

5294

A-465

ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

ЗИЛ



ЗИЛ



P5 - 5294

ЛАБОРАТОРИЯ ЯДЕРНЫХ ПРОБЛЕМ
ЛАБОРАТОРИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ
И АВТОМАТИЗАЦИИ ТЕХНИКИ

Л. Александров, В. Гаджоков

АНАЛИЗ СКРЫТЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ
ПОСТРОЕНИЕМ
РЕГУЛЯРИЗОВАННЫХ ИТЕРАЦИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ

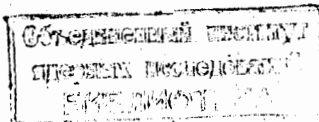
1970

P5 - 5294

Л. Александров, В. Гаджиков

АНАЛИЗ СКРЫТЫХ ЗАКОНОМЕРНОСТЕЙ
ПОСТРОЕНИЕМ
РЕГУЛЯРИЗОВАННЫХ ИТЕРАЦИОННЫХ
ПРОЦЕССОВ

Направлено в ЖЭТФ



8520/4 15

Задача нахождения предполагаемых закономерностей на основе анализа наблюдений (измерения, экспериментально определенные функции и т.д.) физических явлений - одна из наиболее часто встречающихся в вычислительной практике. В случае, когда предполагаются близкие между собой закономерности или когда их число является неизвестным, к этой задаче до сих пор не имеется удовлетворительного вычислительного подхода.

В настоящей работе делается попытка дать общую математическую постановку задачи о скрытых закономерностях и связать ее возникновение с новой исследовательской стратегией. На основе регуляризованных итерационных процессов для решения нелинейных задач^{/1,2/} предлагается общий вычислительный подход к анализу скрытых закономерностей.

В работе рассматриваются некоторые конкретные классы задач, а также реальные численные примеры.

§ 1. Задача об анализе скрытых закономерностей

1. Обозначим через $f(t)$ наблюдаемую функцию, описывающую некоторое свойство данного физического явления. Предположим, что $f(t)$ определена на интервале $J = [t_1, t_2]$, $-\infty < t_1 < t_2 < \infty$ (для простоты аргумент t и функцию $f(t)$ будем рассматривать скалярными).

Пусть задана совокупность \mathcal{L} скалярных функций $g_i (i=1,2,\dots,m)$, зависящих от параметров $p_{ij} (j=1,2,\dots,n_i)$ и аргумента $t \in J$

$$\mathcal{L} = \{ g_1 (p_{11}, \dots, p_{1n_1}; t), \dots, g_m (p_{m1}, \dots, p_{mn_m}; t) \}.$$

Предположим некоторую гладкость функций g_i относительно параметров p_{ij} , а именно: существование непрерывных вторых производных по параметрам.

На основе предварительно известной информации о наблюдаемой функции или из некоторых других соображений (теория, аналогия, феноменология и т.п.) выдвигается следующая основная гипотеза:

Наблюдаемая функция $f(t)$ аппроксимируется линейной комбинацией элементов совокупности \mathcal{L}

$$f(t) = \sum_{i=1}^m a_i g_i (p_{i1}, \dots, p_{i,n_i}; t), \quad (1)$$

где $a_i \geq 0$.

Согласно этой гипотезе, совокупность \mathcal{L} связывается с функцией $f(t)$. В этом случае \mathcal{L} будем называть совокупностью "характерных функций" и обозначать как \mathcal{L}_f .

Определение 1

Нахождение множества \mathcal{L}_f , параметров $p_{ij} (i=1,2,\dots,m; j=1,2,\dots,n_i)$ и амплитуд $a_i (i=1,2,\dots,m)$ называется "полной задачей анализа скрытых закономерностей".

2. Пусть задан ряд наблюдений анализируемой функции $\{f(t_k)\}_{k=1,2,\dots,s}$ и пусть задано множество \mathcal{L}_f с определенным числом предполагаемых закономерностей m .

На основе соотношения (1) неизвестные p_{ij} и a_i могут быть найдены, исходя из следующей нелинейной (в общем случае переопределенной) системы

$$f(t_k) = \sum_{i=1}^m a_i g_i(p_{i1}, \dots, p_{in_i}; t_k) \quad \left. \vphantom{f(t_k)} \right\} \quad (2)$$

$$k = 1, 2, \dots, s$$

Введем следующие обозначения векторов:

$$x = (a_1, \dots, a_m, p_{11}, \dots, p_{1n_1}, \dots, p_{m1}, \dots, p_{mn_m}) \in R_{\ell(m)}$$

$$(\ell(m) = m + \sum_{i=1}^m n_i),$$

$$F(x) = (F_1(x), \dots, F_s(x)) \in R_s,$$

где

$$F_k = \left(\sum_{i=1}^m a_i g_i(t_k) \right) - f(t_k), \quad k = 1, 2, \dots, s.$$

