

6816

ОБЪЕДИНЕННЫЙ  
ИНСТИТУТ  
ЯДЕРНЫХ  
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна.



P11 - 6816

ЭКЗ. ЧИТ. ЗАЛА

Г.Элер

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ

СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕТОДИКА ПОДГОНКИ

1972

P11 - 6816

Г.Элер

## СТАТИСТИЧЕСКАЯ МЕТОДИКА ПОДГОНКИ

Направлено в "Известия АН СССР"  
(серия технической кибернетики)

ОИЯИ  
БИБЛИОТЕКА

## 1. Введение

Из года в год растет объем получаемой физической информации, и во все большей мере в народное хозяйство внедряются физические методы с целью автоматизации и регулирования измерительных и производственных процессов. Неизбежно появившееся в ходе такого развития несоответствие между имеющейся в распоряжении физиков-экспериментаторов вычислительной техникой и постоянно растущим спросом на нее может быть преодолено только путем наращивания объема вычислительной техники и одновременного применения эффективных математических методов обработки информации. Ввиду того, что расширение объема вычислительной базы связано со значительными материальными затратами, особенно большое значение имеет улучшение математического обеспечения */soft-ware/* вычислительных машин. Ниже излагается статистический метод, который применим к разного рода задачам и может привести к существенному повышению эффективности обработки информации.

Метод наименьших квадратов для задач с  $n$  параметрами/задачами в  $n$ -мерном пространстве/основан на решении системы  $n$  уравнений с  $n$  неизвестными. С ростом числа параметров быстро возрастает необходимое время обработки данных. Метод градиентов, используемый для нахождения наилучшего приближения, использует частные производные по  $n$  параметрам, что требует значительного времени для реализации итерационного процесса. Кроме того, в случае задач с несколькими решениями процесс подгонки, осуществляемый этим методом, прекращается при достижении минимума, лежащего ближе всего к начальным параметрам, и поэтому не может быть гарантирован наилучший результат. В последние годы был разработан алгоритм Фурье, причем наиболее широко он был развит в применении к обработке спектров. Благодаря этому, достигнут кроме повышения точности, значительный выигрыш во времени

счета. Все же экстраполяция времени, приводимого в работе /1/ для БЭСМ-6, для машины БЭСМ-4 дает значения порядка одного часа.

Вследствие сказанного эти методы не пригодны /или годятся только при наличии мощных ЭВМ/ для быстрой обработки информации с целью применения результатов сразу вслед за экспериментом. На практике непосредственная связь с быстродействующими ЭВМ редко реализуема. В большинстве случаев имеется достаточное количество ЭВМ среднего быстродействия. Для достижения высокой степени автоматизации именно скорость обработки информации приобретает решающее значение. Это требование может быть выполнено только в том случае, если метод подгонки основан на очень простом математическом принципе. Чем проще этот принцип, тем короче время обработки.

Простой метод подгонки, основанный на применении теории вероятности, описывается в предлагаемой работе. На двух приведенных примерах объясняется принцип его работы и обсуждается вносимая им статистическая ошибка.

## 2. Метод подгонки

Рассмотрим случай  $n$  свободных параметров  $p_i$ . Из конкретной физической задачи всегда могут быть найдены имеющие физический смысл нижние ( $ap_i$ ) и верхние ( $bp_i$ ) границы для области изменения параметров. Искомое решение лежит в границах этой  $n$ -мерной области  $A_1$ . Здесь же находится точка, соответствующая набору  $n$  случайных параметров  $p_i$ . Эту точку можно охарактеризовать величиной нормированной суммы квадратов отклонений между экспериментальными и теоретическими значениями:

$$\chi_1^2 = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (teo_j - eks_j)^2 / deks_j,$$

где  $N$  - общее число экспериментальных значений,  $eks$  - экспериментальные значения,  $teo$  - теоретические значения,  $deks$  - ошибка экспериментальных значений.

