

АВТОМАТИЗАЦИЯ ОБРАБОТКИ ДАННЫХ ДИСКРЕТНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ ЯДЕРНЫХ ИЗЛУЧЕНИЙ

В. Гаджожков

Институт ядерных исследований и ядерной энергетики Болгарской академии наук, София

Обзор посвящен автоматизированной обработке с помощью ЭВМ данных, накапливаемых в измерениях дискретных ядерных спектров. Задача обработки таких данных разбита на два этапа, первый из которых осуществляется в диалоговом режиме, а второй — решает сформированный на первом этапе поток однотипных нелинейных задач в полностью автоматическом режиме. Детально рассмотрены алгоритмы двух этапов обработки. Указаны требования, предъявляемые к алгоритмам с тем, чтобы они обладали универсальностью применения к данному классу задач. Обсуждается построение таких алгоритмов на основе регуляризованных итерационных процессов.

The review deals with automated computer processing of data accumulated in measurements of discrete nuclear spectra. The problem of processing such data is subdivided into two steps, the first being carried out interactively on a graphical display, while the second solves in a fully-automated regime the stream of non-linear problems generated during the first step. The algorithms of the two processing stages are considered in detail. The requirements to these algorithms are formulated aiming at their universality of application to the class of problems discussed. The constructing of such algorithms on the basis of regularized iteration processes is also dealt with.

ВВЕДЕНИЕ

Когда говорят об автоматизации спектрометрических исследований, подразумевают прежде всего применение ЭВМ для накопления, передачи, сортировки и хранения экспериментальных данных, а также для управления спектрометрическим экспериментом. Эти трудоемкие процессы сравнительно легко поддаются формализации и описанию при помощи языковых средств, доступных современным ЭВМ. С них естественно начинать автоматизацию исследований. В настоящей работе рассматриваются способы эффективного подхода к проблеме автоматизации математической обработки данных, полученных при физических измерениях дискретных спектров ядерных излучений. Иными словами, речь пойдет о естественном продолжении процесса автоматизации спектрометрических исследований.

Настоящий обзор основан прежде всего на опыте, накопленном в Отделе ядерной спектроскопии и радиохимии ЛЯП ОИЯИ, начиная с 1969 года. Автор выражает глубокую благодарность руководству Отдела и дирекции Лаборатории ядерных проблем, предоставившим ему возможность сотрудничать с этим замечательным коллективом исследователей в течение ряда лет. Разумеется, ни руководство, ни коллектив не несут ответственности за те утверждения в обзоре, которые могли бы показаться спорными или оказаться ошибочными.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И МЕТОДЫ ЕЕ РЕШЕНИЯ

1.1. Предварительные замечания. Спектром называется распределение некоей физической величины (например, интенсивности U излучения) по какому-нибудь параметру (например, по энергии E излучения). Функцию $U(E)$, описывающую плотность этого распределения, обычно называют спектральной функцией.

Предмет спектрометрии ядерных излучений или, как чаще говорят, ядерной спектроскопии достаточно ясен из самого ее названия. Здесь можно условно выделить следующие этапы [1, 2, 3]: детектирование излучения; аналого-цифровое преобразование сигналов; накопление информации; предварительная обработка данных; расчет основных параметров спектра; калибровка по эффективности и энергии; интерпретация результатов (построение схем распада, поиск подходящих ядерных моделей и пр.).

Развитие и усовершенствование технических средств детектирования излучений и регистрации сигналов привело к тому, что уже в течение многих лет невозможно себе представить серьезное спектрометрическое исследование без применения ЭВМ [4, 5]. По объему вычислительных работ наиболее трудоемкими являются этапы предварительной обработки данных и расчета параметров спектра. Как раз на этих этапах мы сосредоточим наше внимание в дальнейшем. Нисколько не преуменьшая те интеллектуальные и технические трудности, которые в достаточной мере присущи и остальным этапам ядерной спектрометрии, можно утверждать, что именно на указанных этапах исследователь встречается с наибольшими математическими трудностями.

Этапы предварительной обработки и расчета параметров спектра характеризуются следующими особенностями:

- а) большой объем вводимой информации;
- б) целесообразность участия человеческого интеллекта в предварительной обработке;
- в) нелинейность решаемой основной математической задачи;
- г) большой объем вычислений;
- д) сравнительно небольшой объем выводимой информации.

При их рассмотрении будем полагать, что предшествующие этапы:

завершены, т. е. измерения окончены и накопленная информация записана в памяти ЭВМ (или же на некотором машинно-читаемом носителе).

1.2. Основная задача спектрометрии. Любая реальная измерительная аппаратура обладает специфической функцией отклика $K(E, e)$ и дает на своем выходе не спектральную функцию $U(E)$, а аппаратурный спектр $A(E)$, причем

$$A(E) = \int_a^b K(E, e) U(e) de, \quad (1)$$

где a и b — нижняя и верхняя границы области чувствительности спектрометра.

Уравнение (1), как известно, является интегральным уравнением Фредгольма 1-го рода (см., например, [1, 4, 6—8]). Решение этого уравнения, т. е. нахождение неизвестной функции $U(e)$ при заданных $A(E)$ и $K(E, e)$, представляет собой основную задачу спектрометрии. Отметим некоторые особенности этой задачи:

а) она является некорректной [1];

б) функция отклика спектрометра $K(E, e)$ далеко не всегда известна с достаточной степенью точности, иными словами, как попытка ее аналитического задания, так и ее прямое измерение наталкиваются на существенные трудности;

в) аппаратурный спектр $A(E)$ по своей природе является функцией непрерывной и в процессе аналого-цифрового преобразования подвергается своеобразному «квантованию» с шагом, равным шагу преобразования. Математически это эквивалентно интегрированию истинного аппаратурного спектра в пределах каждого шага преобразования. Из-за особенностей а) и б) к решению основной задачи спектрометрии в форме (1) прибегают только тогда, когда невозможно упростить ее и свести к другой, более легкой задаче, например, в случае тормозного излучения или замедляющихся нейтронов, чьи спектры заведомо непрерывны [6, 9]. Пункт в) очень часто попросту игнорируют. Это вполне понятно: спектрометрическая задача достаточно сложна сама по себе [10] и ее решение традиционными методами часто наталкивается на непреодолимые трудности, откуда вытекает стремление избежать дополнительных осложнений, связанных с учетом интегрирования.

1.3. Случай дискретного спектра. Спектр считается дискретным, когда он состоит из отдельных, четко отличимых друг от друга линий. Это означает, что естественная ширина линий Γ много меньше расстояния между ними ΔE . Пренебрегая естественной шириной, такой спектр удобно представить в виде линей-

ной комбинации конечного числа дельта-функций:

$$U(e) = \sum_{i=1}^k A_i \delta(e - e_i), \quad (2)$$

где e_i — характеристические энергии спектральных линий; A_i — интенсивности (амплитуды) соответствующих линий; k — число линий в спектре.

Подставляя (2) в (1), получаем

$$A(E) = \sum_{i=1}^k A_i K_i(E), \quad (3)$$

где принято обозначение $K_i(E) = K(E, e_i)$. Видно, что, когда исследуемый спектр дискретен, функция отклика распадается на k независимых компонентов, а интегрирование сводится к суммированию по компонентам с весами A_i .

Уравнение (3) выражает плотность распределения сигналов на выходе спектрометрического тракта до аналого-цифрового преобразователя. Следуя установившейся терминологии, будем называть шаг преобразований шириной канала преобразователя. Так как на практике обычно пользуются (или, по крайней мере, стремятся к этому) преобразователями с постоянной шириной канала, мы ограничимся рассмотрением этого случая, полагая для простоты, что она равна единице. Будем считать, что все каналы пронумерованы, причем их номера совпадают со значением верхнего порога $q = 1, 2, \dots, Q$. Очевидно, общее число каналов преобразования равно Q . Поскольку преобразователь реагирует одинаковым образом на все сигналы, попадающие между нижним и верхним порогами данного канала q , то общее число Y сигналов, зарегистрированных в этом канале, получается интегрированием распределения (3) в пределах порогов:

$$Y_q = \sum_{i=1}^k A_i \int_{q-1}^q K_i(E) dE, \quad q = 1, 2, \dots, Q. \quad (4)$$

Соотношения (4) представляют собой систему нелинейных уравнений относительно искомых параметров спектра, которые входят в правые части уравнений (интенсивности линий — явно и линейно, а остальные параметры — неявно и нелинейно, под знаком интеграла). Существенно, что левые части (4) непосредственно измеримы. Чаще всего это — числа импульсов, зарегистрированных в каналах анализатора, но они могут являться также степенями почернения фотопластины, используемой в качестве детектора в магнитном спектрометре электронов конверсии [11], скоростями счета детектора в α -спектрометре при разных токах магнита и т. п. В нашем изложении мы будем обычно упоминать для

определенности только числа импульсов в каналах анализатора, но выводы сохраняют силу и для иных дискретных спектров.

Совокупность чисел Y_q представляет собой данные, которые накапливаются с помощью спектрометра, когда его детектор облучается смесью из k монохроматических линий разной интенсивности. В этих данных скрыт полный образ искомого спектра $U(\epsilon)$. Цель решения системы (4) — раскрытие этого образа, т. е. нахождение отдельных дискретных линий в экспериментально снятом спектре. Ясно, что решение обсуждаемой задачи зависит от разрешающей способности используемого спектрометра (полуширины аппаратурной линии). Заметим, что, как правило, разрешающая способность данного прибора слабо зависит от энергии излучения.

Поскольку разрешающие способности используемых спектрометров всегда хуже тех, которые хотелось бы иметь, цель решения системы (4) можно сформулировать по-иному: надежное извлечение возможно большего количества полезной информации, скрытой в экспериментальных данных. Далее будет показано, что на основе использования подходящих алгоритмов эта цель вполне достижима даже для линий, расстояние между которыми меньше разрешающей способности. Иными словами, путем более точного решения системы (4) можно добиться «улучшения» спектрометра.

Отметим, что, когда ширина канала существенно меньше полуширины одиночной линии (последнее имеет место, например, в сцинтилляционных спектрометрах), поправки на интегрирование аппаратурного спектра в пределах отдельного канала становятся пренебрежимо малыми, и замечание, сделанное ранее, теряет силу.

1.4. Возникновение потока однотипных нелинейных задач. То обстоятельство, что все реальные спектрометры имеют конечную разрешающую способность в сочетании с физическим фактом неравномерности распределения линий по спектру, приводит к очень важным следствиям [12—14].

Во-первых, образы истинных линий в зарегистрированном спектре $\{Y_q\}$ естественным путем группируются в скопления, в которых расстояния между соседними линиями сравнимы с полушириной одиночной линии h , т. е. если и превосходят ее, то не более, чем в несколько раз (например, в 2—3 раза в случае гауссовой формы одиночной линии). Расстояние же между соседними скоплениями больше, чем максимальное расстояние между соседними линиями внутри скопления.

Во-вторых, вклад отдельной линии в число зарегистрированных сигналов Y_q распространяется только на те значения номеров каналов q , которые относятся к данному скоплению линий. Вклад же линий данного скопления в каналы соседних скоплений пренебрежимо мал как по сравнению с зарегистрированными числами

сигналов, так и относительно неизбежных ошибок измерения.

В-третьих, так как линии одного и того же скопления близки друг к другу, а разрешающая способность спектрометра слабо зависит от параметра, по которому разворачивается спектр, то можно с хорошей степенью точности принять, что разрешающая способность одинакова для всех линий скопления (и, конечно, несомненно изменяется при переходе к соседним скоплениям).

Пусть некое скопление линий полностью заключено в каналах с номерами от q_{in} по q_e . Упорядоченную совокупность

$$\{Y_q\}_{q=q_{in}, q_{in}+1, \dots, q_e} \quad (5)$$

будем называть участком спектра. По самому определению участка и в силу только что перечисленных следствий те уравнения системы (4), которые соответствуют совокупности (5), независимы от остальных уравнений системы и могут решаться отдельно от них. Следовательно, при подходящем разбиении всего спектра на участки система нелинейных уравнений (4) распадается на конечное число независимых друг от друга нелинейных систем меньшей размерности, соответствующих участкам разбиения. В этом случае мы вправе говорить о частичной декомпозиции исходного спектра или, иными словами, о том, что система (4) порождает поток однотипных нелинейных задач [15] об обработке участков типа (5). Если нам удастся построить универсальный алгоритм [15] решения задач потока, то проблема автоматизации обработки дискретных спектров будет в значительной мере решена.

Сведёние исходной задачи к потоку задач пониженной размерности значительно облегчает обработку данных на ЭВМ, так как понижает требования к оперативной памяти машины, а также и общее число необходимых элементарных операций. Это весьма существенно, ибо без подобной редукции обработка спектров на малых ЭВМ вообще невозможна.

Например, γ -спектры изотопов области деформированных ядер могут состоять из нескольких сот отдельных линий. Один такой спектр, измеренный на спектрометре с полупроводниковым детектором и записанный в 4096 каналах, обычно разбивается на несколько десятков участков (50—100) и, следовательно, порождает поток из такого же числа однотипных нелинейных задач обработки. В предельном случае отдельный участок может содержать только одну линию. Средняя же длина участка составляет 30—50 каналов, что значительно меньше длины исходного спектра.