Для определенности будем считать, что пространства R_ℓ и R_s -евклидовы. Нелинейную систему (2) можно записать в векторной форме

$$F(x) = \theta. \quad (3)$$

Будем предполагать, что оператор F отображает ограниченное выпуклое подмножество $X \subseteq R_\ell$ в R_s . Обозначим через $F'(x)$ матрицу Якоби оператора F относительно x . Пусть оператор $H(x) = F''(x)F'(x)$ -регулярный. Рассмотрим его число обусловленности^{/3/}:

$$\text{cond } H(x) = \|H^{-1}(x)\| \|H(x)\| = \frac{\mu_1}{\mu_2} \geq 1, \quad (4)$$

где μ_1 и μ_2 - соответственно наибольшее и наименьшее сингулярные числа^{/3/} оператора $H(x)$. Оператор $H(x)$ нерегулярен тогда и только

тогда, когда $\mu_2 = 0$. В этом случае, если $\mu_1 \neq 0$, $\text{cond } H(x)$ будем считать неограниченно большим.

Пусть задано действительное число r , $1 < r < \infty$.

Определение 2.

Если для всех $x \in X$ выполнено неравенство

$$\text{cond } H(x) \leq r, \tag{5}$$

то решение уравнения (3) называют "регулярной задачей с модулем r ".

§ 2. К анализу скрытых закономерностей для заданного множества \mathcal{L} ,

1. В случае, когда различные закономерности не зависят от одного и того же параметра, матрица Якоби оператора F записывается в виде

$$F'(x) = \begin{bmatrix} g_1(t_1), \dots, g_m(t_1), a_1 \frac{\partial g_1(t_1)}{\partial p_{11}}, \dots, a_1 \frac{\partial g_1(t_1)}{\partial p_{1n_1}}, \dots, a_m \frac{\partial g_m(t_1)}{\partial p_{m1}}, \dots, a_m \frac{\partial g_m(t_1)}{\partial p_{mn_m}} \\ g_1(t_2), \dots, g_m(t_2), a_1 \frac{\partial g_1(t_2)}{\partial p_{11}}, \dots, a_1 \frac{\partial g_m(t_2)}{\partial p_{1n_1}}, \dots, a_m \frac{\partial g_m(t_2)}{\partial p_{m1}}, \dots, a_m \frac{\partial g_m(t_2)}{\partial p_{mn_m}} \\ \dots \\ g_1(t_s), \dots, g_m(t_s), a_1 \frac{\partial g_1(t_s)}{\partial p_{11}}, \dots, a_1 \frac{\partial g_m(t_s)}{\partial p_{1n_1}}, \dots, a_m \frac{\partial g_m(t_s)}{\partial p_{m1}}, \dots, a_m \frac{\partial g_m(t_s)}{\partial p_{mn_m}} \end{bmatrix}$$

(Если существуют две или более закономерности, зависящие от общего параметра, то изменения в матрице $F(x)$ несущественны для дальнейших рассуждений).

Нетрудно проверить, что регулярность задачи (3) зависит от близости между собой или малости по модулю закономерностей, а также от малости амплитуд a_i или малости по модулю производных от закономерностей.

Пусть для задачи (3), для всех $x \in X$ $\mu(x) \neq 0$. Тогда при фиксированном γ всегда существует достаточно малое действительное число $\delta > 0$ такое, что если выполняется хотя бы одно из неравенств

$$\sum_{k=1}^s (g_{i_1}(t_k) - g_{i_2}(t_k))^2 \leq \delta ; i_1, i_2 = 1, 2, \dots, m ; i_1 \neq i_2$$

$$a_i \leq \delta ; i = 1, \dots, m$$

$$|g_i(t_k)| \leq \delta ; k = 1, 2, \dots, s$$

(6)

$$\left| \frac{\partial g_i(t_k)}{\partial p_{ij}} \right| \leq \delta , k = 1, 2, \dots, s ,$$

то задача (3) становится нерегулярной.

Надо особо подчеркнуть, что возмущения наблюдаемой функции $\{f(t_k)\}_{k=1,2,\dots,s}$ (а наличие возмущений весьма характерно для задачи о скрытых закономерностях) тоже могут нарушить регулярность задачи (3) при выполнении хотя бы одного из неравенств (6) с достаточно малым δ .

Как правило, современные исследования приводят к нерегулярным задачам о скрытых закономерностях.

2. Общие вычислительные алгоритмы, обеспечивающие решение задачи (3), в случае ее нерегулярности можно строить на основе регуляризованных итерационных процессов для решения нелинейных уравнений ^{/1,2/}. Примером такого процесса является \mathcal{R}_{ϵ_n} ^{/2/}.