Чисто статистическим способом задается новый набор параметров и определяется для него  $\chi_2^2$ . В том случае, если это значение не лучше предыдущего, с помощью образования новых наборов параметров продолжается случайный перебор точек в области  $A_1$  до

тех пор, пока не выполнится условие  $\chi^2_2 < \chi^2_1$ . В этом случае найдена точка, лежащая ближе к минимуму  $\chi^2$ , так что область поиска  $A_1$  можно сузить и вести дальнейший перебор точек в меньшей области  $A_2$ . Для продолжающегося процесса подготовки повышается тем самым плотность перебираемых точек, а также вероятность дальнейшего улучшения результатов. Уменьшение области вариаций происходит в зависимости от величины отношения  $\chi^2_2 / \chi^2_1$ . Чем больше изменение в  $\chi^2$ , тем сильнее можно сузить  $n$ -мерную область вариаций. При этом выбор функциональной зависимости от  $\chi^2_2 / \chi^2_1$  диктуется спецификой физической проблемы. В каждом конкретном случае уменьшение областей вариации всех параметров должно происходить так, чтобы процесс подгонки сходился к минимуму  $\chi^2$  после возможно меньшего числа итераций. Сходимость метода может быть улучшена, если при уменьшении области поиска будет дополнительно учтена величина изменения параметров. Так как значительное уменьшение  $\chi^2$  достигается относительно большим изменением только некоторых из  $n$  параметров, то области вариаций этих параметров могут быть более, чем другие, сужены в зависимости от величины  $|p_i(2) - p_i(1)| / (bp_i - ap_i)$ . Дополнительно можно использовать направление изменения параметра. С большой вероятностью искомое значение параметра лежит в направлении этого изменения. Следовательно, сходимость может быть улучшена, если новая область вариаций для каждого параметра не только уменьшается в зависимости от изменения  $\chi^2$  и  $p_i$ , но также если эти новые области сдвигаются в направлении только что произошедшего изменения параметра. Следовательно, метод подгонки должен содержать некоторые величины, которые управляют этим, зависящим от изменения параметров, процессом. Для каждой конкретной физической задачи надо найти оптимальные значения этих величин. Так как описанный метод подгонки является статистическим, все вышесказанное справедливо для большей части всех параметров. Однако в отдельных случаях может оказаться, что оба эффекта /сужение и сдвиг областей вариаций/, ведущие в общем случае к сходимости, изменяют  $\chi^2$  в противоположных направлениях.  $\chi^2$ , используемый в качестве критерия улучшения, зависит от всех параметров, поэтому может случиться, что для части параметров, несмотря на уменьшение  $\chi^2$ , изменение произошло в неправильном направлении. Поэтому величины, регулирующие процесс сходимости, должны давать возможность любому значению параметра выходить далеко за границы, установленные предыдущим шагом. Тогда в

в дальнейшем ходе подгонки становится возможной коррекция предыдущих неблагоприятных итераций.

