

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДОВ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ДЛЯ МОДЕЛЬНО- И ДЕТЕКТОРНО-НЕЗАВИСИМОГО ОЦЕНИВАНИЯ РАСПРЕДЕЛЕНИЙ (ПРОБЛЕМА АНФОЛДИНГА, АНСМИРИНГА, ДЕКОНВОЛЮЦИИ)

В.Б.Аникеев, В.П.Жигунов

Институт физики высоких энергий, Протвино

В связи с большими объемами статистики в настоящее время каждый эксперимент по измерению сечений и структурных функций нуклона заканчивается корректировкой экспериментальных гистограмм на ограниченный акцептанс и конечное разрешение детектора. Очевидно, что такая процедура должна быть модельно-независимой. В работе рассмотрены следующие методы корректировки: метод наименьших квадратов (метод псевдорешения), метод Тихонова, метод спектрального окна, итерационный метод, метод корректирующих множителей, метод максимума энтропии и др. Для всех методов проведен анализ статистической и систематической ошибок оценок в рамках единой модели, связывающей экспериментальную гистограмму с изучаемым распределением. Использование перечисленных методов рассмотрено для оценивания непрерывных распределений и структурных функций. Изложение проиллюстрировано численными экспериментами.

Modern experiments on measuring cross sections and nucleon structure functions contain high statistics and include a procedure of correcting experimental histograms by limited acceptance and finite resolution of the detector. It is evident that this routine should be model independent. In this paper the following correcting methods are considered: least-squares method (pseudoinversion method), Tikhonov's method, spectral window method, iteration method, correction factors method, maximum entropy method, etc. The analysis of statistical and systematical errors of obtained estimates for all methods is given in the framework of unified model that binds the experimental histogram with the distribution being studied. Methods enumerated above are used to obtain estimates of continuous distributions and structure functions. Numerical experiments are used as illustrations.

ВВЕДЕНИЕ

Цель многих экспериментов в физике высоких энергий — измерение дифференциальных сечений кинематических переменных, описыва-

ющих конечное состояние после столкновения частиц или их распада. В настоящее время объем данных, получаемых в этих экспериментах, настолько велик, что не статистическая ошибка данных, а систематические ошибки экспериментов становятся определяющим фактором. Одним из главных источников систематических ошибок в экспериментальных данных является конечное разрешение детекторов и их аксептанс. Поэтому непосредственные экспериментальные данные являются детекторно-зависимыми оценками измеряемых дифференциальных сечений. Это приводит к тому, что экспериментальные данные приходится «корректировать» на аксептанс детектора и его разрешение. При такой «корректировке» часто привлекают модельные соображения, что, в свою очередь, приводит к модельно-зависимым оценкам сечений. Из сказанного следует, что проблема стала весьма актуальной в последние годы и носит весьма общий характер. Ее решению посвящено множество работ, однако в них отсутствует общая постановка задачи; имеет место недопонимание того, что она является некорректной обратной задачей, решение которой приводит либо к неприемлемо большой статистической ошибке в оценке сечений, либо к систематической ошибке при использовании методов регуляризации для подавления раскачки измерительных ошибок. Как следствие, отсутствует анализ существования и величины последней при «корректировке» экспериментальных данных. Очевидно, что выбор метода «корректировки» данных эксперимента и его анализ надо делать и на стадии планирования эксперимента, т.к. только после этого можно увидеть, насколько «хорошей» может быть оценка сечения при данном разрешении детектора и планируемой статистике эксперимента.

Поэтому в обзоре каждый метод рассматривается по следующей схеме:

— формулировка математической модели, связывающей изучаемое распределение с данными эксперимента;

— «корректировка» экспериментальных данных — это фактически решение обратной некорректной задачи, задаваемой сформулированной моделью;

— различные методы «корректировки» данных — это различные методы регуляризации этой задачи;

— различные методы регуляризации ведут к различным оценкам изучаемого сечения;

— для оценки должна быть дана характеристика ее смещенности (систематическая ошибка) и характеристика шумовой составляющей (статистическая ошибка).

Сформулируем модель процесса измерения [1], поскольку она будет использоваться во всех разделах обзора. Большая часть излагаемого материала инвариантна к числу кинематических переменных, от которых зависит изучаемое дифференциальное сечение. Поэтому для краткости

мы будем говорить об одной переменной, которую обозначим x . В результате реконструкции события по непосредственно измеряемым величинам в детекторе и оценивания величины x мы получим вместо ее истинного значения некоторое другое значение x' . В целом этот процесс описывается условной плотностью вероятности $K(x'|x)$, которую будем называть разрешением эксперимента по переменной x . В литературе разрешением по x часто называют стандартное отклонение $\sigma(x)$, неявно предполагая, что $K(x'|x)$ является нормальным распределением:

$$N(x'|x, \sigma^2(x)) = (\sqrt{2\pi} \sigma(x))^{-1} \exp\{(x' - x)^2 / 2\sigma^2(x)\}.$$

Функция $K(x'|x)$ вычисляется по методу Монте-Карло с использованием программы симуляции работы детектора и реконструкции событий. Подробнее мы остановимся на этом вопросе позже.

Другими характеристиками эксперимента является функция $E(x)$, которая есть вероятность регистрации детектором события с данным x (акцептанс или эффективность детектора) и $\bar{E}(x')$ — вероятность включения события с полученным x' в окончательную статистику эксперимента после проведения обрезаний по кинематическим переменным в процессе анализа событий.

В результате этих детекторных искажений вместо изучаемого нормированного распределения $p(x) = d\sigma/dx/\sigma_{\text{tot}}$ получается экспериментальное распределение

$$\tilde{p}(x') = c \int dx \tilde{E}(x') K(x'|x) E(x) p(x), \quad (1)$$

где c — нормировочная константа, а интеграл берется по всем допустимым значениям x при данной энергии пучковой частицы. Интегрирование $p(x)$ с ядром $K(x'|x) \geq 0$ обладает фильтрующим свойством и приводит к сглаживанию распределения $p(x)$, потере его тонкой структуры. Наличие $E(x)$, $\tilde{E}(x') \leq 1$ приводит к дополнительным искажениям. Поэтому различие между истинным распределением $p(x)$ и экспериментальным $\tilde{p}(x')$ (систематическая ошибка) может быть весьма значительным и превышать статистическую ошибку, что и заставляет «корректировать» данные эксперимента.

Этими данными являются числа событий в каналах гистограммы по величине x , которые мы обозначим Y_n . Из выражения (1) следует, что их математические ожидания равны*

*В дальнейшем знак \leftarrow над выражением будет означать усреднение по ошибкам измерения, а знак \wedge над функцией — оценку этой функции.

$$\bar{Y}_n = L \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx' \tilde{E}(x') \int dx K(x'|x) E(x) \frac{d\sigma}{dx},$$

где L — интегральная светимость эксперимента. Вводя обозначения

$$S(x) = L d\sigma/dx, \quad A_n(x) = \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx' \tilde{E}(x') K(x'|x) E(x), \quad (2)$$

мы можем окончательно записать математическую модель эксперимента в виде [1]:

$$Y_n = \int dx A_n(x) S(x) + \varepsilon_n, \quad n = 1, \dots, N, \quad (3)$$

где ε_n — флуктуация числа событий Y_n в n -м канале гистограммы. Относительно ε_n предполагаем, что $\bar{\varepsilon}_n = 0$, $\overline{\varepsilon_n \varepsilon_m} = K_{nm} \approx \delta_{nm} / Y_n$. Функции $A_n(x)$ имеют прозрачный смысл: $A_n(x)$ — есть вероятность попадания события с данным x в n -й канал гистограммы.

Функции $A_n(x)$ могут быть вычислены только по методу Монте-Карло:

- разыгрывается N событий при данном x ;
- для каждого события, используя программу симуляции детектора, получают «измерения»;
- используя программу реконструкции, вычисляют значение x' ;
- подсчитывают число событий k в n -м бине гистограммы по x' ;
- вычисляют значение $A_n(x) = k/N^*$.

Выражение (3) для измерения Y_n естественно интерпретировать как скалярное произведение функций $S(x)$ и $A_n(x)$. Вводя это скалярное произведение в пространство искомым функций $S(x)$, превращаем его в гильбертово пространство. Теперь любая функция $S(x)$ может быть записана как сумма двух компонент: $S_A(x)$, принадлежащей подпространству, натянутому на систему функций $A_n(x)$:

$$S_A(x) = \sum_{n=1}^N C_n A_n(x), \quad (4)$$

и $S_A^\perp(x)$ — компоненты, ортогональной этому подпространству:

*Отметим, что если разрешение по переменной x зависит от других кинематических переменных, то аппаратные функции могут оказаться зависящими от модели взаимодействия, заложенной в программу Монте-Карло.

$$\int dx A_n(x) S_A^\perp(x) = 0. \quad (5)$$

Отсюда следует, что составляющая $S_A^\perp(x)$ не может быть оценена на основании только Y_n , так как из (3) и (5) следует, что Y_n от нее не зависят. Часто $S_A(x)$ называют «измеримой» («видимой») компонентой $S(x)$, а $S_A^\perp(x)$ «неизмеримой» («невидимой»).

Из этих рассуждений следует важный вывод: в рамках модели (3), если $S_A^\perp(x) \neq 0$, конечность числа измерений приводит к смещенности оценки функции $S(x)$.

В рамках модели (3) в первом разделе мы рассмотрим линейные оценки $S(x)$, во втором разделе — нелинейные, как с привлечением априорной информации о положительности $S(x)$ (принцип максимума энтропии и др.), так и без привлечения — метод корректирующих множителей. Третий раздел посвящен оцениванию структурных функций нуклона по данным глубоконеупругого рассеяния лептонов, где будет дано обобщение модели (3) на одновременное оценивание двух функций.

