

На правах рукописи



БЕЛАШЕВ БОРИС ЗАЛМАНОВИЧ

**РАЗВИТИЕ МЕТОДОВ ИНТЕГРАЛЬНЫХ
ПРЕОБРАЗОВАНИЙ В ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ
ОБРАБОТКИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ**

Специальность **05.13.18** - Математическое моделирование,
численные методы и комплексы программ

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
доктора технических наук

Петрозаводск - 2004

Работа выполнена в Институте геологии
Карельского научного центра РАН

Научный консультант: доктор физико-математических наук,
вед. н. с. Сулейманов М.К.

Официальные оппоненты:

доктор физико-математических наук, профессор
Ососков Геннадий Алексеевич (университет «Дубна»),
Дубна

доктор технических наук, профессор
Балакирев Валентин Сергеевич (МГУИЭ), Москва

доктор технических наук, профессор
Савин Игорь Константинович (ПетрГУ), Петрозаводск

Ведущая организация: Лаборатория информационных технологий
Объединенного Института Ядерных
Исследований, Дубна.

Защита диссертации состоится в ___ часов ___ декабря 2004 г.
на заседании диссертационного совета Д 212.190.03 в Петрозавод-
ском государственном университете по адресу: 185910, г. Петроза-
водск, пр. Ленина, д. 33.

С диссертацией можно ознакомиться в Научной библиотеке
Петрозаводского государственного университета.

Автореферат разослан "12" ноября 2004 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
кандидат технических наук,
доцент В. В. Поляков



В. В. Поляков

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА ДИССЕРТАЦИИ

Актуальность работы связана с совершенствованием способов регистрации, представления, передачи, хранения, обработки и интерпретации данных эксперимента.

Информационные проблемы эксперимента: выделение сигнала заданного вида из совокупности данных, определение влияния среды распространения на параметры сигнала, восстановление формы сигнала путем устранения искажений и помех продемонстрированы на примере физики высоких энергий.

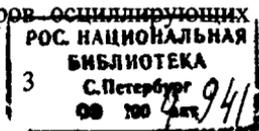
Рост множественности вторичных частиц с увеличением массы и энергии сталкивающихся ядер в ядро-ядерных взаимодействиях и разнообразии кинематических характеристик продуктов ядерных реакций предъявляют к электронным установкам коллайдерных пучков требование за минимальное время обеспечить отбор и обработку заданной топологии событий на уровне значительных помех. Повышение быстродействия электроники связывают с одновременным выполнением ею функций детектора, усилителя, преобразователя и устройства сжатия данных.

Вариант электроники, распознающей образы, устраняющей искажения, обеспечивающей помехозащищенность передаваемой информации, дают нейронные сети с особым типом логики, высокой степенью параллелизма и связности нейронов.

В технологиях АТМ стандарта преодолены недостатки магистрального способа передачи данных. За счет применения виртуальных каналов, без блокировочной коммутации пакетов, увеличения полосы пропускания мультимедийная информация с малой задержкой поступает к различным потребителям

В интерпретации данных ядро-ядерных экспериментов с большим числом частиц замечен переход от инклюзивных и полуклюзивных представлений к статистическим, характеризующим ядерное вещество усредненными параметрами, наподобие описания газовой и конденсированных сред.

Альтернативой повышению энергии сталкивающихся частиц является изучение связанных состояний атомов и частиц в интерференционных экспериментах, представляющих информацию в форме спектральных параметров осциллирующих зависимостей.



Интерференционные эксперименты нацелены на решение фундаментальных проблем обнаружения массы нейтрино, несохранения барионного и лептонного чисел.

Отмеченные тенденции связаны с применением интегральных методов, позволяющих получить информацию, недоступную прямому наблюдению, по-новому представить и передать данные, изучить многоканальные процессы и размытые распределения частиц.

Применимые к описанию статических и динамических систем, интегральные методы позволяют делать строгие выводы, обеспечивают обнаружение и исправление ошибок при передаче и хранении информации, облегчают обработку интегральных образов. Фурье - спектрометры дают на два-три порядка лучшее разрешение и скорость регистрации данных по сравнению со сканирующими приборами.

Возникнув в математике, интегральные преобразования нашли применение в теоретической и экспериментальной физике. В развитии теории заметную роль играли фейнмановские диаграммы и экстремальные принципы, а в технике - голограммы и мультиплексные системы измерения. Разработка методов решения обратных задач сблизила теорию и практику обработки данных экспериментов.

Часто модели, которым сопоставляют результаты экспериментов, строят на основе интегральных характеристик систем. Так, например, большой класс моделей интерпретирует структуру вещества по дифракционной картине излучений и частиц.

В процессе обработки данных эксперимента распространена замена обратной задачи прямой задачей определения параметров модельной функции, наилучшим образом аппроксимирующей данные. Неоднозначность решения обратной задачи трансформирована в неоднозначность выбора модельных функций или групп параметров, совместимых с данными. Выделение устойчивого решения обратной задачи в регуляризационных методах также связано с априорными ограничениями, накладываемыми на свойства решения. При этом введение априорной информации в задачу часто оказывается попыткой исследователя навязать природе собственные представления.

Понимая, необходимость априорной информации в принципе, мы стремились ограничить ее роль, получить сведения о модели процессов из данных наблюдения, используя при обработке фильтрационные и другие методы, дающие контрастную оценку решения обратной задачи. В этом смысле подход отвечает тенденции современных направлений прикладной статистики, в которых важность ограничения априорной информации методологически ясно осознается.

Цель работы - создание комплекса методов, моделей, алгоритмов, программных и технических средств, предназначенных для решения обратных задач обработки данных в области высоких энергий, материаловедения, статистической физики, геофизики.