Разбиение спектра на участки — отнюдь не формальная задача, более того, ее решение, как правило, не однозначно. Чтобы правильно провести разбиение, необходимо уметь распознавать одиночные и перекрывающиеся линии и их скопления, а в сложных случаях нужны еще воображение, опыт и интуиция. Поскольку мы еще не научились достаточно хорошо программировать эти

атрибуты разума, участие человеческого интеллекта на этапе разбиения представляется особенно важным. При разумном выделении участков из исходного спектра окончательные значения его расчетных параметров практически не зависят от способа разбиения (если, конечно, этот способ остается разумным). Следовательно, задача обработки спектра все-таки имеет однозначное решение, несмотря на неоднозначность разбиения. Большое значение для достижения однозначности решения имеет используемый алгоритм. Хороший алгоритм обработки участков, как будет видно далее, может давать индикацию неразумного разбиения. Полезным оказывается также привлечение дополнительных физических соображений, например, резкое выпадение значения полуширины линий данного участка из общей плавной зависимости недвусмысленно говорит о наличии неполадок.

Итак, если спектр измерен и разумно разбит на участки, для решения потока однотипных нелинейных задач необходимо:

а) построить подходящую математическую модель функции отклика спектрометра $K_i(E)$. Модель должна явно зависеть по крайней мере от двух параметров — от положения центра линии p_i и от ее полуширины h_i (так как линия обычно размыта, полуширину принято измерять полной шириной на половине высоты; для краткости мы будем использовать термин «полуширина»);

б) дополнить математическую модель членами, учитывающими присутствие фоновых сигналов в Y_q ;

в) подставить в соотношения (4) явный вид выбранной модели;

г) на каждом участке спектра, т. е. для каждой из задач порожденного потока, задать начальные приближения искомым неизвестным, включая и параметры фоновых членов;

д) решить индивидуальные задачи потока, применяя к каждой из них подходящую итерационную процедуру, выбираемую согласно универсальному алгоритму обработки данного потока;

е) для каждой из задач потока рассчитать наследственные ошибки искомым параметров в точке решения, обусловленные как неточностью исходных данных, так и неполнотой принятой модели.

1.5. Построение математической модели спектра. Физические процессы, ответственные за регистрацию излучения детектором, имеют сложный и заведомо статистический характер. Это утверждение сохраняет силу во всех случаях измерения дискретных ядерно-физических спектров. При построении моделей конкретных спектров следует как можно более точно учитывать характер взаимодействия излучения с детектором. Определенности ради мы проведем наше рассмотрение на примере γ -спектров от полупроводниковых детекторов, что, пожалуй, встречается наиболее часто. Проводимые здесь рассуждения относятся к одиночной монохроматической γ -линии.

Понятие аппаратурной линии. Взаимодействие γ -излучения с веществом можно считать достаточно хорошо изученным. γ -Квант может подвергнуться в материале чувствительного объема детектора одному из следующих трех процессов: рассеянию разных видов, из которых наиболее существен комптон-эффект; полному поглощению с отдачей энергии одному из связанных электронов (фотоэффекту) и образованию электрон-позитронных пар с потерей энергии, равной энергии покоя рожденных частиц (очевидно, этот процесс пороговый), а также их возможным комбинациям, например, образованию пары с последующим полным поглощением остаточного γ -кванта и т. п. [16]. В интересующей нас области энергий (≤ 10 МэВ) процессы рождения более тяжелых пар не имеют места.

Каждый процесс взаимодействия γ -квантов с веществом, как и каждая возможная комбинация процессов, приводит к характерному распределению сигналов на выходе спектрометра. Сумма указанных распределений и есть функция отклика спектрометра на γ -излучение данной энергии или, как еще говорят, форма одиночной линии. Из-за множественности физических процессов форма эта достаточно сложна даже в случае монохроматического детектируемого спектра. Удовлетворительных аналитических выражений, описывающих эту форму, не существует; попытки составления таких выражений пока наталкиваются на значительные трудности. Попытаемся ответить на вопрос о том, насколько оправданы усилия, затрачиваемые на преодоление трудностей.

Цель обработки спектра состоит в надежном определении интенсивностей и энергий отдельных линий. Вся существенная информация об указанных физических величинах сосредоточена в пике полного поглощения, площадь и положение которого равны соответственно интенсивности и энергии с точностью до относительно простого (но необязательно линейного) калибровочного преобразования. Целесообразно включить в обработку также пики простого и двойного вылетов, так как они могут быть полезны в идентификации линий сложных спектров, состоящих из множества монохроматических компонентов. Что же касается комптоновской части спектра, куда можно отнести также и пики обратного рассеяния, в ней так перемешаны вклады отдельных линий, что ее обработка, по крайней мере, на настоящем этапе наших возможностей представляется вряд ли возможной и, быть может, ненужной.

Итак, из-за различной информативности отдельных компонентов аппаратурного спектра изолированной γ -линии в полупроводниковом спектрометре введем следующие дополнительные определения и условия.

1. Линиями аппаратурного спектра будем считать только резко выраженные максимумы в распределении сигналов. Физически

такая линия соответствует пику полного поглощения или, реже, пикам простого или двойного вылетов. Формы изолированных аппаратурных линий подобны (только пик запаздывающей аннигиляции уширен).

2. Идентификацию аппаратурных линий, т. е. установление однозначной связи с пиками той или иной гамма-линии исследуемого спектра, будем проводить после обработки всех участков спектра.

3. Все остальные компоненты аппаратурного спектра будем относить к фону задачи (вместе с истинным физическим фоном).

4. Разрешающую способность спектрометра будем определять по отношению к введенному выше понятию аппаратурной линии.

С этими оговорками к γ -спектрам от полупроводниковых детекторов применимы все выводы, сделанные ранее. Заметим, что это характерно только для конкретного типа рассмотренных спектрометров. Например, к магнитным спектрометрам электронов внутренней конверсии эти же выводы применимы без введения дополнительных условий.

Аналитическое описание аппаратурной линии. Теперь, когда понятие аппаратурной линии однозначно определено, можем перейти к обзору описаний ее формы.

а) Если разброс сигналов от детектора обусловлен только случайными (статистическими) факторами, то можно ожидать нормальное распределение этих сигналов:

$$K(E) = \left(\frac{1}{\sigma \sqrt{2\pi}} \right) \exp \left[- \left(\frac{E-p}{\sigma \sqrt{2}} \right)^2 \right], \quad (6)$$

причем центр распределения p является мерой энергии поглощенного γ -кванта, дисперсия σ^2 связана линейно с полушириной:

$$h = 2 \sqrt{2 \ln 2} \sigma, \quad (7)$$

а интенсивность измеряется площадью аппаратурной линии, которая попросту совпадает с ранее введенной амплитудой A (в настоящем разделе мы опускаем индекс номера линии i).

Это — самая старая, самая физическая и наиболее часто используемая модель, перешедшая в полупроводниковую спектроскопию из сцинтилляционной. Ее применяют так много авторов, что мы затрудняемся указать, кто из них был первым.

б) Для многих детекторов допущение пункта а) о том, что разброс сигналов обусловлен чисто статистическими факторами, является слишком сильным упрощением [17, 18]. Последовательность физических процессов, в результате которых падающий γ -квант превращается детектором в сигнал определенной амплитуды, весьма сложна [18], а попытки теоретического расчета рас-

пределения сигналов (см., например, [19]) пока не нашли практического применения в обработке спектрометрических данных. Происходит это в основном по двум причинам. Во-первых, получаемые теоретические выражения сами по себе достаточно громоздки и неудобны; во-вторых, в них тоже участвуют неизвестные параметры и даже неизвестные функции, например, эффективность собирания носителей тока. В тех же случаях, когда не имеет места ни та, ни другая причина, сам расчет распределения сигналов выполнен при недопустимых упрощениях, что возвращает нас к исходному пункту.

В описанных условиях естественно стремление избежать как простоты распределения (6), так и неудобств теоретических расчетов, что можно сделать либо табличным заданием формы одиночной линии, либо путем введения в (6) добавочных аддитивных или мультипликативных членов. Такой подход можно было бы назвать эмпирико-феноменологическим.

в) Табличное задание формы одиночной линии [20—22] — наиболее эмпирический подход к построению математической модели спектра. Для его осуществления необходимо располагать достаточно плотным набором чистых реперных линий по всему исследуемому энергетическому интервалу. Это условие наряду с повышенным расходом оперативной памяти на хранение стандартных таблиц несколько занижают очевидные достоинства метода.

Добавочные члены к (6) подбираются обычно на основе допущения, что главенствующую роль играет гауссово распределение, но «хвосты» его искажены в силу ряда причин (неполного собирания носителей, несовершенства электронной аппаратуры и т. п.). Было предложено много разных способов аналитического описания асимметрии аппаратурной линии (см., например, [23—26]). Обзор основных из них можно найти в работах [27—29], где проведена сравнительная оценка разных способов. Для этого были измерены одиночные линии полного поглощения со статистикой более чем 10^6 импульсов при фоне порядка нескольких сот событий на канал. Коэффициент усиления и ширина канала подбирались таким образом, чтобы полуширина пика полного поглощения была около 30—40 каналов. В указанных условиях поправки на интегрирование распределения сигналов в пределах одного канала анализатора становятся несущественными. Сравнение различных моделей асимметрии проводилось по критерию χ^2 при оптимальных значениях параметров и привело к следующим выводам: центральная часть пика полного поглощения хорошо описывается распределением Гаусса; асимметрия проявляется только в хвостах чистого гауссиана и при низких скоростях счета заметна только слева от максимума; асимметрию можно наиболее точно описать в виде двух аддитивных членов, условно назван-

ных функциями ступеньки и хвоста; полную функцию распределения сигналов вблизи максимума пика полного поглощения можно представить в виде

$$F(i) = G(i) + S(i) + D(i) + B(i), \quad (8)$$

где i — номер канала; $B(i)$ — линейный фон; гауссиан

$$G(i) = H_G \exp[-(i - i_0)^2 / 2\sigma^2], \quad (9)$$

функция ступеньки

$$S_i = (1/2) H_S [1 - \operatorname{erf}((i_0 - i) / \sigma \sqrt{2})], \quad (10)$$

функция хвоста

$$D(i) = \begin{cases} H_D \exp[(i - c) / \beta], & i \leq i_1; \\ H_D \exp[-(i - c)^2 / 2\delta^2], & i \geq i_1, \end{cases} \quad (11)$$

а i_1 — точка сшивания двух частей $D(i)$, причем

$$i_1 = c - 2\delta^2 / \beta. \quad (12)$$

Видно, что для полного описания асимметрии необходимо ввести пять дополнительных параметров. Для их точного определения пришлось сильно растянуть исследуемый спектр, а для расчета их начальных приближений применять специальную процедуру. В то же время основная физическая информация по-прежнему содержится в параметрах гауссиана. По этой причине такую полную трактовку формы одиночной линии полного поглощения можно рекомендовать только в случае особо прецизионных измерений. Быть может, в будущем ее можно будет применять и в рядовых спектроскопических исследованиях, в которых на сегодняшний день приходится довольствоваться полуширинами порядка десяти каналов.

г) В своих работах по обработке дискретных спектров на ЭВМ мы рано ориентировались на использование симметричного гауссиана (6) как представление формы одиночной линии [4, 10, 30—35]. Преимущества этой модели очевидны: четкая и однозначная физическая интерпретация параметров сочетается с простотой, имеющей первостепенное значение при программной реализации, особенно на малых ЭВМ. Ее недостаток, выразившийся в некотором несоответствии действительной форме аппаратурных линий и выглядевший на первых порах не менее очевидным, оказался явлением временным. Развитие техники производства полупроводниковых детекторов излучения, а также аналоговой и цифровой электроники привело к широкому распространению спектрометров с аппаратурным распределением сигналов, незначительно отличающимся от нормального. В указанном смысле можно утверждать, что к преимуществам модели (6) присоединилась и универсальность.

То, что модель симметричного гауссиана может с успехом использоваться в физических исследованиях, продемонстрировано с достаточной убедительностью большим количеством работ, выполненных с ее помощью (см., например, обзоры по программе ЯСНАПП ОИЯИ [36, 37], итоговую серию методических публикаций [38—43] и др.). Применимость модели к прецизионной спектроскопии γ -излучения показана в [44].

Построение математической модели спектра на данном фиксированном участке разбиения завершается добавкой членов, учитывающих фоновую подложку. Следуя оправдавшей себя традиции, будем представлять фон неким полиномом от номеров каналов. В этом представлении не нужно учитывать интегрирование фона в пределах одного канала преобразователя, поскольку определенное интегрирование полинома данной степени в пределах каждого канала приводит к полиному такой же степени *. Мы не будем ограничиваться представлением фона прямой, так как такое ограничение не позволяет учесть возможность попадания комптоновских максимумов от более высокоэнергетических линий в рассматриваемый участок. В общем случае как коэффициенты фонового полинома, так и его степень являются неизвестными. Коэффициенты полинома находятся в процессе решения нелинейной задачи для данного участка наряду с остальными неизвестными параметрами. Степень полинома можно определить по известным статистическим критериям [45] на основе серии обработок того же участка с разными фиксированными степенями. Впрочем, необходимость в таком детальном подходе к фону возникает сравнительно редко. Гораздо чаще физик, задающий начальные приближения, безошибочно угадывает подходящую степень на основе своего предыдущего опыта. Для большинства участков линейный фон действительно является наиболее подходящим; примерно в 10% случаев приходится аппроксимировать фон полиномами второй и третьей степени; случаи высших степеней чрезвычайно редки и к ним всегда следует относиться с осторожностью, так как поведение полиномов таких степеней достаточно свободно (и во всяком случае не соответствует физике обсуждаемых явлений), что может привести к искажению значений параметров спектра. В первую очередь это относится к линиям низкой интенсивности.