Пусть существуют число $\epsilon_0 \geq 0$ и начальное приближение $x_0 \in X$ такие, что выполнены условия

$$0 \leq (2MT\rho_0 + N_0) \gamma b_0 \leq 1 - ((MT + P)\rho_0 + N_0) \gamma^2 < 1$$

$$((MT + P)\rho_0 + N_0) \gamma^2 < 1 \quad (7)$$

$$((MT + P)\rho_0 + N_0) \gamma^2 + \frac{(2MT\rho_0 + N_0) \gamma^3}{(1 - (2MT\rho_0 + N_0)\gamma b_0)(\gamma - b_0)} \leq 1,$$

где

$$\rho_n = \|F''(x_n)F(x_n)\|; \quad b_n = \|(F''(x_n)F'(x_n) + \epsilon_n E)^{-1}\|;$$

($n = 0, 1, 2, \dots$)

$$\|F'(x)\| \leq T < \infty, \quad \frac{1}{2} \|F''(x)\| \leq M < \infty$$

для всех $x \in X$; $N_0 = a_1(\epsilon_0^2 + \tau_0 \epsilon_0)$, $\tau_n = \|F''(x_n)F'(x_n)\|$,

$$\epsilon_n = \frac{a_1}{2} (\sqrt{\tau_n^2 + 4N_0 \frac{\rho_n}{\rho_0}} - \tau_n); \quad \gamma > b_0 \quad \text{и } a_1 a_2 \in (0, 1] -$$

- заданные действительные числа.

Из теоремы 2 работы ^{/2/} следует, что при выполнении условий (7) приближенное решение уравнения

$$F'(x)F(x) = \theta \quad (8)$$

можно построить следующим процессом:

$$\begin{aligned} \mathcal{R}_{\epsilon_n} : x_0, x_{n+1} &= x_n - (F'(x_n)F'(x_n) + \epsilon_n E)^{-1} F'(x_n)F(x_n), \\ x_n &\in X \quad (n = 0, 1, 2, \dots). \end{aligned}$$

Когда линейный оператор $F'(x_n)$ — мономорфизм, уравнение (8) эквивалентно уравнению (3). В общем случае решения уравнения (3) всегда являются решениями уравнения (8). Из этих соображений следует, что процесс \mathcal{R}_{ϵ_n} можно использовать для нахождения приближенного решения уравнения (1).

§ 3. Анализ скрытых закономерностей в общем случае

1. Когда невозможно определенно указать вид и число закономерностей (т.е. точно задать совокупность \mathcal{L}), полный анализ скрытых закономерностей сильно затрудняется. Однако и в этом случае на основе регуляризованных итерационных процессов возможно приближенное решение этой задачи.

Рассмотрим такое множество $\bar{\mathcal{L}}$ всевозможных предполагаемых закономерностей, по отношению к которому неизвестное нам множество \mathcal{L} является собственным подмножеством $\mathcal{L}, \subset \bar{\mathcal{L}}$.

Сделаем основную гипотезу в множестве $\bar{\mathcal{L}}$. Получаем следующий аналог уравнения (3)

$$\bar{F}(\bar{x}) = \theta, \quad (9)$$

где нелинейный оператор \bar{F} действует из ограниченного выпуклого подмножества $\bar{X} \subseteq R_{\ell(\bar{m})}$ в R_s и где $s \geq \ell(\bar{m}) > \ell(m)$.

Если теперь удастся найти решение уравнения (9), то в нем будут находиться закономерности одинакового типа с равными параметрами, или закономерности с нулевыми амплитудами, или нулевые закономерности. Найденное таким образом множество ненулевых и различающихся между собой закономерностей с ненулевыми амплитудами и будет искомым множеством \mathcal{L}_1 .

2. Численное решение уравнения (9) является более чем сложной задачей. Из предположения о множестве $\bar{\mathcal{L}}$ следует, что $\bar{\mu}_1 \neq 0$, а $\bar{\mu}_2 = 0$ для любого $\bar{x} \in \bar{X}$ и, следовательно, $\text{cond } \bar{H}(\bar{x})$ — неограниченное число. Из того, что не существует конечного числа r , для которого выполнялось бы неравенство (5), и из определения 2 следует утверждение: решение уравнения (9) всегда является нерегулярной задачей.

Приближенное решение задачи (9) можно построить на основе регуляризованных итерационных процессов.