Рис. 1 поясняет принцип процесса подгонки на примере зависимости  $\chi^2$  от одного параметра ( $n = 1$ ). Представленная кривая дает качественную зависимость  $\chi^2$  от параметра  $p$ . Начальные границы интервала изменений параметра  $ap_1$  и  $bp_1$  могут быть выбраны из конкретной физической задачи. Внутри этого интервала случайно задаются величины  $p$  и вычисляются соответствующие им значения  $\chi^2$ . Так как  $\chi^2_2 < \chi^2_1$ , то в точке  $p$  /2/ будет построен новый интервал изменений  $p$ , меньший, чем  $(bp_1 - ap_1)$ , и вследствие большого изменения  $p$  сдвинутый в сторону роста значения  $p$ . При этом произошел скачок через минимум. Следующее значение  $p$  /3/ не будет принято во внимание вследствие того, что  $\chi^2_3 > \chi^2_2$ . Только для значения  $p$  /4/ будет достигнуто дальнейшее улучшение, вновь будут сужены границы интервала изменений  $p$ , причем этот интервал будет сдвинут в направлении минимума. Параметры самого процесса подгонки должны быть выбраны так, чтобы минимум достигался после возможно меньшего числа шагов  $w$  при выполнении дополнительного условия  $\lim_{k \rightarrow w} (bp_k - ap_k) = \epsilon$ . Под  $\epsilon$  подразумевается желаемая точность в определении физических параметров. В случае слишком сильного сужения интервала изменений  $p$  /или, иначе, области вариаций  $p$  / это условие будет выполнено преждевременно и процесс подгонки окончится на склоне кривой, представленной на рис. 1, не имея возможности достигнуть минимума. В случае слишком слабого сужения области вариаций минимум, конечно, достигим, но увеличивается время обработки результатов, так как растет число итераций, не ведущих к их улучшению. Пример на рис. 1 объясняет только принцип метода. В реальном случае с  $n$  свободными параметрами  $\chi^2$  зависит от всех этих параметров. С каждым шагом итерации  $\chi^2(p_i)$  изменяются для всех  $n$  параметров  $p_i$  по типу рис. 1.

Так как значения параметров во время процесса подгонки берутся совершенно случайно, эффективность его можно охарактеризовать вероятностью дальнейшего улучшения уже достигнутого результата. Предварительное представление об этом может дать следующая грубая оценка. Параметр с номером  $i$  ведет к улучшению в процессе подгонки, если он лежит на отрезке  $\beta_i (bp_i - ap_i)$  всей области вариаций. Вероятность этого равна, следовательно,  $\beta_i$ . Так как произведение  $n$  вероятностей  $\beta_i$  приближенно может быть заменено величиной среднего геометрического  $\bar{\beta}$  всех  $\beta_i$ , возведенной

в степень  $n$ , то получается, что вероятность улучшения  $\chi^2$  при одновременном изменении всех параметров равна:  $w = \beta^n$ . В связи с тем, что сужение области вариаций происходит несимметрично, можно считать, что  $0,5 < \beta < 1$ . Следующие два факта ведут к дальнейшему увеличению  $\beta$ . Во-первых, не все параметры изменяются в правильном направлении и, во-вторых, параметры  $p_i$  входят в функцию  $\chi^2(p_1, \dots, p_n)$  с различным весом. По грубой оценке,  $\beta$  должно лежать в интервале 0,7 - 0,9.

На рис. 2 представлена зависимость  $w$  от  $n$ . С ростом числа параметров  $n$  скорость изменения вероятности  $dw/dn$  уменьшается. Для 6 свободных параметров к улучшению ведет каждый второй шаг итерации, для 10 - каждый третий шаг, для 20 - каждый восьмой шаг. В описанных ниже примерах применения метода качественное поведение этой зависимости такое же, как на рис. 2.

### 3. Первый пример

Метод подгонки, описанный в разделе 2, был применен для анализа угловых распределений дифференциальной поляризации нуклонов, испускаемых в реакциях, проходящих с образованием составного ядра. С помощью ядерной реакции  $^{12}\text{C}({}^3\text{He}, p_0){}^{14}\text{N}$  в работе /2/ было исследовано промежуточное ядро  $^{15}\text{O}$ . По теории, развитой в работе Симона и Вельтона /3/, угловое распределение дифференциальной поляризации может быть представлено суммой нормированных сферических функций 1-го рода. Задача заключается в том, чтобы из угловых распределений поляризации протонов, измеренных при различных энергиях частиц  ${}^3\text{He}$ , вызывающих реакцию, определить параметры /полную ширину, парциальные ширины, энергию уровня, спин и четность/ уровней составного ядра  $^{15}\text{O}$ , участвующих в реакции. Для этого необходимо учитывать все комбинации нескольких /до пяти/ уровней с различными квантовыми характеристиками.