1. ЛИНЕЙНЫЕ ОЦЕНКИ СЕЧЕНИЙ

При изложении методов и их численных иллюстраций мы будем в основном следовать [2]. Из двух примеров, использованных в [2] для сравнения методов, здесь мы используем исторически более ранний [1]:

$$S(x) = C \left[A_1 \frac{G_1^2}{(x-x_1)^2 + G_1^2} + A_2 \frac{G_2^2}{(x-x_2)^2 + G_2^2} \right],$$

$$E(x) = 1 - \frac{x-x_1}{x_2-x_1 + 2G_2}, \quad \tilde{E}(x') = 1,$$

$$K(x'|x) = N(x'|x, \sigma^2),$$

где $x \in [4, 16]$, $A_1 = 2$, $A_2 = 1$, $G_1 = G_2 = 1$, $x_1 = 10$, $x_2 = 14$, $\sigma = 1,5$ и C выбиралось из условия $\int dx S(x) = 10^4$ (см. рис.1,а).

Общие свойства линейных оценок. Линейная оценка $\hat{S}(x)$ в общем случае имеет вид

$$\hat{S}(x) = \sum_{n=1}^N a_n(x) Y_n. \quad (6)$$

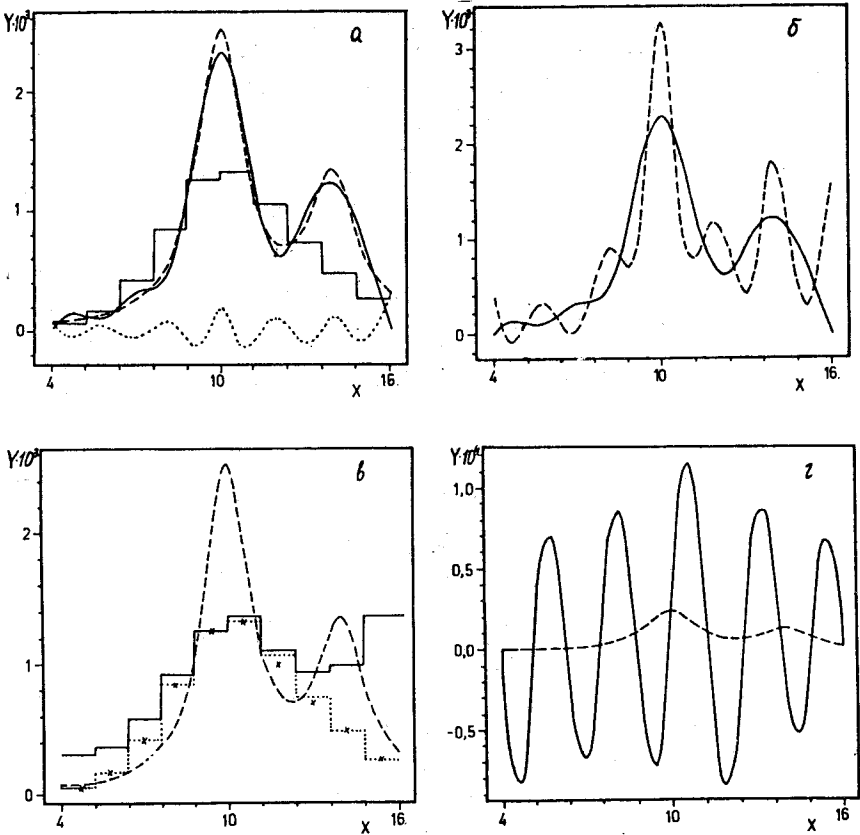


Рис.1. а) Гистограмма — распределение $(d\bar{Y}/dx)_n$ ($\epsilon_n = 0$), сплошная линия — $S_A(x)$, штриховая — функция $S(x)$, пунктирная — «неизмеримая» компонента $S_A^+(x)$; б) сплошная линия — $S_A(x)$, штриховая линия — $S_A(x) + 5S_A^+(x)$; в) гистограмма — ступенчатая оценка \hat{S}_0 , штриховая линия — функция $S(x)$, пунктирная — распределение $(d\bar{Y}/dx)_n$ ($\epsilon_n = 0$), маркеры — моделированное распределение $(dY/dx)_n$ ($\epsilon_n \neq 0$), $Sp A_R^0 = 3,03$, $Sp \Sigma^0 = 1,86 \cdot 10^4$; з) сплошная линия — оценка по МНК $\hat{S}^+(x)$ ($\epsilon_n \neq 0$), штриховая — функция $S(x)$; $Sp A_R^+ = 10$, $Sp \Sigma^+ = 1,1 \cdot 10^9$

Из (4) и (5) следует, что для разумных оценок, которые не используют априорную информацию, $a_n(x)$ должны лежать в подпространстве, натянутом на $A_n(x)$.

Если использовать соотношение (3), то $\hat{S}(x)$ можно представить следующим образом:

$$\hat{S}(x) = \sum_n a_n(x) \int dx' A_n(x') S(x') + \sum_n a_n(x) \epsilon_n. \quad (7)$$

Проводя усреднение (7) по ошибкам измерений, мы имеем

$$\bar{\hat{S}}(x) = \sum_n a_n(x) \int dx' A_n(x') S(x') = \int dx' A_R(x, x') S(x'), \quad (8)$$

где функция

$$A_R(x, x') = \sum_n a_n(x) A_n(x') \quad (9)$$

может быть названа остаточной аппаратной функцией [1].

Из (8) следует, что если $A_R(x, x')$ не обладает свойством

$$\int dx' A_R(x, x') S_A(x') = S_A(x), \quad (10)$$

то оценка $\hat{S}(x)$ будет обладать дополнительным смещением, которое связано с выбором конкретного метода оценивания (конкретным выбором функций $a_n(x)$ в (6)).

Шумовая составляющая оценки $\hat{S}(x)$ характеризуется, как это следует из (7) и (8), оператором ошибок [1]:

$$\Sigma(x, x') \equiv \overline{(\hat{S}(x) - \bar{\hat{S}}(x))(\hat{S}(x') - \bar{\hat{S}}(x'))} = \sum_{n,m} a_n(x) K_{nm} a_m(x'). \quad (11)$$

Итак, линейная оценка общего вида (6) может интерпретироваться как результат «нового эксперимента» с новой аппаратной функцией $A_R(x, x')$ и шумовой составляющей $\xi(x) = \sum_n a_n(x) \epsilon_n$ с оператором ошибок (11).

Рассмотрим средний квадрат расстояния между $S_A(x)$ и $\hat{S}(x)$:

$$\begin{aligned} D^2 &= \overline{\int dx [S_A(x) - \hat{S}(x)]^2} = \\ &= \overline{\int dx [(S_A(x) - \bar{\hat{S}}(x)) + (\bar{\hat{S}}(x) - \hat{S}(x))]^2} = \\ &= \int dx [S_A(x) - A_R S]^2 + \text{Sp } \Sigma. \end{aligned}$$

Отсюда видно, что в целом шумовую составляющую оценки $\hat{S}(x)$ удобно характеризовать значением $\text{Sp } \Sigma$. Далее мы увидим, что разре-

шение «нового эксперимента» (соответственно смещение оценки $\hat{S}(x)$) удобно характеризовать величиной $\text{Sp } A_R$ [3].

Метод наименьших квадратов. Рассмотрим прежде всего свойства оценки по методу наименьших квадратов (МНК). Опираясь на рассуждения об «измеримой» компоненте $S(x)$, будем искать оценку $S(x)$ в виде [4, 6]:

$$\hat{S}(x) = \sum_n C_n A_n(x)$$

из условия минимума функционала

$$\Phi = \sum_{n,m} \left[Y_n - \int dx A_n(x) \hat{S}(x) \right] W_{nm} \left[Y_m - \int dx A_m(x) \hat{S}(x) \right],$$

который в этом случае принимает вид:

$$\Phi = \sum_{n,m} (Y_n - \sum_k G_{nk} C_k) W_{nm} (Y_m - \sum_l G_{ml} C_l), \quad (12)$$

где $W = K^{-1}$, $G_{nk} = \langle A_n | A_k \rangle = \int dx A_n(x) A_k(x)$ — матрица Грама функций $A_n(x)$. Дифференцирование функционала (12) по C_i приводит к следующей системе уравнений на вектор C :

$$G^T W G \hat{C} = G^T W Y. \quad (13)$$

Поскольку матрицы G и W являются положительно определенными, то решение этой системы уравнений можно записать в виде

$$\hat{C} = G^{-1} Y.$$

Следовательно, оценка $S(x)$ согласно МНК есть

$$\hat{S}^+(x) = \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} Y_m. \quad (14)$$

Легко видеть, что $\int dx A_n(x) \hat{S}^+(x) = Y_n$ и функционал (12) обращается в нуль.

Более формальный способ [4] получения оценки (14) основан на теории интегральных уравнений [5]. Минимизация функционала МНК

$$\Phi = \sum_n \left[\tilde{Y}_n - \int dx \tilde{A}_n(x) \hat{S}(x) \right]^2,$$

где $\tilde{Y}_n = \sqrt{W_n}$, $\tilde{A}_n(x) = \sqrt{W_n} A_n(x)$ при $W_{nm} = W_n \delta_{nm}$, по функции $S(x)$ приводит к интегральному уравнению с вырожденным ядром:

$$\sum_n \tilde{A}_n(x) \int dx' \tilde{A}_n(x') S(x') = \sum_m Y_m \tilde{A}_m(x).$$

Общее решение этого уравнения имеет вид

$$\hat{S}(x) = \sum_{n=1, m=1}^N \frac{1}{\lambda_n} U_n(x) \langle U_n | \tilde{A}_m \rangle Y_m + S_A^\perp(x),$$

где $S_A^\perp(x)$ — любое решение соответствующего однородного уравнения, $U_n(x)$ — собственные функции, λ_n — собственные значения ядра уравнения

$$\sum_n \tilde{A}_n(x) \int dx' \tilde{A}_n(x') U_n(x') = \lambda_n U_n(x).$$

Линейно независимые решения $S_A^\perp(x)$ образуют счетное множество, ортогональное функциям $U_n(x)$. Из последнего уравнения следует, что $U_n(x)$ являются линейными комбинациями функций $\tilde{A}_n(x)$, а следовательно, первый член решения $\hat{S}(x)$ («измеримая» компонента $S(x)$) является линейной комбинацией исходных аппаратных функций $A_n(x)$.

