УДК 535.342.01

К ВОПРОСУ О ВЫБОРЕ МОДЕЛИ КОЭФФИЦИЕНТА ПОГЛОЩЕНИЯ И ОПРЕДЕЛЕНИИ ЕЕ ПАРАМЕТРОВ ДЛЯ НАИЛУЧШЕЙ АППРОКСИМАЦИИ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ РЕЗУЛЬТАТАМИ ТЕОРЕТИЧЕСКИХ РАСЧЕТОВ

А. Г. Покровский и *М. Я. Розинский*

В настоящей работе для некоторой модели коэффициента поглощения выбираются такие значения параметров, при которых расхождение между теоретическими и экспериментальными спектрами оказывается наименьшим. Пригодность выбранной модели для описания данного процесса определяется в таком случае величиной минимального расхождения.

В настоящей работе авторы предприняли попытку подойти с точки зрения идей и методов нелинейного программирования к проблеме, сформулированной в заглавии статьи. Работа состоит из трех параграфов. В § 1 будет показано, как указанная проблема сводится к задаче, решаемой методами нелинейного программирования. В § 2 мы приводим пример, демонстрирующий возможности практического применения предлагаемого подхода. § 3 посвящен изложению некоторых аспектов дальнейшего развития теории и практики разработанного авторами метода.

§ 1. В настоящее время в связи с широким использованием для интерпретации атмосферных спектров поглощения в ИК области и для других задач так называемых прямых методов расчета (подробный обзор по этим методам дан в работе [1]), а также в связи с постановкой и решением задач, аналогичных обратной задаче термического зондирования ([2]), все большую роль играет проблема выбора модели коэффициента поглощения и ее параметров, при использовании которых экспериментальные данные аппроксимировались бы в широком диапазоне физических условий наилучшим образом.

Из эксперимента мы можем получить значения среднего спектрального поглощения $\tilde{A}_э(\nu)$ в интервале $[\nu_\alpha, \nu_\beta]$, пользуясь формулой

$$\tilde{A}_э(\nu) = \frac{\tilde{I}_{0\nu} - \tilde{I}_\nu}{\tilde{I}_{0\nu}}, \qquad (1.1)$$

где $\tilde{I}_{0\nu}$ $(\tilde{I}_\nu)$ — средняя спектральная интенсивность ИК излучения, падающего на входную (выходную) щель спектрометра. Для теоретического расчета этой величины, как правило, используется формула

$$\tilde{A}_т(\nu) = \int\limits_{-\infty}^{+\infty} \{1 - \exp[uK_{\mathbf{x}}(\nu')]\}\, g(\nu - \nu')\, d\nu', \qquad (1.2)$$

где $\mathbf{x} = (x_1, \ldots, x_n)$ — набор параметров, определяющий конкретный вид коэффициента поглощения в рамках принятой модели, а посредством свертки с функцией $g(\nu)$ учитывается искажающее влияние прибора (предполагается, что $\int\limits_{-\infty}^{+\infty} g(\nu) d\nu = 1$).

Будем рассматривать набор физических условий, при которых получена величина $\bar{A}_э(\nu)$, как точку r-мерного евклидова пространства ($\mathbf{y} \in R_r$). Тогда, если ставить задачу аппроксимации экспериментальных значений теоретическими в некоторой области физических условий Δ ($\Delta \in R_r$), то следует рассматривать величины $\bar{A}_э(\nu)$ и $\bar{A}_т(\nu)$ уже как функции $r+1$ переменной ($\mathbf{y}' = (\nu, y_1, \ldots, y_2)$), определенные на множестве Δ' ($\Delta' = \{\mathbf{y}' : \nu \in [\nu_\alpha, \nu_\beta], y \in \Delta\}$) и в качестве критерия аппроксимации использовать величину выражения

$$\max_{\mathbf{y}' \in \Delta'} |\bar{A}_э(\mathbf{y}') - \bar{A}_т(\mathbf{y}')|. \tag{1. 3}$$