Для подгонки по методу градиентов при 12 свободных параметрах необходимо примерно 15 минут счета на БЭСМ-4, и поэтому данная проблема не может быть решена таким способом. Эта трудность привела к развитию и применению изложенного метода подгонки. Для определения границ  $a\rho$  и  $b\rho$  можно использовать только правило суммирования парциальных ширин. В связи с этим для свободных параметров получились очень широкие области вариаций.

Применение статистического метода подгонки дало значительную экономию во времени счета, в данном случае оно сократилось с 15 минут до 30 секунд, что означает увеличение скорости счета в 30 раз.

На рис. 3 приведен пример зависимости  $\chi^2$  от двух параметров. Очень большие области вариаций параметров требуют повторного применения процесса подгонки несколько раз.

В данной области вариаций, которая определена границами  $ap_1, bp_1$  и  $ap_2, bp_2$ , задаются случайные значения параметров  $P_1$  и  $P_2$ . В случае, если соответствующее этим параметрам значение  $\chi^2$  окажется меньше наперед заданного значения  $\chi^2_{lim}$ , начинается подгонка. Если взять для рассматриваемого примера в качестве  $\chi^2_{lim}$  значение 500, то подгонка начнется уже в точке 1 с начальным значением  $\chi^2 = 250$ . Результатом этого первого процесса подгонки является уменьшение  $\chi^2$  до 80. Если теперь уменьшить  $\chi^2_{lim}$  до значения 100, которое несколько больше, чем наилучшее достигнутое до сих пор  $\chi^2$ , то вновь процесс подгонки может начаться только внутри двух областей, ограниченных линиями  $\chi^2 = 100$  /на рисунке эти линии выделены/. После ряда неудачных итераций процесс подгонки, начавшийся в точке 6, достигнет значения  $\chi^2 = 15$ . Новым уменьшением  $\chi^2_{lim}$  до значения 20 еще больше сужается область, в которой возможна дальнейшая подгонка /на рисунке - пунктирная линия/, так что, когда после ряда дальнейших напрасных итераций процесс подгонки начнется в точке 14, то он может окончиться вблизи наименьшего минимума. Чем сильнее сужение областей после каждого процесса подгонки, тем больше число напрасных итераций в общем пространстве. Но в связи с тем, что такие итерации не требуют большого времени счета, легко может быть достигнута такая плотность точек в пространстве, которая гарантирует нахождение наилучшего минимума.

#### 4. Второй пример

Развитие наших знаний о структуре атомного ядра происходит в данное время в области ядерной спектроскопии большей частью в направлении ухода от линии стабильности в области короткоживущих изотопов. Число изотопов, которое становится доступным исследованию благодаря новым усовершенствованным экспериментальным методам, постоянно увеличивается, и в общем растет сложность схемы уровней этих ядер. Быстрая обработка этой спектромет-



рической информации является основой для анализа результатов измерений непосредственно вслед за экспериментом, что имеет большое значение в особенности при исследовании короткоживущих изотопов и при применении методов ядерной спектроскопии в прикладных задачах. Поэтому процесс подгонки, описанный в разделе 2, был применен также к изучению этой проблемы.

Для объяснения принципа достаточно, если в рамках этой работы будет рассмотрен простой случай. Предполагается, что: а/ форма пиков может быть хорошо описана симметричной функцией Гаусса, б/ кривая фона с хорошим приближением описывается полиномом 3-й степени, в/ имеются только незначительные наложения соседних пиков, г/ экспериментальные значения имеют небольшие статистические ошибки.

Задача состоит в определении положений пиков и их амплитуд. Ясно выраженная структура таких спектров позволяет использовать математические соотношения для задания относительно малых областей вариаций для параметров положения, амплитуды и фона. В отличие от первого примера здесь удовлетворительные результаты могут быть получены с помощью однократной подгонки. Ввиду того, что процесс подгонки является статистическим, общая ошибка зависит как от статистической ошибки экспериментальных значений, так и от статистической ошибки метода. Ошибка, вносимая методом, может быть исследована лучше всего, если экспериментальную ошибку можно считать пренебрежимо малой. Поэтому эти исследования были проведены на конструированных спектрах, для которых значение  $\chi^2$ , при достаточно большом числе итераций, стремится к предельному значению, равному нулю.