Остаточная аппаратная функция $A_R(x, x')$ в МНК

$$A_R^+(x, x') = \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} A_m(x') \quad (15)$$

обладает максимально достижимым разрешением, так как не искажает «измеримую» компоненту $S(x)$ (соотношение (10) выполняется)

$$\begin{aligned} \int dx' A_R^+(x, x') S_A(x') &= \int dx' \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} A_m(x') \sum_l C_l A_l(x') = \\ &= \sum_{n,m,l} C_l A_n(x) G_{nm}^{-1} G_{ml} = \sum_l C_l A_l(x) = S_A(x). \end{aligned} \quad (16)$$

Это означает, что оценка $\hat{S}^+(x)$ по МНК является несмещенной оценкой проекции $S(x)$ на подпространство, натянутое на систему функций $A_n(x)$, т.е. то подпространство, которое доступно для «измерения» экспериментом: $\hat{S}^+(x) = S_A(x)$ (см. рис.1,а).

Оценка (14) может быть получена как решение следующей вариационной задачи:

$$\min_{S(x)} \Phi = \int dx S^2(x)$$

при условии, что $\langle A_n | S \rangle = Y_n$, $n = 1, \dots, N$. Выражение (14) называют [6,7] псевдорешением, а оператор $\sum_n A_n(x) G_{nm}^{-1}$ — псевдообратным оператором для системы уравнений $\langle A_n | S \rangle = Y_n$, если скалярное произведение в пространстве $S(x)$ определено как $\langle \tilde{S}, S \rangle = \int dx \tilde{S}(x) S(x)$, а в пространстве измерений как $\langle \tilde{Y}, Y \rangle = \sum_{n,m} \tilde{Y}_n W_{nm} Y_m$.

Выполнение (10) для $A_R^+(x, x')$ фактически означает, что $A_R^+(x, x')$ в МНК является проектором на «измеримую» часть пространства функций $S(x)$. Действительно, обозначая его P_A , можно убедиться, что $P_A^2 = P_A$. Ортогональным ему проектором на «измеримую» часть пространства функций $S(x)$ является

$$P_A^\perp(x, x') = \delta(x - x') - P_A(x, x').$$

Вычислим характеристику разрешения, введенную ранее:

$$\text{Sp } A_R^+ = \int dx \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} A_m(x) = N.$$

Это согласуется с естественным утверждением: чем больше число измерений, чем больше размерность «измеримого» пространства, тем лучше, в принципе, можно построить оценку $\hat{S}(x)$ на основании измерений Y_n .

Оператор ошибок и его шпур для оценки МНК даются выражениями

$$\begin{aligned} \Sigma^+(x, x') &= \sum_{n,m,l,k} A_n(x) G_{nm}^{-1} K_{ml} G_{lk}^{-1} A_k(x'), \\ \text{Sp } \Sigma^+ &= \text{Sp } K G^{-1}. \end{aligned} \quad (17)$$

Рассмотрим с общей точки зрения шумовую составляющую оценки $\hat{S}^+(x)$. При достаточно больших значениях недиагональных элементов матрицы G (функции $A_n(x)$, $A_m(x)$, $n \neq m$, сильно перекрываются, что обычно и происходит на практике) она может оказаться плохо обусловленной. Следствием этого является наличие малых собственных значений λ у матрицы G . Это может привести к неприемлемо большому шуму в $\hat{S}^+(x)$, что видно из следующих рассуждений.

Введем собственные векторы $|g^{(l)}\rangle$ и собственные значения λ_l матрицы Грама G :

$$G |g^{(l)}\rangle = \lambda_l |g^{(l)}\rangle, \quad \langle g^{(l)} | g^{(m)} \rangle = \delta_{lm}. \quad (18)$$

Используя теорему о спектральном представлении G^{-1} , мы можем записать

$$G^{-1} = \sum_{l=1}^N \frac{|g^{(l)}\rangle\langle g^{(l)}|}{\lambda_l}. \quad (19)$$

Подставляя (19) в выражение (14) для $\hat{S}^+(x)$, имеем

$$\hat{S}^+(x) = \sum_{n,m,l} A_n(x) g_n^{(l)} g_m^{(l)} \frac{(\bar{Y}_m + \varepsilon_m)}{\lambda_l}. \quad (20)$$

Отсюда видно, что шумовая составляющая $\hat{S}^+(x)$ пропорциональна ε_m/λ_l , которые при малых λ_l могут быть весьма большими. Это видно также из выражения (17) для $\text{Sp } \Sigma$, если рассмотреть частный случай $K_{nm} = \sigma^2 \delta_{nm}$: $\text{Sp } \Sigma = \sum_l \sigma^2/\lambda_l$.

Для нашего численного примера $\lambda_{\min} = 0,105 \cdot 10^{-5}$, $\lambda_{\max} = 0,821$. Добавление к точным значениям \bar{Y}_n относительно малых статистических флуктуаций ε_n (см. рис.1,а) приводит к драматическому возрастанию шумовой составляющей в оценке $\hat{S}^+(x)$ (см. рис.1,б).

Таким образом, хотя оценка $\hat{S}^+(x)$ имеет конечную шумовую составляющую ($\lambda_{\min} \neq 0$), ее большое значение приводит к необходимости использования методов регуляризации, разработанных для решения некорректных задач.

Общим методом подавления шумовой составляющей $\hat{S}^+(x)$ является фильтрация $\hat{S}^+(x)$ через шумоподавляющий фильтр $U(x, x')$: $\hat{S}(x) = \int dx' U(x, x') \hat{S}^+(x')$. Если $UP_A^\perp = 0$, то можно показать, что $\hat{S} = US_A$ [8]. Более того, любая оценка может быть записана как результат фильтрации $\hat{S}^+(x)$ через $U(x, x') = A_R(x, x')$ данной оценки. Действительно, используя (6), (9) и (14), имеем

$$A_R \hat{S}^+ = \sum_n a_n(x) \int dx' A_n(x') \sum_{m,k} A_m(x') G_{mk}^{-1} Y_k = \sum_n a_n(x) Y_n. \quad (21)$$

Наиболее широко распространенные методы выбора $A_R(x, x')$ (или $a_n(x)$) мы рассмотрим далее.

Иногда пользуются простейшей оценкой $\hat{S}_0(x)$ в виде ступенчатой функции, которая учитывает эффективность регистрации $E(x)$, но пренебрегают отличием разрешения $K(x, x')$ от δ -функции. Для сравнения

получим выражения для $S_0(x)$ и ее характеристик $A_R^0(x, x')$, $\Sigma^0(x, x')$, $\text{Sp } A_R^0$, $\text{Sp } \Sigma^0$.

Ищем $\hat{S}_0(x)$ в виде

$$\hat{S}_0(x) = \sum_n a_n \chi_n(x)$$

по МНК из условия минимума функционала

$$\Phi = \sum_{n,m} \left[Y_n - \int dx \chi_n(x) E(x) \sum_k a_k \chi_k(x) \right] \times \\ \times W_{nm} \left[Y_m - \int dx \chi_m(x) E(x) \sum_l a_l \chi_l(x) \right],$$

где χ_n — характеристическая функция n -го бина экспериментальной гистограммы:

$$\chi_n(x) = \begin{cases} 1, & x \in [x_n, x_{n+1}) \\ 0, & x \notin [x_n, x_{n+1}) \end{cases}$$

Обозначая $\int dx \chi_n(x) E(x) \chi_n(x) = C_n$, имеем

$$\hat{S}_0(x) = \sum_n \chi_n(x) C_n^{-1} Y_n,$$

$$A_R^0(x, x') = \sum_n \chi_n(x) C_n^{-1} A_n(x'),$$

$$\text{Sp } A_R^0 = \sum_n C_n^{-1} \int_{x_n}^{x_{n+1}} dx A_n(x),$$

$$\Sigma^0(x, x') = \sum_{n,m} \chi_n(x) C_n^{-1} W_{nm}^{-1} C_m^{-1} \chi_m(x'),$$

$$\text{Sp } \Sigma^0 = \sum_n C_n^{-2} \Delta x_n K_{nn}, \quad \Delta x_n = x_{n+1} - x_n.$$

На рис.1,а приведены $\hat{S}_0(x)$ и значения $\text{Sp } A_R^0$, $\text{Sp } \Sigma^0$. Сравнение последних со значениями $\text{Sp } A_R^+$, $\text{Sp } \Sigma^+$ показывает, как улучшение разрешения в оценке $\hat{S}^+(x)$ может приводить к драматическому увеличению шумовой составляющей. Рис.1,б иллюстрирует, как учет неэффективности $E(x)$ в ступенчатой оценке может приводить к нелепому результату при плохом разрешении $K(x, x')$: большие значения Y_n из-за плохого разрешения в

последних двух бинах, исправленные на малую эффективность в них, приводят к выбросу в $\hat{S}_0(x)$.

Метод спектрального окна. Метод спектрального окна как метод регуляризации сводится к подавлению вклада малых λ_l в (19) введением под знак суммы множителя $f(\lambda_l)$ [6]:

$$\tilde{G}^{-1} = \sum_{l=1}^N f(\lambda_l) \frac{|g^{(l)}\rangle\langle g^{(l)}|}{\lambda_l} \quad (22)$$

такого, что $f(\lambda) \leq 1$ и $f(\lambda)$ мало для малых собственных значений. Для дальнейшего анализа разрешения и шума оценки, получаемой из $\hat{S}^+(x)$ заменой G^{-1} на \tilde{G}^{-1} , удобно ввести функции

$$\Psi_l(x) = \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \sum_n g_n^{(l)} A_n(x). \quad (23)$$

Можно убедиться, используя (18), что $\Psi_l(x)$ образуют ортонормированный базис в «измеримом» пространстве:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_l | \Psi_k \rangle &= \sum_{n,m} \int dx \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} g_n^{(l)} A_n(x) \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} g_m^{(k)} A_m(x) = \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{\lambda_l \lambda_k}} g_n^{(l)} G_{nm} g_m^{(k)} = \sum_n \frac{1}{\sqrt{\lambda_l \lambda_k}} g_n^{(l)} \lambda_k g_n^{(k)} = \delta_{lk}. \end{aligned}$$

На рис.2 приведены $\Psi_n(x)$ при $n = 1, 3, 5, 7, 9$.

