

СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

4852/82

P11-82-459

А.К.Чураков, Н.Г.Волков, Г.А.Кононенко,
В.М.Цупко-Ситников

ИНДЕКСНЫЙ АЛГОРИТМ ФОРМИРОВАНИЯ
АППРОКСИМИРУЮЩЕЙ ФУНКЦИИ В МНК

1982

СССР N/64-02/262
DM 23 03 88

1. ВВЕДЕНИЕ

В практике обработки результатов измерений часто встречается задача определения параметров функции, описывающей полученную в эксперименте зависимость. Как правило, такие задачи решаются с помощью метода наименьших квадратов /МНК/ [1,2].

Существует значительное количество различных алгоритмов, реализующих МНК и предназначенных для работы с определенной функцией, а также более универсальных, в которых задача формирования функции вынесена за пределы общей программы подгонки. В настоящей работе предлагается алгоритм формирования аппроксимирующей функции в задаче МНК, позволяющий с помощью одной программы проводить подгонку экспериментальной зависимости различными функциями, подбирая таким образом оптимальное решение.

2. ПРИМЕНЕНИЕ ИНДЕКСАЦИИ ДЛЯ ФОРМИРОВАНИЯ АППРОКСИМИРУЮЩЕЙ ФУНКЦИИ

Обычная процедура МНК включает в себя формирование минимизируемого функционала $S[f(\vec{p}, x), y(x)]$:

$$S[f(\vec{p}, x), y(x)] = \sum_i (y(x_i) - f(\vec{p}, x_i))^2 \frac{1}{\sigma_i^2}, \quad /1/$$

где $y(x_i)$ - набор экспериментальных значений; $f(\vec{p}, x_i)$ - аппроксимирующая функция; σ_i^2 - дисперсия $y(x_i)$, и вычисление точки экстремума в соответствии с условием

$$\begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial p_1} &= 0, \\ \vdots \\ \frac{\partial S}{\partial p_M} &= 0. \end{aligned} \quad /2/$$

Вычисления как производных, так и значений $S[f(\vec{p}, x), y(x)]$ удобно вести, найдя предварительно вектор отклонения

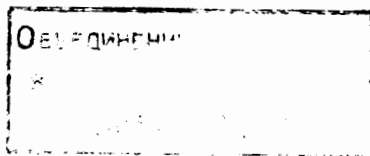
$$d_i = (y(x_i) - f(\vec{p}, x_i)) \frac{1}{\sigma_i^2}. \quad /3/$$

Тогда

$$S[f(\vec{p}, x), y(x)] = \sum_i d_i^2 \sigma_i^2 \quad /4/$$

и

$$\frac{\partial S}{\partial p_j} = 2 \sum_i d_i \frac{\partial f(\vec{p}, x_i)}{\partial p_j}. \quad /5/$$



Возьмем вместо фиксированной функции, описывающей данную экспериментальную зависимость, набор различных функций, которые могут использоваться в данной области /например, для анализа линейчатых спектров это могут быть гауссианы с различными искажениями, используются и другие функции для описания пиков и фона/:

$$\mathcal{F}(\vec{p}, x) = f_1(p_1, \dots, p_{M_1}, x) + f_2(p_{M_1+1}, \dots, p_{M_2}, x) + \dots + f_N(p_{M_{N-1}+1}, \dots, p_{M_N}, x). \quad /6/$$

Поскольку функции $f_n(\vec{p}_n, x)$ независимы друг от друга, для каждой из них

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\vec{p}, x)}{\partial p_j} = \frac{\partial f_n(\vec{p}_n, x)}{\partial p_j} \quad (1 \leq j \leq M_N). \quad /7/$$

а значения d_i будут набираться последовательно при формировании $f(\vec{p}, x)$ из нужного набора $f_n(\vec{p}_n, x)$.

Введем вектор выбора аппроксимирующей функции \vec{V} со следующими компонентами:

$$V_n \begin{cases} 0, & \text{если } f_n(\vec{p}_n, x) \text{ не будет использоваться;} \\ K, & \text{если } f_n(\vec{p}_n, x) \text{ будет использоваться } K \text{ раз.} \end{cases} \quad /8/$$

Например, если при аппроксимации мы хотим использовать две функции $f_3(\vec{p}, x)$ и одну $f_6(\vec{p}, x)$, то \vec{V} примет значение

$$\vec{V} = \{0, 0, 2, 0, 0, 1, 0, \dots, 0\}. \quad /9/$$

Процедура формирования d_i и $\frac{\partial \mathcal{F}(\vec{p}, x)}{\partial p_j}$ будет состоять из двух этапов.