На рис. 4 представлены результаты для параметра энергии  $E$ , на рис. 5 - для параметра интенсивности  $A$ . Для трех случаев, а именно, для одновременного процесса подгонки с 6, 12 и 20 свободными параметрами, нанесено число  $N$  результатов процесса подгонки с определенным отклонением  $\Delta E/B$  и  $\Delta A/A$  соответственно. Процесс подгонки начинался каждый раз в другой, случайно выбранной точке  $n$ -мерного пространства свободных параметров, что тем самым ведет к статистическому разбросу конечных результатов. Поверхностям, заштрихованным различным образом, соответствуют различные значения амплитуд. Пики в спектре различались по амплитуде больше чем на три порядка.

Из рис. 4 и 5 видно, что средние статистические ошибки  $\Delta E/B$  и  $\Delta A/A$  растут довольно медленно с ростом числа параметров. Они

увеличиваются главным образом за счет уменьшения числа очень хороших результатов, в то время как для максимальной ошибки наблюдается лишь слабая тенденция роста. Для 20 свободных параметров  $\Delta E/B = 1,2 \cdot 10^{-3}$ , что дает вклад в общую ошибку  $\Delta E = 3,6$  эв, если принять, к примеру, разрешающую способность детектора  $B = 3$  кэв. В самом неблагоприятном случае максимальная ошибка  $\Delta E/B = 5 \cdot 10^{-3}$  вносит дополнительную неопределенность в определение положения пика  $\Delta E = 15$  эв. Более значительны отклонения от действительного значения параметра для пиков с малым значением амплитуд. Так как этим пикам присуща большая экспериментальная ошибка, то получается, что погрешность в определении положения пиков мала по сравнению с экспериментальной ошибкой. Ввиду этого она может не учитываться. Это верно для амплитуд вплоть до  $10^5$ . При больших значениях амплитуд, напротив, можно пренебречь экспериментальной ошибкой по сравнению с ошибкой, вносимой методом подгонки.

Так как статистический метод подгонки должен обеспечить быструю обработку спектров, большой интерес представляет зависимость точности параметров от продолжительности времени счета. В этом направлении проводились систематические исследования, результат которых качественно представлен на рис. 6.

Кривая /1/ на рис. 6 получается, если проводится только грубое определение начальных значений параметров, и, как следствие этого, предполагаются относительно большие области вариаций параметров. Кривая /2/ получается при хорошем учете свойств гауссовой функции, здесь соответственно уменьшены области вариаций параметров.

Счет возможен в трех различных режимах, отмеченных точками А, В, С. Точка А соответствует приближенному значению, найденному без подгонки, оно может служить грубой оценкой и пригодно для контроля хода эксперимента. Необходимое для этого время обработки  $t_A$  является вообще самым малым временем получения информации. Первые шаги начавшегося процесса подгонки не приводят к существенному улучшению, так как вначале испытывается чувствительность  $\chi^2$  к направлению при изменении параметров. Но уже следующие шаги очень скоро ведут к значительно улучшенным значениям /точка В/, точность которых уже смогла бы удовлетворить большинству требований. Более высокой точности можно достигнуть только за счет существенного возрастания времени счета /точка С/. Но тогда статистический метод теряет

свое преимущество перед другими методами, которое как раз и состоит в очень быстром нахождении приближенных значений.

На конкретном примере можно дать представление об эффективности метода подгонки, описанного в этой работе: для обработки на БЭСМ-4 спектра с 20 пиками в 300 каналах в режиме  $\sim A$  требуется время  $t_A = 6$  сек, в режиме  $B$  - время  $t_B = 30$  сек.