Проведя замену $G^{-1} \rightarrow \tilde{G}^{-1}$ в выражении (14) для $\hat{S}^+(x)$, имеем

$$\hat{S}(x) = \sum_l \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \Psi_l(x) f(\lambda_l) \langle g^{(l)} | Y \rangle. \quad (24)$$

Из этого выражения можно получить, что

$$\begin{aligned} A_R(x, x') &= \sum_l \Psi_l(x) f(\lambda_l) \Psi_l(x'), \\ \text{Sp } A_R &= \sum_l f(\lambda_l) < \text{Sp } A_R^+ = N, \end{aligned} \quad (25)$$

$$\Sigma(x, x') = \sum_{l,n,m,k} \Psi_l(x) \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} f(\lambda_l) g_n^{(l)} K_{nm} g_m^{(k)} f(\lambda_k) \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} \Psi_k(x'),$$

$$\text{Sp } \Sigma = \sum_{l,m,n} \frac{1}{\lambda_l} f^2(\lambda_l) g_n^{(l)} K_{nm} g_m^{(l)}.$$

И при $K_{nm} = \sigma^2 \delta_{nm}$

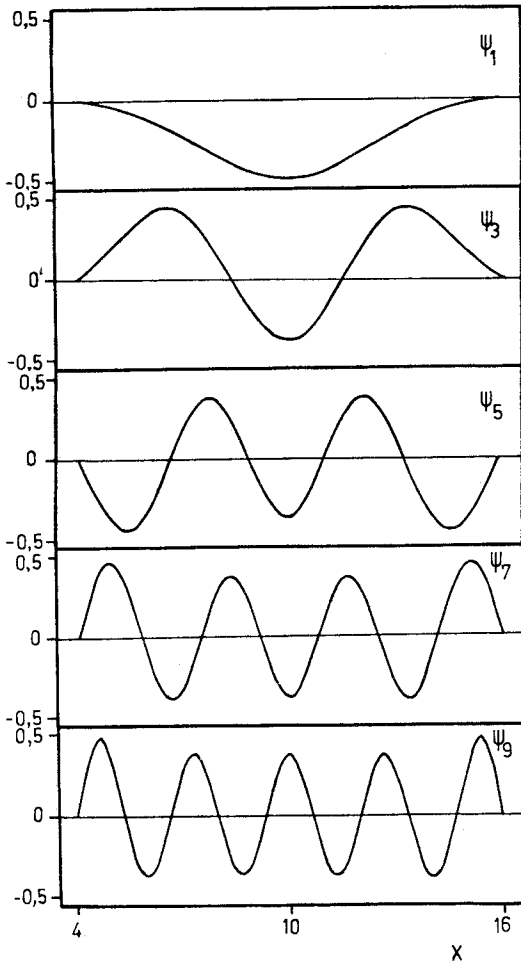


Рис.2. Функции $\Psi_1, \Psi_3, \Psi_5, \Psi_7, \Psi_9$ ортогонального базиса в измеримом пространстве

$$\begin{aligned} \text{Sp } \Sigma &= \sum_l^N f^2(\lambda_l) \frac{\sigma^2}{\lambda_l} < \text{Sp } \Sigma^+ = \\ &= \sum_l \frac{\sigma^2}{\lambda_l}. \end{aligned}$$

Последнее утверждение ($\text{Sp } \Sigma < \text{Sp } \Sigma^+$) выполняется, конечно, и для общего вида матрицы K .

Таким образом, метод спектрального окна приводит, с одной стороны, к ухудшению разрешения A_R , т.е. оценка $\hat{S}(x)$ будет обладать дополнительной смещенностью по сравнению с $\hat{S}^+(x)$, вызванной регуляризациями. С другой стороны, шумовая составляющая $\hat{S}(x)$ меньше шумовой составляющей $\hat{S}^+(x)$.

Очевидно, что при $f(\lambda) = 1$ выражения (24), (25) являются выражениями

для МНК в спектральном представлении, и значит

$$A_R^+(x, x') = \sum_{l=1}^N \Psi_l(x) \Psi_l(x'). \tag{26}$$

Рассмотрим простейший вид для $f(\lambda)$: $f(\lambda) = 1$ при $\lambda \geq \lambda_{N_R}$, $N_R < N$ и $f(\lambda) = 0$ при $\lambda < \lambda_{N_R}$. Считая, что λ_l упорядочены по убыванию, имеем

$$A_R(x, x') = \sum_{l=1}^{N_R} \Psi_l(x) \Psi_l(x'). \tag{27}$$

То есть, в то время как A_R^+ является проектором на все видимое пространство, A_R — проектор на его подпространство, натянутое на функции $\Psi_1, \dots, \Psi_{N_R}$. Выбор N_R является компромиссом между ухудшением разрешения в оценке (24) и величиной ее шумовой составляющей. Более подробно на выборе N_R мы остановимся в разделе, посвященном выбору параметра регуляризации.

На рис.3,а дается сравнение оценки $\hat{S}(x)$ по методу спектрального окна с $S(x)$, а на рис.4,а — сравнение $A_R(x_0, x)$ по методу спектрального окна при выборе $f(\lambda)$ в виде ступенчатой функции с $A_R^+(x_0, x)$ и $A_R^0(x_0, x)$.

Если решить более сложную обобщенную проблему собственных значений

$$G \tilde{g}^{(l)} = \tilde{\lambda}_l K \tilde{g}^{(l)}, \quad \langle \tilde{g}^{(l)} | K | \tilde{g}^{(m)} \rangle = \delta_{lm},$$

то можно ввести другой ортонормированный базис в «измеримом» пространстве:

$$\tilde{\Psi}_l(x) = \frac{1}{\sqrt{\tilde{\lambda}_l}} \sum_n \tilde{g}_n^{(l)} A_n(x).$$

Он обладает некоторыми преимуществами перед базисом $\Psi_l(x)$. Коэффициенты Фурье $\hat{S}^+(x)$ в базисе $\tilde{\Psi}_l(x)$ равны

$$\langle \tilde{\Psi}_l | \hat{S}^+ \rangle = \sum_{nmk} \frac{1}{\sqrt{\tilde{\lambda}_l}} \tilde{g}_n^{(l)} G_{nm} G_{mk}^{-1} Y_k = \sum_n \frac{1}{\sqrt{\tilde{\lambda}_l}} \tilde{g}_n^{(l)} Y_n.$$

Поэтому оценку (24) можно записать в виде

$$\hat{S}(x) = \sum_l \frac{f(\lambda_l)}{\sqrt{\tilde{\lambda}_l}} \tilde{\Psi}_l(x) \langle \tilde{g}^{(l)} | Y \rangle.$$

Коэффициенты этого разложения не коррелируют между собой и обладают единичной дисперсией*:

$$\overline{\langle \tilde{g}^{(l)} | \varepsilon \rangle \langle \varepsilon | \tilde{g}^{(k)} \rangle} = \langle \tilde{g}^{(l)} | K | \tilde{g}^{(k)} \rangle = \delta_{lk},$$

*Этим можно воспользоваться для исключения из $\hat{S}(x)$ тех членов разложения, у которых коэффициенты статистически незначимы, т.е. $\langle \tilde{g}^{(l)} | Y \rangle < 3\sigma = 3$.

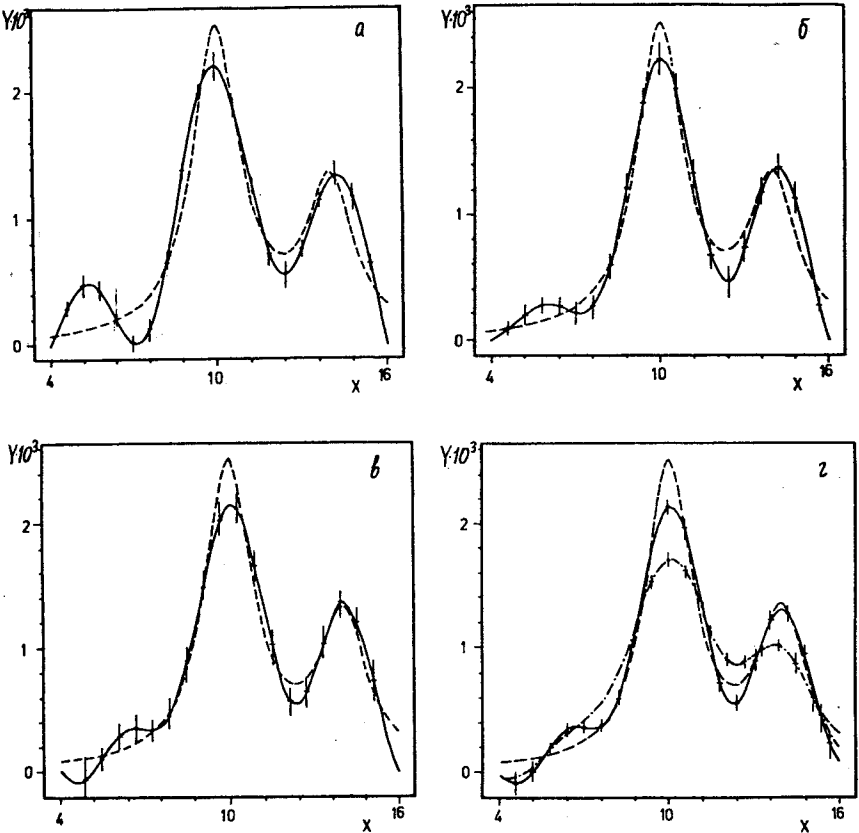


Рис.3. Сравнение оценок \hat{S} , минимизирующих $\overline{D^2}$, для различных методов: сплошная линия — оценка $\hat{S}(x)$ ($\epsilon_n \neq 0$), штриховая — функция $S(x)$. Для иллюстрации в некоторых точках в качестве ошибок приводятся величины $\Sigma(x, x)^{1/2}$. а) Метод спектрального окна, $\text{Sp } A_R = 5,0$, $\text{Sp } \Sigma = 6,78 \cdot 10^4$; б) итерационный метод, $\text{Sp } A_R = 5,49$, $\text{Sp } \Sigma = 1,11 \cdot 10^5$; в) метод Тихонова, $\text{Sp } A_R = 5,82$, $\text{Sp } \Sigma = 1,54 \cdot 10^5$; г) дуальный метод: $\sigma = 0,3$ — сплошная линия, $\text{Sp } A_R = 5,70$, $\text{Sp } \Sigma = 1,58 \cdot 10^5$; $\sigma = 1,0$ — штрихпунктирная, $\text{Sp } A_R = 4,11$, $\text{Sp } \Sigma = 4,97 \cdot 10^4$