Формулировка нелинейной задачи обработки участка спектра. Подставляя явный вид (6) в уравнения системы (4), соответствующие участку (5), получаем после несложных преобразований окончательный вид системы нелинейных уравнений, которую необ-

* Действительно,

$$\int_{q-1}^q x^n dx = q^n - \frac{n}{2} q^{n-1} + \dots + (-1)^n.$$

ходимо решить, чтобы обработать данные участка:

$$Y_q = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^k S_i \left[J \left(\frac{q-p_i}{\sigma\sqrt{2}} \right) - J \left(\frac{q-p_i-1}{\sigma\sqrt{2}} \right) \right] + \sum_{j=0}^l a_j q^j, \quad (13)$$

где

$$q = q_{in}, q_{in} + 1, \dots, q_e \quad (14)$$

и принято обозначение интеграла ошибок

$$J(x) = \int_{-x}^x \exp(-u^2) du. \quad (15)$$

Смысл остальных символов: σ^2 — дисперсия одиночной линии; S_i — площадь пика i ; p_i — положение центра пика i ; k — число линий на участке; l — степень полинома; a_j — его коэффициенты. Число уравнений (13), очевидно, равно

$$m = q_e - q_{in} + 1, \quad (16)$$

а число неизвестных

$$n = 2k + l + 2, \quad (17)$$

причем

$$m \geq n. \quad (18)$$

Соотношения (13) — (18) представляют собой явный вид [12—14, 46] одной из однотипных нелинейных задач потока, возникающего при обработке дискретных спектров ядерных излучений.

1.6. Особенности потока задач дискретной спектрометрии. Мы уже указывали на некоторые общие свойства задач спектрометрии. Посмотрим теперь, как проявляются эти свойства в потоке, к которому была сведена исходная задача (1) для дискретного спектра.

а) Нелинейность каждой задачи потока обусловлена нелинейной зависимостью модели от параметров. Поэтому приходится прибегать к итерационной процедуре, которую начинают с некоторых начальных приближений неизвестных. Начальные приближения подбираются для отдельных задач индивидуально.

б) Переопределенность — число уравнений обычно превосходит число неизвестных. По причине переопределенности решают не исходную систему (13) на каждом участке разбиения, а соответствующую ей усредненную задачу, причем в качестве оператора усреднения берут производную (матрицу Якоби) правой части (13) [47]. Эта операция аналогична переходу от условных к нормальным уравнениям в случае метода наименьших квадратов.

в) Приближенность задач потока связана с принципиально неизбежным разбросом измеренных величин ΔY_q . В отсутствие

систематических ошибок разброс предполагают чисто статистическим. Разную степень точности уравнений (13) учитывают введением диагональной матрицы статистических весов W , элементы которой обратно пропорциональны квадратам величины разброса.

г) Плохая обусловленность линейных шагов процедуры решения — общее явление в потоках спектрометрических задач. Она может быть следствием любой из указанных ниже причин, а также их сочетаний.

1. Наличие на участке относительно очень слабых линий. В этом случае матрица линейного шага (см. далее) содержит столбцы, относительная величина которых много меньше остальных, и ее числовое обращение затруднено.

2. Наличие очень близких друг к другу линий примерно одинаковой интенсивности. При этом матрица линейного шага содержит пары почти линейно-зависимых столбцов [12]. Числовое обращение такой матрицы опять-таки затруднено.

Неточность исходных данных, хотя и не в состоянии сама по себе привести к плохой обусловленности, усугубляет действие указанных причин. К универсальному алгоритму решения задачи предъявляется требование распознавать случаи плохой обусловленности и принимать соответствующие меры для обеспечения устойчивости итерационного процесса.

д) Принципиальная возможность возникновения в потоке ограниченного числа полных задач на нахождение скрытых закономерностей [34]. Это значит, что в потоке может попасться настолько сложный участок (или несколько таких), что одной интуиции физика-оператора недостаточно для определения числа линий k на нем. В подобных случаях к алгоритму предъявляется очень жесткое требование определить объективно число искомых закономерностей.

Прежде чем перейти к составлению универсального алгоритма решения потока нелинейных задач, рассмотрим несколько смежных вопросов.

1.7. Итерационные процедуры решения систем нелинейных уравнений. Из множества существующих итерационных процедур (см., например, [48]), которыми можно воспользоваться для решения задачи (13) — (18), рассмотрим только те, которые действительно применяются в практике обработки данных дискретной спектрометрии. Введем обозначения:

$$Y = \text{col} \{Y_q\}_{q=q_{i_n}, q_{i_n+1}, \dots, q_e}, Y \in R^m; \quad (19)$$

$$x = \text{col} (\sigma, S_1, p_1, \dots, S_k, p_k, a_0, \dots, a_l), x \in R^n; \quad (20)$$

$F \in C^1$ — нелинейный оператор правой части (13), отображающий n -мерное евклидово пространство R^n на R^m . Тогда (13) записы-

ваается в виде

$$Fx - Y = 0, \quad (21)$$

или, обозначая,

$$Fx - Y = fx, \quad (22)$$

имеем

$$fx = 0. \quad (23)$$

Обозначим также производную оператора f через

$$f'(x) = [\partial f_\mu / \partial x_\nu] = [\partial F_\mu / \partial x_\nu], \quad (24)$$

где

$$\mu = 1, 2, \dots, m \quad (25)$$

и

$$\nu = 1, 2, \dots, n. \quad (26)$$

Для учета приближенного характера исходных уравнений (13) введем диагональную матрицу весов W , ненулевые элементы которой равны

$$w_{\mu\mu} = 1/(\Delta Y_\mu)^2. \quad (27)$$

Усредненная задача теперь принимает вид

$$\overline{f'(x)} Wfx = 0, \quad (28)$$

где черта над оператором является знаком транспонирования. Приближенным ее решением обычно считается тот вектор \tilde{x} , при котором функционал

$$\theta = \sqrt{\overline{f'xWfx}/(m-n)} \quad (29)$$

минимален. Смысл этого функционала — средневзвешенное квадратическое отклонение левой части (23) от нуля. Поэтому решение, удовлетворяющее критерию минимума θ , является также решением в смысле наименьших квадратов. Наличие нормировки по степеням свободы $m - n$ превращает квадрат значения θ в известный [45] статистический критерий χ^2 .

Используемые методы решения. Будем считать, что все рассматриваемые итерационные процессы решения (28) начинаются с некоторого начального приближения вектора неизвестных x^0 . Способ задания начальных приближений рассмотрен позднее (см. разд. 2).

а) Наиболее распространенным методом решения сформулированной задачи является метод Гаусса — Ньютона:

$$x^0: x^{t+1} = x^t - [V(x^t)]^{-1} \overline{f'(x^t)} Wfx^t, \quad (30)$$

где матрица линейного шага

$$V(x^t) = \overline{f'(x^t)} Wf'(x^t), \quad (31)$$

а верхний индекс t — номер итерации. Второй член в (30) называется вектором линейного шага изменения неизвестных.

Достоинство метода — быстрая сходимость (не хуже линейной) вблизи точки решения, а основной недостаток — малость радиуса сходимости. Этот метод широко используется в обработке дискретных спектров [20, 49—51], хотя его успешное применение в большой степени зависит от удачного задания x^0 [50]. Заметим, что учет такой априорной информации, как ограничения на область изменения параметров и т. п. [26], вообще говоря, улучшает сходимость, но не гарантирует ее. Из-за особенностей потока задач, обсуждавшихся ранее, метод Гаусса — Ньютона часто расходится и в принципе не пригоден для решения полной задачи на отыскание скрытых закономерностей.

б) Стремление добиться сходимости итерационного процесса и тогда, когда (30) расходится, привело к ряду модификаций метода Гаусса — Ньютона.

1. Демпфирование линейного шага процесса, которое осуществляется путем умножения вектора линейного шага на положительную константу, меньшую единицы (иногда на диагональную матрицу демпфирующих коэффициентов, различных для отдельных компонент вектора). Эта модификация использовалась, например, в работе [52]; ее нельзя назвать универсальной, и, кроме того, она сильно замедляет скорость сходимости указанного процесса.

Особого рода демпфирование путем мультипликативной регуляризации использовалось в [21]. В дополнение к недостаткам, указанным выше, мультипликативная регуляризация невыгодна и потому, что она изменяет в наибольшей степени именно те элементы матрицы линейного шага V , которые менее всего в том нуждаются.

2. Поддержание положительной определенности матрицы линейного шага V , что позволяет выполнить итерацию даже в случае плохо обусловленного шага. Шире других использовался метод Левенберга—Маркуардта — своего рода аддитивная регуляризация процесса, причем величина аддитивного члена находится с помощью эмпирических правил. Подобный алгоритм реализовался, например, в работах [53, 54].

в) Трудности, встречаемые в реализации метода Гаусса—Ньютона, побудили некоторых авторов воспользоваться так называемыми квазиньютоновскими методами или методами переменной метрики. В этих методах матрица линейного шага V не вычисляется, а сразу строится обратная матрица V^{-1} , начиная с некоторого начального приближения и улучшая его на каждой итерации. Один из этих методов реализовался в программах [17, 55]. Недостатками методов переменной метрики следует считать замедленную сходимость при большом числе неизвест-

ных и принципиальную непригодность для решения полной задачи нахождение скрытых закономерностей.

г) Помимо указанных методов использовался также метод статистической подгонки [56—59]. Он представляет собой разновидность классического прямого поиска путем проб и ошибок с применением ряда вспомогательных мер, направленных на ускорение продвижения блуждающего вектора x к точке решения \tilde{x} . Оценка ошибок искомых параметров в указанном методе, конечно, тоже чисто статистическая.

Статистической подгонкой параметров обрабатываемого спектра минимизируем непосредственно функционал (29), не прибегая к его производным. Главное достоинство такой подгонки заключается в экспрессности, даже при реализации на малых и средних ЭВМ, из-за чего она может быть очень полезной при контроле за ходом физического эксперимента. В то же самое время метод статистической подгонки встречает характерные затруднения в обработке участков, содержащих повышенное число перекрывающихся линий или комбинацию линий, резко отличающихся по интенсивности. Поэтому на базе обсуждаемого метода нельзя построить требуемый универсальный алгоритм решения потока однотипных линейных задач дискретной спектрометрии.

Регуляризованные итерационные процессы. Содержание предыдущего раздела в достаточной мере иллюстрирует те характерные трудности, которые надо преодолеть на пути к созданию универсального алгоритма решения потока однотипных нелинейных задач, порождаемых дискретной спектрометрией. Аналогичные трудности присущи и другим задачам.

Для широкого класса некорректно поставленных задач в работах школы А. Н. Тихонова (см., например, [1]) был развит метод регуляризации построения приближенных решений. В некоторых работах [9, 15, 47, 60—63] Л. Александровым разработаны и обоснованы регуляризованные итерационные процессы (R -процессы) для решения систем нелинейных уравнений. Из множества R -процессов особенно подходящим для потока задач дискретной спектрометрии является процесс типа ERP с экспоненциально убывающим регуляризатором. Он осуществляется по схеме [15, 61]

$$x^0: x^{t+1} = x^t - [V(x^t) + \alpha^t I]^{-1} \overline{f'(x^t)} W f x^t, \quad (32)$$

где

$$\alpha^t = \alpha^0 \exp(-rt), \quad (33)$$

а α^0 и r — положительные константы; I — единичная матрица.

Во избежание преждевременного прерывания R -процесса по достижении первого (возможно, локального) минимума функционала (29) критерием выхода из него является не минимум вели-

чины θ , а минимум поведенческого параметра [14, 61]:

$$\Theta_s^t = \sum_{i=1}^s \rho_i \theta^{t-i+1}, \quad t \geq s-1, \quad (34)$$

где

$$\theta^t = \theta(x^t), \quad (35)$$

а ρ_i — положительные весовые коэффициенты, сумма которых нормирована к единице:

$$\sum_{i=1}^s \rho_i = 1. \quad (36)$$

Величину Θ_s^t будем называть длиной невязкой или, точнее, невязкой длиной в s итераций. Очевидно, весовые коэффициенты можно подобрать так, чтобы при монотонном невозрастании θ^t критерии минимума величин (29) и (34) удовлетворялись на одной и той же итерации.

Оценки наследственных погрешностей искомым параметром производятся одним и тем же способом [15, 45] как в случае процесса (30), так как и для R -процесса (32). Чисто статистические погрешности рассчитываются по формуле

$$\varepsilon_v^{\text{стат}} = V [V(\tilde{x})^{-1}]_{vv}, \quad (37)$$

а более реальные «полные» ошибки, учитывающие также неточность принятой модели, — следующим образом:

$$\varepsilon_v^{\text{полн}} = \varepsilon_v^{\text{ст}} \theta(\tilde{x}). \quad (38)$$

При решении полной задачи нахождение скрытых закономерностей матрица $V(\tilde{x})$ заведомо вырождена и оценка (37) невыполнима. В таких случаях ее можно заменить на подобную оценку, где вместо оператора $V(\tilde{x})$ используется регуляризованный оператор $V(\tilde{x}) + \tilde{\alpha}I$ ($\tilde{\alpha}$ — величина регуляризатора на той итерации, где было достигнуто решение \tilde{x}). Это приводит к искаженным значениям $\varepsilon_v^{\text{ст}}$, по крайней мере, для параметров «лишних» закономерностей. Поскольку стратегия решения полной задачи предусматривает повторную обработку участка с исправленным числом искомым закономерностей, искаженные оценки ошибок не являются окончательными и корректируются впоследствии.