Основные задачи:

- редукция данных к идеальному прибору;
- сравнение методов реконструкции сигналов;
- оценка структуры распределений частиц;
- построение моделей геофизических процессов;
- совершенствование схем регистрации и обработки данных;
- конструирования измерительных интегральных устройств;
- разработка алгоритмов и программ для обработки данных экспериментов интегральными методами;

Методы исследований и фактический материал: Основным методом исследования в диссертационной работе является метод иммитационного моделирования с элементами теоретического анализа.

На основе методов максимума энтропии (ММЭ), преобразований Фурье, Гильберта, Уолша, Френеля и авторегрессионной модели разработаны фильтрационные методы оценки структуры распределений частиц, алгоритмы и программы обработки данных, технические устройства (приборы).

Экспериментальные данные получены методами рентгеновской дифрактометрии, инфракрасной спектроскопии, люминесценции, ядерного гамма-резонанса, исследования диэлектриков. Данные по реакциям $\pi^- p^-$, $\pi^-^{12}\text{C}$ при $P_{\pi^-} = 40$ Гэв/с получены облучением пузырьковой пропановой камеры на пучке Серпуховского синхро-

фазотрона. Распределения, дифрактограммы, спектры частиц получены автором или соавторами работ. Частично использованы данные литературных источников.

При моделировании использованы программы преобразования Фурье FFT и интегральных методов библиотеки Церна, программа спектрального варианта ММЭ, авторские программы, реализованные в средах Watcom Fortran и Turbo Basic [32-36].

В основу диссертационной работы положены результаты исследований автора по планам научно-исследовательских работ Института геологии Карельского научного центра РАН и результаты, полученные в сотрудничестве с Объединенным Институтом Ядерных Исследований (г.Дубна) и Петрозаводским Университетом.

Научная новизна работы состоит в

1. исследовании границ ММЭ и его связи с регуляризационными методами решения обратных задач;
2. разработке фильтрационных методов оценки структуры размытых распределений частиц;
3. результатах решения ряда обратных задач физики высоких энергий, материаловедения, статистической физики;
4. моделях циклов формирования ленточных глин и движения тел в сейсмодислокациях при сейсмозодействии;
5. алгоритмах, программах обработки и устройствах регистрации данных.

Новыми физическими результатами работы являются в области физики высоких энергий:

- снятие априорных ограничений в статистической модели источников частиц Копылова-Подгорецкого;
- оценки структур спектров эффективных масс ($\pi^{\pm} p$) пар и распределений π -мезонов по быстрой в $\pi^- p$ - и $\pi^+ C$ - реакциях;
- независимость рождения кумулятивных π -мезонов и Δ -изобар;
- влияние массы мишени и заряда π -мезонов на число и значения характерных быстрой;

в области материаловедения:

- метод определения параметров кристаллической решетки;
- метод оценки ближнего порядка аморфных соединений;

- повышение разрешения дифрактограмм, ЯМР, ЯГР, ИК спектров материалов;

в статистической физике:

- применимость ММЭ к описанию состояний систем частиц, далеких от термодинамического равновесия;

- оценка концентрации промежуточного продукта и точки смены режима в системе открытых химических реакций.

Практическая значимость работы определена получением дополнительной информации об объекте исследования с помощью интегральных методов и устройств.

При помощи приставки к ИК спектрометрам [16] зарегистрированы ИК спектры рассеяния порошков, отражения малых образцов минералов и горных пород. Благодаря повышению разрешения ИК спектров при низких температурах [17] изучена температурная зависимость спектральных полос минералов [21]. Мультиплексные электроды [1,12] предназначены для измерения характеристик плоских диэлектриков, например, слюды мусковита, фотомагнитметр [11] и сквид [9] - для картирования магнитных полей установок и человека. Спектральными методами получены характеристики природных процессов и систем [25,27].

Оценки параметров геофизических процессов в разработанных моделях [38, 41] позволяют более обоснованно подойти к реконструкции обстановок прошлого и решению целого ряда инженерных и экологических проблем.

Полученные физические результаты могут быть приняты во внимание при планировании новых экспериментов. Сведения о связанных состояниях частиц [28] представляют интерес для энергетики, а структура ближнего порядка аморфных соединений - для установления ее связи с химической и радиационной стойкостью материалов [37]. Автоматическое дифрактометрическое определение параметров кристаллической решетки [26] эффективно при массовом анализе проб в геологии, например, при поиске и оценке благородных оруденений. Метрологическое значение имеет апостериорное повышение информативности экспериментальных распределений частиц [31,19,25].

Комплекс программ предназначен для оценки структуры размытых распределений частиц и спектральных параметров осцилля-

ционных зависимостей и позволяет вести обработку данных интерференционных и натуральных экспериментов [32-36].

Результаты исследований вошли в кандидатскую диссертацию автора, научные отчеты Института геологии Кар.НЦ РАН по темам НИР: "Исследование минералов с диэлектрическими свойствами и пути их практического использования", "Геологическое и технологическое изучение новых промышленных минералов и горных пород Карелии с целью комплексного использования и охраны окружающей среды", "Свекофенская эпоха эволюции беломорид (метаморфизм, гранитообразование, метасоматоз, пегматито- и рудогенез)", использованы при подготовке обобщающих обзоров и монографий. Результаты работы в виде отдельных программ обработки данных и регистрирующих устройств внедрены в Институте геологии Карельского научного центра РАН (г.Петрозаводск) и Лаборатории Высоких Энергий Объединенного Института Ядерных Исследований (г.Дубна).