3. Рассмотрим один из возможных эвристических алгоритмов на основе процесса \mathcal{R}_{ϵ_n}

- ϵ : а) задается допустимая точность Δx искомого решения;
- б) выдвигается гипотеза о том, что функционал ϵ_n можно аппроксимировать экспонентой $\epsilon_n = u e^{-v n}$ ($u > 0, v \geq 0$);
- в) включается генератор пары (u, v) ;
- г) при заданных x_0 и паре (u_1, v_1) проверяются начальные условия (5);
- д) если начальные условия не выполняются, делается переход к в). В противном случае — переход к е);
- е) строится конечная часть процесса \mathcal{R}_{ϵ_n} с $\epsilon_n = u_1 e^{-v_1 n}$ до номера n^* , при котором ρ_n перестает монотонно убывать;

ж) берется x_{n^*} при ρ_{n^*} . По формуле оценки в теореме 2^{/2/} проверяется заданная точность;

з) если заданная точность удовлетворена, общий вычислительный процесс прерывается. В противном случае делается переход к в). Если после второго цикла в)–з) оказывается, что $(\rho_{n^*})_2 > (\rho_{n^*})_1$, общий вычислительный процесс прерывается. В противном случае делается снова переход к в).

Вариант алгоритма 6 реализован в стандартной программе КАТОК^{/4,5/}.

§ 4. Численные примеры анализа скрытых закономерностей

1. Пусть задана система уравнений^{/6/}:

$$x_1 + x_2 + x_3 = 1.600\ 000$$

$$x_1 \cos x_4 + x_2 \cos x_5 + x_3 \cos x_6 = 0.126\ 895$$

$$x_1 \cos 2x_4 + x_2 \cos 2x_5 + x_3 \cos 2x_6 = -0.823\ 201$$

$$x_1 \cos 3x_4 + x_2 \cos 3x_5 + x_3 \cos 3x_6 = -0.558\ 708$$

$$x_1 \cos 4x_4 + x_2 \cos 4x_5 + x_3 \cos 4x_6 = -0.356\ 338$$

$$x_1 \cos 5x_4 + x_2 \cos 5x_5 + x_3 \cos 5x_6 = 0.351\ 082$$

Эту упрощенную задачу типа скрытых периодичностей решаем, следуя^{/6/} с начальными приближениями:

$$x_1^0 = 0.9, \quad x_2^0 = 0.6, \quad x_3^0 = 0.2,$$

$$x_4^0 = 1, \quad x_5^0 = 2, \quad x_6^0 = 3.$$

При этих начальных приближениях вычислительный процесс на основе метода Ньютона расходится. В таблице 1 дается найденное путем построения стационарного ($\epsilon_n = \text{const}$) процесса \mathcal{R}_{ϵ_n} /7,8/ решение. Для сравнения приводится и решение, найденное методом квазилинеаризации Беллмана-Калабы /6/. Как видно из этой таблицы, регуляризованный итерационный процесс дает еще на четвертой итерации решение не хуже, чем метод квазилинеаризации; а решение на пятой итерации точно (со всеми знаками!) восстанавливает заданные значения правой части системы (10).

2. Поток Φ нейтронов, испускаемых источником дисковидной формы, зависит от расстояния x между источником и детектором /9/:

$$\Phi(x) = \frac{S}{2\kappa D} (e^{-\kappa x} - e^{-\kappa\sqrt{x^2 + R^2}}).$$

Для определения параметров S и κ по данным измерения потока в работе /9/ применялась с успехом упомянутая в примере 1 модификация /7/ регуляризованного процесса \mathcal{R}_{ϵ_n} .

3. При регистрации γ -лучей сцинтилляционным детектором фотопик изолированной линии имеет форму, близкую к гауссовской /7,8/, но с уширением в низкоэнергетической части. По физическим соображениям асимметрию линии можно искать в виде второго гауссиана, сопутствующего основному. Учет второго пика при обработке спектров позволяет точнее рассчитать интенсивности и энергии спектральных линий. Получаемая задача анализа скрытых гауссиан в экспериментально измеренных кривых успешно решалась по указанной модификации процесса \mathcal{R}_{ϵ_n} /7,8/.

4. Рассмотрим полную задачу об анализе скрытых экспонент при неизвестном их числе для зависимости

$$y(x) = 2 + e^{-0.1x} + e^{-0.15x}. \quad (11)$$

Для сетки по x берем $\{1, 2, \dots, 8\}$ и сопоставляем ей множество значений $y(x)$, подверженных альтернативному разбросу величиной в 0,01: $\{3.7655, 3.555, 3.379, 3.218, 3.079, 2.955, 2.846, 2.751\}$. Предполагаем, что число экспонент больше двух (для определенности берем три экспоненты). В качестве начальных приближений показателей принимаем $h_1 = h_2 = h_3 = 0.125$.

Описанная задача решалась по программе SHE, реализующей специфический регуляризованный процесс для анализа экспоненциальных зависимостей на ЭВМ GIER^{/11/}. Была получена следующая аппроксимация

$$y(x) \approx 1.985 + 0.812 e^{-0.0903x} + 0.596 e^{-0.149x} + 0.607 e^{-0.144x} \quad (12)$$

В этом случае "фон" a_0 найден с относительной ошибкой 0,75%, амплитуды a_1 , a_2 и a_3 - соответственно с ошибками 18,8%, 19,2%, 21,4%, а декременты h_1 , h_2 и h_3 - соответственно с ошибками 9,7%, 0,67% и 4,0%.

