

- [1] Nason P., Dawson S., Ellis R. K. //Nucl. Phys. 1988. B303. P. 607.
 [2] Altarelli G. //Phys. Reports. 1982. 81. P. 1. [3] Bloch F., Nordsieck A. //Phys. Rev. 1937. 52. P. 54; Yennie D. R., Frautschi S. C., Suura H. //Ann. Phys. 1961. 13. P. 379. [4] Kinoshita T. //J. Math. Phys. 1962. 3. P. 650; Lee T. D. Particle Physics and Introduction to Field Theory. Harwood Academic, 1981.

Поступила в редакцию
06.12.90

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1991. Т. 32, № 3

УДК 519.21

МЕТОД РИТЦА В ЗАДАЧЕ ИНТЕРПРЕТАЦИИ НЕЛИНЕЙНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Т. В. Матвеева, Ю. П. Пытьев

(кафедра физики атмосферы и математической геофизики)

Рассмотрен класс задач интерпретации нелинейных измерений, сводящихся к вычислению значения известной функции по неточно заданному аргументу. Предлагается метод решения задач интерпретации, позволяющий значительно упростить вычислительный процесс и хорошо аппроксимировать решение точной задачи.

Схема измерений подавляющего большинства физических экспериментов описывается равенством

$$\xi = a(f) + v, \quad (1)$$

согласно которому измеряется значение $a(f)$ известной функции $a(\cdot)$, в то время как исследователя, как правило, интересует значение ее аргумента f или, в более общем случае, значение функции $U(f)$, где f (или $U(f)$) — параметры исследуемого объекта. В равенстве (1) ξ — результат измерения, v — погрешность, $a(\cdot)$ — векторозначная функция, f — вектор параметров объекта. В качестве примера приведем более подробную запись равенства (1):

$$\xi(t) = \int_Y K(t, y) z(f, y) dy + v(t), \quad t \in T,$$

в которой

$$a(f) = a(f, \cdot) = \int_Y K(\cdot, y) z(f, y) dy,$$

причем интеграл описывает взаимодействие измерительного прибора с объектом и средой, t — время измерения.

На практике определение параметров объекта чаще всего проводится методом наименьших квадратов (МНК):

$$\|\xi - a(f)\|^2 \sim \min_{f \in \mathcal{F}}$$

где \mathcal{F} — множество, априори содержащее вектор параметров f . Если уравнение $a(f) = a$ имеет единственное решение при любом $a \in a(\mathcal{F})$, задача состоит в определении значения функции $a^{-1}(\cdot)$, аргумент которой $a(f)$ согласно равенству (1) известен с ошибкой v . Ограничимся этим случаем и рассмотрим задачу определения параметров объекта — вектора $U(f)$ — по неточно измеренному аргументу функции $U(\cdot)$:

$$\xi = f + v, \quad (2)$$

т. е. рассмотрим задачу интерпретации измерения (2).

Примером может служить измерение температуры поверхности, когда в схеме (2) регистрируется электромагнитное излучение поверхности и тем самым измеряется функция Планка

$$f = C_1 / (\exp\{C_2/T\} - 1),$$

а исследователя интересует температура $T = U(f) = C_2 / [\ln(C_1/f) + 1]$.

Пусть в схеме (2) f, v — случайные векторы из \mathcal{R}_n , заданы ограниченное множество $\mathcal{F} \subseteq \mathcal{R}_n$, априори содержащее f с вероятностью 1, и $q(\cdot)$ — плотность распределения f на \mathcal{F} ; задан класс распределений v , сосредоточенных на ограниченном множестве $\Delta \subseteq \mathcal{R}_n$. В задаче интерпретации измерения (2) требуется определить оператор $R(\cdot)$ так, чтобы $R(\xi)$ можно было использовать как наиболее точную в среднем квадратичном (с. к.) версию значения $U(f)$.

Если задано совместное распределение f, v и $E\|U(f)\|^2 < \infty$, то, как известно, наилучшим в с. к. приближением $U(f)$ будет $E(U(f) | \xi)$ — условное математическое ожидание $U(f)$ при заданном ξ . Однако на практике чаще всего совместное распределение f, v неизвестно. Далее будут использованы результаты работы [1], в которой задача интерпретации измерения (2) рассмотрена как задача минимизации оценки с. к. погрешности редукции

$$h^2(R, U) = \sup_{\mathcal{F}} E \int \|R(\xi) - U(f)\|^2 q(f) df \sim \inf_R,$$

где супремум вычисляется на заданном классе распределений v . Для оценки получена мажоранта в виде квадратичного по R функционала: $h(R, U) \leq h_1(R, U) + h_2(R)$, где функционал

$$h_1^2(R, U) = \int_{\mathcal{F}} \|R(f) - U(f)\|^2 q(f) df$$

контролирует систематическую погрешность (ложный сигнал), а функционал

$$h_2^2(R) = \int \sum_{i,j} K_{ij}(x) \partial R / \partial x_i \partial R / \partial x_j dx, \quad \mathcal{Q} = (f + x, f \in \mathcal{F}, x \in \Delta),$$

оценивает уровень шума редукции.

