) f x_n\|} - \frac{1}{2}\|f'(x_n)\|^2 \right)$$

$$(n = 1, 2, \ldots)$$

/$a_1 \in [0, 1]$ и $a_2 \in (0, 1]$ - заданные постоянные для процесса/.

При решении уравнения $(f'^* f)$ на основе процесса R_{ϵ_n} имеет место утверждение о сходимости и существовании решения, сходного с теоремой 1.4 /теорема 2.3 /10/ /.

В §2.4 приводятся характерные численные примеры, иллюстрирующие некоторые свойства AR -процессов: расширение сферы сходимости в сравнении с обыкновенным методом Гаусса - Ньютона /см. решение системы /2.4.10/ /10/ /; нахождение всех решений задачи путем варьирования только одного параметра ϵ_0 /см. решение системы /2.4.12/ /10/ /.

В §2.5 полную задачу о собственных значениях для матрицы /в “плохом“ случае/ предлагается решать на основе AR -процессов /10/. Приводится численный пример.

<u>В третьей главе</u> диссертации приводятся два специфических R -процесса для анализа экспоненциальных зависимостей.

В §3.1 рассматривается решение системы

$$x_0 + \sum_{i=1}^{n} x_i \exp(-x_{n+i} j) = y_j$$

$$(j = 1, 2, \ldots, m;\ 2n + 1 \le m) \qquad /3.1.1/$$

относительно неизвестных $x_0, x_1, \ldots, x_n, x_{n+1}, \ldots x_{2n}$. Суммы $y_1, y_2, \ldots, y_m$ задаются приближенно.

При $2n + 1 = m$ рассматривается вопрос о корректности задачи /3.1.1/. Если в решении системы /3.1.1/ существуют экспоненты с нулевыми амплитудами или с равными декрементами, то матрица Якоби вырождается, и решение системы /3.1.1/ ста-

новится некорректной задачей /5,7/ . Далее предлагается устойчивый итеративный алгоритм для решения системы /3.1.1/, основанный на специфической линеаризации и методе регуляризации А.Н.Тихонова /2/. Этот алгоритм реализован в стандартной программе SHE /5/ /§3.3 /. На основе программы SHE можно определять и число экспонент в задачах типа /3.1.1/ /5,7/. Пусть n^* - известная оценка сверху числа экспонент. При решении /3.1.1/ с $n \ge n^*$ на основе SHE находятся экспоненты с равными /численно/ декрементами или с нулевыми /численно/ амплитудами. Очевидно, число экспонент с ненулевыми амплитудами и различными декрементами есть искомое число.

В §3.2 приводится решение трех задач типа /3.1.1/ на основе SHE. В двух из них число экспонент находится описанным выше способом. Последняя из задач §3.2 представляет пример из области нейтронной физики - изучение термализации нейтронов в кристаллических модераторах /5/.

В §3.4 при изучении фотопика изолированной γ -линии применяется удобная для реализации на ЭВМ модификация R -процесса Гаусса - Ньютона /“ a -приближенное решение“ /6/ /. Рассматривается случай, когда в измеренном фотопике /гауссиан с неизвестными амплитудами, позицией и шириной/ предполагается наличие искажения в форме гауссиана с малой амплитудой, а также с величинами позиции и ширины, близкими к величинам позиции и ширины основного гауссиана. В этой постановке полностью проанализированы фотопики изотопов $^{137}C_s$ и $^{46}S_c$ /6/ и иллюстрируется возможность применения R -процессов для контроля физического эксперимента /6/.

<u>В четвертой главе</u> /§§4.1 и 4.2/ рассматривается общая постановка "анализа скрытых закономерностей" /17/ /экспонент, гауссианов, периодичностей и др./. Получаемые нелинейные задачи разделяются на “регулярные“ и “нерегулярные“ /17/. Решение нерегулярных задач оказывается возможным на основе R -процессов типа R_{GN} /17/.

В §4.3 приведено несколько численных примеров решения задач о выделении скрытых закономерностей. В первом примере /задача о выделении скрытых периодичностей /22, стр. 129/ / сравнивается метод типа R_{GN} с методом квазилинеаризации /10,17/. На основе R -процесса типа R_{GN} приводится подробное решение специально выработанной тестовой задачи /пример 4б/ /17/ /. Этот пример представляет искусственно усложненную задачу типа выделения скрытых гауссианов. В приведенном решении задача была дополнительно усложнена предположением о неизвестном числе гауссианов. Этот пример дает представление о возможности применения R -процессов Гаусса - Ньютона для исследования данного класса спектроскопических задач.

В §4.4 обсуждается вопрос об автоматизации обработки больших количеств спектроскопической информации на основе R -процессов. В конце приводится полностью проанализированный сложный спектр изотопа ^{175}Hf на основе предложенного автором метода. /Этот пример был любезно предоставлен автору кандидатом физико-математических наук Н. Неновым/.

Заключение

В диссертации получены следующие основные результаты.