Результат применения метода подгонки к экспериментально измеренному спектру с хорошо изолированными пиками показан на рис. 7. Экспериментально полученные значения представлены точками, результатом подгонки является проведенная на рис. 7 кривая. Этот спектр подгонялся 100 раз с различными исходными случайными параметрами. Для каждой подгонки на БЭСМ-4 требовалось 15 сек. Полученные таким образом средние значения положения пиков /в каналах/ и амплитуд /в импульсах/, а также их средние ошибки показаны на рисунке.

## 5. Заключение

Метод подгонки, описанный в этой работе, служит основой системы программ для быстрой обработки экспериментальной информации /4/, поскольку он обеспечивает повышение эффективности счета более чем на порядок. Получаемая с помощью этого метода точность в большинстве случаев вполне достаточна для требований, предъявляемых данной физической задачей. Если все же в отдельных случаях ставятся более высокие требования, то полученные результаты могут быть использованы как исходные параметры для других, более точных, методов. За счет этого можно уменьшить число итераций, что также дает значительный выигрыш во времени.

Принцип статистического метода подгонки был продемонстрирован на двух различных примерах. В этой работе объясняются лишь основы метода, поэтому в разделе 4 показано его применение к простому спектру с неперекрывающимися пиками. Подробное описание системы программ для быстрой обработки спектров, в том числе и для сложных случаев с сильно перекрывающимися пиками, будет дано в отдельной работе.

Предлагаемый метод является достаточно универсальным, и, наверняка, будут найдены области его дальнейшего применения.

## Литература

1. Л. М. Сороко. Сообщение ОИЯИ, 1-5030, Дубна, 1970.
2. Г. Элер, М. И. Кривоустов, Г. И. Вибике, Ф. Асфур, И. В. Сизов, Г. Ширмер. Сообщения ОИЯИ, P15-5156, Дубна, 1970.
3. A. Simon, T. A. Welton. *Phys. Rev.*, 90, 1036 (1953).
4. Г. Элер, П. М. Гопыч, Г. В. Винель, В. Хабенихт, О. Н. Козаченко. Тезисы докл. XXII совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Часть 1, стр. 273, Киев, 25.01 - 28.01.1972. Ленинград, 1972.

Рукопись поступила в издательский отдел  
28 ноября 1972 года.

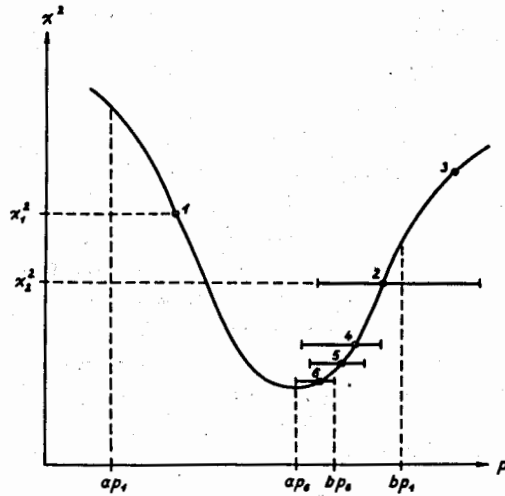


Рис. 1. Качественное представление процесса подгонки для одномерного случая.

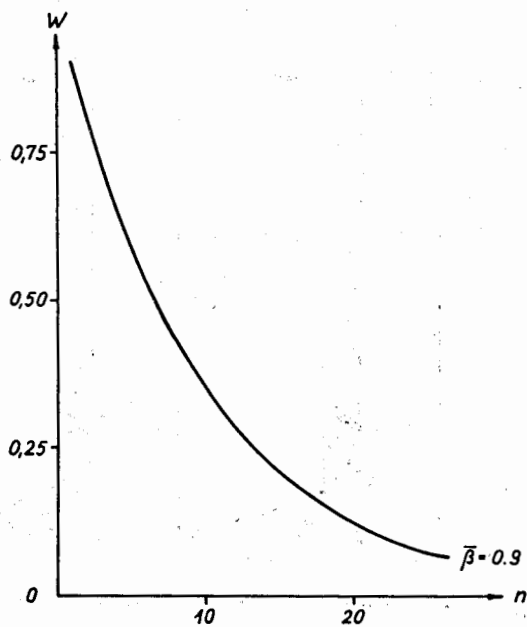


Рис. 2. Качественная зависимость вероятности улучшения точности  $w$  от числа свободных параметров  $n$ .