В работе [1] задача интерпретации рассмотрена в форме задачи на условный минимум

$$\inf (h_1^2(R, U) | h_2^2(R) \leq \varepsilon), \quad (3)$$

разрешимой на соболевском классе W_2^1 функций $R(\cdot)$. В свою очередь задача (3) сводится к задаче на минимум для функции Лагранжа

$$L(R) = h_1^2(R, U) + \lambda h_2^2(R), \quad (4)$$

где $\lambda \geq 0$ — множитель Лагранжа.

При некоторых ограничениях на качество $R(\cdot)$ можно получить дифференциальную форму задачи (3). Ее решение является в общем случае непростой проблемой, требующей определенных вычислительных затрат. Тем не менее применение нелинейной редукции дает преимущества при интерпретации измерений. Сравнительный анализ, проведенный на основе вычислительного эксперимента, показал, что для широкого класса задач интерпретации измерений фактическая погрешность, полученная в рамках линейной редукции, в 1,2 раза, а погрешность интерпретации, основанной на применении МНК, в 2 раза превосходят погрешность нелинейного метода. В настоящей работе предлагается метод решения задачи (3), позволяющий значительно упростить вычислительный процесс.

Пусть

$$a(R, Q) = \int_{\mathcal{F}} R(f) Q(f) q(f) df + \lambda \int \sum_{i,j} K_{ij}(y) \partial R / \partial y_i \partial Q / \partial y_j dy$$

— симметричная положительно определенная билинейная форма,

$$\varphi(R) = \int_{\mathcal{F}} U(f) R(f) q(f) df$$

— линейная форма, и

$$F(R) = a(R, R) - 2\varphi(R). \quad (5)$$

Задача на минимум функции Лагранжа (4) эквивалентна задаче на минимум $F(R)$, а последняя, как известно [2], эквивалентна задаче определения $R \in W_2^1$ такого, что

$$a(R, Q) = \varphi(Q) \text{ для любого } Q \in W_2^1. \quad (6)$$

Задаче (6) сопоставим задачу, называемую приближением по Ритцу и состоящую в нахождении такого $R^* \in W_2^{1*}$, что

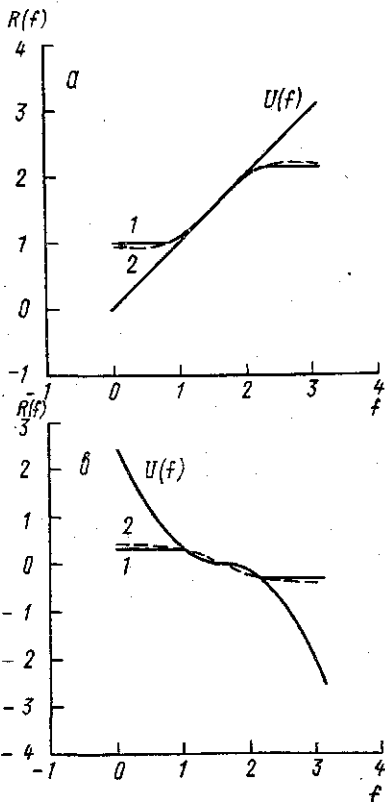
$$a(R^*, \vartheta^*) = \varphi(\vartheta^*) \quad \forall \vartheta^* \in W_2^{1*}, \quad (7)$$

где $W_2^{1*} \in W_2^1$ — подпространство размерности N с базисом u_1, u_2, \dots, u_N . Положим $R^* = \sum_{j=1}^N a_j u_j$, тогда условие (7) эквивалентно системе линейных уравнений

$$\sum_{j=1}^N a(u_j, u_i) a_j = \varphi(u_i), \quad i = 1, 2, \dots, N.$$

В методе Ритца важным вопросом является выбор базиса $\{u_j\}_1^N$. Как показано в [1], в вариационной задаче (3) на границе \mathcal{D} реализуется так называемое естественное граничное условие, при котором на границе значение R не фиксируется, а нормальная производная равна нулю. Естественно выбрать базис так, чтобы функции $u_i, i=1, \dots, N$, также подчинялись этому граничному условию.