а выражения (25) приобретают вид

$$A_R(x, x') = \sum_l \tilde{\Psi}_l(x) f(\tilde{\lambda}_l) \tilde{\Psi}_l(x'),$$

$$\text{Sp } A_R = \sum_l f(\tilde{\lambda}_l),$$

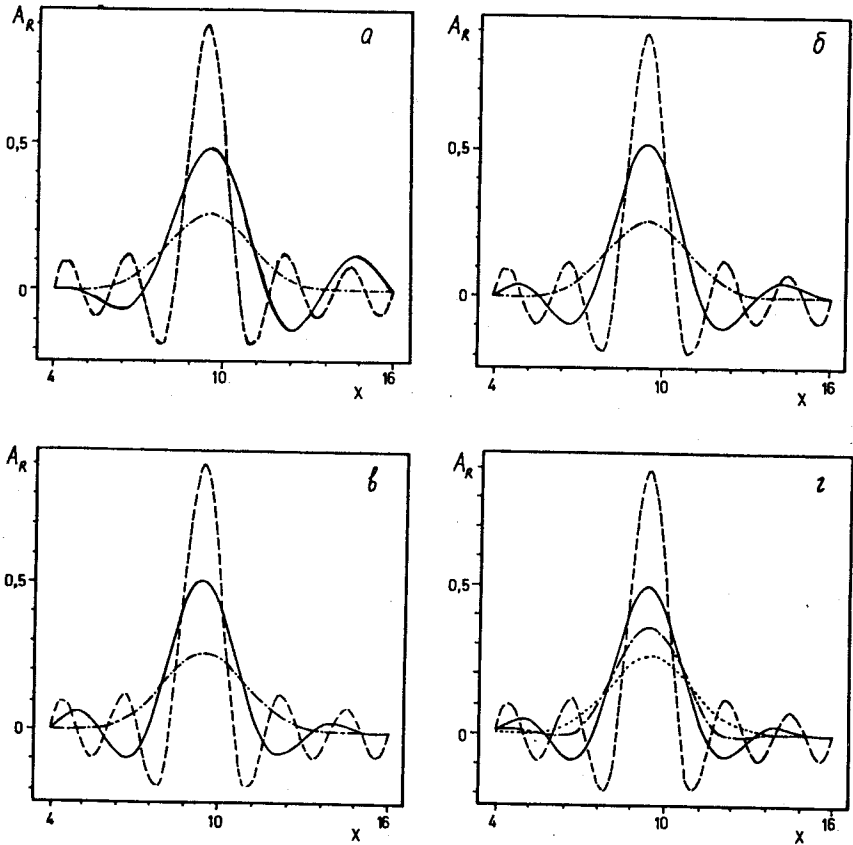


Рис.4. Сравнение $A_R(x_0, x)$ (сплошная линия) с $A_R^+(x_0, x)$ (штриховая линия) и с $A_R^0(x_0, x)$ (штрихпунктирная) для различных методов, $x_0 = 9,4$. а) Метод спектрального окна, б) итерационный метод, в) метод Тихонова, г) дуальный метод ($\sigma = 0,3$ и $\sigma = 1,0$)

$$\Sigma(x, x') = \sum_l \tilde{\Psi}_l(x) \frac{f^2(\tilde{\lambda}_l)}{\tilde{\lambda}_l} \tilde{\Psi}_l(x'),$$

$$\text{Sp } \Sigma = \sum_l \frac{f^2(\tilde{\lambda}_l)}{\tilde{\lambda}_l}.$$

Итерационный метод. Рассмотрим использование другого метода регуляризации — итерационного метода [6,9] — для подавления шума в

$\hat{S}^+(x)$. В духе нашего подхода мы будем использовать его для построения приближенного выражения G^{-1} . При построении $\hat{S}^+(x)$ требовалось решить систему уравнений (13), эквивалентную системе

$$GC = Y. \quad (28)$$

Простейшей итерационной схемой решения (28), приводящей к линейной оценке $S(x)$, является

$$C^{(i+1)} = G^{(i)} - \tau(GC^{(i)} - Y), \quad (29)$$

где i — номер итерации, τ — параметр релаксации, на выборе которого мы остановимся позже. Если в качестве нулевого приближения выбрать $C^{(0)} = 0$, то можно убедиться, что

$$C^{(i)} = \tau \sum_{j=0}^{i-1} (1 - \tau G)^j Y. \quad (30)$$

Таким образом, в итерационной схеме (29) линейная оценка на i -й итерации имеет вид

$$\hat{S}^{(i)}(x) = \sum_{n,m} \tau \sum_{j=0}^{i-1} A_n(x) (1 - \tau G)_{nm}^j Y_m = \sum_{n,m} A_n(x) \tilde{G}_{nm}^{-1} Y_m. \quad (31)$$

Здесь приближенное значение G^{-1} , которое в этой схеме равно $\tau \sum_{j=0}^{i-1} (1 - \tau G)^j$, опять обозначим через \tilde{G}^{-1} . Выражения для $A_R(x, x')$ и $\Sigma(x, x')$ выглядят как (15) и (17) с заменой G^{-1} на \tilde{G}^{-1} . Однако выражения для $\text{Sp } A_R$ и $\text{Sp } \Sigma$ меняются:

$$\begin{aligned} \text{Sp } A_R &= \text{Sp } \tilde{G}^{-1} G, \\ \text{Sp } \Sigma &= \text{Sp } \tilde{G}^{-1} K \tilde{G}^{-1} G. \end{aligned} \quad (32)$$

Изложенная схема получения итерационной оценки становится прозрачнее, если опять перейти к спектральному представлению \tilde{G}^{-1} и базису $\Psi(x)$ в «измеряемом» пространстве. Используя известное представление функции F от матрицы G

$$F(G) = \sum_l F(\lambda_l) |g^{(l)}\rangle \langle g^{(l)}|,$$

мы можем записать для i -й итерации

$$\tilde{G}^{-1} = \tau \sum_l^N \sum_{j=0}^{i-1} (1 - \tau \lambda_l)^j |g^{(l)}\rangle \langle g^{(l)}|. \quad (33)$$

Сумма по j является суммой членов геометрической прогрессии, что позволяет (33) выразить в виде

$$\tilde{G}^{-1} = \sum_l \frac{1}{\lambda_l} [1 - (1 - \tau \lambda_l)^i] |g^{(l)}\rangle \langle g^{(l)}|. \quad (34)$$

Отсюда следует, что \tilde{G}^{-1} будет сходиться к G^{-1} , если $0 < \tau \lambda_{\max} < 2$.

Однако для уменьшения смещенности оценки $\hat{S}^{(i)}$ при конечном числе итераций целесообразно τ выбирать из условия $\tau \cong 1/\lambda_{\max}$. В этом случае функция $f_i(\lambda) = [1 - (1 - \tau \lambda)^i]$ при больших λ близка к единице, а при малых λ — к нулю. Используя (34) для \tilde{G}^{-1} , можно $\hat{S}^{(i)}(x)$, $A_R(x, x')$, $\text{Sp } A_R$, $\Sigma(x, x')$, $\text{Sp } \Sigma$ для итерационного метода записать в виде (24), (25) с функцией $f_i(\lambda)$, определенной выше.

Таким образом, итерационный метод опять приводит к стабилизации оценки $\hat{S}(x)$ относительно входного шума ϵ_n , ухудшая при этом разрешение. Выбор числа итераций N_i (играющего роль параметра регуляризации в этом случае) является компромиссом между величиной шума в оценке и ее разрешением. На рис.3,б дается сравнение оценки (31) по итерационному методу с $S(x)$, а на рис.4,б — сравнение $A_R(x_0, x)$ по итерационному методу с $A_R^+(x_0, x)$ и $A_R^0(x_0, x)$.

Метод регуляризации Тихонова. В этом методе [10] оценка $S(x)$ определяется из функционала, обобщающего функционал МНК:

$$\Phi = \sum_{n,m} (Y_n - \bar{Y}_n) W_{nm} (Y_m - \bar{Y}_m) + \alpha \int dx \left[\frac{d^k S(x)}{dx^k} \right]^2, \quad (35)$$

где второй член называют стабилизатором, $\alpha > 0$ — параметром регуляризации.

Рассмотрим случай $k = 0$. Вариация (35) по $S(x)$ приводит к следующему уравнению для $\hat{S}(x)$:

$$\alpha \hat{S}(x) + \sum_{n,m} A_n(x) W_{nm} \int dx' A_m(x') \hat{S}(x') = \sum_{n,m} A_n(x) W_{nm} Y_m. \quad (36)$$

Следовательно, $\hat{S}(x)$ можно записать

$$\hat{S}(x) = \frac{1}{\alpha} \sum_n A_n(x) \sum_m W_{nm} [Y_m - \int dx' A_m(x') \hat{S}(x')] \equiv \sum_n A_n(x) \Delta_n. \quad (37)$$

Подставляя (37) в определение Δ_n , приходим к системе уравнений на Δ_n :

$$\Delta = \frac{1}{\alpha} W [Y - G\Delta],$$

которую можно представить в двух эквивалентных видах

$$[\alpha I + WG]\Delta = WY,$$

$$[\alpha K + G]\Delta = Y$$

и соответственно записать решение в двух видах

$$\Delta = [\alpha I + WG]^{-1} WY, \quad (38)$$

$$\Delta = [\alpha K + G]^{-1} Y. \quad (39)$$

Как следует из (37) и, например, (39), оценка $\hat{S}(x)$, полученная по методу регуляризации Тихонова, как и в предыдущих методах регуляризации получается из $\hat{S}^+(x)$ заменой G^{-1} на приближенное значение

$$\tilde{G}^{-1} = [\alpha K + G]^{-1}. \quad (40)$$

Используя обозначение (40), можем записать

$$\hat{S}(x) = \sum_{n,m} A_n(x) \tilde{G}_{nm}^{-1} Y_m,$$

$$A_R(x, x') = \sum A_n(x) \tilde{G}^{-1} A_m(x'), \quad (41)$$

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp } \tilde{G} \tilde{G}^{-1},$$

$$\Sigma(x, x') = \sum_{n,m,l,k} A_n(x) \tilde{G}_{nm}^{-1} K_{ml} \tilde{G}_{lk}^{-1} A_k(x'),$$

$$\text{Sp } \Sigma = \text{Sp } \tilde{G}^{-1} K \tilde{G}^{-1} G.$$

Если предположить $K_{nm} = \sigma^2 \delta_{nm}$ и перейти к спектральному представлению (40),

$$\tilde{G}^{-1} = \sum_l [\alpha \sigma^2 + \lambda_l]^{-1} |g^{(l)}\rangle \langle g^{(l)}| = \sum \frac{f(\lambda_l)}{\lambda_l} |g^{(l)}\rangle \langle g^{(l)}|,$$

где $f(\lambda) = \lambda/(\alpha \sigma^2 + \lambda)$, то выражения (41) можно записать в виде (24), (25) с заменой прежнего $f(\lambda)$ на новое. Соответственно, выводы, сделанные относительно метода спектрального окна, будут справедливы относительно метода Тихонова. На рис.3,в дается сравнение оценки по методу

Тихонова с $S(x)$, а на рис. 4, в — сравнение $A_R(x_0, x)$ по методу Тихонова с $A_R^+(x_0, x)$ и $A_R^0(x_0, x)$.