Однако ввиду невозможности построения функции $\bar{A}_э(y')$ для всех $\mathbf{y}' \in \Delta'$ мы вынуждены искать максимум $|\bar{A}_э(\mathbf{y}') - \bar{A}_т(\mathbf{y}')|$ не на всем Δ', а лишь на некотором конечном его подмножестве M. Наши намерения при этом не пострадают, так как можно показать, что для всякого $\alpha > 0$ при соответствующем выборе M из неравенства $\max\limits_{\mathbf{y}' \in \Delta'} |\bar{A}_э(\mathbf{y}') - \bar{A}_т(\mathbf{y}')| \leqslant \varepsilon$ будет следовать неравенство $\max\limits_{\mathbf{y}' \in \Delta'} |\bar{A}_э(\mathbf{y}') - \bar{A}_т(\mathbf{y}')| \leqslant (1+\alpha)\varepsilon$.

Как видно из формулы (1. 2), $\bar{A}_т(\mathbf{y}')$ является функцией вектора x, следовательно, целесообразно ввести обозначение

$$f(\mathbf{x}) = \max_{\mathbf{y}' \in M} |\bar{A}_э(\mathbf{y}') - \bar{A}_т(\mathbf{y}', \mathbf{x})|. \tag{1. 4}$$

В таком случае вопрос о выборе набора параметров $\mathbf{x}$, при котором в рамках принятой модели функция $\bar{A}_э(\mathbf{y}')$ наилучшим образом аппроксимировалась бы функцией $\bar{A}_т(\mathbf{y}')$, сводится к задаче отыскания минимума функции $f(\mathbf{x})$, для решения которой в математике разработаны многочисленные методы. Далее, если $f_A(\mathbf{x})$ и $f_B(\mathbf{x}')$ — функции, определяемые по формуле (1. 4) для моделей A и B соответственно, то естественно считать, что модель A лучше, чем модель B, описывает реальную ситуацию в том и только в том случае, когда $\min\limits_{\mathbf{x}' \in R_n} f_A(\mathbf{x}) < \min\limits_{\mathbf{x}' \in R'_n} f_B(\mathbf{x}')$.

Таким образом, мы получили критерий применимости данной модели для описания реального процесса, определяемый с помощью методов нелинейного программирования.

§ 2. Числовой эксперимент был проведен в январе 1969 г. в ВЦ СОАН СССР. Методика его несколько отличалась от предложенной выше, так как для первого раза предпочтение было отдано более примитивной, но значительно более простой в реализации методике.

В качестве контура поглощения был взят лоренц-допплеровский контур. В этом случае, если на отрезке спектра $[\nu_\alpha, \nu_\beta]$ расположено N линий, $n = 4N$ и $\mathbf{x} = (\nu_{0_1}, \ldots, \nu_{0_N}, E_{0_1}, \ldots, E_{0_N}, S_{0_1}, \ldots, S_{0_N}, \gamma_{L_{0_1}}, \ldots, \gamma_{L_{0_N}})$, где ν_{0_i} — центр, E_{0_i} — энергия, S_{0_i} — интегральная интенсивность и $\gamma_{L_{0_i}}$ — лоренцевская полуширина i-й линии. Однако величины ν_{0_i} E_{0_i} определялись на основе квантовомеханических расчетов и оставались неизменными, так что варьировались только значения S_{0_i}, $\gamma_{L_{0_i}}$. Для определения значений $\bar{A}_э(\nu, \mathbf{y})$ использовались результаты опытов К. П. Василевского (спектры поглощения H_2O на участке 4230—4240 $см^{-1}$). Набор параметров, доставляющий минимум функции $f(\mathbf{x})$, искался отдельно для каждого из имевшихся четырех наборов условий эксперимента $\mathbf{y}^{(i)}$ $i = 1, 2, 3, 4$ (т. е. $\Delta'_i = \{(\nu, \mathbf{y}^{(i)}) : \nu \in [\nu_\alpha, \nu_\beta]\}$). Для поиска минимума $f(\mathbf{x})$ был применен так называемый метод покоординатного наискорейшего спуска (его описание можно найти в работе [3]), несколько измененный в связи с некоторыми особенностями функции $f(\mathbf{x})$.