R -процесс в состоянии преодолеть все трудности, указанные выше. Его единственный недостаток — незначительное снижение скорости сходимости по сравнению с методом Гаусса—Ньютона, особенно на начальных итерациях, где регуляризатор еще велик и действует как демпфер. По нашим оценкам, R -процесс приводит к решению в среднем за 7—10 итераций и замедление сходимости полностью скомпенсировано его уникальными положительными,

качествами. Естественно, что R -процесс должен занять центральное место в универсальном алгоритме решения задач возникшего потока.

Регуляризованный итерационный процесс с экспоненциально убывающим регуляризатором был реализован впервые в программе КАТОК [4, 10, 33]. Позднее были разработаны усовершенствованный вариант программы на ФОРТРАНе [12—14], а также программа КОЛОВОК [46], в которой используется авторегуляризованный итерационный процесс ARP, реализованный в программном пакете общего назначения REGN—СФМРIL [15].

1.8. Обусловленность итерационных шагов и перенормировка операторов в пространствах R^n и R^n . Мы уже отмечали, что линейные шаги итерационного процесса, по которому решаются отдельные задачи потока, как правило, являются плохо обусловленными. Количественной мерой обусловленности n -мерной линейной задачи

$$Ax = b$$

является число обусловленности [64] матрицы A :

$$\text{cond } A = \|A\| \cdot \|A^{-1}\|, \quad (39)$$

где $\|A\|$ — некая норма матрицы A . Для евклидовых норм, которыми мы будем пользоваться в настоящей работе,

$$\text{cond } A = g_1/g_n, \quad (40)$$

где g_1 и g_n — наибольшее и наименьшее из сингулярных чисел матрицы. Известно [64], что число обусловленности ограничивает сверху перенос относительных ошибок правой части исходной системы на вектор решения (при точной матрице):

$$\|dx\|/\|x\| \leq \text{cond } A \|db\|/\|b\|, \quad (41)$$

а также перенос относительных ошибок матрицы задачи на вектор решения (при точном свободном члене):

$$\|dx\|/\|x\| \leq \text{cond } A \|dA\|/\|A\|. \quad (42)$$

Поскольку в численных расчетах на ЭВМ присутствуют по меньшей мере ошибки округления [65] (а на практике всегда имеется и множество дополнительных источников ошибок), то из оценок (41) и (42) следует, что имеет смысл пытаться понизить число обусловленности решаемых задач путем подходящего преобразования. Это преобразование не должно быть ортогональным, так как число обусловленности инвариантно относительно ортогональных преобразований в евклидовой метрике.

Простейшие преобразования такого типа представлены классом неортогональных невырожденных диагональных матриц. Они широко используются в вычислительной практике и обычно

называются преобразованиями перемасштабирования (scaling). Мы предпочитаем использовать термин «перенормировка», так как эти преобразования существенным образом меняют нормы преобразуемых векторов и согласованные с ними нормы операторов. Подходящий выбор коэффициентов перенормировки может заметно понизить числа обусловленности участвующих в процессе матриц, в чем и состоит смысл применения этих преобразований.

Например, для произвольной невырожденной действительной (2×2) -матрицы

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad (43)$$

можно выразить сингулярные числа в явном виде как положительные квадратные корни из собственных значений положительной-определенной симметричной матрицы $A\bar{A}$, откуда получаем

$$\text{cond } A = \sqrt{\frac{\text{Sp}(A\bar{A}) + \sqrt{\text{Sp}^2(A\bar{A}) - 4 \det^2(A\bar{A})}}{\text{Sp}(A\bar{A}) - \sqrt{\text{Sp}^2(A\bar{A}) - 4 \det^2(A\bar{A})}}}, \quad (44)$$

где

$$\text{Sp}(A\bar{A}) = a_{11}^2 + a_{12}^2 + a_{21}^2 + a_{22}^2 \quad (45)$$

и

$$\det(A\bar{A}) = (a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})^2. \quad (46)$$

При помощи неравенства Коши нетрудно убедиться, что разность $\text{Sp}^2(A\bar{A}) - 4 \det^2(A\bar{A})$ всегда положительна, т. е. число обусловленности действительно и положительно. Умножение матрицы A справа на диагональную матрицу перенормировки типа

$$D = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & k \end{pmatrix} \quad (47)$$

приводит к изменению ее следа и определителя:

$$\text{Sp}(A'\bar{A}') = a_{11}^2 + a_{21}^2 + k^2(a_{12}^2 + a_{22}^2); \quad (48)$$

$$\det(A'\bar{A}') = k^2(a_{11}a_{22} - a_{12}a_{21})^2, \quad (49)$$

где

$$A' = AD. \quad (50)$$

Подставив (48) и (49) в (44), можно получить явный вид зависимости числа обусловленности от коэффициента перенормировки (легко видеть, что число обусловленности зависит только от отношения диагональных элементов матрицы перенормировки, так что вид (47) не меняет общности рассмотрения). Исследование

указанной зависимости показывает, что при

$$k = k_0 = \sqrt{\frac{a_{11}^2 + a_{21}^2}{a_{12}^2 + a_{22}^2}} \quad (51)$$

имеется минимум, равный

$$\text{cond } A' (k_0) = \sqrt{(1 + |\cos Z|)/(1 - |\cos Z|)}, \quad (52)$$

где

$$|\cos Z| = \sqrt{(a_{11}a_{12} + a_{21}a_{22})^2 / (a_{11}^2 + a_{21}^2)(a_{12}^2 + a_{22}^2)}, \quad (53)$$

а угол Z можно рассматривать как угол между векторами столбцов исходной матрицы A в базисе до преобразования перенормировки. Следовательно, только в случае ортогональности этих векторов (например, при $a_{12} = a_{21} = 0$ или при $a_{11} = a_{22} = 0$) можно добиться, чтобы число обусловленности стало равным единице. Во всех иных случаях изменение числа обусловленности в результате преобразования (50) ограничено снизу выражением (52).

Величину k_0 можно рассматривать как степень уравновешенности матрицы A по столбцам; тогда преобразование (50) с $k = k_0$ переводит исходную матрицу A в максимально уравновешенную по столбцам матрицу A' , насколько это возможно при данных значениях элементов A . Таким же путем можно вывести формулы, аналогичные (51)–(53), для случая перенормировки и уравновешивания по строкам, что происходит при умножении A' слева на другую диагональную матрицу D' . Кстати, эти формулы идентичны (51)–(53) с перестановкой элементов a_{12} и a_{21} .

Приведем численный пример. Пусть дана матрица

$$A = \begin{pmatrix} 1.01\text{E}00 & 2.59\text{E}-3 \\ 5.09\text{E}-2 & 1.34\text{E}-4 \end{pmatrix}.$$

Ее определитель $\det A = 3.509\text{E}-5$, а число обусловленности $\text{cond } A = 3.28104\text{E} + 5$ (с точностью до шести значащих цифр). Оптимальная перенормировка A получается по (51) при $k_0^* = 3.89935\text{E} + 2$, и тогда она переходит в

$$A' = \begin{pmatrix} 1.01\text{E}00 & 1.00993\text{E}00 \\ 5.09\text{E}-2 & 5.22513\text{E}-2 \end{pmatrix}$$

с числом обусловленности $\text{cond } A' = 1.49435\text{E} + 3$. Аналогично, проводя оптимальную перенормировку A' слева при $k_0^* = 1.95805\text{E} + 1$, получаем

$$A'' = \begin{pmatrix} 1.01000\text{E}00 & 1.00993\text{E}00 \\ 9.96650\text{E}-1 & 1.02311\text{E}00 \end{pmatrix},$$

у которой $\text{cond } A'' = 1.52284\text{E} + 2$, т. е. более чем на три порядка ниже числа обусловленности матрицы A .

Если мы работаем на десятичной ЭВМ и хотим избежать дополнительных ошибок округления, связанных с перенормировкой, то нужно положить $k_{10}^{r,l} = 10^{\text{INT}(\log k_0^{r,l} + 0,5)}$, что в нашем случае дает соответственно 1000 справа и 10 слева. После перенормировки матрица A принимает вид

$$A''_{10} = \begin{pmatrix} 1.01E00 & 2.59E00 \\ 5.09E-1 & 1.34E00 \end{pmatrix}$$

и ее число обусловленности падает до 279, что несколько хуже минимального значения 152.

На двоичных ЭВМ в тех же целях следует брать $k_2^{r,l} = 2^{\text{INT}(\log_2 k_0^{r,l} + 0,5)}$. Для матрицы A эти коэффициенты будут 512 справа и 16 слева, сама она преобразуется в

$$A''_2 = \begin{pmatrix} 1.01000E00 & 1.32608E00 \\ 8.14400E-1 & 1.09773E00 \end{pmatrix},$$

а число обусловленности падает до $1.61647E + 2$, что уже очень близко к минимуму. Это и понятно: целые степени двух образуют более густую сетку, чем целые степени десяти, а поэтому «двоичная» перенормировка является почти оптимальной.

Итак, из рассмотрения двумерных квадратных действительных невырожденных матриц можно сделать следующие выводы.

1. Возможно добиться изменения числа обусловленности этого класса матриц при помощи диагонального неортогонального преобразования перенормировки справа и слева, т. е. по столбцам и по строкам.

2. Возможность понижения числа обусловленности при перенормировке связана с уравновешенностью преобразуемой матрицы по столбцам и по строкам.

3. Если преобразуемая матрица не уравновешена по столбцам и по строкам, то оптимальная перенормировка справа и слева приводит к минимуму числа обусловленности преобразованной матрицы.

4. Численное значение минимума допускает простую геометрическую интерпретацию.

5. В практике решения конкретных задач на ЭВМ можно проводить перенормировку, близкую к оптимальной, модифицируя только порядки элементов преобразуемых матриц, без ввода дополнительных ошибок округления. Ввиду точной обратимости такая перенормировка может оказаться очень полезной.

Насколько нам известно, не существует доказательства верности этих выводов в общем случае n -мерных квадратных матриц. Тем не менее их простота и геометрическая естественность наводят на мысль, что такое доказательство возможно в принципе,

а накопленный опыт практического применения этих выводов (см. разд. 2) является дополнительным аргументом в пользу их справедливости.

Прежде чем перейти к обсуждению особенностей перенормировки нелинейных переопределенных задач типа (23), выясним вопрос о том, какой из источников плохой обусловленности линейных шагов (см. п. 1.6) можно обойти при помощи преобразования перенормировки. Ясно, что близость положений отдельных линий спектра, из-за которой пара (или пары) столбцов матрицы линейного шага близка к линейной зависимости, приводит к малости многомерного аналога угла Z и, таким образом, не подвержена влиянию перенормировки. Отличия же в амплитудах линий спектра можно преодолеть, если для каждой линии ввести свою собственную единицу измерения. Следовательно, перенормировка задач потока может дать нам возможность обрабатывать участки спектра так, как будто все линии в них имеют примерно одну и ту же интенсивность.

Это — очень важное облегчение. Собственно говоря, при отказе от такой перенормировки нерегуляризованный метод Ньютона становится в реальных условиях практически бесполезным.

Вернемся теперь к уравнению (23). Положим

$$x = Cz, \quad (54)$$

где матрица перенормировки имеет вид

$$C = \text{diag}(c_1, c_2, \dots, c_n). \quad (55)$$

Если обозначим через G нелинейный оператор, переводящий $z \in R^n$ в $Gz \in R^m$, то вместо (23) получим новое уравнение

$$Gz = 0, \quad (56)$$

причем, как легко видеть, его производная

$$G'(z) = [\partial G_\mu / \partial z_\nu] = [(\partial f_\mu / \partial x_\nu) (\partial x_\nu / \partial z_\nu)] = f'(x) C. \quad (57)$$

Все выражения и оценки (19)—(38) сохраняют силу, если в них подставить z , Gz и $G'(z)$ вместо x , fx и $f'(x)$ соответственно. Заметим, что преобразование (54) привело к перенормировке прямоугольной матрицы $f'(x)$ справа, т. е. по столбцам в пространстве R^n , тогда как элементы пространства R^m (вектор Y и нуль-векторы из уравнений (23) и (56) так же, как и векторы fx и Gz) остались без изменений. Следовательно, величина невязки θ инвариантна относительно проведенного преобразования вектора неизвестных.

В принципе возможно было бы провести перенормировку и по компонентам векторов в пространстве R^m . Сам вид уравнения

(23) подсказывает, однако, что эти компоненты одинаковы по порядку, а использование матрицы весов еще больше скрадывает различия между ними. Значит, для типа задач, составляющих решаемый нами поток, перенормировка в R^m не необходима. Уравновешенность же матрицы $G'(z)$ по столбцам приводит к матрице линейного шага, которая уравновешена как по столбцам, так и по строкам — в силу самого способа построения $V(z)$ из $G'(z)$ [см. (31)].