Из формулы (12) можно заключить, что число закономерностей равно двум. Имея в виду исключительные трудности^{/10/} анализа экспоненциальных зависимостей при близких по величине декрементах и наличии возмущений у величин $y(x)$, аппроксимацию (12) следует оценивать как успешную.

5. Задача нахождения скрытых экспонент возникает и при экспериментальном исследовании процессов термализации нейтронов в кристаллических модераторах. В этом случае показатель второй экспоненты имеет важный физический смысл для данной среды (графит, бериллий и др.) - он определяет время термализации в ней. По программе SHE был решен ряд реальных задач такого типа^{/11/}.

6. При предположении симметричной гауссовой формы пика полного поглощения в Ge-Li γ - детекторах зависимость числа импульсов Y_q , зарегистрированных в канале с номером q , представляется в виде^{/5,7/}:

$$Y_q = \sum_{i=1}^k \frac{a_i}{\sigma\sqrt{2\pi}} \int_{q-1}^q e^{-\left(\frac{x-p_i}{\sigma\sqrt{2}}\right)^2} dx + \sum_{j=0}^{\ell} b_j q^j, \quad (13)$$

$$q \in [q_{\text{нач}} \ q_{\text{кон}}].$$

Задача определения параметров спектра при заданных $\{q\}$ и $\{Y_q\}$ решалась по программе КАТОК^{/4/}, реализующей частный случай алгоритма Б. Приводим три характерных случая обработки спектров по этой программе.

а) обработка заведомо одиночной линии ^{137}Cs (измерения этой линии даны в таблице 2а) с $k=2$ приводит к следующим позициям двух искоемых гауссиан

$$\sigma = 2.267 \text{ кан.}$$

$$p_1 = 275.1384 \text{ кан.}$$

$$p_2 = 275.1399 \text{ кан.}$$

Так как их дисперсии одинаковы априори, то отсюда следует, что на рассматриваемом участке находится только один гауссовский пик. Начальные условия и найденное решение даются в табл. 3;

б) на рис. 1 представлен участок спектра, состоящий из шести одиночных линий. Этот искусственный пример составлен физиком З. Стахурой^{х)} специально для проверки методов анализа сложных спектров следующим образом: спектр ^{137}Cs снимался за 6 разных интервалов времени (что задает интенсивности отдельных линий),

х) Z. Stachura, Instytut Fizyki Jadrowej, Krakow-23.

затем полученные линии раздвигались влево или вправо на определенное число каналов и производилось поканальное суммирование чисел импульсов. Таким образом, все параметры результирующего спектра являются известными, а отсчеты в каналах подвержены статистически независимому разбросу. Полученный таким образом "спектр" дан в таблице 2б.

Пример обрабатывался по программе КАТОК с $k=8$ в целях определения числа линий на участке. Динамика вычислительного процесса показана на рис. 2, 3 и 4, а начальные приближения и найденное решение даны в табл. 4. Рис. 2 показывает, что истинное число пиков $k=6$. Минимум невязки достигнут на 9-ой итерации (рис. 5). Повторная обработка того же участка с $k=6$ привела к очень хорошему совпадению расчетных параметров с истинными, что видно из табл. 5. Повторная обработка была необходима только для расчета ошибок параметров.

в) рис. 6 представляет собой обработанный по программе КАТОК сложный участок реального спектра ^{132}La в области ≈ 700 кэв (см. табл. 2в). Число k было задано 6, причем пик с максимумом в канале 627,5 получился дважды. На рисунке показаны полученные при обработке площади гауссиан и их позиции. Фон аппроксимировался полиномом 2-й степени.

Л и т е р а т у р а

1. Л. Александров. Препринт ОИЯИ Р5-5136, Дубна 1970.
2. Л. Александров. Препринт ОИЯИ Р5-5137, Дубна 1970.
3. Дж. Форсайт, К. Молер. Численное решение систем нелинейных алгебраических уравнений, изд. "Мир", М., 1969, стр. 13, 32.
4. В. Гаджоков. Препринт ОИЯИ Р10-5035, Дубна 1970.

5. В. Гаджоков. Лекции 2-й Школы ЭВМ в Алуште, май 1970, 10-5255, Дубна 1970.
6. Р. Беллман, Р. Калаба. Квазилинеаризация и нелинейные краевые задачи, изд. "Мир", М., 1968, стр. 129.
7. В. Гаджоков, Л. Александров, Ч. Стоянов. Препринт ОИЯИ Р10-5043, Дубна 1970.
8. Ч. Стоянов, Л. Александров, В. Гаджоков. Атомная энергия т. 28, (1970), вып. 8.
9. В. Христов. Диссертация ФИ с АНЕБ при БАН, София.
10. К. Ланцош. Практические методы прикладного анализа, изд. Физматгиз, М., 1961, стр. 280.
11. Л. Александров. Препринт ОИЯИ Р5-5215, Дубна, 1970.