1. Последовательно просматриваются компоненты V_n , $n=1, 2, \dots, N$, и в тех случаях, когда $V_n \neq 0$, формируются значения вектора параметров \vec{p} и d_i . В нашем примере

$$\vec{p} = \{^1p_{M_2+1}, \dots, ^1p_{M_3}; ^2p_{M_2+1}, \dots, ^2p_{M_3}; ^1p_{M_5+1}, \dots, ^1p_{M_6}\}, \quad /10/$$

$$\begin{aligned} ^1d_i &= \frac{y(x_i)}{\sigma_i^2} - \frac{f_3(^1\vec{p}_m, x_i)}{\sigma_i^2} && \text{- первый проход,} \\ ^2d_i &= ^1d_i - \frac{f_3(^2\vec{p}_m, x_i)}{\sigma_i^2} && \text{- второй проход,} \\ d_i &= ^2d_i - \frac{f_6(^1\vec{p}_m, x_i)}{\sigma_i^2} && \text{- третий проход.} \end{aligned} \quad /11/$$

Здесь $^1p_{M_2+1}, \dots, ^1p_{M_3}$ - начальные значения параметров первой функции $f_3(\vec{p}_m, x_i)$; $^2p_{M_2+1}, \dots, ^2p_{M_3}$ - начальные значения параметров второй функции $f_3(\vec{p}_m, x_i)$ /например, 1I_0 , 1C_0 , $^1\sigma_0^2$, 2C_0 , $^2\sigma_0^2$ - параметры двух гауссианов для аппроксимации дублета/.

Соответственно, $^1p_{M_5+1}, \dots, ^1p_{M_6}$ - начальные значения параметров $f_6(\vec{p}_m, x_i)$ /например, коэффициенты полинома, аппроксимирующего фон под дублетом/.

2. Далее, вновь просматривая V_n , вычисляем значения

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial S}{\partial p_j} &= 2 \sum_i d_i \frac{\partial f_3(^1\vec{p}, x_i)}{\partial p_j}, \quad j=1, 2, \dots, J_3; \quad J_3 = M_3 - M_2, \\ \frac{\partial S}{\partial p_j} &= 2 \sum_i d_i \frac{\partial f_3(^2\vec{p}, x_i)}{\partial p_j}, \quad j=J_3+1, \dots, J_3+J_3, \\ \frac{\partial S}{\partial p_j} &= 2 \sum_i d_i \frac{\partial f_6(^1\vec{p}, x_i)}{\partial p_j}, \quad j=2J_3+1, \dots, 2J_3+J_6; \quad J_6 = M_6 - M_5. \end{aligned} \right\} /12/$$

Здесь J_3 и J_6 - число параметров функций $f_3(\vec{p}, x_i)$ и $f_6(\vec{p}, x_i)$. Используя вычисленные величины d_i и $\partial S / \partial p_j$, легко получить из /4/ значения

$$S(f(\vec{p}, x), y(x)) \quad \text{и} \quad -\vec{V}S = -\left(\frac{\partial S}{\partial p}\right).$$

3. ФОРМИРОВАНИЕ С ПОМОЩЬЮ ИНДЕКСАЦИИ СПИСКА ВАРЬИРУЕМЫХ ПАРАМЕТРОВ

Дополнительные возможности при аппроксимации создает использование при переходе от p_m /6/ к p_j /10/ специального вектора \vec{w} , определяющего характер всех параметров подгонки. Это позволяет не только разделить параметры на варьируемые и неварьируемые, но и объединить параметры, которые варьируются одинаково. Такой подход обеспечивает большую гибкость при решении задачи подгонки. Компоненты w_j конкретного вектора \vec{w} определяются следующим образом:

$$w = \begin{cases} J + \ell, & \text{если } j\text{-тый параметр не варьируется /где } J\text{- число} \\ & \text{варьируемых параметров, } \ell\text{- порядковый номер фикси-} \\ & \text{рованного параметра в списке фиксированных парамет-} \\ & \text{ров/;} \\ j', & \text{если } j\text{-тый параметр варьируется /здесь } j'\text{- поряд-} \\ & \text{ковый номер параметра в списке варьируемых парамет-} \\ & \text{ров/}. \end{cases}$$

В алгоритме в этом случае используется переход $p_j = p_{w_j}$ и, соответственно,

$$\frac{\partial \mathcal{F}(\vec{p}, x)}{\partial p_j} \rightarrow \frac{\partial \mathcal{F}(\vec{p}, x)}{\partial p_{w_j}}. \quad /13/$$

Рассмотрим на предыдущем примере, как работает в этом случае алгоритм. Пусть вектор \vec{p} имеет вид, приведенный в /10/. Простейший вид вектора \vec{w} в этом случае - $w_j = j$:

$$\vec{w} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, \dots, 2J_3 + J_6\},$$