Преобразование (54) допускает также интересную интерпретацию в терминах метрики дуальных пространств R^n и R^m . В самом деле, дифференциал невязки можно представить в виде

$$d\theta = \overline{W} f_x f'(x) dx / (m - n) \theta(x) = \overline{W} G_z G'(z) dz / (m - n) \theta(z). \quad (58)$$

Знаменатели дробей слева и справа в тождестве (58) идентичны, а числители можно рассматривать как скалярные произведения пар дуальных векторов с метрическими тензорами $f'(x)$ и $G'(z)$ соответственно. Чем сильнее разнятся между собой элементы метрических тензоров, тем в большей степени анизотропны соответствующие пары дуальных пространств. Перенормировка понижает анизотропию и тем самым облегчает ход итерационного процесса, заставляя его протекать в менее «сплюсненном» пространстве, или, иными словами, она делает анизотропию соизмеримой с точностью представления чисел в ЭВМ.

Нам еще осталось ответить на вопрос, сколько раз следует проводить перенормировку, решая данную нелинейную задачу, — один раз в начале итерационного процесса, на каждой итерации или же как-нибудь по-иному? Ответить на него сравнительно легко.

Современные ЭВМ работают обычно с точностью, эквивалентной шести-семи десятичным значащим цифрам. Сохраняя некоторое количество разрядов для расчетов с разумными ошибками округления, можно, по-видимому, еще мириться с матрицей линейного шага, чьи элементы разнятся между собой на три-четыре десятичных порядка. Это предоставляет нам возможность строить матрицу производной (матрицу Якоби) из элементов с максимальными отличиями, не превышающими полутора-двух десятичных порядков. Если проводить первую перенормировку до начала итерационного процесса по значениям компонентов вектора начальных приближений и если эти компоненты удалены от компонентов решения не более, чем на два десятичных порядка, то первая перенормировка вполне может остаться единственной для данной задачи. В противном случае становится желательным, а подчас и необходимым проведение второй, если вектор неизвестных ушел достаточно далеко от начальных приближений.

2. УНИВЕРСАЛЬНЫЙ АЛГОРИТМ РЕШЕНИЯ ПОТОКОВ НЕЛИНЕЙНЫХ ЗАДАЧ ДИСКРЕТНОЙ СПЕКТРОМЕТРИИ

Напомним, что к моменту применения универсального алгоритма измерения считаются законченными, а накопленная и отсортированная информация доступна для непосредственного использования на ЭВМ, т. е. спектр или спектры записаны в оперативной или периферийной памяти.

2.1. Предварительная обработка «сырых» экспериментальных данных. Предварительная обработка есть не что иное, как необходимая подготовка к вычислению искомых параметров спектра. Попытки автоматизации этого этапа предпринимались многими авторами; хороший обзор достигнутых результатов и основных направлений развития автоматического поиска пиков и разбиения спектра на участки сделан в [66]. На наш взгляд, ни одно из предложенных решений не может считаться удовлетворительным для целей исследовательской спектроскопии, хотя многие из них вполне пригодны для прикладных задач (например, в активационном анализе), где характер измеряемых спектров хорошо изучен или же условия измерения (статистика, смесь изотопов и т. п.) варьируют в относительно небольших пределах. Методы автоматического поиска пиков, например, могут «работать» хорошо или плохо в зависимости от задаваемого извне параметра чувствительности. Слишком низкий порог чувствительности приводит к «отысканию» несуществующих паразитных линий, а слишком высокий — к пропуску линий малой интенсивности. Для любого конкретного спектра можно найти эмпирическим путем оптимальное значение величины порога, но мы имеем довольно смутное представление о том, как зависит порог от условий измерения. Существующая ситуация, вообще говоря, вполне естественна. Поиск пиков обычно ведется по формальным параметрам, чей расчет к тому же некорректен (например, численное дифференцирование спектра), и от него нельзя ожидать большего. Можно утверждать, что задача автоматического поиска пиков аналогична задаче распознавания образов, а это достаточно сложная и пока еще отнюдь не решенная проблема.

Поэтому на данном этапе мы считаем целесообразным отказаться от полной автоматизации предварительной обработки дискретных спектров и сосредоточить внимание на полуавтоматическом ее варианте, осуществляемом при помощи дисплея в режиме диалога человека с ЭВМ. Нам кажется, что такой подход наилучшим образом соответствует современному уровню наших возможностей и позволяет подключить к процессу предварительной обработки такие человеческие (и на сегодня непрограммируемые) качества, как воображение, интуиция, способность распознавать образы, самообучение за счет накопленного опыта и т. п.

Большинство математических операций при такой предварительной обработке спектров элементарны и поддаются описанию без помощи формул. Обычно она осуществляется на малой ЭВМ, хотя не исключено и использование мощной машины в мультипрограммном режиме (на практике это бывает реже). Наше рассмотрение основывается на допущении, что каждую отдельную задачу формируемого потока можно считать задачей нахождение скрытых закономерностей [34, 67]. Это не является ограничением; более того, спектрометрические задачи — типичные представители указанного класса, а закономерностью здесь следует считать каждую из линий (пиков) обрабатываемого спектра.

В наиболее общих чертах алгоритм предварительной обработки в выбранном варианте включает следующие этапы:

- 1) изобразить спектр на экране дисплея (целиком или частями);
- 2) выделить из спектра участок, содержащий изолированное скопление линий;

- 3) для выделенного участка указать число искомым закономерностей, степень фонового полинома и начальные приближения неизвестных;

- 4) построить из исходных данных участка и из данных предыдущей операции стандартный массив, содержащий результаты предварительной обработки участка;

- 5) записать стандартный массив в периферийной памяти машины (или передать его по линии связи на другую ЭВМ) для дальнейшей окончательной обработки;

- 6) если все участки данного спектра исчерпаны, то предварительная его обработка окончена; если нет, то вернуться к первой операции последовательности.

Некоторые из перечисленных операций элементарны и вряд ли нуждаются в более подробном обсуждении. Поэтому мы ограничимся только рассмотрением двух из них: способа задания начальных приближений и структуры стандартного массива. Кроме того, обсудим и вопрос о языке общения с ЭВМ в ходе предварительной обработки [67].

а) *Задание начальных приближений* с помощью точечного дисплея сводится к указанию нескольких характерных точек для каждой искомой закономерности. Указание или выделение этих точек из множества таковых, составляющих графический образ, осуществляется оператором, который руководствуется своим опытом, интуицией и т. п. В этом случае начальные приближения можно выразить как элементарные функции координат характерных точек.

Число характерных точек, необходимых для вычисления начальных приближений одной искомой закономерности, называется кратностью характерных точек. Отметим, что кратность не обязательно равна числу параметров, которые определяют данный тип

закономерности. В случае обработки дискретных спектров с использованием гауссовой модели (6) формы одиночной линии каждая закономерность определяется тремя параметрами: амплитудой (площадью) линии, ее положением и полушириной. В то же самое время для расчета их начальных приближений достаточно знать координаты двух характерных точек: одну в максимуме предполагаемого пика и одну справа или слева от максимума — там, где, по мнению физика-оператора, пик «кончается» (т. е. тонет в фоне). Иными словами, кратность характерных точек равна двум.

Пусть координаты максимума и минимума i -го пика, «увиденного» оператором на экране дисплея (пользуемся кавычками, так как оператор может заметить или просто заподозрить существование линии там, где ее не видно в буквальном смысле слова), равны соответственно $(q_i^{\text{макс}}, Y_i^{\text{макс}})$ и $(q_i^{\text{мин}}, Y_i^{\text{мин}})$. Тогда за начальные приближения можно принять величины:

$$h_i^0 = |q_i^{\text{макс}} - q_i^{\text{мин}}|; \quad (59)$$

$$S_i^0 = |q_i^{\text{макс}} - q_i^{\text{мин}}| |V_i^{\text{макс}} - V_i^{\text{мин}}|; \quad (60)$$

$$P_i^0 = q_i^{\text{макс}}. \quad (61)$$

Далее, поскольку мы считаем (см. разд. 1.4), что полуширина одинакова для всех линий данного участка (строго говоря, почти одинакова), то естественно принять

$$h^0 = \frac{1}{k} \sum_{i=1}^k h_i^0, \quad (62)$$

а тогда дисперсию гауссовой кривой можно найти из (7).

Осталось найти начальные приближения коэффициентов фонового полинома. Для этого достаточно сообщить машине, какую степень полинома оператор считает наиболее подходящей, не указывая дополнительных характерных точек. Тогда можно положить:

$$a_0^0 = \min \{V_q\}_{q=q_{in}, q_{in}+1, \dots, q_e}; \quad (63)$$

$$a_1^0 = a_2^0 = \dots = a_k^0 = 0. \quad (64)$$

Определение вектора начальных приближений на участке, содержащем три пика разной интенсивности на фоновой подложке в виде полинома второй степени, показано на рис. 1. Из координат, помеченных оператором, характерных точек:

мин. 1 (551, 1213); макс. 1 (557, 1369);

мин. 2 (560, 1341); макс. 2 (565, 1616);

мин. 3 (577, 749); макс. 3 (570, 2316)

получаем по формулам (59)—(64) компоненты вектора начальных приближений

$$x^0 = \text{col}(2,55; 936; 557; 1375; 565; 10969; 570; 600; 0; 0),$$

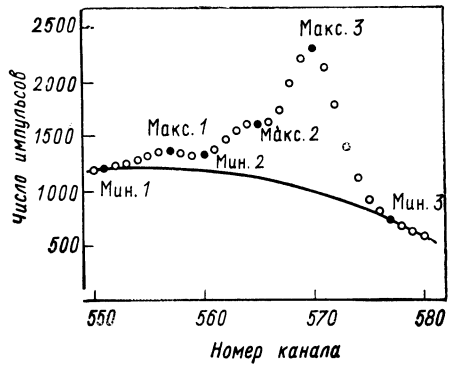
где порядок параметров такой же, как в (20). Точное решение задачи этого искусственного примера известно:

$$(2,2; 800; 557,5; 2400; 564,5; 7200; 570,5; 1209; -8; -1),$$

а из сравнения двух векторов видно, что некоторые компоненты вектора начальных приближений довольно далеки от соответствующих истинных значений, хотя по порядку величины они близки к ним. Исключение составляют последние два коэффициента

Рис. 1. К определению начальных приближений при помощи точечного дисплея (искусственный пример).

Помеченные оператором максимумы и минимумы трех линий обозначены черными точками, а фон изображен непрерывной линией и представлен полиномом второй степени. Численные значения компонентов вектора начальных приближений приведены в тексте



фонового полинома, что нарушает условие однократной перенормировки задачи (см. разд. 1.8), но это нарушение кажущееся, так как перенормировку по переменным фона можно проводить независимо от их начальных приближений [12—14, 46]. Заметим, что начало фонового полинома в примере сдвинуто на девять каналов правее начала участка, т. е. находится в канале 559.

Задание вектора начальных приближений на дисплее — простая, но довольно грубая операция. Тем не менее, располагая мощным алгоритмом решения систем нелинейных уравнений, можно найти точку решения и в этих условиях. Вряд ли имеет смысл пытаться уточнить начальные приближения путем усложнения предварительной обработки [привлечение дополнительных характерных точек, уточнение формул (59)—(64) и т. п.]. Количество затрат в этом направлении не оправдывается соответствующим уточнением неизвестных. К тому же алгоритмы, основанные на регуляризованных итерационных процессах, способны справиться с задачами потока при описанной точности начальных приближений.

б) Структура стандартного массива, в который входят как исходные данные участка (т. е. координаты точек спектра), так и результаты предварительной обработки (координаты групп характерных точек соответствующей кратности, выбранная степень фонового полинома и т. п.), является вопросом соглашения. Любой формат, который понятен программе окончательной обработки участков, может считаться приемлемым. И все же ввиду массовости задачи и большого числа обрабатываемых участков следует позаботиться о разумной организации формата с тем, чтобы его структура сочетала простоту с гибкостью, а также чтобы более экономно расходовалась доступная память.

Таблица 1

Номера байтов	Содержание
$1 \div 2$ $3 \div 66$ $67 \div 68$ $69 \div 70$ $71 \div 72$ 73 74 75 76 $77 \div 80$ $81 \div 80 + mv$ $81 + mv \div 80 + m(v + y)$ $81 + m(v + y) \div 80 + (m + Hk)(v + y)$ $81 + (m + Hk)(v + y)$	<p>Общая длина L стандартного массива, выраженная в байтах и записанная как двоичное целое число</p> <p>Идентификатор массива</p> <p>m — длина участка в каналах</p> <p>n — число искомых параметров</p> <p>k — число искомых закономерностей</p> <p>l — степень фонового полинома</p> <p>H — кратность характерных точек</p> <p>v — длина одной абсциссы в байтах</p> <p>y — длина одной ординаты в байтах</p> <p>Запасные (для служебной информации)</p> <p>m последовательных абсцисс, каждая длиной в v байт</p> <p>m ординат в том же порядке, что и абсциссы, каждая длиной в y байт</p> <p>k групп из $H(v + y)$ байтов каждая; первые v байт в группе представляют собой абсциссу, а следующие за ними y — ординату соответствующей характерной точки</p> <p>Контрольный байт, дополняющий циклическую сумму массива до 377_8 или 11111111_2</p>

Одно из возможных решений этого вопроса представлено в табл. 1. Указанная форматная структура [67] сочетает в себе: байтовые элементы, являющиеся наименьшей адресуемой единицей памяти большинства современных ЭВМ;

переменную длину, позволяющую экономно располагать следующие друг за другом стандартные массивы в периферийной памяти ЭВМ;

возможность контроля передаваемой информации по байтовой циклической сумме (а при подходящем выборе рабочего кода — и по четности каждого байта);

независимость от рабочего кода;
 возможность передачи как целых чисел, так и чисел с плавающей точкой.