Рукопись поступила в издательский отдел
29 июля 1970 г.

Таблица I

№ неизв.	Решения системы (10)			
	№ итерации	квазилинеаризация	№ итерации	процесс
1		0.943582		0.9436478
2		0.486676		0.4867594
3	I	0.169742	I	0.1695396
4		1.09000		1.090069
5		1.92583		1.926058
6		2.45651		2.457768
1		1.00218		1.007788
2		0.476529		0.5914380
3	2	0.121287	2	0.00082097
4		1.11113		1.112433
5		2.01352		2.076304
6		2.62338		2.8823229
1		1.00002		1.002671
2		0.503119		0.4988137
3	3	0.096864	3	0.09781200
4		1.11001		1.111498
5		2.0379		2.040979
6		2.80801		2.862145
1		0.999988		1.000024
2		0.499537		0.4996841
3	4	0.100475	4	0.1002909
4		1.11000		1.110007
5		2.02981		2.029744
6		2.85931		2.861724
1	истинное	1.000000		1.000001
2	решение	0.500000		0.5000026
3	по раб. /6/	0.100000	5	0.09999625
4		1.11000		1.110000
5		2.03000		2.030004
6		3.42000		2.863208

Таблица 2
Анализируемые спектры в примере 6 §4

Задача а)

канал	импульсы	канал	импульсы	канал	импульсы	канал	импульсы
267	21	272	344	276	1171	280	211
268	19	273	613	277	1014	281	87
269	35	274	889	278	714	282	45
270	68	275	1145	279	383	283	20
271	184						

Задача б)

канал	импульсы	канал	импульсы	канал	импульсы	канал	импульсы
756	56	767	798	778	2400	789	1239
757	60	768	509	779	2409	790	1114
758	75	769	323	780	2116	791	1014
759	121	770	262	781	1583	792	945
760	215	771	246	782	1101	793	760
761	382	772	206	783	827	794	653
762	659	773	253	784	742	795	392
763	938	774	448	785	840	796	217
764	1183	775	785	786	1021	797	116
765	1226	776	1315	787	1254	789	52
766	1080	777	1893	788	1316	799	21

Задача в)

канал	импульсы	канал	импульсы	канал	импульсы	канал	импульсы
622	20064	628	20600	634	20256	640	19522
623	19958	629	20110	635	20936	641	19416
624	19973	630	19978	636	21723	642	18884
625	20296	631	19648	637	21418	643	18724
626	20259	632	19752	638	20814	644	18599
627	20396	633	20090	639	20013		

Таблица 3
Начальные приближения и решение к задаче об анализе спектра e_s

Параметр	a_1	p_1	a_2	p_2	σ	b_0	b_1
начальн. приобл.	2480	278	4270	274	1.8	20	0
решение	4186.45 ± 49.23	275.138 ± 0.028	2492.87 ± 31.92	275.139 ± 0.028	2.2671 ± 0.0256	16.187 ± 2.535	-0.1585 ± 0.1492

Таблица 4
Начальные приближения и решение к примеру Стахуры

Параметр	a_1	p_1	a_2	p_2	a_3	p_3	a_4	p_4	b	
нач. приобл.	2169	763	9702	765	1280	768	4845	778	1.859	
решение	5491.88 ± 74.58	764.235 ± 0.034	835.00 ± 49.52	770.48 ± 0.24	13617.3 ± 348.5	778.06 ± 0.06	3041.77 ± 69.00	787.00 ± 0.12	2.279 ± 0.034	
Параметр	a_5	p_5	a_6	p_6	a_7	p_7	a_8	p_8	b_0	b_1
нач. приобл.	1708	787	2296	788	2930	789	3985	791	9	0
решение	1623.98 ± 272.65	782.40 ± 0.65	3601.53 ± 83.00	787.35 ± 0.12	4146.59 ± 136.37	791.94 ± 0.08	1328.07 ± 17.82	763.84 ± 0.034	49.74 ± 3.82	-1.174 ± 0.138