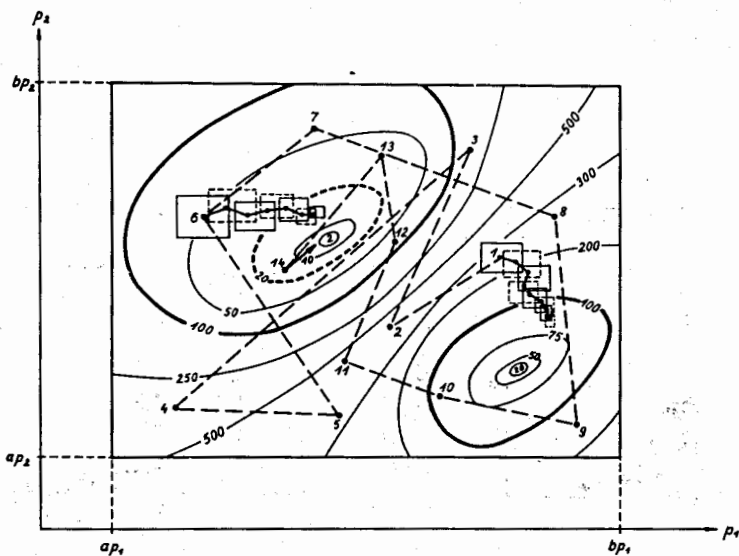


Рис. 3. Качественное представление процесса подгонки для двух-мерного случая в задаче с большой областью вариаций параметров.

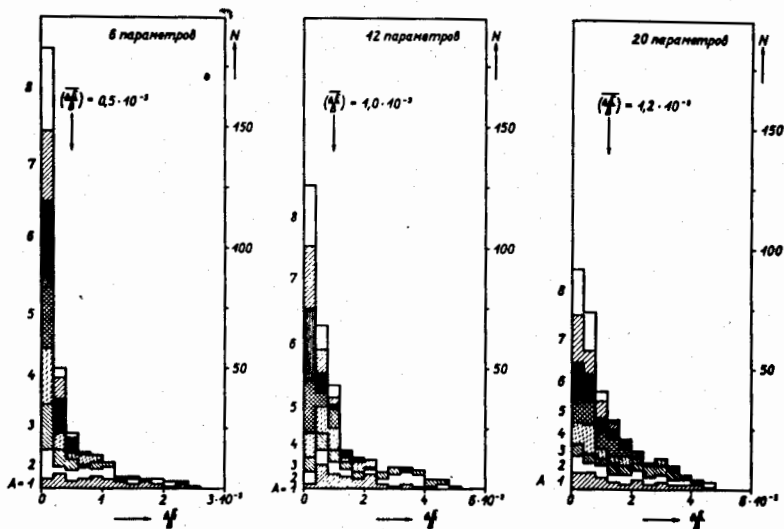


Рис. 4. Распределение ошибки  $\Delta E/V$  для 6, 12 и 20 свободных параметров при различных значениях амплитуд: 1 - 500; 2 - 1500; 3 - 5000; 4 - 15000; 5 - 50000; 6 - 150000; 7 - 500000; 8 - 1500000.