Еще более экономную структуру можно построить, если отказаться от записи всех абсцисс в стандартном массиве и включить в него только начальный номер канала на участке при постоянном шаге абсциссы в один канал (в этом случае теряется возможность пропуска тех каналов, которые резко выпадают из спектра по аппаратным причинам).

Очевидно, общая длина стандартного массива в формате табл. 1 выражается в байтах следующим образом:

$$L = 81 + (m + Hk)(v + y). \quad (65)$$

Например, для участка на рис. 1 при $v = 3$ и $y = 4$ (ASCII-код), получаем $81 + (31 + 2 \times 3) \times (3 + 4) = 340$ байтов.

Частные случаи подобного формата были реализованы на ЭВМ Минск-2 [68] (где в силу особенностей архитектуры ЭВМ использована постоянная длина массива в 400₈ слов), а также на малых ЭВМ HP-21MX, ИЗОТ-310 и ЕС-1010 [12—14, 46] (при переменной длине с использованием кода ASCII).

Последовательность стандартных массивов, являющаяся выходной информацией алгоритма предварительной обработки и соответствующая разбиению исходного спектра на участки, поступает на вход программы, которая реализует алгоритм решения потока нелинейных задач.

в) *Язык общения с ЭВМ* в процессе предварительной обработки должен быть как можно более удобным для оператора, а также максимально приспособленным к типу решаемой задачи. Отсюда вытекает требование о его простоте. Команды языка можно разделить на две группы.

1. Необходимые команды:

- подсветка точек спектра (нескольких или одной, по выбору);
- сдвиг изображения налево или направо по спектру;
- отметка начала участка;
- отметка конца участка;
- отметка характерных точек необходимой кратности для одной искомой закономерности;
- указание степени фонового полинома;

построение и вывод стандартного массива данных участка (построение ведется по мере выполнения предыдущих команд, а последняя только осуществляет вывод).

2. Дополнительные команды, предоставляющие больше удобства оператору:

- сглаживание выпадающей точки по значениям ординат ее соседей;

- гашение дополнительной подсветки;

вызов на экран следующей секции спектра (если спектр вводится в оперативную память по секциям, эта команда должна перейти в группу 1);

команда смещения маркеров (т. е. точек с дополнительной подсветкой);

команды перемены масштаба по оси Y с линейного на логарифмический, и наоборот;

пропуск выпадающей точки (альтернатива сглаживания);

сброс системы;

установка значения кратности характерных точек;

ввод идентификатора спектра (с автоматической нумерацией участков по порядку их вывода) и т. п.

Более подробное описание команд языка представлено в [67].

Подачу отдельной команды можно осуществлять схемным путем (например, с помощью светового карандаша, указывая им на изображения световых клавиш на экране) или же программным дешифратором команд (пользуясь мониторной клавиатурой). Чтобы запретить выполнение команд, поданных оператором в нарушение правильной последовательности предварительной обработки участка, целесообразно ввести квадратную «матрицу синтаксиса» языка. Число строк и столбцов матрицы равно числу команд языка, причем строки соответствуют последней поданной команде, а столбцы — той, которая за ней следует. Элементы матрицы равны единице, если соответствующая последовательность команд допустима, и нулю, если последовательность запрещена. Таким образом, машина получает возможность следить за правильностью подаваемых команд, что, конечно, не гарантирует безошибочность предварительной обработки, зато полностью исключает чисто технические ошибки.

2.2. Решение отдельных нелинейных задач потока в автоматическом режиме. Приступим теперь к рассмотрению центральной и наиболее существенной части универсального алгоритма, осуществляющей решение отдельных нелинейных задач сформированного потока в автоматическом режиме. Входной информацией на этом этапе является последовательность стандартных массивов, а выходной — значения искомым параметров спектра (20) и их наследственных ошибок (38). Общая стратегия алгоритма выглядит следующим образом [12, 33]:

к очередной задаче потока применяется метод Гаусса—Ньютона;

при обнаружении расходимости итерационного процесса Гаусса—Ньютона, данная задача решается по методу регуляризованного итерационного процесса;

если здесь тоже обнаруживается расходимость, задача объявляется нерешаемой и вызывается стандартный массив следующей задачи.

Очевидно, частота появления последней ситуации может служить обратной мерой универсальности алгоритма.

Общее описание алгоритма. Перечислим основные этапы алгоритма.

A1. Ввести число задач обрабатываемого потока.

A2. Ввести один стандартный массив данных; преобразовать его к виду, удобному для счета; рассчитать значения компонентов вектора начальных приближений x^0 ; провести автоматическую перенормировку на основе значений компонентов x^0 .

A3. Решать перенормированную нелинейную систему уравнений методом Гаусса—Ньютона (30); после каждой итерации проверять сходимость итерационного процесса и удовлетворение критериев выхода из него; при нарушении сходимости перейти к A4; при устойчивом протекании процесса и удовлетворении критериев выхода перейти к A6.

A4. Начав с того же вектора начальных приближений, решать перенормированную нелинейную систему уравнений методом регуляризованного итерационного процесса (32); после каждой итерации проверять сходимость процесса и удовлетворение критериев выхода из него; при нарушении сходимости перейти к A5; при устойчивом протекании процесса и удовлетворении критериев выхода перейти к A6.

A5. Объявить данную конкретную задачу нерешимой при помощи используемого алгоритма; вывести входные данные задачи; перейти к A7.

A6. Рассчитать наследственные ошибки искомым неизвестных; с помощью преобразования, обратного перенормировке, вернуться к имеющим физический смысл значениям неизвестных и их наследственных ошибок; вывести эти значения.

A7. Проверить, обработаны ли все задачи данного потока; если еще остаются необработанные участки, перейти к A2; если все задачи исчерпаны, считать обработку потока оконченной; обработку следующего потока (если таковой имеется) можно начать, запустив алгоритм снова с A1.

Подготовка к решению. Этап A1 настолько элементарен, что мы можем заняться непосредственно этапом A2, который является подготовительным по отношению к следующим за ним. Тут следует учесть несколько особенностей.

Во-первых, стандартный массив содержит целочисленные данные, которые прежде всего нужно преобразовать в формат с плавающей точкой. Если был использован внешний обменный код, его следует преобразовать во внутренний рабочий код конкретной ЭВМ.

Во-вторых, используя данные о размерности конкретной задачи в начале стандартного массива (см. табл. 1), следует из-

вдоль координаты характерных точек и вычислить по (59)—(64) компоненты вектора x^0 , располагая их по порядку согласно (20).

В-третьих, следует приступить к перенормировке, для чего мы должны хорошо разобраться в характере зависимости используемой модели (13) от неизвестных параметров. Поэтому вернемся к (13) и, приняв

$$P_i = (q - p_i - 1)/\sigma \sqrt{2}; \quad (66)$$

$$T_i = (q - p_i)/\sigma \sqrt{2}, \quad (67)$$

запишем

$$Y_q = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^k S_i [J(T_i) - J(P_i)] + \sum_{j=0}^i a_j q^j. \quad (68)$$

Тогда, продифференцировав по параметрам, получим в явном виде компоненты производной оператора:

$$\frac{\partial f}{\partial \sigma} = \frac{1}{\sigma \sqrt{\pi}} \sum_{i=1}^k S_i [P_i \exp(-P_i^2) - T_i \exp(-T_i^2)]; \quad (69)$$

$$\partial f / \partial S_i = (1/2 \sqrt{\pi}) [J(T_i) - J(P_i)]; \quad (70)$$

$$\partial f / \partial p_i = \frac{S_i}{\sigma \sqrt{2\pi}} [\exp(-P_i^2) - \exp(-T_i^2)]; \quad (71)$$

$$\partial f / \partial a_j = q^j. \quad (72)$$

Исследование зависимостей (68)—(71) показывает, что, как и следовало ожидать, вклад отдельной линии замечен только на ограниченном интервале слева и справа от позиции максимума, причем это относится не только к самому аппаратурному спектру (68), но и ко всем его производным (исключая параметры фона, которыми мы займемся позднее). Величина этого «интервала значимости» не превосходит параметра σ более, чем в 3—3,5 раза; вне его формулы (68)—(71) дают пренебрежимо малые значения. Кроме того, можно заметить, что все имеющиеся в формулах члены, за исключением площадей S_i , близки к единице. Следовательно, требуется перенормировка по площадям. Перенормировка по остальным параметрам не необходима, а в качестве коэффициента перенормировки по площади можно взять саму площадь или близкую к ней целую степень основания (10, 2 или пр.).

Продемонстрируем это на искусственном примере участка, расположенного в каналах 546—554 и содержащего одну линию с интенсивностью в 10000 импульсов; полуширина линии составляет 2,355 канала, а фон отсутствует. Центр распределения сигнала

лов до преобразования приходится на отметку 549,5 канала. Данные участка показаны в табл. 2 (обратить внимание на сдвиг максимума из-за интегрирования в пределах одного канала).

Таблица 2

q	F_x	$\partial f/\partial \sigma$	$\partial f/\partial S$	$\partial f/\partial p$
546	2.37E00	2.98E+1	2.37E-4	-8.57E00
547	5.98E+1	4.08E+2	5.98E-3	-1.67E+2
548	6.06E+2	1.50E+3	6.06E-2	-1.12E+3
549	2.42E+3	-1.82E+2	2.42E-1	-2.23E+3
550	3.83E+3	-3.52E+3	3.83E-1	-1.60E-9*
551	2.42E+3	-1.82E+2	2.42E-1	2.23E+3
552	6.06E+2	1.50E+3	6.06E-2	1.12E+3
553	5.98E+1	4.08E+2	5.98E-3	1.67E+2
554	2.37E00	2.98E+1	2.37E-4	8.57E00

* Очевидно, из-за ошибок округления; точное значение равно нулю.

Матрица Якоби в этом случае имеет размерность 9×3 и представлена тремя последними колонками таблицы. Из нее строим матрицу линейного шага

$$V(x) = \begin{pmatrix} 1.729E+7 & -1.250E+3 & 5.000E-6 \\ -1.250E+3 & 2.712E-1 & -6.000E-10 \\ 5.000E-6 & -6.000E-10 & 1.251E+7 \end{pmatrix},$$

у которой неуравновешенность по столбцам и строкам достигает четырех десятичных порядков, а собственные значения равны соответственно $1.7290E+7$; $1.2510E+7$ и $1.8085E-1$. В силу способа своего построения, матрица V положительно определена и ее сингулярные числа совпадают с собственными значениями. Следовательно, ее число обусловленности равно $9.5604E+7$ (заметим, что две пары элементов V отличны от нуля только из-за ошибок округления). Обращение такой матрицы требует некоторых мер предосторожности даже при работе на десятичной машине с мантиссой в 12 разрядов, которой мы пользовались для расчета примера.

Если провести перенормировку согласно (54), приняв

$$C = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 10^4 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

то получим новую матрицу линейного шага

$$V(z) = \begin{pmatrix} 1.729E+7 & -1.250E+7 & 5.000E-6 \\ -1.250E+7 & 2.712E+7 & -6.000E-6 \\ 5.000E-6 & -6.000E-6 & 1.251E+7 \end{pmatrix}$$

с собственными значениями: $3.5718E+7$; $1.2437E+7$ и $8.8046E+6$, число обусловленности у которой падает до $4.0567E00$. Видно, что даже в простейшем случае можно добиться существенного понижения числа обусловленности матрицы линейного шага задачи простой перенормировкой. На более сложных участках, содержащих линии разной интенсивности, выигрыш по числу обусловленности может превосходить только что продемонстрированные семь десятичных порядков.

Что касается перенормировки по коэффициентам фонового полинома, начальные приближения большинства которых равны нулю, то можно указать на две особенности:

во избежание слишком высоких значений при возведении номеров каналов в квадрат, куб и т. д. удобнее перенести начало координат в точку, находящуюся внутри участка (перенос относится только к фону и не затрагивает параметры спектра);

после переноса можно рассчитать коэффициенты перенормировки по фоновым переменным, исходя не из их начальных приближений, а из среднего значения соответствующей степени на участке.

Итак, алгоритм автоматической перенормировки должен содержать следующие шаги.

Б1. Извлечь из x^0 компонент, соответствующий площади линии.

Б2. Отделить порядок от мантиссы.

Б3. Приписать мантиссе постоянный низкий порядок (например, единичный) и принять новое число за соответствующий компонент вектора z^0 .

Б4. Приписать порядок компоненте x^0 единичной мантиссе (с тем, чтобы произведение двух вновь полученных чисел равнялось исходному компоненту вектора x^0) и сохранить полученную целую степень рабочего основания в качестве элемента матрицы C .

Б5. Проверить, исчерпаны ли все линии участка; если нет, вернуться к Б1; если да — перейти к Б6.

Б6. Рассчитать средние значения степеней полинома со сдвинутым началом и подобрать ближайшие к ним целые степени основания.

Б7. Составить диагональную матрицу перенормировки C ; расставить по ее диагонали единицы в сочетании с целыми степенями основания, полученными в Б4 и Б6, соблюдая порядок компонентов согласно (20).

Б8. Перейти к итерационной процедуре (см. А3).