Таблица 5
 Результаты обработки "спектра" Стахуры с $\kappa = 6$

Параметр	Единица измерения	Расчетное значение	Ошибка	Истинное значение
σ	каналы	2.270	0.035	2.292
a_1	усл. ед.	1.009	0.032	1
ρ_1	каналы	764.160	0.44	764.145
a_2	усл. ед.	0.123	0.008	0.1
ρ_2	каналы	770.454	0.244	770.145
a_3	усл. ед.	2.008	0.077	2
ρ_3	каналы	778.044	0.069	778.145
a_4	усл. ед.	0.249	0.041	0.2
ρ_4	каналы	782.254	0.654	782.145
a_5	усл. ед.	0.988	0.036	1
ρ_5	каналы	787.172	0.122	787.145
a_6	усл. ед.	0.615	0.027	0.6
ρ_6	каналы	791.923	0.089	792.145

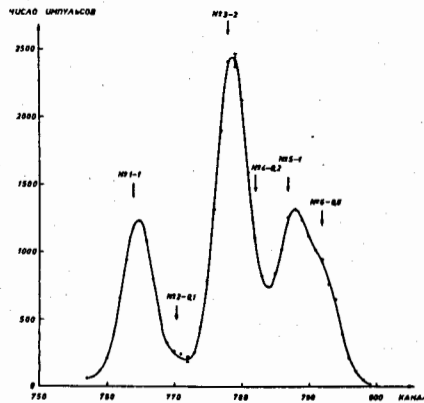


Рис. 1. Сложный участок "спектра" 3. Стахуры. Точками нанесены входные данные, для двух из которых указаны статистические ошибки. Сплошная кривая - полученная аппроксимация. Стрелками указаны позиции отдельных гауссиан, а рядом с их номером даны интенсивности в условных единицах.

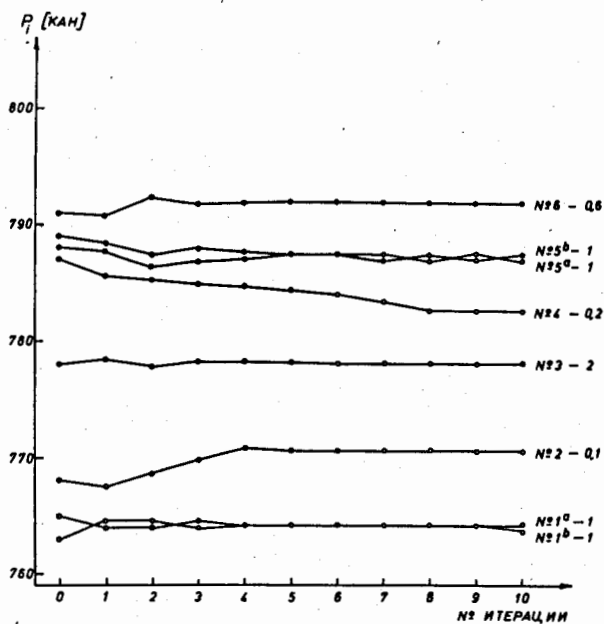


Рис. 2. Динамика изменения гауссиан по итерациям. Итерация с №0 соответствует вектору начальных приближений, а с № 9 - минимуму невязки. Для наглядности масштаб правой части кривых 5^a и 5^b увеличен в 2,5 раза. (Начиная с 6-й итерации).

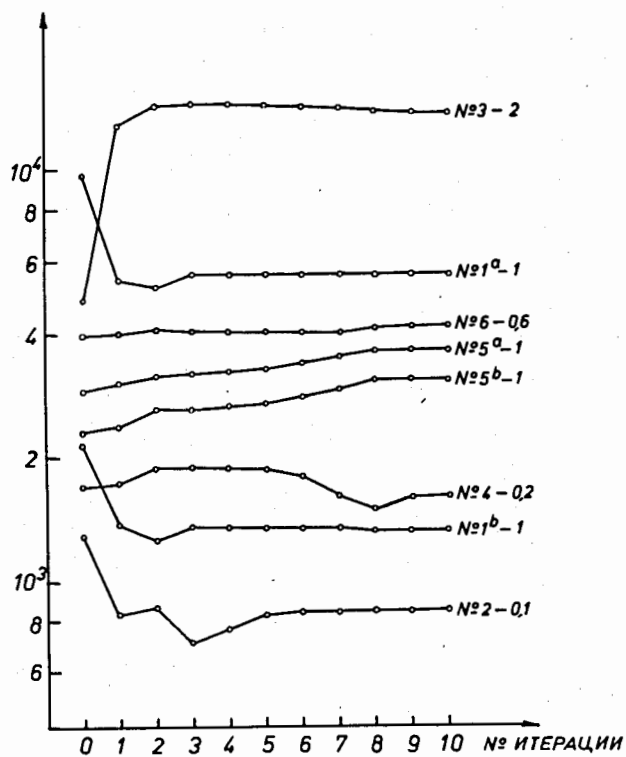


Рис. 3. Динамика изменения площадей гауссиан по итерациям. Видно, что процесс обнаруживает сходимость, несмотря на плохие начальные приближения, в особенности для гауссиан с №№ 1^a и 3. Суммы площадей гауссиан с номерами (1^a и 1^b) и (5^a и 5^b) соответствуют истинным значениям площадей пиков 1 и 5, указанным на рис. 1.