Научная апробация работы: Основные результаты работы доложены и обсуждены на международных и национальных конференциях, совещаниях, семинарах:

- XXIII Школа по автоматизация научных исследований (Кишинев, 9-18 октября 1989);
- III Всесоюзная конференция Прикладная мессбауэровская спектроскопия (Казань, 10-12 июня 1992);
- I Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного, нейтронного и электронного излучений для исследования материалов (Дубна - Москва, 25-29 мая 1997);
- Karelia and Norway: the main trends and prospects of scientific cooperation (Petrozavodsk, 28-31 May, 1997);
- Международная конференция Углеродсодержащие формации в геологической истории (Петрозаводск 2-7 июня 1998);
- European Powder Diffraction Conference 6 (Hungary, Budapest 1998 August 23-25);
- Международный семинар Теория минералогии (Сыктывкар, 19-23 июня, 2000)
- Международная конференция Диэлектрики 2000 (С.-Петербург, 17-20 сентября 2000);

- III Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного, нейтронного и электронного излучений для исследования материалов (Москва, 210-23 мая 2001);
 - Международный семинар Минералоиды (Сыктывкар, 19-21 июня 2001);
 - Первый Всероссийский палеовулканический симпозиум совещание (Петрозаводск, 20-25 августа 2001);
 - XV международная конференция Математические методы в технике и технологиях (Тамбов, 2002,4-6 июня);
 - XVI International Baldin Seminar On High Energy Physics Problems (Dubna, 2002,12-15 June);
 - VI International European Conference on Residual Stresses in Material (Portugal, Coimra, 2002, August 2-9);
 - VIII Международная конференция Глубинное строение и геодинамика Фенноскандии, окраинных и внутриплатформенных транзитных зон (Петрозаводск, 16-20 сентября, 2002 г.)
 - V International Congress On Mathematical Modelling (Dubna, 2002, September 30-October 6);
 - IV Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике (Петрозаводск, 2003,29 мая - 3 июня);
 - XV Международное совещание Рентгенография и кристаллохимия минералов (С.-Петербург, 15-19 сентября, 2003);
 - XVI международная конференция Математические методы в технике и технологиях (С.-Петербург, 2003,16-19 сентября);
 - IV Национальная конференция по применению рентгеновского, синхротронного, нейтронного и электронного излучений для исследования материалов (Москва, 19-23 ноября 2003 г.);
 - V Всероссийский симпозиум по прикладной и промышленной математике (Кисловодск, 2004,1-4 июня);
 - XVII международная конференция Математические методы в технике и технологиях (Кострома, 2004,1-3 июня, 2004);
 - Международный семинар Кварц, кремнезем (Сыктывкар, 19-21 июня 2004);
- на семинарах Институтов геологии и прикладных математических исследований Карельского научного центра РАН), Лабораторий

Высоких энергий и Информационных технологий Объединенного института ядерных исследований (Дубна).

Материаловедческие исследования были поддержаны грантом РФФИ № 01-05-64230.

Структура и объем работы. Диссертация состоит из введения, шести глав и заключения. Объем диссертации составляет 251 страниц, в том числе 72 рисунка и 20 таблиц. Список литературы включает 288 наименований.

Публикации. Результаты диссертации опубликованы в 41 работе, включая 20 реферированных работ. Список приведен в конце автореферата.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении проанализированы тенденции развития методов регистрации и обработки экспериментальных данных, обоснована актуальность применения интегральных методов при решении обратных задач обработки данных, сформулированы цели и задачи исследований, приведены данные об апробации результатов, описана структура диссертационной работы.

В первой главе рассмотрены обратные задачи регистрации и обработки данных (регистрация данных с наилучшим отношением сигнал-шум, редукция данных к идеальному прибору, оценка структуры, спектральных характеристик, функций распределения данных, интроскопия) и методы их решения.

Математическая модель этих задач представлена уравнением Фредгольма I рода $s(x) = \sum_{\xi=1}^N h(x, \xi) f(\xi) + n(x)$, $x=1, \dots, M$, в котором

по наблюдаемому сигналу $s(x)$, линейному оператору $h(x, \xi)$ следует найти оценку сигнала $f(\xi)$ при наличии шума $n(x)$. Устойчивое решение такой некорректной задачи выделяют регуляризационным методом, вводя априорные ограничения. В алгебраических методах задачу сводят к системе линейных уравнений, решая переопределенные задачи ($M > N$) методами регрессионного анализа, а недоопределенные ($M < N$), не имеющих единственного решения, - методом псевдообратного оператора, минимизирующего норму функционала невязки наблюдаемого сигнала и его оценки. Апри-

орный функционал ММЭ дает максимально произвольную оценку сигнала при выполнении условий задачи.

Применимость интегральных преобразований Фурье, Гильберта, Френеля, Уолша, Радона к решению обратной задачи с инвариантным оператором $h(x, \xi) = h(x - \xi)$ основана на фильтрационных процедурах, позволяющих аналитически выразить оценки решения и их ошибки.

Вторая глава посвящена интегральному кодированию данных в физических экспериментах и разработанным интегральным устройствам (приборам) [1, 9, 11, 12, 16].

Интегральное кодирование элементов множества неприводимым полиномом над полем Галуа применяют в измерительных мультиплексных системах и при передаче данных. Преимущества мультиплексных систем перед сканирующими устройствами проявляются, если основной вклад в дисперсию измерений вносят посторонние помехи и шумы. Используемые в качестве циклических кодов, псевдослучайные последовательности длины N позволяют в N раз уменьшить дисперсию помехи.