Результаты опыта представлены в таблице и на рис. 1, 2. В качестве начальных значений **x** были взяты величины, приведенные в [4], средние значения компонент **x** вычислялись только по совокупности близких величин.

Собственные частоты, см$^{-1}$	Исходные данные ($S_{o_i} \cdot \gamma_{L_{o_i}}$)	Значения по экспериментам				Конечные данные ($S_{o_i} \cdot \gamma_{L_{o_i}}$)
		№ 1	№ 2	№ 3	№ 4	
4230.15	0.868 0.0495	0.440 0.048	0.515 0.051	0.433 0.047	0.440 0.044	0.440 0.048
4230.35	0.280 0.049	0.100 0.098	0.140 0.134	0.137 0.137	0.142 0.129	0.140 0.130
4239.88	0.245 0.059	0.200 0.036	0.200 0.032	0.200 0.057	0.198 0.057	0.200 0.057
4239.99	0.1125 0.068	0.0645 0.063	0.0525 0.039	0.0525 0.079	0.0535 0.079	0.053 0.079
4240.00	0.237 0.072	0.232 0.023	0.230 0.022	0.235 0.023	0.230 0.029	0.232 0.023

Анализируя полученные результаты, можно сделать следующие выводы. Во-первых, градиент функции f (**x**) мал в достаточно большой окрестности точки ее минимума. Следовательно, можно выбрать значение **x**, вполне удовлетворяющее всем **y**′. К тому же необходимо учесть, что в про-

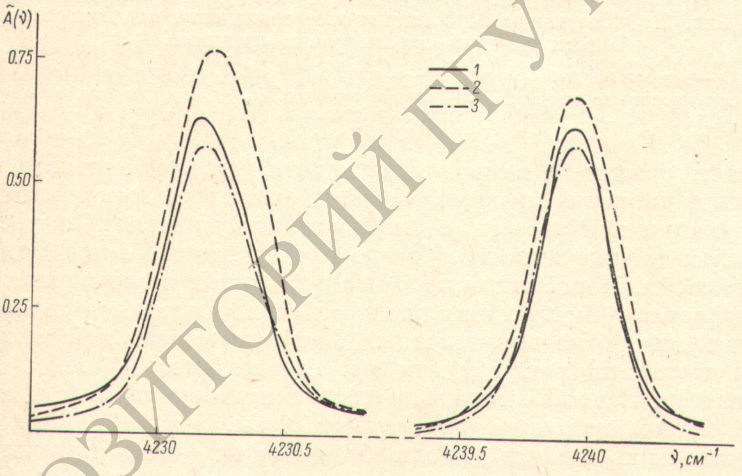

Рис. 1. Эксперимент № 1 (наихудшее совпадение индивидуальных значений параметров со средними).

1 — кривая значений $\tilde{A}_э$ (**y**′), *2* — кривая значений $\tilde{A}_т$ (**y**′) при начальных значениях параметров **x**, *3* — кривая значений $\tilde{A}_т$ (**y**′) при средних значениях параметров **x**.

веденном эксперименте значительная часть оставшегося расхождения между $\tilde{A}_э$ (**y**′) и $A_т$ (**y**′) объясняется несовершенством метода минимизации f (**x**).

Подводя итоги данного эксперимента, можно сказать, что даже при несовершенной методике минимизации f (**x**) можно получить хорошее приближение экспериментальных значений среднего спектрального поглощения теоретическими. Однако о сравнении моделей можно будет говорить лишь, применив для минимизации f (**x**) более совершенный метод.