Для примера рассмотрим решение задачи (6) в случае $n=1, k=\dim U_b=1, q(\cdot)=1$. Пусть $\{K_{ij}\}$ — единичная матрица, $\mathcal{D} = [0, b+\Delta], |v| \leq \Delta$. В качестве базиса на W_2^{1*} выберем функции $u_i = \cos(\pi i x / (b+\Delta)), i=0, 1, \dots, N$. Пусть для простоты



Решения, полученные для случая $W=0,2, \Delta=\pi/4$ методом Ритца при $N=3$ (2), и аналитическое решение задачи (3) (1) для случаев: а) $U(f)=f$, б) $U(f)=(f-\pi/2)^2$, в) $U(f)=\begin{cases} (f-\pi/2)^2, & f < \pi/2, \\ -(f-\pi/2)^2, & f > \pi/2 \end{cases}$

выкладок $(b+\Delta)=\pi$. На рисунке приведено аналитическое решение задачи (3) и решение, полученное методом Рунге, для случаев

$$U(f) = f, \quad U(f) = (f - \pi/2)^2 \quad \text{и} \quad U(f) = \begin{cases} (f - \pi/2)^2, & f < \pi/2, \\ -(f - \pi/2)^2, & f > \pi/2. \end{cases}$$

Как видно из графиков, решение, полученное методом Рунге, хорошо аппроксимирует решение точной задачи уже при числе базисных функций $N=3$. Таким образом, предлагаемый метод дает значительный выигрыш во времени счета и может быть рекомендован для решения реальных физических задач.

ЛИТЕРАТУРА

[1] Пытьев Ю. П. // Матем. моделирование. 1989. 1, № 5. С. 44. [2] Деклу Ж. Метод конечных элементов. М., 1976.

Поступила в редакцию
30.11.90

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1991. Т. 32, № 3

АТОМНАЯ И ЯДЕРНАЯ ФИЗИКА

УДК 539.186.2

СЕЧЕНИЯ ВОЗБУЖДЕНИЯ $3p^53d$ -УРОВНЕЙ АРГОНА ЭЛЕКТРОНАМИ

В. Э. Бубелев, А. Н. Грум-Гржимайло

(НИИЯФ)

Получены сечения возбуждения всех уровней тонкой структуры $3p^53d$ -конфигурации атома аргона электронами. Расчеты проведены в приближении искаженных волн с учетом обменной амплитуды. Результаты сравниваются с известными экспериментальными данными.

Информация о сечениях возбуждения электронами уровней тонкой структуры аргона с конфигурацией $3p^53d$ важна для приложений в физике газового разряда и лазерной физике, а также для исследования механизмов возбуждения атомов. Экспериментальное изучение этих величин затруднено. Уровни $3d$ радиационно распадаются на уровни $4p$ с эмиссией в далекой инфракрасной области. Это препятствует применению оптического метода измерения сечений, в котором, кроме того, крайне сложно учесть процессы вторичного заселения излучающих состояний. Для трех уровней $3d$ с полным моментом $J=1$, распадающихся на основное состояние аргона с излучением в вакуумном ультрафиолете, данные скудны [1]. При интегрировании дифференциальных по углу рассеяния сечений (электрический метод) недостаточное разрешение электронных детекторов позволило получить результаты лишь для половины из общего числа $3d$ -уровней. [2]. Этот способ может дать плохо контролируемую ошибку экстраполяции на малые и большие углы рассеяния. Проведено также несколько измерений спектров потерь электронов под малыми углами [3], не содержащих количественных данных о величине сечений.

Надежные систематически расчеты к настоящему времени отсутствуют. Известны лишь полуэмпирические результаты для состояний с $J=1$, основанные на экспериментальных данных по спектрам потерь и расчетах обобщенных сил осциллятора $3s-3d$ -перехода [4, 5], а также полуквантовые оценки для нужд физики плазмы [6, 7]. В работе [8] проводились исследования дифференциальных характеристик возбуждения состояний $3p^53d$ ($J=1$).

В данном кратком сообщении мы приводим наши результаты, полученные методом искаженных волн с атомными волновыми функциями в промежуточном типе связи. Качество волновых функций проверялось сопоставлением вероятностей излучательных переходов с участием $3d$ -уровней со спектроскопическими данными [9] и с более точными расчетами [10]. Анализ показал хорошее качество волновых функций всех уровней, кроме тех, которые имеют полный момент $J=1$. В вычислениях сечений учитывались прямая и обменная амплитуды. Искажённые волны рассчитывались с использованием оптического потенциала конечного состояния аргона