В приставке к ИК спектрометрам фокусировкой излучения увеличена апертура и проведено суммирование лучей различных направлений. Благодаря этому расширен диапазон измерений: зарегистрированы спектры отражения и рассеяния малых образцов и порошков минералов и горных пород [16].

В мультиплексных фотоманометре, сквиде, электродах (Рис.1) точность и скорость картирования повышены за счет сбора данных с большой площади, распределения ошибки измерения по нескольким элементам, малого числа перемещений датчика [9, 11, 12]. Устойчивость электродов, их контакт с диэлектриком улучшены специальной конфигурацией магнитного поля [1].

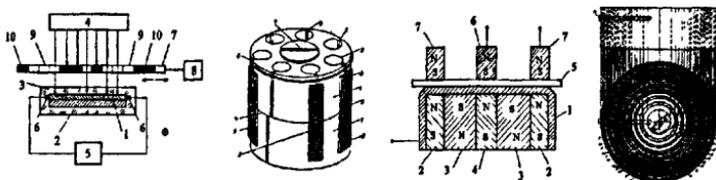


Рис. 1. Схемы мультиплексных фотоманометра, сквида, электродов для измерения характеристик диэлектриков

В третьей главе исследованы известные и предложены новые интегральные методы обработки данных. В задаче редукции сигналов к идеальному прибору продемонстрирована применимость ММЭ для широкого класса сигналов, аппаратурных функций, видов и уровней шума. При реконструкции импульсного сигнала [4] получены зависимости пространственного и амплитудного разрешения от уровня шума, оценены границы применимости ММЭ, для аддитивного белого шума, составившие 20-30% [39]. Множителям Лагранжа приписан смысл обратных "температур" данных [13].

ММЭ представлен как нелинейный регуляризационный метод с регуляризирующим оператором $H^T (HG_k H^T + V_k / \rho)^{-1}$, где H - описывает матрицу $h(x, \xi)$, G_k и V_k - диагональные матрицы, составленные из значений оценок решения и шума на k -ой итерации. Регуляризирующий оператор ММЭ - модификация псевдообратного оператора $H^T (HH^T)^{-1}$ [40]. Для $N=M$ и диагональной матрицы H в преобразованном виде $G_k^{-1} H^T (HH^T + V_k G_k^{-1} / \rho)^{-1}$ он содержит оператор $V_k G_k^{-1}$ производный от стабилизирующего оператора, минимизирующего сумму $\sum_{k=1}^M \ln \frac{\hat{f}_k(x)}{\hat{n}_k(x)}$. Преобразованная в логарифм

произведения, эта сумма дает информацию ММЭ оценки решения. Таким образом, требование максимума энтропии соответствует минимальной информации, содержащейся в оценке решения, в форме условий обратной задачи. Оператор $V_k G_k^{-1}$ задает контраст ММЭ оценки, обостряя интенсивные пики и размывая слабые. Благодаря нахождению регуляризирующего оператора в показателе экспоненты ММЭ оценки происходит подавление отрицательных выбросов и ускорение сходимости итерационного процесса.

В отличие от распространенных методов решения обратной задачи ММЭ реконструирует импульсные сигналы, дает оценки, не содержащие осцилляционных выбросов, допускает высокие уровни шума. При восстановлении низкочастотных сигналов результаты ММЭ и регуляризационных методов близки. Трудности ММЭ

проявляются при реконструкции пиков на плавном фоне, когда выбором одного параметра ρ невозможно удовлетворить противоречивым требованиям в характере сигнала [8]. В задаче аппроксимации данных в отличие от метода максимального правдоподобия, минимизирующего сумму квадратов отклонений данных от моделирующей функции, ММЭ максимизирует сумму парциальных квадратов, взвешенных множителями [14]. Условие максимума энтропии естественным образом выделяет полосу погрешностей шириной в $2\sqrt{2}$ среднеквадратичных отклонения a . Высокая чувствительность к шуму не позволяет считать алгебраический метод MART быстрым ММЭ алгоритмом.

Благодаря преобразованию и анализу интегрального образа распределения частиц новые фильтрационные методы дают контрастную оценку структуры размытого распределения частиц без использования конкретных сведений о функции размытия [24]. При анализе информативными оказались симметризации распределения частиц $f(v)$ и поведение модулей фурье образов синглета и мультиплета. Умножение фурье образа $F(\omega)$ на функцию $\cos(\omega\Omega) = \frac{1}{2}(e^{i\omega\Omega} + e^{-i\omega\Omega})$ с параметром

Ω дает удвоение и сдвиг компонент и позволяет оценить структуру по особенностям получаемой оценки и параметру Ω . В линейной комбинации фурье образа и его гильберт образа с множителями $\cos(\omega\Omega)$ и $\sin(\omega\Omega)$ изменением параметра Ω регулируем расщепление дублетов. А умножением фурье образа распределения частиц на функцию $\exp(\frac{\Gamma}{2}|\omega|)$ с параметром Γ сужает ширины пиков в получаемой оценке (Рис. 2). Введение пробных функций размытия позволяет реализовать эту идею при помощи ММЭ и обрабатывать распределений частиц при уровнях шума в 20-30% [37].

В авторегрессионной модели аппроксимирующую функцию $y(l)$ задает линейная комбинация предшествующих данных $x(l-k)$:

$$y(l) = \sum_{k=1}^p a(k)x(l-k).$$
 Ошибка $y(l)-x(l)$ предстает как шум, возникающий при прохождении данными "отбеливающего" фильтра с коэффициентами $a(k)$. Спектр мощности сигнала получают деле-

нием спектральной плотности шума на квадрат модуля спектральной функции фильтра. Для спектрального анализа осциллирующих зависимостей использованы вариант ММЭ Бурга, метод Писаренко, оценивающий частоты и амплитуды гармонических составляющих сигнала и метод Прони, дающий оценки характеристик затухающих составляющих сигналов. Их результативность доказана примерами обработки экспериментальных и симулированных данных [28].