§ 3. Для дальнейшего развития предложенного здесь подхода важнейшей задачей является создание совершенного метода минимизации f (**x**), а точнее — применение уже имеющихся методов [5] к нашей задаче. Второй по важности является проблема сокращения затрат машинного времени на решение подобных задач. Здесь мы сталкиваемся с такими проблемами, как оптимальный выбор множества M и отыскания критериев, позволяющих сравнивать a priori экономичность различных методов. Очень важен также вопрос о числе минимумов функции $f(\mathbf{x})$, так как интерес представляет только главный минимум, а в то же время ни одним из методов нельзя отличить локальный минимум от главного. Представляет также интерес вопрос о точной оценке градиента $f(\mathbf{x})$ вблизи точки ее минимума.

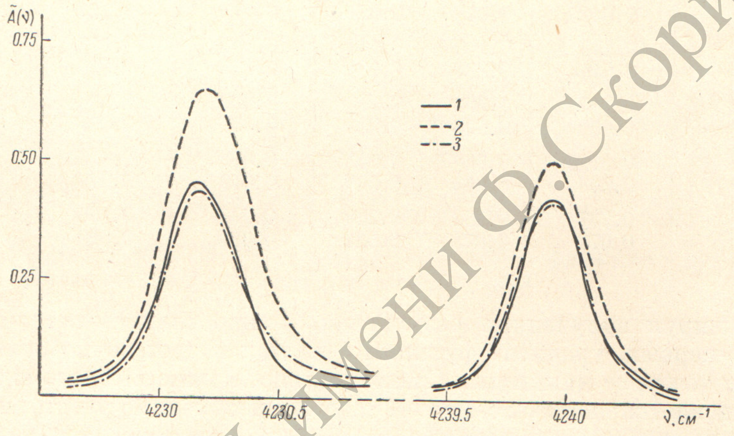

Рис. 2. Эксперимент № 3 (наилучшее совпадение индивидуальных значений параметров со средними).

1 — кривая значений $\tilde{A}_э(\mathbf{y}')$, *2* — кривая значений $\tilde{A}_т(\mathbf{y}')$ при начальных значениях параметров x, *3* — кривая значений $\tilde{A}_т(\mathbf{y}')$ при средних значениях параметров x.

Наконец, сравнивая те или иные модели для коэффициента поглощения, нельзя упускать из вида, что на качество аппроксимации влияет и вид «функции прибора» $g(\nu)$. Следовательно, можно добиваться в рамках одной и той же модели лучшего приближения, меняя модели $g(\nu)$ и их параметры. Подобный опыт, так же как опыт по сравнению моделей для коэффициента поглощения, целесообразно проводить лишь при совершенном алгоритме минимизации $f(\mathbf{x})$, поэтому такой эксперимент и не был поставлен, хотя задуман был значительно раньше.

Мы надеемся, что большинство намеченных здесь опытов и предложений в скором времени будут осуществлены.

В заключение авторы хотели бы выразить свою признательность К. Я. Кондратьеву за постоянное внимание и помощь в разработке данной проблемы, а также В. Ф. Демьянову и В. Н. Малоземову за многочисленные и полезные консультации и К. П. Василевскому, любезно предоставившему в наше распоряжение обширный экспериментальный материал.

Литература

[1] К. Я. Кондратьев, Ю. М. Тимофеев. Физика атмосферы и океана. Изв. АН СССР, *3*, № 2, 1967.
[2] К. Я. Кондратьев, Ю. М. Тимофеев. Проблемы физики атмосферы. ЛГУ, сб. 5, 1967.
[3] В. Т. Поляк. Экономика и матем. методы, *3*, № 6, 1967.
[4] D. M. Gates, R. F. Calfee, D. W. Hansen, W. S. Benedict. Line parameters and computed spectra for water vapour bands at 2.7 μ. NBS monography, 71, August, 1964.
[5] В. Ф. Демьянов. Кибернетика, *2*, № 6, 1966.

Поступило в Редакцию 7 июля 1969 г.