Случай $k = 2$ рассмотрим, следуя работе [1]. В этом случае вариация (35) по $S(x)$ приводит к следующему уравнению для $\hat{S}(x)$:

$$\alpha \frac{d^4 \hat{S}}{dx^4} + \sum_{n,m} A_n(x) W_{nm} \int dx' A_m(x') \hat{S}(x') = \sum_{n,m} A_n(x) W_{nm} Y_m \quad (42)$$

при краевых условиях

$$\left. \frac{d^2 \hat{S}}{dx^2} \delta \left(\frac{d\hat{S}}{dx} \right) \right|_a^b = \left. \frac{d^3 \hat{S}}{dx^3} \delta(\hat{S}) \right|_a^b = 0.$$

Если известны $S|_{x=a} = dS/dx|_{x=a}$, то, требуя $d^2 \hat{S}/dx^2|_{x=b} = d^3 \hat{S}/dx^3|_{x=b} = 0$, можно найти решение (42) следующим образом.

При этих краевых условиях существует функция Грина для уравнения

$$\frac{d^4 F(x, x')}{dx^4} = \frac{d^4 F(x, x')}{dx'^4} = \delta(x - x'),$$

она имеет вид

$$F(x, x') = \begin{cases} (x-a)^2(3x' - x - 2a)/6, & x \leq x', \\ (x' - a)^2(3x - x' - 2a)/6, & x > x'. \end{cases} \quad (43)$$

Умножая уравнение (42) на функцию Грина (43) и интегрируя по x , получим

$$\hat{S}(x) = \frac{1}{\alpha} \sum_{n,m} U_n(x) W_{nm} \left[Y_m - \int dx' A_m(x') \hat{S}(x') \right] \equiv \sum_n U_n(x) \Delta_n,$$

где

$$U_n(x) = \int dx' F(x, x') A_n(x'). \quad (44)$$

Действуя аналогично случаю при $k = 0$, получим

$$\Delta = [\alpha K + M]^{-1} Y, \quad (45)$$

где

$$M_{nm} = \int dx dx' A_n(x) F(x, x') A_m(x').$$

Таким образом, в этом случае оценка $\hat{S}(x)$ и ее характеристики имеют вид

$$\hat{S}(x) = \sum_{n,m} U_n(x) [\alpha K + MM]_{nm}^{-1} Y_m,$$

$$A_R(x, x') = \sum_{n,m} U_n(x) [\alpha K + M]_{nm}^{-1} A_m(x'),$$

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp} [\alpha K + M]^{-1} \langle A | U \rangle,$$

(46)

$$\Sigma(x, x') = \sum U_n(x) [\alpha K + M]_{nm}^{-1} K_{mi} [\alpha K + M]_{ij}^{-1} U_j(x'),$$

$$\text{Sp } \Sigma = \text{Sp} [\alpha K + M]^{-1} K [\alpha K + M]^{-1} \langle U | U \rangle.$$

То, что оценка в этом случае является линейной комбинацией функций $U_n(x)$, а не $A_n(x)$, объясняется следующим образом. Стабилизатор при $k = 2$ является не L_2 -нормой, которой мы пользовались раньше, а

$$\| S \|^2 = \int dx [d^2 S / dx^2]^2,$$

которой соответствует скалярное произведение в виде

$$\langle \tilde{S} | S \rangle = \int dx (d^2 \tilde{S} / dx^2) (d^2 S / dx^2).$$

Тогда, предполагая, что $S_A^\perp = dS_A^\perp / dx = 0$ при $x = a$, используя краевые условия для $\hat{S}_A(x)$, условие ортогональности $S_A(x)$ и $S_A^\perp(x)$ при этом скалярном произведении можно записать

$$\langle S_A | S_A^\perp \rangle = \int dx S_A^\perp (d^4 S_A / dx^4) = 0.$$

Это условие будет выполнено, если $d^4 S_A / dx^4$ будет линейной комбинацией функций $A_n(x)$, как того требует уравнение (42), а $\hat{S}(x)$, соответственно, линейной комбинацией функции $U_n(x)$.

Выражения, аналогичные (46) при краевых условиях

$$d^2 \hat{S} / dx^2 |_{x=a} = d^3 \hat{S} / dx^3 |_{x=a} = d^2 \hat{S} / dx^2 |_{x=b} = d^3 \hat{S} / dx^3 |_{x=b} = 0,$$

можно найти в [1]. Как видно из численного примера, рассмотренного в [1], оценка $\hat{S}(x)$ оказывается очень близкой к решению для $k = 0$.

В работе [11] рассмотрен другой подход для $k = 2$. Он основан на использовании представления $\hat{S}(x)$ в виде

$$\hat{S}(x) = \sum_{i=1}^I a_i b_i(x),$$

где $b_i(x)$ — B -сплайны, $1 \leq N^*$. Подстановка этого выражения в функционал МНК дает

$$\begin{aligned} \Phi_{\text{МНК}} &= \sum_{n,m} \left(Y_n - \sum_i A_{ni} a_i \right) W_{nm} \left(Y_m - \sum_j A_{mj} a_j \right) = \\ &= a^T A^T W A a - a^T A^T W Y - Y W A a + Y W Y, \end{aligned}$$

где матрица A равна $A_{ni} = \langle A_n | b_i \rangle$. Введем собственные векторы и собственные значения матрицы $G = A^T W A$:

$$G g^{(l)} = \lambda_l^{(l)} g^{(l)}, \quad \langle g^{(l)} | g^{(m)} \rangle = \delta_{lm}, \quad l = 1, \dots, I.$$

Подставляя в первый член функционала спектральное представление матрицы G :

$$G_{nm} = \sum_l g_n^{(l)} \lambda_l g_m^{(l)},$$

запишем его в виде

$$a^T G a = \sum_{l,i,j} a_i g_i^{(l)} \lambda_l g_j^{(l)} a_j = \sum_l \tilde{a}_l^2,$$

где новые \tilde{a}_l и старые параметры a_i связаны соотношениями:

$$\tilde{a}_l = \sqrt{\lambda_l} \sum_i g_i^{(l)} a_i, \quad a_i = \sum_l \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} g_i^{(l)} \tilde{a}_l.$$

Подстановка в функционал выражения a_i через \tilde{a}_l и его минимизация по \tilde{a}_l дает для них оценку

$$\hat{\tilde{a}}_l = \sum_{l,n,m} \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} g_i^{(l)} A_{ni} W_{nm} Y_m.$$

Можно убедиться, что ковариационная матрица оценок $\hat{\tilde{a}}_l$ равна единичной матрице I . Отсюда следует, что дисперсия a_i

$$D(a_i) = \sum_l (g_i^{(l)})^2 / \lambda_l$$

при наличии малых λ_l становится неприемлемо большой. Следовательно, необходимо прибегать к регуляризации. Автор [11] предлагает искать оценку параметров a_i из функционала Тихонова для $k = 2$:

*Изложение этого подхода мы привяжем к использованным ранее формулам и обозначениям.

$$\Phi = \Phi_{\text{МНК}} + \frac{\alpha}{2} \int dx |S''(x)|^2 = \Phi_{\text{МНК}} + \frac{\alpha}{2} a^T C a.$$

После перехода в стабилизаторе к переменным \tilde{a}_l мы можем записать

$$a^T C a = \sum \tilde{a}_l g_l^{(l)} \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} C_{ij} \frac{1}{\sqrt{\lambda_m}} g_j^{(m)} \tilde{a}_m \equiv \tilde{a}^T C_1 \tilde{a}.$$

Вводя собственные векторы и собственные значения матрицы C_1

$$C_1 f^{(l)} = \mu_l f^{(l)}, \quad \langle f^{(l)} | f^{(m)} \rangle = \delta_{lm}, \quad l = 1, \dots, I,$$

запишем $a^T C a$ в виде

$$a^T C a = \sum_{l,m,i} \tilde{a}_l f_l^{(i)} \mu_i f_m^{(i)} \tilde{a}_m \equiv \sum_i \tilde{\tilde{a}}_i \mu_i \tilde{\tilde{a}}_i,$$

где

$$\tilde{\tilde{a}}_i = \sum_l f_l^{(i)} \tilde{a}_l, \quad \tilde{a}_l = \sum_i f_l^{(i)} \tilde{\tilde{a}}_i, \quad \sum_l \tilde{a}_l^2 = \sum_i \tilde{\tilde{a}}_i^2$$

Подстановка \tilde{a}_l , выраженного через $\tilde{\tilde{a}}_i$, в остальные члены функционала Φ и его дифференцирование по $\tilde{\tilde{a}}_i$ дает

$$\hat{\tilde{\tilde{a}}}_i = \sum_{l,j,n,m} (1 + \tau \mu_i)^{-1} f_l^{(i)} \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} g_j^{(l)} A_{nj} W_{nm} Y_m \equiv (1 + \tau \mu_i)^{-1} \hat{\tilde{\tilde{a}}}_i(\tau = 0).$$

Таким образом, регуляризованное решение близко к нерегуляризованному при $\tau \mu_i \ll 1$ и близко к нулю при $\tau \mu \gg 1$, подавляя вклад сильно шумящих $\tilde{\tilde{a}}_i(\tau = 0)$.