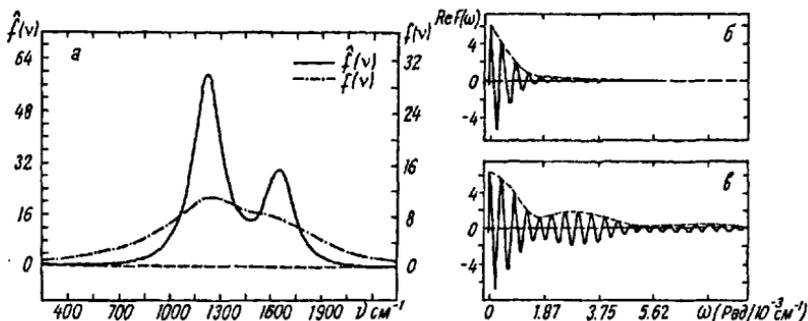


Рис. 2. Регулирование ширины пиков: исходное распределение $f(v)$ и его оценка $\hat{f}(v)$ (а); - действительные части исходного фурье-образа $F(\omega)$ (б) и преобразованного фурье-образа $F_1(\omega)$ (в).

Четвертая глава посвящена применению развитых методов в физике высоких энергий, статистической физике, материаловедении [2, 3, 5-7, 10, 19, 22, 23, 25, 26, 28-31, 37].

В статистической модели Копылова-Подгорецкого, описывающая экспериментальные данные, формула вероятности обнаружения двух тождественных частиц с разностью 4-х импульсов

$\{\vec{q}_0, \vec{q}\}$, испущенных источниками с координатами \vec{r}_1, \vec{r}_2 в моменты времени t_1, t_2 и временем жизни τ ,

$$W(\vec{q}_0, \vec{q}) = 1 + \frac{\cos[\vec{q}(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) - q_0(t_1 - t_2)]}{1 + (q_0 \tau)^2}$$

представлена через фурье образы $F(\vec{q}), X(q_0)$ распределения источников $f(\vec{R})$ и $\chi(t)$ по переменным $\vec{R} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ и $t = t_1 - t_2$

$$W(0, \vec{q}) = 1 + F(\vec{q})$$

$$W(q_0, \vec{q}) = 1 + CF(\vec{q})X(q_0) \quad (2)$$

Распределения источников восстанавливают обратным преобразованием Фурье функций $F(\vec{q})$ и $X(q_0)$. Число пар тождественных частиц, для применения метода, оценено в $10^6 - 10^7$ [2,28].

Пики спектров эффективных масс ($\pi^\pm p$) пар близки к положениям Δ_0^{++} (1.232), Δ_0^{++} (1.650), Δ_0^{++} (1.670), Δ_0^{++} (1.910). Неизменность формы оценки спектра при исключении кумулятивных π -мезонов указывает на независимость процессов рождения Δ -изобар и кумулятивных π -мезонов [3,6,28].

Структура распределений π -мезонов по быстрой в $\pi^- p, \pi^-^{12}C$ реакциях (Рис. 3) дает области фрагментации мишени, налетающей частицы, сохранения π -мезона. Значения характерных быстрот зависят от массы мишени и зарядов π -мезонов [7,28].

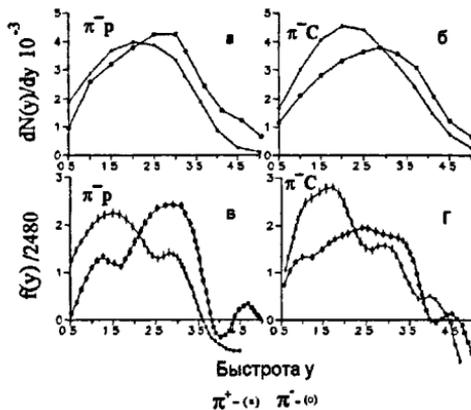


Рис. 3. Распределение π -мезонов по быстрой в $\pi^- p$ (а) и $\pi^-^{12}C$ (б) взаимодействиях и их оценки соответственно (в), (г), полученные методом уменьшения ширины пиков.

Для определения параметров кристаллической решетки оптимизирована ММЭ оценка рентгенограммы эталонного образца кварца. Параметры оптимизации - число шагов рентгенограммы, коэффициент ММЭ p , шаг множителей Лагранжа, общее число итераций. В результате точность определенных параметров кристаллической решетки приближена к точности фотометода за счет повышения точности определения положения дифракционного максимума, снижения статистического разброса, разделения пиков спектральных линий K_{α_1} , K_{α_2} , использования прецизионной области углов дифракции. Существенным преимуществом нового метода является возможность его автоматизации [26].

Предложен метод оценки ближнего порядка (БП) аморфных материалов, альтернативный методу функций радиального распределения, извлекающий дополнительную информацию из рентгенограммы соединения путем повышения ее разрешения и контрастности. Метод опробован на силикатных стеклах [37] шунгитах [22] и других углеродах [23]. Для стекол ближний порядок сопоставлен известным кристаллическим модификациям. Для титанового стекла ближний порядок соответствует изоструктурам (Рис. 4). Обнаружен полиморфизм ближнего порядка в одном соединении.