В приведенном нами примере (см. табл. 2 и объяснения к ней) для простоты не учитывалась матрица статистических весов. На самом деле отдельные уравнения решаемой нелинейной системы имеют различную точность и, следовательно, различные веса. Учет этого факта, однако, не меняет принципа перенормировки.

Критерии сходимости и прерывания процесса. По окончании подготовки к счету можно приступить к решению задачи участка с помощью классического метода Гаусса—Ньютона. Мы будем пользоваться им в чистом виде (30), не прибегая к модификациям.

Критерием сходимости итерационного процесса будем считать монотонное невозрастание невязки (29) по итерациям. Если на данной итерации невязка больше, чем на предыдущей, то следует отказаться от решения методом Ньютона и применить регуляризованный итерационный процесс (32). Несколько позднее увидим, что возрастание невязки — не единственный признак отклонения от нормального хода процесса.

Из множества критериев прерывания итерационного процесса в программах обработки (12—14, 33] использовано четыре.

1. Выполнение некоего достаточно большого и одинакового для всех потоков числа итераций.

2. Получение значения невязки, которое ниже некоторой константы, одинаковой для всех задач данного потока и для всех потоков.

3. Равенство нулю приращений всех неизвестных в пределах соответствующих наследственных ошибок.

4. Получение вектора левой части (23), все компоненты которого не превосходят по модулю некоторой константы, чье значение характерно для конкретной решаемой задачи и рассчитывается автоматически (критерий равномерной аппроксимации).

Критерии сходимости и прерывания проверяются после выполнения каждого линейного итерационного шага. До начала первой итерации нужно вычислить невязку начальных приближений $\theta(x^0)$, которая необходима для проверки сходимости и, кроме того, используется в расчете начального значения регуляризатора (в случаях, когда не удается найти решение методом Ньютона, см. далее).

В качестве константы равномерной аппроксимации можно взять величину

$$\Delta_0 = \sqrt{\bar{a}_0^0}, \quad (73)$$

где a_0^0 берется из (63).

При обнаружении расходимости ньютоновского процесса естественно отнести ее за счет вырожденности или плохой обусловленности матрицы линейного шага задачи V . Эти два понятия,

хотя и принципиально разные с точки зрения строгого математического подхода, становятся неотличимыми и могут переходить друг в друга в реальных ситуациях выполнения расчетов на ЭВМ. Ограниченная точность представления чисел и ее следствия (накопление ошибок округления, возможное переполнение разрядной сетки и пр.) смазывают резкую грань между вырожденностью и плохой обусловленностью. Если вернуться к непере-нормированной матрице V примера из табл. 2, то можно видеть, что при работе с пятью значащими десятичными цифрами она представляется вырожденной, хотя на самом деле является плохо обусловленной.

В этой связи полезно рассмотреть те ступени ньютоновского процесса, где может обнаружиться его плохая обусловленность, что может иметь место вопреки формальному удовлетворению критерия невозрастающей невязки. Отметим, что с помощью перенормировки мы исключили возможность переполнения и поэтому займемся поиском дополнительных признаков проявления вырожденности и плохой обусловленности, пропуская те шаги алгоритма, где можно было бы ожидать переполнения. Существует, по крайней мере, два таких признака, за которыми можно следить без модификаций процесса (30).

V1. Выполнение линейного шага итерации требует обращения матрицы V . Параллельно с обращением V можно вычислять ее определитель и, как только он обратится в машинный нуль, следует считать V вырожденной в конкретной вычислительной ситуации.

V2. Как мы уже отмечали, матрица линейного шага положительно определена по самому своему построению. Диагональные элементы как самой матрицы V , так и обратной ей V^{-1} должны быть положительными. Если V достаточно плохо обусловлена для конкретной точности выполнения расчетов, то не исключено появление отрицательных диагональных элементов V^{-1} . Следовательно, нужно проверять знаки диагональных элементов V^{-1} и, обнаружив минус, считать V недостаточно хорошо обусловленной для нормального протекания ньютоновского итерационного процесса [12—14].

И в том, и в другом случае необходимо прерывать решение методом Гаусса—Ньютона независимо от невозрастания невязки и переходить к регуляризованному итерационному процессу.

Регуляризованные процессы. ERP-процесс — наиболее мощное средство, которым мы располагаем. Им можно пользоваться либо в виде (32)—(36), либо со следующими модификациями.

Во-первых, можно ограничить значение регуляризатора снизу введением добавочного члена

$$\alpha^t = \alpha^0 (\theta^0) \exp(-rt) + \alpha_\infty \quad (74)$$

Во-вторых, подбор начального значения регуляризатора делается зависимым от невязки вектора начальных приближений:

$$\alpha^0(\theta^0) = \begin{cases} \exp(r^0\theta^0 + r), & \theta^0 < \theta_{\max}^0; \\ \exp(r^0\theta_{\max}^0 + r), & \theta^0 \geq \theta_{\max}^0, \end{cases} \quad (75)$$

где r , α_{∞} , r^0 и θ_{\max}^0 — положительные константы, подобранные вычислительно-экспериментальным путем и одинаковые как для всех задач данного потока, так и для всех обрабатываемых потоков.

Смысл ограничения регуляризатора снизу состоит в том, чтобы не допустить превращение ERP-процесса в процесс Гаусса — Ньютона из-за обращения регуляризатора в машинный нуль (так как если мы дошли до этого этапа, данную задачу нельзя решить без регуляризации). Смысл же зависимости (75) в том, чтобы начинать решение задач с относительно хорошими начальными приближениями при меньших начальных значениях регуляризатора. Только когда вектор начальных приближений настолько далек от точки решения, что невязка θ^0 превосходит константу θ_{\max}^0 , (75) переходит в (33).

В-третьих, желательно предусмотреть возможность автоматического сшивания ERP-процесса с R_{ϵ} -процессом, у которого значение регуляризатора не меняется по итерациям. Это можно сделать, если проводить ERP-процесс до достижения минимума длинной невязки (34), затем вернуться на одну итерацию назад и начать с нее R_{ϵ} -процесс в поисках нового, еще более низкого минимума длинной невязки. Таким образом, с помощью R_{ϵ} -процесса можно добиться улучшения найденного ERP-процессом решения.

Критерий сходимости ERP-процесса подвергается модификации по ходу выполнения итераций:

если число итераций еще недостаточно для вычисления первой длинной невязки (а заметим, что тогда значение регуляризатора еще достаточно велико), то сохраняют силу все три критерия из предыдущего раздела;

если возможен расчет длинной невязки, то критерий монотонного невозрастания θ^t теряет силу, а процесс считается расходящимся при выявлении ситуаций В1 и В2.

При обнаружении расходимости будем считать конкретную задачу нерешимой универсальным алгоритмом и переходить к специальному режиму вывода исходных ее данных.

Критерием прерывания регуляризованного итерационного процесса остается минимум определенной (34) длинной невязки. В то же самое время критерии 2,3 и 4 теряют смысл, и их проверка должна быть выключена. Проверку критерия 1 можно сохранить, чтобы избежать заикливания, но выход по этому критерию следует считать своего рода сигналом о возможных неблагоприятных в конкретной решаемой задаче потока.

Оценка ошибок и вывод информации. Специальный режим вывода данных участка, задачу которого не удалось решить средствами универсального алгоритма, осуществляется на этапе А5. Его можно было бы назвать режимом бессилия, но он является также режимом организованного перехода к следующей задаче без нарушения общего автоматизма обработки потока. При правильной подготовке входных данных этот режим не используется [5].

Оценка статистических наследственных ошибок искомых параметров проводится после каждого линейного итерационного шага. Если конкретная задача решается методом Гаусса-Ньютона, то указанная оценка нужна для проверки критерия 3; по ходу ее выполнения проверяются также два дополнительных признака В1 и В2 нормального протекания вычислений. Если же решение ищется регуляризованным итерационным процессом, критерий 3 отпадает, а выявление признаков В1 и В2 служит сигналом о необходимости перехода к специальному режиму вывода А5.

После того как решение задачи найдено, следует приступить к окончательной оценке наследственных ошибок и к выводу результатов. Алгоритм этой процедуры выглядит следующим образом.

Г1. Вычислить матрицу, обратную нерегуляризованной матрице линейного шага, в точке решения и проверить наличие ситуаций В1 и В2. Если обнаружится хотя бы одна из них и:

- 1) решение найдено методом Ньютона, то перейти к А4;
- 2) решение найдено регуляризованным итерационным процессом, то перейти к Г2.

Если же ситуаций В1 и В2 не обнаружено, то перейти к Г3.

Г2. Вычислить матрицу, обратную регуляризованной матрице линейного шага, в точке решения и проверить наличие ситуаций В1 и В2. Если обнаружится хотя бы одна из них и:

- 1) решение найдено регуляризованным итерационным процессом, то перейти к А5;

2) оценка проводится в специальном режиме вывода А5, то взять абсолютную величину отрицательных диагональных элементов и, оставаясь в том же режиме, перейти к Г3.

Если же ситуаций В1 и В2 не обнаружено, то перейти к Г3.

Г3. Вычислить по (37) статистические наследственные ошибки, а по (38) — полные.

Г4. Вывести данные решаемой задачи, невязку в точке решения, расчетные значения искомых параметров и их полные наследственные ошибки, а также информацию о том, каким путем было найдено решение.

Г5. Перейти к А7 (этот шаг не относится к алгоритму вычисления ошибок и вывода результатов, но поскольку он элементарен и следует непосредственно за выводом, мы упоминаем его здесь, чтобы не останавливаться на нем подробнее).

2.3. Решение полной задачи на нахождение скрытых закономерностей с помощью универсального алгоритма. Ранее были описаны детали универсального алгоритма обработки данных дискретной спектрометрии [4, 11—14, 33, 67]. Алгоритм состоит из двух частей, из которых первая осуществляется в режиме диалога с ЭВМ и формирует поток однотипных нелинейных задач, а вторая полностью автоматизирована и решает последовательно все задачи потока, не нуждаясь во вмешательстве оператора. Существеннейшим элементом второй части универсального алгоритма является регуляризованный итерационный процесс с экспоненциально спадающим регуляризатором.

Читатель мог бы заметить, что на всех этапах универсального алгоритма мы имеем дело с неким фиксированным числом искомых закономерностей, какими в случае дискретной спектрометрии выступают линии обрабатываемого спектра, попавшие на данный участок. Число этих линий задается физиком-оператором во время предварительной обработки. Между тем, как мы уже отмечали, в реальных спектрах попадаются участки настолько сложные, что оператор не в состоянии определить «на глаз» число искомых линий. Такие участки порождают полные задачи на нахождение скрытых закономерностей [34].

Решая указанные задачи, будем пользоваться характерным свойством регуляризованных итерационных процессов ньютоновского типа [15], на которое уже указывалось в [34]. Свойство это состоит в том, что попытка нахождения регуляризованным итерационным процессом такого числа закономерностей, которое больше истинного для данной конкретной задачи, приводит к псевдорешению, где либо имеются закономерности с нулевыми или пренебрежимо малыми амплитудами, либо имеются пары закономерностей с разными амплитудами, но с совпадающими или очень близкими остальными параметрами. В реальных вычислительных ситуациях могут встречаться и комбинации двух случаев.

Итак, регуляризованные итерационные процессы ньютоновского типа обладают свойством отсеивать лишние закономерности в заведомо вырожденных задачах.

При решении потоков задач дискретной спектрометрии совпадающие или очень близкие параметры означают совпадающие или очень близкие положения двух линий на данном участке. Происходит это потому, что, согласно принятой модели, полуширины всех линий на участке считаются одинаковыми. Близость положений, конечно, следует оценивать, исходя из разрешающей способности используемого спектрометра. Например, при полуширине одиночной линии в 5—6 каналов расчетные позиции двух пиков, отстоящих друг от друга менее, чем в 0,25—0,3 канала, вполне можно считать совпадающими.

На основе описанного свойства регуляризованных итерационных процессов укажем на два возможных способа решения полной задачи при помощи универсального алгоритма. Участок спектра, порождающий такую задачу, будем для краткости называть условно «полным участком».

а) Обработка полного участка в полуавтоматическом режиме.

а1. На этапе предварительной обработки полный участок подвергается такой же трактовке, как и все остальные, т. е. на нем указывается столько линий, сколько замечает физик-оператор.

а2. После этого полный участок обрабатывается вместе со всеми остальными — потоком.

а3. Результаты «окончательной» обработки полного участка рассматриваются особо в целях выявления закономерностей с пренебрежимо малыми амплитудами или с очень близкими позициями; кроме того, его невязка в точке решения и найденное значение полуширины линии сравниваются с соответствующими величинами на соседних (нормальных) участках. Если результаты такого рассмотрения удовлетворительны, то задача считается решенной. В противном случае предварительная обработка полного участка повторяется с указанием нового — большего или меньшего — числа закономерностей, участок включается в новый поток (см. п. а2) и т. д. до тех пор, пока не будет найдено удовлетворительное решение задачи.

б) Обработка полного участка в автоматическом режиме.

б1. Предварительная обработка полного участка повторяется несколько раз с различными числами указываемых физиком-оператором закономерностей, начиная со значения заведомо ниже и кончая значением заведомо выше ожидаемого. Соответственно полный участок порождает не одну, а несколько однотипных нелинейных задач. Все эти задачи становятся равноправными членами потока.

б2. Сформированный поток задач обрабатывается по второй части универсального алгоритма в автоматическом режиме.