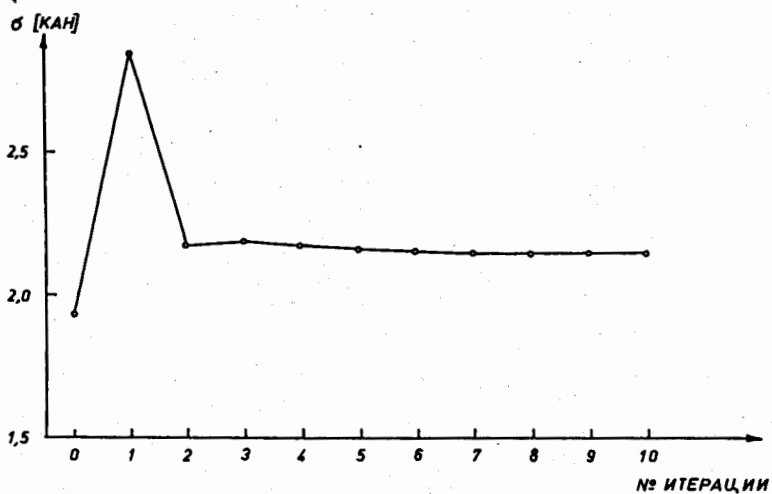


Рис. 4. Динамика изменения дисперсии гауссиан по итерациям.

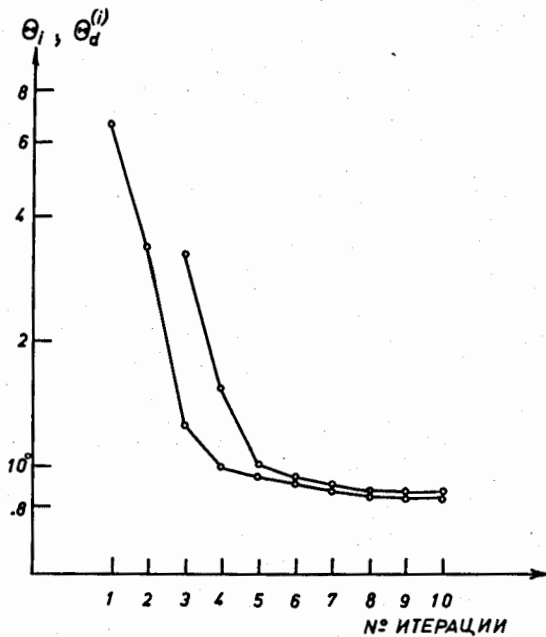


Рис. 5. Динамика изменения невязки по итерациям. Нижняя кривая представляет собой обычную невязку, а верхняя - длинную, т.е. средневзвешенную по трем предыдущим итерациям.

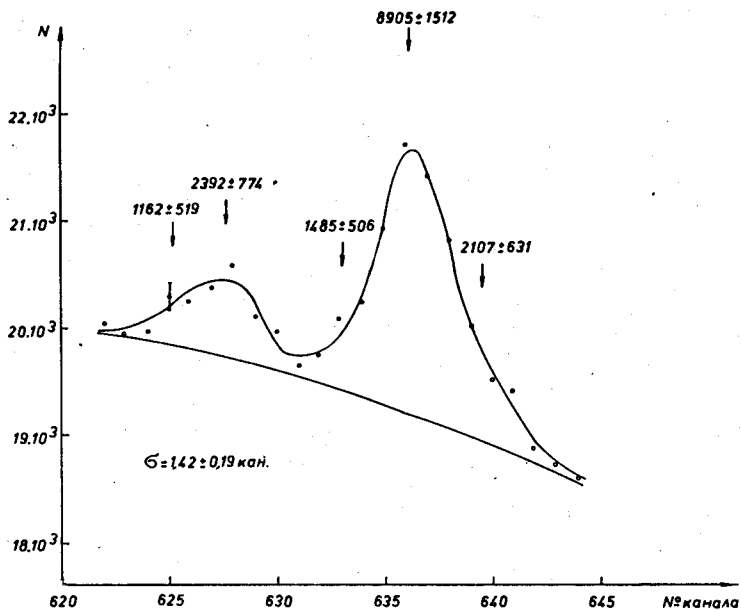


Рис. 6. Результаты обработки реального участка спектра ^{132}La в области 700 кэВ. Стрелками обозначены позиции найденных гауссиан, а над ними даны их интенсивности. Для второго пика слева дана сумма двух площадей с одинаковыми позициями. Дисперсия считалась одинаковой в пределах обрабатываемого участка. Нижняя сплошная кривая представляет собой аппроксимацию фоновой подложки параболой.