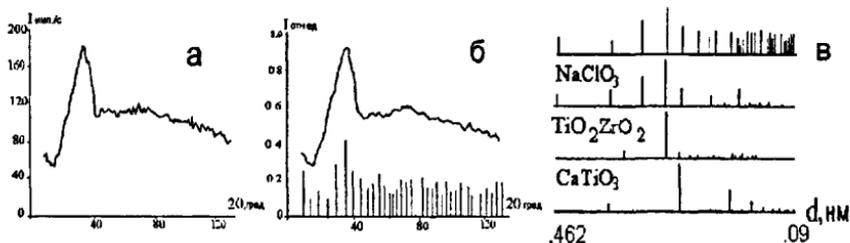


Рис. 4. Дифрактограмма титанового стекла (а), ее ММЭ оценка и штрихдиаграмма (б) и результаты идентификации БП (в)

Цель апостериорной обработки нейтронных дифрактограмм, ЯМР, ЯГР и ИК спектров - проверка достоверности результатов ММЭ аппаратными методами высокого разрешения [28, 31]. Установлено сходство минералов дестинезита и диадохита [19],

получены сведения о примесях кварца по структуре размытой ОН полосы его ИК спектра [25,31].

Нахождение по данным наблюдения функции распределения величин основано на положительности и максимальной энтропии оценки. Описание равновесных и неравновесных состояний при помощи ММЭ приводит к известным результатам. Для стационарного состояния системы открытых автокаталитических химических реакций рассчитана концентрация промежуточного продукта и найдено ее значение, характеризующее смену режима [29,30].

В пятой главе подчеркнута роль интегральных параметров процессов для выявления их механизмов и построения моделей.

На примерах люминесценции, маркирующей перспективные участки пегматитовых жил, и спектра мощности скорости течения через пролив продемонстрирована информативность спектральных методов детектирования геофизической информации [25, 27]. Сделанные оценки периодов формирования ленточных глин подтвердили влияние приливного механизма планет Солнечной системы на осадконакопление [41].

Дальность перемещения тел (интегральный параметр) положен в основу моделей полета обломка и выдвигания блока породы в сейсмодислокациях (Рис.5), дающих путем решения обратной задачи оценку скорости поверхности и интенсивности палеоземлетрясений [38].

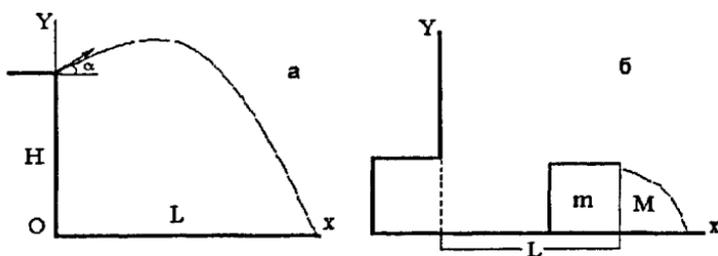


Рис. 5. Схемы движения обломка (а) и выдвигания блока (б)

Диапазон оценки начальных скоростей тел в сейсмологической шкале сопоставлен интенсивности палеоземлетрясений. Проверка

моделей на сейсмодислокациях Карелии (Табл.), подтвердила возможность 6-7 бальных землетрясений в регионе [38].

Оценка балльности землетрясений в модели полета обломков

Положение сейсмодислокации	H [м]	L [м]	$v_{\min} - v_{\max}$ [м/с]	$v_{c\min} - v_{c\max}$ [см/с]	I баллы
Городок ПК-3	33.9	36.9	11.5-17.8	4.6-7.1	6-7
ПК-13	20.7	36.8	14.7-25.6	5.9-10.2	6-7
Гора Церковная	22.5	24.9	10.1-15.7	4.0-6.2	6-7
Вилозеро	14.6	22.1	10.8-18.1	4.3-7.8	6-7
Колгостров	20.0	27.0	11.5-18.9	4.6-7.6	6-7
Губа Святуха ПР-2	32.1	45.0	13.7-29.7	5.5-19.9	6-7(8)
ПР-3	29.1	98.2	26.8-56.9	10.7-22.8	7-8
ПР-4	27.1	41.0	14.7-24.7	5.9-9.9	6-7
Уницкая губа	7.0	13.0	9.0-16.1	3.6-6.5	6-7
Сегозеро	30.0	34.8	12.6-19.9	5.0-7.9	6-7
Имплахти	26.0	51.0	17.5-30.3	7.0-12.8	7
о-в. Мякисало	40.0	41.4	13.1-20.8	5.2-8.3	6-7
п. Харлу	30.0	51.2	17.0-29.1	6.8-11.6	7
Кирьволахти	21.5	41.4	15.6-27.9	6.2-11.2	7
оз. Пулосаари	12.0	11.2	9.8-16.5	3.9-6.6	6-7
залив Меклахти	24.0	40.0	14.9-25.6	6.0-10.2	6-7

В шестой главе описан комплекс используемых программ, разработанных по известным и усовершенствованным автором алгоритмам [32-36]. Комплекс состоит из программ трехмерного преобразования Фурье, ММЭ устранения функции размытия, визуальной аппроксимации распределения, методов спектрального анализа ММЭ, Писаренко и Прони.

В заключение дана краткая формулировка основных результатов исследований, изложенных в диссертации, подтверждающих перспективность предложенного подхода к моделированию и исследованию сложных систем.