б3. Серия полученных решений, относящихся к полному участку, анализируется отдельно от остальных результатов обработки, и на базе тех же критериев, что и в п. а3, из них выбирается то, которое наилучшим образом согласуется с результатами обработки соседних (нормальных) участков.

Способ а) требует меньших затрат машинного времени, но больших — человеческого по сравнению со способом б), поэтому мы отдаем последнему предпочтение.

Заметим, что привлечение дополнительной физической информации о соседних участках действительно становится необходимым только при очень плохой точности данных измерения (при недостаточной статистике). Лишние закономерности «обыкновенных» полных участков можно отсеять только с помощью регуляризо-

ванного итерационного процесса. Кстати, нет надобности специально заботиться о его включении в обработку — универсальный алгоритм вызывает его автоматически, когда это необходимо [33]. Часть физических оценок значимости результатов обработки тоже доступна автоматизированному программному анализу [13, 14, 46].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Оба этапа универсального алгоритма были реализованы впервые в 1969—1970 гг. на ЭВМ «Минск-2» Отдела ядерной спектроскопии и радиохимии ЛЯП ОИЯИ и с тех пор используются постоянно в исследовательской работе [10, 11, 33, 69, 70].

В последние годы были созданы усовершенствованные варианты программ для малых ЭВМ «Хьюлетт-Паккард» 2116 и 21MX, ИЗОТ-310 и ЕС-1010 [12—14], а также программа КОЛОВОК [46] для ЭВМ ЕС-1040. Ведутся интенсивные работы по усовершенствованию программ первоначальной обработки спектров, а также по более полной автоматизации процесса этой обработки. Вопрос о надежности оценок наследственных ошибок параметров спектра исследовался особо [71] методом сравнительного расчета. Сделанные выводы позволяют заключить, что производимые оценки точности алгоритма заслуживают доверия и удовлетворяют требованиям прецизионной спектрометрии [44].

Надежность работы алгоритма признана исключительно высокой [3—5]. В частности, режим DUMP, соответствующий невозможности обработать данный участок, удается наблюдать только при заведомо ошибочных входных данных. При помощи универсального алгоритма и разработанных на его основе программ было обработано огромное количество экспериментального материала и была получена существенная физическая информация [35—44, 71—97]. Сам алгоритм рассматривался с разных точек зрения в ряде работ [5, 66, 74, 98—101]. Предполагается, что стратегия подхода к обработке спектрометрических данных будет в основном оставаться такой же и во время выполнения исследовательской программы ЯСНАПП-2, причем новая техника и новые программные разработки в большей степени ориентированы на диалоговый режим работы, что должно привести к более активному участию физика в обработке данных и, в конечном итоге, к более физическим оценкам искомых параметров спектра.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я., Методы решения некорректных задач. М., Наука, 1974.
2. Заикин П. Н. Системы полной математической обработки результатов спектрометрических экспериментов. Автореф. дис. на соиск. учен. степени д-ра физ.-мат. наук. М., 1977 (МГУ).

3. Гаджиков В. Автоматизация обработки данных дискретной спектрометрии ядерных излучений. Автореф. дис. на соиск. учен. степени д-ра физ.-мат. наук. София, 1978 (ИЯИЯЕ Болгарской АН).
4. Гаджиков В. В кн.: ЭВМ в экспериментальной физике. Дубна, 1970 с. 155—177.
5. Цупко-Ситников В. М. В кн.: ЭВМ в ядерных исследованиях. Дубна 1974, с. 285—307.
6. Тихонов А. Н. и др.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1965, т. 29, с. 815—818.
7. Тихонов А. Н. В кн.: Вычислительные методы и программирование. Вып. 8. М., Изд-во МГУ, 1967, с. 3—33.
8. Green D. W.— Nucl. Instrum. and Methods, 1969, v. 76, p. 349—356.
9. Александров Л., Христов Е.— Докл. Болгарской АН, 1968, т. 21, с. 195—198.
10. Гаджиков В. Препринт ОИЯИ, P10-6655. Дубна, 1972.
11. Вылова Л. А. и др. Препринт ОИЯИ, P10-6751. Дубна, 1972.
12. Gadjokov V. Preprint JINR, E10-12352. Dubna, 1979.
13. Gadjokov V. Preprint JINR, E10-12353. Dubna, 1979.
14. Gadjokov V. Preprint JINR, E10-12354. Dubna, 1979.
15. Александров Л. Препринт ОИЯИ, Б1-5-9969. Дубна, 1976.
16. Альфа-, бета- и гамма-спектроскопия. Вып. 1. Пер. с англ. Под ред. К. Зигбана. М., Атомиздат, 1969.
17. Routti J. T., Prussin S. G.— Nucl. Instrum. and Methods., 1969, v. 72, p. 125—142.
18. Camp D. C. Preprint UCRL-50156, University of California, 1967.
19. Trammel R., Walter F. J.— Nucl. Instrum. and Methods., 1969, v. 76, p. 317—321.
20. Dragoun O., Jagn P. Preprint 1967/V/4, Max-Planck-Institut für Kernphysik, Heidelberg, 1967.
21. Winter G. Preprint ZfK-182, Zentralinstitut für Kernforschung. Rossendorf bei Dresden, 1969.
22. Злоказов В. Б. Препринт ОИЯИ, E10-9059. Дубна, 1975.
23. Geider J. S., Graham R. L., Johns M. W. Paper presented at the 18th Conf. on Nucl. Spectroscopy and Structure of the Atomic Nuclei. Riga, 1968.
24. Stevens M., Harvey J. A. Report WASH-1071 of the AEC Nuclear Cross Section Advisory Group presented at the Meeting in Argonne, Illinois, 1966.
25. Звольски Й., Приходько В. И. Препринт ОИЯИ, 6-3517. Дубна, 1967.
26. Helmer R. G. e.a.— Nucl. Instrum. and Methods, 1967, v. 57, p. 46—57.
27. McNelles L. A., Campbell J. L.— Ibid., 1975, v. 127, p. 73—81.
28. Jorch H. H., Campbell J. L.— Ibid., 1977, v. 143, p. 551—559.
29. Campbell J. L., Jorch H. H.— Ibid., 1979, v. 159, p. 163—170.
30. Кабуров Х. К. и др. Доклад, представленный на Советании по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра. Дубна, 1969 г. (См. также: Ядрена энергия, 1977, т. 5, с. 102—107.)
31. Стоянов Ч., Александров Л., Гаджиков В.— Атомная энергия, 1970, т. 29, с. 203; (На англ. яз. см: J. Radioanal. Chemistry, 1972, v. 10, p. 75—81.)
32. Гаджиков В., Александров Л., Стоянов Ч. Сообщение ОИЯИ, P10-5043. Дубна, 1970.
33. Гаджиков В. Препринт ОИЯИ, P10-5035. Дубна, 1970. (На англ. яз. см.: Instrum and Experim. Technique, 1970, N 5, p. 1338—1341.)
34. Александров Л., Гаджиков В. Препринт ОИЯИ, P5-5294. Дубна, 1970. (На англ. яз. см: J. Radioanal. Chemistry, 1971, v. 9, p. 279—292.)
35. Гаджиков В. и др. Препринт ОИЯИ, P6-5434. Дубна, 1970. (См. также: Изв. АН СССР. Сер. физ., 1970, т. 35, с. 2255—2265.)
36. Арлът Р. и др.— ЭЧАЯ, 1974, т. 5, вып. 4, с. 843—891.

37. Громов К. Я.— ЭЧАЯ, 1975, т. 6, вып. 4, с. 971—1039.
38. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-9071. Дубна, 1975.
39. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-9072. Дубна, 1975.
40. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-9073. Дубна, 1975.
41. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-10414. Дубна, 1977.
42. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-10415. Дубна, 1977.
43. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-10416. Дубна, 1977*.)
44. Вылов Ц. Препринт ОИЯИ, Р6-10417. Дубна, 1977.
45. Худсон Д. Статистика для физиков. Пер. с англ. М., Мир, 1967.
46. Гаджоков В. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-12724. Дубна, 1979.
47. Александров Л. Препринт ОИЯИ, Р5-10366. Дубна, 1977.
48. Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. Пер. с англ. М., Мир, 1975.
49. Quittner P., Wainerdi R. E. Atomic Energy Review, 1970, v. 8, p. 361—415.
50. Tepel J. W. Report PEL-207, Pelindaba (South Africa), 1970.
51. Рупп Э. Препринт ОИЯИ, Р10-5776. Дубна, 1971.
52. Slavić I. A., Bingulac S. P.— Nucl. Instrum. and Methods, 1970, v. 84, p. 261—268.
53. Varnell L., Trischuk J.— Ibid., 1969, v. 26, p. 109—114.
54. Block H. P., de Lange J. C., Schotman J. W.— Ibid., 1975, v. 128, p. 545—556.
55. Phillips G. W., Marlow K. W.— Ibid., 1976, v. 137, pp. 525—536.
56. Элер Г. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-7364. Дубна, 1973.
57. Элер Г. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-7365. Дубна, 1973.
58. Элер Г. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-7366. Дубна, 1973.
59. Элер Г. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-7367. Дубна, 1973.
60. Александров Л. Препринт ОИЯИ, Р5-5136. Дубна, 1970.
61. Александров Л. Препринт ОИЯИ, Р5-5137. Дубна, 1970.
62. Александров Л. Препринт ОИЯИ, Р5-5515. Дубна, 1970.
63. Александров Л. Препринт ОИЯИ, Р5-5790. Дубна, 1971.
64. Forsythe G., Moler C. V. Computer Solution of Linear Algebraic Systems; N.Y., Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, 1967.
65. Воеводин В. В. Ротапринт Вычислительного центра МГУ. М., 1969.
66. Кабина Л. П., Кондуров И. А. Препринт ФТИ АН СССР им. А. Ф. Иоффе. Л., 1972.
67. Гаджоков В.— Ядерная энергия, 1978, № 9, с. 73.
68. Вылова Л. А. и др. Препринт ОИЯИ, Р10-7061. Дубна, 1973.
69. Лысенко З. В., Томик И., Трубников В. Р. Препринт ОИЯИ, 10-3331. Дубна, 1967.
70. Зайдель З. и др. Препринт ОИЯИ, 13-5044. Дубна, 1970.}
71. Александров В. С., Вылов Ц., Гудов В. И. В кн.: Программа и тезисы докладов XXIV совещания по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра, Харьков, 1974, Л., Наука, 1973, с. 484—485.
72. Вылов Ц. и др.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1972, т. 36, с. 718—743.
73. Амов Б. и др.— Ядерная физика, 1972, т. 16, № 5, с. 881—889.
74. Вылов Ц. и др.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1972, т. 36, № 10, с. 2111—2117.
75. Вылов Ц. и др.— Там же, 1972, т. 36, № 10, с. 2118—2123.
76. Афанасьев В. П. и др.— Там же, 1973, т. 37, № 1, с. 25—31.
77. Вылов Ц. и др.— Там же, с. 43—47.
78. Александров В. С. и др.— Там же, 1973, т. 37, № 5, с. 948—952.
79. Бутцев В. С. и др.— Там же, 1973, т. 37, № 5, с. 953—64.

* Работы [38—43] опубликованы также в кн.: Прикладная ядерная спектроскопия. Вып. 6. М., Атомиздат, 1976.

80. Вылов Ц. и др.— Там же, 1974, т. 38, № 4., с. 701—709.
81. Александров А. А. и др.— Там же, 1974, т. 38, № 10, с. 2096—2102.
82. Александров А. А. и др.— Там же, 1974, т. 38, № 12, с. 2487—2492.
83. Бонч-Осмоловская Н. А. и др.— Там же.
84. Александров В. С.— Там же, 1975, т. 39, № 3, с. 468—477.
85. Вылов Ц. и др.— Там же, с. 506—522.
86. Адам И. и др.— Болгарский физ. журн., 1975, т. 2, № 1, с. 12—30.
87. Arlt R. e.a.— J. Inorganic and Nucl. Chemistry, v. 34, N 10, p. 3001—3005.
88. Байер Г. Ю. и др.— Изв. АН СССР. Сер. физ., 1972, т. 36, № 4, с. 782—785.
89. Бутцев В. С., Громов К. Я., Калинин В. Г.— Там же, 1973, т. 37, № 5, с. 1024—1034.
90. Latuszynski A. e.a.— Nucl. Instrum. and Methods, 1974, v. 120, N 2, p. 321—328.
91. Адам И. и др.— Болгарский физ. журн., 1976, т. 3, № 2, с. 145—160.
92. Адам И. и др.— Там же, 1976, т. 3, № 1, с. 26—38.
93. Вылов Ц. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-9369. Дубна, 1975.
94. Зубер К. и др. Препринт ОИЯИ, 6-8517. Дубна, 1975.
95. Зубер К. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-8669. Дубна, 1975.
96. Аврамов С. Р. и др. Препринт ОИЯИ, Р6-8781. Дубна, 1975.
97. Громов К. Я. и др. Препринт ОИЯИ, Р13-10611. Дубна, 1977.
98. Арльт Р. и др.— Приборы и техника эксперимента, 1972, № 6, с. 71-83.
99. Лобанов Е. М., Левушкин Ю. А., Власюга С. П.— Атомная энергия, 1973, т. 35, № 4, с. 247—252.
100. Лобанов Е. М., Левушкин Ю. А., Власюга С. П.— Докл. АН БССР, 1973, т. 17, № 9, с. 805—807.
101. Михайлов В. и др.— Ядрена энергия, 1977, № 6, с. 65.