1. Предложен класс методов решения нелинейных операторных уравнений. / R -процессы/ [8-10]. Рассмотрены конкретные представители этого класса методов:

- R -процессы Ньютона - Канторовича [8] /глава 1/;
- R -процессы Гаусса - Ньютона [9,10] / §2.2/;
- авторегуляризованный процесс R_{ϵ_n} [10] /§§2.3 и 2.4/;
- R -процесс Гаусса- Ньютона с экспоненциально убывающими операторами регуляризации [9,16] /§§2.3 и 2.4/;
- R -процесс для построения " α -приближенного решения" [6] /§3.3/;
- R -процесс для анализа экспоненциальных зависимостей [5,7] /§§ 3.1, 3.2 и 3.3/.

2. Для R -процессов Ньютона - Канторовича и Гаусса - Ньютона получены:

- общие утверждения об их сходимости и существовании решения /теоремы 1.3 [8], 1.4 [8], 2.2 [9] и 2.3 [10] /;
- законы поведения операторов регуляризации, согласованные с условиями сходимости и существования /соотношения /1.2.B1/ [8], /1.3.B1/ [8], /2.2.B1/ [9] и /2.3.2 [10] /.

3. Показано /на основе широкой вычислительной практики на ЭВМ/, что введенные R -процессы могут с успехом применяться при анализе экспериментально снятых экспоненциальных зависимостей [5,17,6]. Предложен способ определения числа неизвестных экспонент [5,7,17] /§§3.1, 4.1 и 4.2 /.

4. Проведены численные исследования по выяснению реальных возможностей применения R -процессов для анализа гамма-спектров [17,6] /пример 4.3.4б/ и §3.4/.

Предложенные в диссертации методы нашли применение в решении следующих задач ядерной физики:

- определение параметров нейтронного затухания [15];
- определение энергий переходов и интенсивностей гамма-лучей при изучении радиоактивиного распада атомных ядер [16-18];
- автоматизация обработки спектрометрической информации [16,23];
- обратная задача спаривания в роторной модели для нечетного деформированного ядра [19].

Основное содержание диссертации опубликовано в работах [5-10, 17] и докладывалось на конференции по реакторной физике /Варшава 1968 г./; совещании по математическим методам решения задач ядерной физики /Дубна, 1969 г./ и на семинарах в отделе вычислительной математики ЛВТА ОИЯИ.

Литература

1. *А.Н.Тихонов. ДАН СССР, 152, 1, 1963, 49-52.*
2. *А.Н.Тихонов. ДАН СССР, 163, 3, 1965, 591-594.*
3. *А.Н.Тихонов, В.К.Иванов, М.М.Лаврентьев. Дифференциальные уравнения с частными производными. Труды симпозиума, посвященного 60-летию академика С.Л.Соболева, М., 1970 г.*
4. *К.Ланцош. Практические методы прикладного анализа. М., 1961, стр. 280.*
5. *Л.Александров. Сообщения ОИЯИ, Р5-5215, Дубна, 1970.*
6. *Ч.Стоянов, Л,Александров, В.Гаджоков. АЭ, т.29, вып. 3, 1970, стр. 203;* J. of Radional. Chem., vol. 10, 1972, 75-81.
7. *Л.Александров. ЖВМ и МФ, т.10, 1970, 5, 1285-1287.*
8. *Л.Александров. ЖВМ и МФ, т.11, №1, 1971, 36-43.*
9. *Л.Александров. Сообщения ОИЯИ, Р5-5137, Дубна, 1970.*
10. *Л.Александров. Сообщения ОИЯИ, Р5-5515, Дубна, 1970.*
11. *Л.В.Канторович. Труды математического института АН СССР, 28, 1949.*
12. *Л.Коллатц. Функциональный анализ и вычислительная математика. М., 1969.*
13. Y.Bard. SJAM J. Numer. Anal., vol. 7, No. 1, 1970.
14. A.Ben-Israel. J. Math. Anal. and Applic., 15, 1966.
15. *В.Христов. Диссертация ФИ с АНЕБ при БАН, София, 1969.*
16. *В.Гаджоков. ПТЭ, 5, 1970.*
17. *Л.Александров, В.Гаджоков.* J. of Radional. Chem., vol. 9, (1971), 279-292.

Препринт ОИЯИ, Р5-5294, Дубна, 1970.

18. *В.Гаджоков, И.Звольски, М.Молнар, Н.Ненов. Известия АН СССР, 95, №1, 1971.*
19. *Л.Александров, Д.Караджов, И.Н.Михайлов, Е.Наджаков, Г.Ходжаев. Сообщения ОИЯИ, Р4-6280, Дубна, 1972.*
20. *Е.П.Жидков, И.В.Пузынин. ЖВМ и МФ, 9, №2, 1969.*
21. *С.Н.Соколов, И.И.Силин. Препринт ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961.*
22. *Р.Беллман, Р.Калаба. Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи. М., 1968.*
23. *С.Аврамов и др. Сообщения ОИЯИ, Р10-6467, Дубна, 1972.*

Рукопись поступила в издательский отдел
30 ноября 1972 года.