Основные результаты, выносимые на защиту

1. Определены границы применимости ММЭ при восстановлении импульсного сигнала. Даны оценки точности его реконструкции в широких диапазонах ширин гауссовой аппаратурной функции и уровней белого шума.
2. Доказано, что ММЭ является нелинейным вариантом регуляризационного метода решения обратной задачи, описываемой уравнением Фредгольма I-ого рода.
3. Разработаны фильтрационные методы оценки структуры распределения частиц, состоящего из однопиковых, перекрывающихся пиков при наличии фона.
4. Разработаны новые алгоритмы, реализующие ММЭ и авторегрессионные методы. Создан комплекс программ обработки результатов экспериментов и наблюдений для оценивания структур размытых распределений частиц и спектральных параметров осцилляционных зависимостей.
5. Предложенные математические методы решения обратных задач позволили разработать новые физические методы и получить ряд конкретных результатов в области физики высоких энергий, статистической физики и материаловедения. В рамках статистической модели источников множественного рождения частиц Копылова - Подгорецкого предложены способы фурье реконструкции области генерации по пространственной и временной переменным. Выявлены структуры спектров эффективных масс ($\pi^\pm p$) пар и распределений по быстрой вторичных π -мезонов в $\pi^- p$ и $\pi^- \pi^+$ - реакциях при $P_{\pi^-} = 40$ Гэв/с. Разработаны новые дифрактометрические методы оценивания параметров кристаллической решетки и ближнего порядка аморфных соединений, упрощающих процесс анализа материалов. В далеком от термодинамического равновесия стационарном состоянии системы открытых

химических реакций $A + 2X \xrightleftharpoons[k_2]{k_1} 3X$, $X \xrightleftharpoons[k_4]{k_3} B$ даны оценки концентрации промежуточного продуктами точки смены режима

6. Построена математическая модель цикличности формирования ленточных глин экзогенным приливным механизмом планет Солнечной системы (на примерах озер Онежского, Ладожского, Пухаярви). Созданы модели движения тел в сейсмодислокациях, позволяющие оценить интенсивность палеоземлетрясений.
7. Сконструированы устройства (приборы) для регистрации магнитных полей, характеристик диэлектриков, инфракрасных спектров материалов.

Публикации:

1. Белашев Б.З., Кизик В.В. Устройство для измерения удельного сопротивления диэлектриков // Ав.св. G 01 N 27/02 № 648894, 1979, БИ №7, 1979.
2. Белашев Б.З., Сулейманов М.К., Чеплаков А.Л. Фурье-алгоритм для определения пространственных характеристик процесса множественного рождения частиц//Препринт ОИЯИ, 1-80-150, Дубна, 1980.
3. Белашев Б.З., Аношин А.И. и др. Фурье-алгоритм для анализа спектров эффективных масс. Результаты поиска барионных резонансов в $\pi^- p$ - и $\pi^- C$ - взаимодействиях при $P_{\pi^-} = 40$ ГэВ/с. // Препринт ОИЯИ, P1-80-574, Дубна, 1980.
4. Белашев Б.З., Сороко Л.М. Обработка экспериментальных данных методом максимума энтропии // Сообщение ОИЯИ, P10-80-696, Дубна, 1980.
5. Белашев Б.З., Аношин А.И. и др. Анализ спектров, содержащих резонансы, при помощи фурье-алгоритма // Сообщение ОИЯИ, P1-81-679, Дубна, 1981.
6. Белашев Б.З., Аношин А.И. и др. Анализ спектров эффективных масс ($\pi^\pm p$) в $\pi^{12}C$ - взаимодействиях при помощи фурье-алгоритма // Сообщение ОИЯИ, P1-81-680, Дубна, 1981.
7. Белашев Б.З., Аношин А.И. и др. Анализ распределения по быстродействию вторичных π -мезонов в реакциях $\pi^- p$ - и $\pi^- C$ // Сообщение ОИЯИ, P1-81-681, Дубна, 1981.
8. Белашев Б.З., Данилов В.И., Сороко Л.М. Исследование спектров методом максимума энтропии// Сообщение ОИЯИ, P10-82-101, Дубна, 1982.
9. Белашев Б.З., Сороко Л.М., Горделий В.И. Мультиплексный сквид // Ав.св. №884521, 1982.
10. Белашев Б.З. Исследование возможностей преобразования Фурье и метода максимума энтропии для обработки спектров частиц высоких энергий / Автореферат кандидатской диссертации // М., НИИЯФ МГУ, 1982.
11. Белашев Б.З., Сороко Л.М. Фотомагнитный магнитометр // Ав.св. G 01 R 33/02 SU № 1056092 A, 1983, БИ, № 43, 1983.
12. Белашев Б.З., Терновой А.Н. Ячейка для измерения диэлектрических характеристик электроизоляционных материалов // Ав.св. G 01 N 27/22 S U № 1182372, 1985, БИ № 36, 1985.