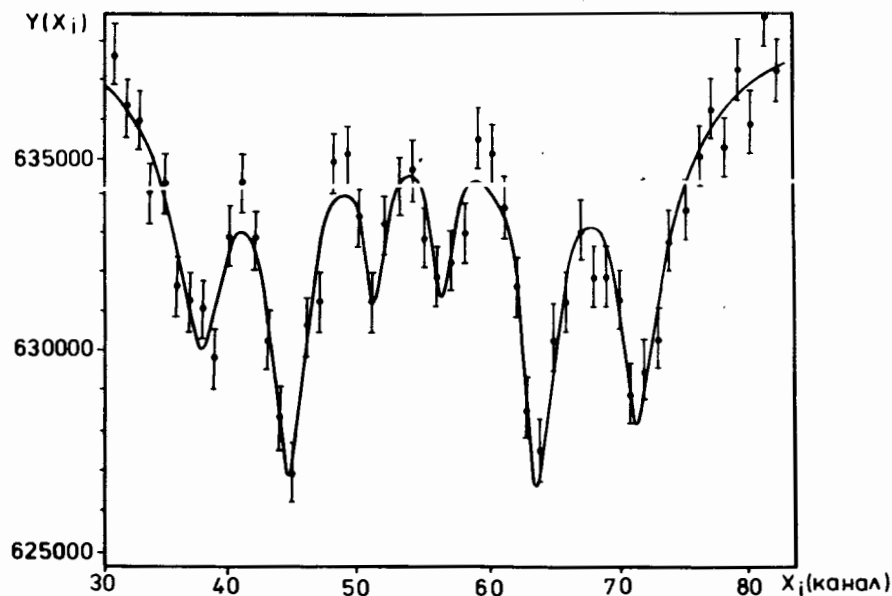
и дальнейшая процедура не будет отличаться от уже описанной.

Однако предположим, что параметры 1 и 4 мы хотим зафиксировать, а параметры 3 и 6 варьировать как один /возвращаясь к дублету: p_1 и p_4 - амплитуды, а p_3 и p_6 - дисперсии (σ^2) двух гауссианов/. В этом случае $\vec{w} = \{J+1, 1, 2, J+2, 3, 2, 4, 5, 6, \dots, J\}$, где $J = 2J_3 + J_6 - 3$ - число варьируемых параметров.

Вычисляя по формуле /10/ значения d_j , мы используем значения параметров p_j , выбираемых по вектору \vec{w} в соответствии с /13/. Аддитивность формул /10/ и /11/ позволяет это сделать без каких-либо изменений основного алгоритма.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предлагаемые методы формирования аппроксимирующей функции были реализованы в программе для обработки мессбауэровских спектров поглощения на ЭВМ СМ-4 и ЕС-1010. Программа аппроксимации работает на основе метода переменной метрики /Дэвидона/. В качестве исходного набора функций использовались отрицательный лоренциан, гауссиан и линейная функция для аппроксимации фона. Век-



Результаты аппроксимации экспериментального спектра мессбауэровского поглощения. При аппроксимации пар пиков 2-5, 3-4 амплитуды и ширины лоренцианов на половине высоты варьировались как общие для каждой пары параметры. Вектор выбора \vec{w} имел вид $\vec{w} = \{1, 2, 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10, 9, 4, 11, 6, 12, 13, 14\}$.

торы выбора \vec{v} и \vec{w} вводились с дисплея ЭВМ так же, как и начальный вектор параметров \vec{p} . Возможность фиксировать различные параметры или объединять их и варьировать как один с помощью \vec{w} позволила получать устойчивые решения для мессбауэрограмм с малой статистикой, но известной симметрией /см. рисунок/.

Кроме использования при обработке в диалоговом режиме предлагаемый алгоритм может являться и частью автоматических программ анализа распределений, имеющих не известную заранее структуру /например, линейчатых спектров/.

ЛИТЕРАТУРА

1. Клепиков Н.П., Соколов С.П. Анализ и планирование эксперимента методом максимума правдоподобия. "Наука", М., 1964.
2. Яноши Л. Теория и практика обработки результатов измерений. "Мир", М., 1965.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 июня 1982 года.

Чураков А.К. и др.

P11-82-459

Индексный алгоритм формирования аппроксимирующей функции в МНК

Предлагается индексный алгоритм формирования обобщенной аппроксимирующей функции и вектора входящих в нее параметров для задачи минимизации по методу наименьших квадратов /МНК/. Алгоритм позволяет с помощью одной программы проводить аппроксимацию экспериментальной зависимости, подбирая таким образом оптимальное решение. Метод эффективен при обработке данных, требующих для аппроксимации применения нескольких различных функций или одинаковых функций, но с разными наборами фиксированных и варьируемых параметров /мессбауэровская спектроскопия, обработка спектров конверсионных электронов и др./.

Работа выполнена в Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1982

Churakov A.K. et al.

P11-82-459

Index Algorithm for Forming Approximation Function in the Least Square Method

An algorithm using indexation for approximation function and their parameter vector formation in the Least Square Method (LSM) is suggested. This algorithm permits to obtain optimal approximation of the experimental results using one program. The algorithm is especially effective for data processing when approximation is needed with several different functions or similar functions but with different sets of fixed and variable parameters (Messbauer spectroscopy, electron conversion spectra etc.).

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1982

Перевод О.С.Виноградовой.