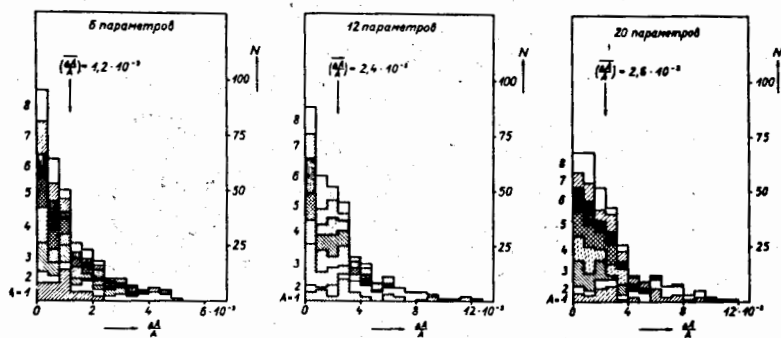


Рис. 5. Распределение ошибки  $\Delta A/A$  для 6, 12 и 20 свободных параметров при таких же отношениях амплитуд, как на рис. 4.

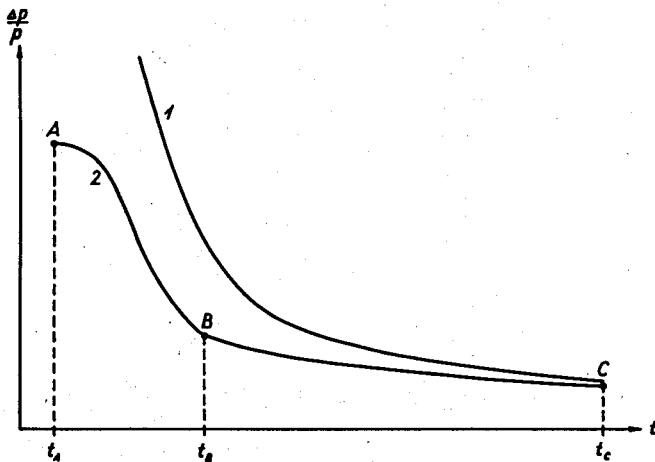


Рис. 6. Качественная зависимость точности  $\Delta p/p$  определения параметра  $p$  от времени обработки  $t$ . Кривая 1 - без учета математических свойств гауссовой функции, кривая 2 - с учетом этих свойств.

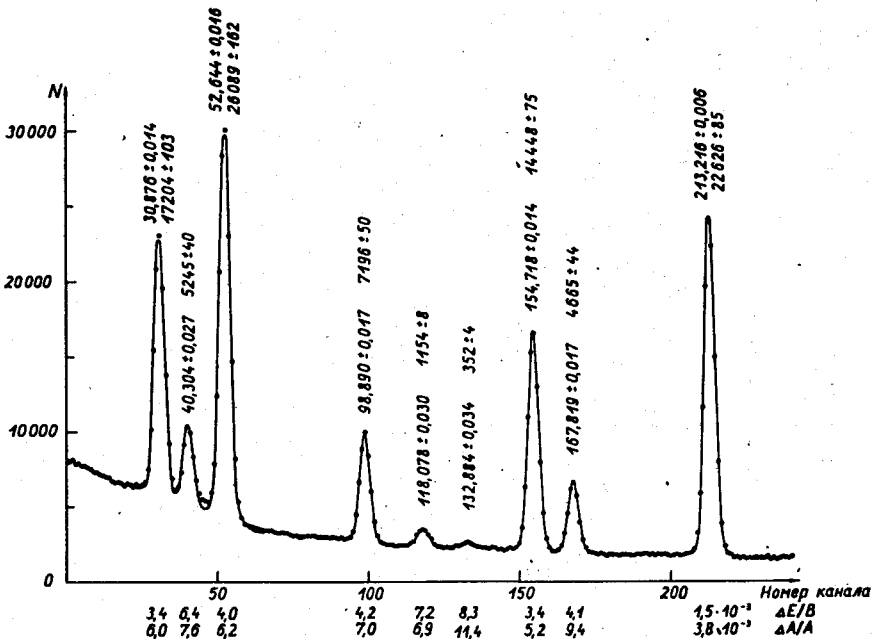


Рис. 7. Пример применения метода подгонки к экспериментальному спектру, состоящему из хорошо изолированных пиков. Точки - экспериментальные значения; кривая - результат подгонки.