13. Белашев Б.З., Сороко Л.М. Метод максимума энтропии и пуассоновский шум // Сообщение ОИЯИ, P10-85-884, Дубна, 1985.
14. Белашев Б.З., Сороко Л.М. Метод максимума энтропии и температура экспериментальных данных // Сообщение ОИЯИ, P10-85-885, Дубна, 1985.
15. Белашев Б.З., Сороко Л.М. Решение обратной задачи методом максимума энтропии и проблема устойчивости оценок // Сообщение ОИЯИ, P10-85-886, Дубна, 1985.
16. Белашев Б.З., Терновой А.Н. Приставка к ИК спектрометрам для получения ИК спектров рассеяния порошкообразных материалов и спектров отражения малых образцов // ЖПС, 1986,45,1, с. 161-163.
17. Белашев Б. З., Терновой А. Н. Криостат - приставка к ИК спектрометрам// ЖПС, 1989,50,1, с. 158-162.
18. Белашев Б.З., Терновой А.Н. Оптико-температурный гистерезис материалов // ЖПС, 1996,63, с. 681-685.
19. Белашев Б.З., Яковлев А.Н. Применение максимума энтропии для обработки рентгенограмм и гамма спектров аморфных минералов // Труды РСНЭ'97, Дубна, 25-29 мая 1997, т. 1, с. 92-94.
20. B. Z. Belashev, Yu. A. Panebratsev, E. I. Shahaliev, L.MSoroko Maximum entropy technique in doublet structure analysis // HNR Communication E1 1-98-90, Dubna, 1998,22 p.
21. Белашев Б.З. Влияние температуры на интенсивность полос $\nu(\text{OH})$ воды в ИК спектрах некоторых силикатных минералов // ЖПС, 1999, 66, с. 124-127.
22. Белашев Б.З., Яковлев А.Н. Опыт расшифровки структуры шунгита методом решения обратной задачи / Труды международного симпозиума Углеродсодержащие формации в геологической истории (2-7 июня 1998 г., Петрозаводск) // Петрозаводск, 2000, с. 102-106.
23. Белашев Б.З., Яковлев А.Н. Ближний порядок аморфных углеродных соединений/ Труды международного симпозиума Некристаллическое состояние твердого минерального сырья 19-21 июня, 2000г. Сыктывкар // Сыктывкар, 2000, с. 211-212.
24. Белашев Б.З. Методы реконструкции размытого спектра // ЖПС, 2001,68,5, с. 639-645.
25. Белашев Б.З., Попова Т.В. Спектральные методы детектирования геологической информации // Материаловедение, 2001,7, с. 25-29.
26. Белашев Б.З., Яковлев А.Н. Определение параметров кристаллической решетки методом максимума энтропии // Поверхность, 2002, 9, с. 45-48.

27. Белашев Б.З., Сулейманов М.К. Поиск периодичностей в экспериментальных данных методами авторегрессионной модели // Письма в ЭЧАЯ, 2002, № 3 [112], с. 77-86.

28. Белашев Б.З., Сулейманов М.К. О некоторых обратных задачах ядерной физики // Письма в ЭЧАЯ, 2002, № 4 [113], с. 63-72

29. Белашев Б.З., Сулейманов М.К. Метод максимума энтропии. Статистическое описание систем // Письма в ЭЧАЯ, 2002, №6 [115], с. 44-50.

30. Белашев Б.З., Сулейманов М.К. Моделирование автокаталитических реакций / Труды XV международной конференции Математические методы в технике и технологиях, (4-9 июня 2002 г., Тамбов) // Тамбов, 2002, т. 4, с. 82-84.

31. Белашев Б.З., Сулейманов М.К. Апостериорное повышение разрешения распределений методом максимума энтропии/ Труды XVI международной конференции Математические методы в технике и технологиях, (16-19 сентября 2003 г., С.-Петербург)// Ростов на Дону, 2003, т.6, с. 58-59.

32. Белашев Б.З. Программа для ЭВМ Визуальная подгонка распределения "VISUALFIT" // Св. Роспатента № 2004610195,2004.

33. Белашев Б.З. Программа для ЭВМ Устранение аппаратурной функции и шума в экспериментальном распределении "MEMFR" // Св. Роспатента № 2004610196,2004.

34. Белашев Б.З. Программа для ЭВМ Вычисление амплитуд гармоник сигнала "PISAR" // Св. Роспатента № 2004610421,2004.

35. Белашев Б.З. Программа для ЭВМ Вычисление амплитуд и фаз гармонических компонент сигнала "FAZAR" // Св. Роспатента №2004610422,2004.

36. Белашев Б.З. Программа для ЭВМ Вычисление частот по коэффициентам отбеливающего фильтра "FREQUENCIES"// Св. Роспатента №2004610423,2004.

37. Белашев Б.З., Яковлев А.Н., Озерова Г. Н., Лебедева Г.А. Применение метода максимума энтропии к анализу ближнего порядка в стеклах //Поверхность, 2004, №8, с. 101-105; "Исследовано в России", <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2004/058.pdf>.

38. Б.З.Белашев, А.Д.Лукашов Физические модели оценивания интенсивности палеоземлетрясений // "Исследовано в России", <http://zhurnal.ape.relarn.ru/articles/2004/098.pdf>.

39. Белашев Б.З. О пространственном и амплитудном разрешении метода максимума энтропии / Труды XVII международной конференции Математические методы в технике и технологиях, (1-3 июня 2004 г., Кострома) // Кострома, 2004, т. 2, с. 128-131.

40. Белашев Б.З. О связи метода максимума энтропии и регуляризационных методов решения обратных задач / Труды XVII международной конференции Математические методы в технике и технологиях, 1-3 июня 2004 г., Кострома// Кострома, 2004, т. 2, с. 124-128.

41. Белашев Б.З. Циклы формирования ленточных глин // Обозрение прикладной и промышленной математики, 2004, т. 11, в. 2, с. 296-297; Cyclic Structure of Varved Clay Strata in Karelian Lakes Degradation Rhythms of Old Glaciation // Karelia & Norway. Proc. Scien. Conf. (28-1 May, 1997) Petrozavodsk, 1998, с 69-73.

Изд. лиц. № 00041 от 30.08.99. Подписано в печать 18.10.04. Формат 60x84¹/₁₆.
Бумага офсетная. Гарнитура «Times». Печать офсетная.
Уч.-изд. л. 1,5. Усл. печ. л. 1,4. Тираж 100 экз. Изд. № 61. Заказ № 442

Карельский научный центр РАН
185003, Петрозаводск, пр. А. Невского, 50
Редакционно-издательский отдел

■23508