Автор не вводит остаточную аппаратную функцию A_R , утверждая, что выбором α систематическую ошибку можно сделать заметно меньше статистической. Это, конечно, верно, но при этом шумовая составляющая оценки может стать неприемлемо большой. Кроме того, остается открытым вопрос о принадлежности $b_i(x)$ «измеримому» пространству.

Численный пример из этой работы был использован нами для иллюстрации анфолдинга по методу максимума энтропии. Оценки $\hat{S}(x)$ и их статистические ошибки в обоих методах оказались достаточно близкими.

Дуальный подход. Этот подход идейно следует работам [7], [12], [13] и заключается в следующем. Пусть $A_0(x, x')$ — функция разрешения с желаемыми свойствами. Введем «расстояние» между $A_0(x, x')$ и функцией $A_R(x, x')$, которая имеет вид (9) (норма Гильберта — Шмидта):

$$\begin{aligned} \|A_R - A_0\|_2^2 &= \int dx dx' [A_R(x, x') - A_0(x, x')] [A_R(x', x) - A_0(x', x)] = \\ &= \int dx \sum_{n,m} a_n(x) G_{nm} a_m(x) - 2 \int dx a_n(x) b_n(x) + B, \end{aligned} \quad (47)$$

где

$$b_n(x) = \int dx' A_n(x') A_0(x, x'),$$

$$B = \int dx dx' A_0(x, x') A_0(x', x).$$

Будем искать теперь $a_n(x)$ из условия минимума «расстояния» между A_R и A_0 при условии, что $\text{Sp } \Sigma$ (см. (11)) равен γ_1 . По методу Лагранжа эта задача сводится к поиску точки стационарности функционала

$$\Phi = \|A_R - A_0\|_2^2 + \lambda [\text{Sp } \Sigma - \gamma_1]. \quad (48)$$

Варьируя (48) по $a_n(x)$ и дифференцируя (48) по λ , имеем

$$\sum_m [\lambda K + G]_{nm} a_m(x) = b_n(x), \quad (49)$$

$$\text{Sp } \Sigma = \gamma_1. \quad (50)$$

Если не все $b_n(x)$ равны нулю, т.е. «измеримые» пространства $A_0(x, x')$ и задачи (3) перекрываются, то (49) имеет решение

$$a_n(x) = \sum_m [\lambda K + G]_{nm}^{-1} b_m(x). \quad (51)$$

Подставив $a_n(x)$ из (51) в (6), мы получим оценку $\hat{S}(x)$, из которой можно найти выражение для $\text{Sp } \Sigma$, содержащее λ . Подставив это выражение в (50), получим уравнение для λ :

$$\text{Sp} [\lambda K + G]^{-1} K [\lambda K + G]^{-1} \langle b | b \rangle = \gamma_1. \quad (52)$$

Используя для $\hat{S}(x)$ выражение (6), имеем ($\text{Sp } \Sigma$ определен выражением (52)):

$$\begin{aligned} \hat{S}(x) &= \sum_n b_n(x) [\lambda K + G]_{nm}^{-1} Y_m. \\ A_R(x, x') &= \sum_n b_n(x) [\lambda K + G]_{nm}^{-1} A_m(x'), \end{aligned} \quad (53)$$

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp} [\lambda K + G]^{-1} \langle A | b \rangle,$$

$$\Sigma(x, x') = \sum_{n,m,i,j} b_n(x) [\lambda K + G]_{nm}^{-1} K_{mi} [\lambda K + G]_{ij}^{-1} b_j(x').$$

Возьмем в качестве $A_0(x, x')$ оператор $A_R^+(x, x')$. Используя определение $b_n(x)$, можно убедиться, что в этом случае $b_n(x) = A_n(x)$ и оценка (53) совпадает с оценкой метода регуляризации Тихонова (41), если отождествить множитель Лагранжа λ с параметром регуляризации α . Тем самым метод регуляризации Тихонова при использовании его для решения задачи (3) получает новую интерпретацию.

С другой стороны, используя определение $b_n(x)$, мы можем записать

$$\hat{S}(x) = \int dx' A_0(x, x') \sum_{n,m} A_n(x') [\lambda K + G]_{nm}^{-1} Y_m,$$

т.е. $\hat{S}(x)$ есть отклик прибора $A_0(x, x')$ на оценку $S(x)$ по методу Тихонова.

Изложенный подход получения оценки $\hat{S}(x)$ имеет симметричную формулировку: будем искать $a_n(x)$ из условия минимума $\text{Sp } \Sigma$ при условии, что $\|A_R - A_0\|_2^2 = \gamma_2$. Такая задача сводится к поиску точки стационарности функционала

$$\Phi = \text{Sp } \Sigma + \lambda \left[\|A_R - A_0\|_2^2 - \gamma_2 \right]. \quad (54)$$

Вариация (54) по $a_n(x)$ и дифференцирование (54) по λ приводит к уравнениям

$$\sum_m \left[\frac{1}{\lambda} K + G \right]_{nm} a_m(x) = b_n(x), \quad (55)$$

$$\|A_R - A_0\|_2^2 = \gamma_2. \quad (56)$$

Сравнивая (49) и (55), видим, что функции $a_m(x)$ в обеих формулировках отличаются только уравнением для множителей Лагранжа. Поэтому выводы, сделанные нами относительно $\hat{S}(x)$ из (46), остаются справедливыми и для $\hat{S}(x)$ из (54).

Для численной иллюстрации мы выбрали $A_0(x, x')$ в виде функции Гаусса $A_0(x, x') = N(x' | x, \sigma^2)$. На рис. 3, г приведены две оценки (51) с $\sigma = 1,0$ и $\sigma = 0,3$. Из рисунка видно, что оценка с $\sigma = 1,0$ имеет большую систематическую ошибку. Это объясняется тем, что в этом случае $b_n(x)$ в (53) оказываются чрезмерно «широкими», чтобы описать поведение $S(x)$. Поэтому на других рисунках мы приводим оценку и ее характеристики с σ заметно меньшим, чем σ в исходной функции разрешения $K(x' | x')$. Отметим, что в этом случае оценка мало отличается от оценки по методу

Тихонова для $k = 0$. На рис. 4, г дается сравнение $A_R(x_0, x)$ в этом случае с $A_R^+(x_0, x)$ и $A_R^0(x_0, x)$.

Об оптимальности метода Тихонова. При наличии нескольких методов оценивания $S(x)$ естественно задаться вопросом, какой из них является наилучшим согласно какому-либо критерию. В качестве последнего рассмотрим среднее расстояние между «измеримой» компонентой $S_A(x)$ и искомой оценкой $\hat{S}(x)$:

$$\overline{D_A^2} = \int dx \overline{[S_A(x) - \hat{S}(x)]^2} = \int dx [S_A(x) - A_R S]^2 + \text{Sp } \Sigma. \quad (57)$$

Величина $\overline{D_A^2}$ определяется систематической ошибкой (первый член (57)) и статистической (второй член (57)). Минимизация (57) по A_R привела бы к оптимальной оценке $\hat{S}(x)$. Но поскольку систематическая ошибка содержит неизвестную функцию $S_A(x)$, эта задача не может быть решена.

Однако оказывается возможным найти оптимальное A_R при более слабых требованиях. Найдем выражение, мажорирующее $\overline{D_A^2}$. Используя выражения

$$\begin{aligned} A_R^+ &= \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} A_m(x), \\ S(x) &= S_A(x) + S_A^\perp(x), \\ A_R^+ S &= A_R^+ S_A = S_A, \\ A_R &= \sum_n a_n(x) A_n(x), \\ \text{Sp } \Sigma &= \sum_{n,m} \int dx a_n(x) K_{nm} a_m(x), \end{aligned}$$

полученные ранее, мы можем записать

$$\overline{D^2} = \int dx [(A_R^+ - A_R) S_A]^2 + \text{Sp } \Sigma \leq \|A_R^+ - A_R\|_2^2 \|S_A\|^2 + \text{Sp } \Sigma \equiv M(A_R),$$

где $\|A_R^+ - A_R\|_2^2$ — операторная норма (норма Гильберта — Шмидта), согласованная с нормой

$$\|S_A\|^2 = \int dx [S_A(x)]^2.$$

Найдем теперь выражение A_R из условия минимума $M(A_R)$. Подставляя в $M(A_R)$ явные выражения для A_R^+ , A_R , $\text{Sp } \Sigma$, получим

$$M(A_R) = [N - 2 \sum_n \int dx a_n(x) A_n(x) + \sum_{n,m} \int dx a_n(x) G_{nm} a_m(x) 1 \|S_A\|^2 + \sum_{n,m} \int dx a_n(x) K_{nm} a_m(x)]. \quad (58)$$

Варьируя (58) по $a_n(x)$, имеем

$$\sum_n \left[\frac{1}{\|S_A\|^2} K + G \right]_{nm} a_m(x) = A_n(x). \quad (59)$$

Подставляя выражение $a_n(x)$ из (59) в выражение для A_R , получим

$$A_R(x, x') = \sum_{n,m} A_n(x) \left[\frac{1}{\|S_A\|^2} K + G \right]_{nm}^{-1} A_m(x'). \quad (60)$$

Сравнивая (60) с A_R из (41), видим, что A_R , минимизирующее $M(A_R)$, есть A_R метода Тихонова для $k = 0$ при $\alpha = 1 / \|S_A\|^2$.

Однако будет ли сохраняться это свойство минимальности мажоранты для метода Тихонова и при других значениях α ? Интересно сравнить значения $M(A_R)$ для различных методов при одном значении статистической ошибки $\text{Sp } \Sigma$. Если положить $\text{Sp } \Sigma = \gamma$, то, поскольку величина

$\|S_A\|^2$ — константа, минимум $M(A_R)$ означает минимум $\|A_R^+ - A_R\|_2^2$. И значит, доставляющее такой минимум A_R является точкой стационарности функции Лагранжа $\Phi = \|A_R^+ - A_R\|_2^2 + \lambda [\text{Sp } \Sigma - \gamma]$.

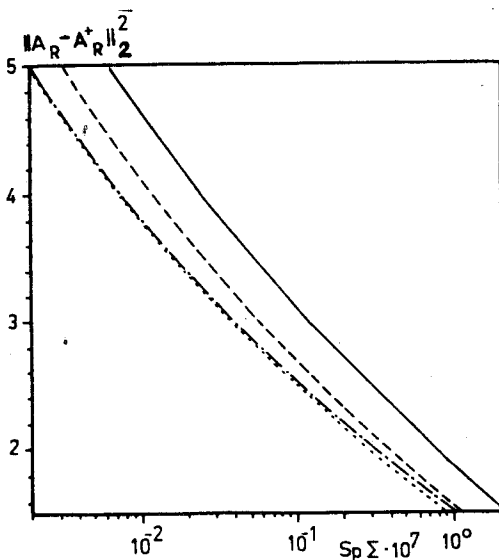


Рис.5. Зависимость $\|A_R^+ - A_R\|_2^2$ от $\text{Sp } \Sigma$. Метод спектрального окна — сплошная линия, итерационный метод — штриховая линия, метод Тихонова — пунктирная линия, дуальный метод — штрихпунктирная линия

Но в предыдущем разделе при анализе функционала (48) показано, что это будет A_R для метода Тихонова при $k = 0$. Численные расчеты, представленные на рис.5, иллюстрируют это утверждение.

Таким образом, метод Тихонова является оптимальным с точки зрения следующего критерия: минимум мажоранты систематической ошибки при заданном значении статистической ошибки.

О выборе значения параметра регуляризации. Здесь под параметром регуляризации α будем понимать: $1/N_R$ — в методе спектрального окна, величину, обратную числу итераций $1/N_i$, — в итерационном методе, α — в методе Тихонова, λ — в дуальном методе. Очевидно, что оптимальным значением α будет то, которое минимизирует D^2 . Именно при этом значении мы привели оценки $\hat{S}(x)$ на рис.3. В реальном эксперименте вычислить D^2 невозможно, и можно опираться только на анализ величин: $\text{Sp } \Sigma$ — характеристика шумовой составляющей; $\text{Sp } A_R$ или $\|A_R^+ - A_R\|_2^2$ — характеристики разрешения (систематической ошибки); и

$$\Phi(\hat{S}) = \sum_{n,m} (Y_n - \bar{Y}_n(\hat{S})) W_{nm} (Y_m - \bar{Y}_m(\hat{S})) \quad (61)$$

— характеристика степени согласия $\hat{S}(x)$ с экспериментальными данными.

Графики этих величин представлены на рис.6*. Из них видно, что для рассмотренной модели только зависимость $\text{Sp } \Sigma$ от α имеет особенность в области минимального значения D^2 . В большинстве рассмотренных случаев $\text{Sp } \Sigma$ начинает резко возрастать вблизи оптимальных значений параметра регуляризации, что может быть использовано для его выбора.

Широко известен выбор значения параметра регуляризации из принципа невязки [14]. В нашем рассмотрении это означает выбор значения α из условия $\Phi(S) = N$. Из рис.6 видно, что за исключением варианта на рис.6,а (метод спектрального окна) принцип невязки приводит к значению α , лежащему правее оптимального значения α . Оценки $\hat{S}(x)$, отвечающие этому принципу выбора значения α , приведены на рис.7. Из этих рисунков видно, что оценки $\hat{S}(x)$, за исключением оценки по методу

*Отметим, что для всех методов, кроме дуального, поведение $\|A_R^+ - A_R\|_2^2$ как функции α аналогично функции $N - \text{Sp } A_R$, т.к. $\|A_R^+ - A_R\|_2^2 = N - 2\text{Sp } G\tilde{G}^{-1} + \text{Sp } G\tilde{G}^{-1} \rightarrow 0$, $\text{Sp } A_R = \text{Sp } G\tilde{G}^{-1} \rightarrow N$ при $a \rightarrow 0$, и поэтому на рис.6 мы приводим только $\text{Sp } A_R$.

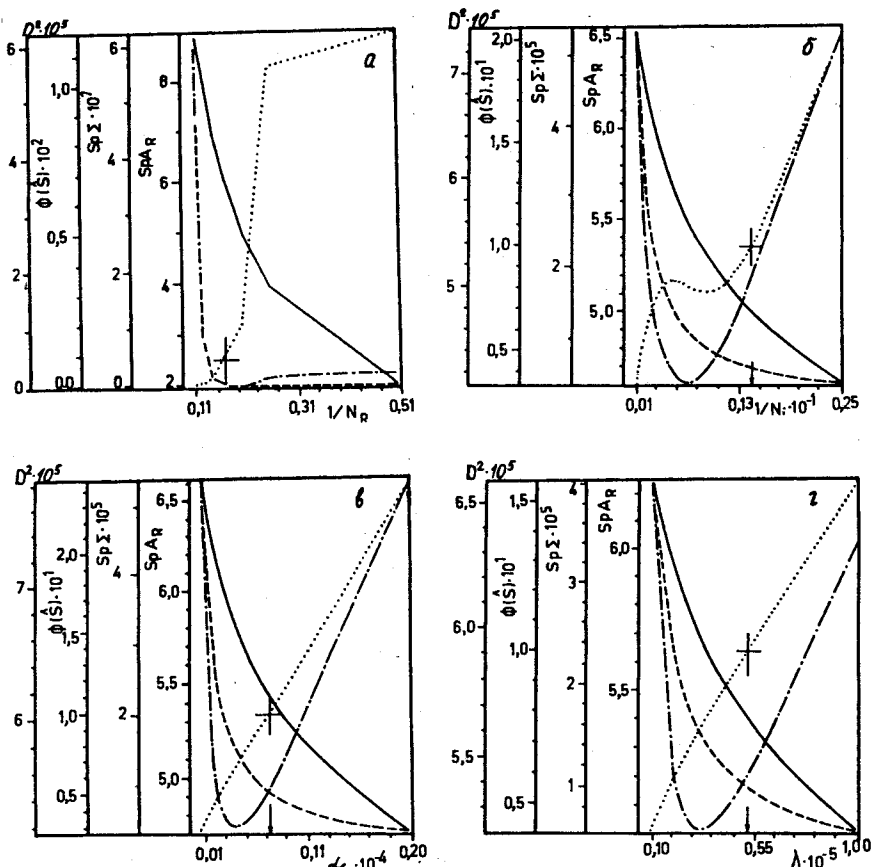


Рис.6. Зависимости $\text{Sp } \hat{A}_R$ (сплошная линия), $\text{Sp } \Sigma$ (штриховая линия), $\Phi(\hat{S})$ (пунктирная линия), D^2 (штрихпунктирная линия) от параметра регуляризации. Крестом на графике помечена точка $\Phi(\hat{S}) = N$, а стрелкой показано соответствующее значение параметра регуляризации. а) Метод спектрального окна, б) итерационный метод, в) метод Тихонова, г) дуальный метод

спектрального окна (рис.7,а), довольно близки к оценкам $\hat{S}(x)$ при оптимальном значении α .

Принципу невязки можно дать следующую интерпретацию. Для методов, кроме дуального, $\bar{Y}_n(\hat{S}) = (GG^{-1}Y)_n \rightarrow Y_n$ при $\alpha \rightarrow 0$. Таким образом, фиксация α из условия $\Phi(\hat{S}) = N$ фактически означает требование, чтобы в среднем отличие от нуля $Y_n - \bar{Y}_n(\hat{S})$ из-за регуляризации было равно измерительной ошибке Y_n .

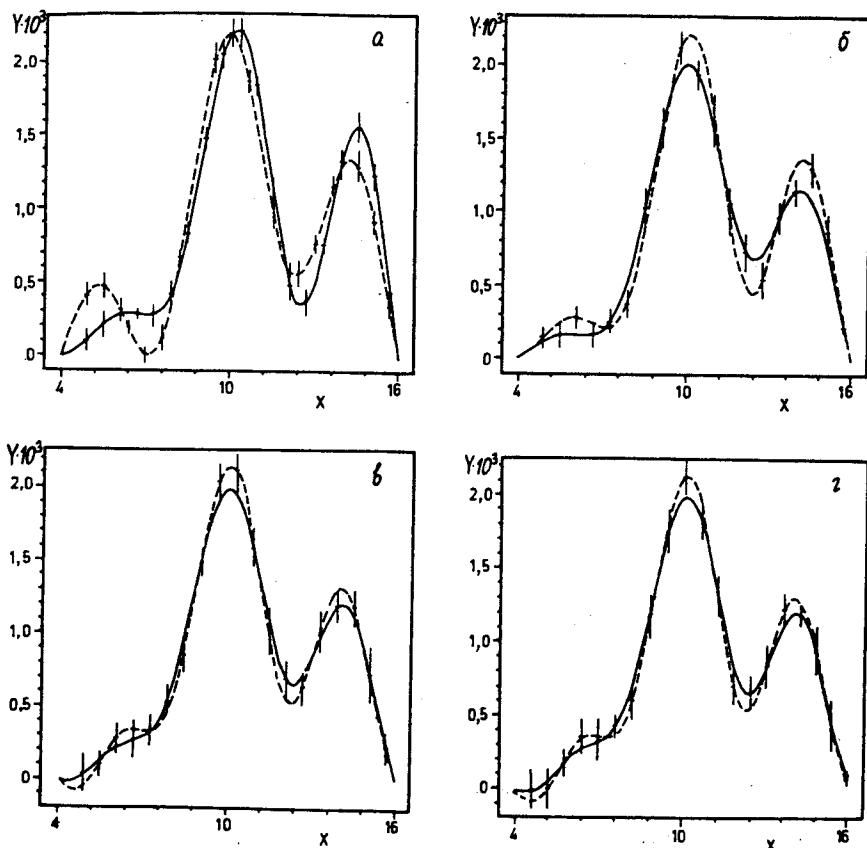


Рис. 7. Сравнение оценок, полученных из условия $\Phi(\hat{S}) = N$ (сплошная линия) с оценками, минимизирующими \overline{D}_2 (штриховая линия). Для иллюстрации в некоторых точках в качестве ошибок приводятся величины $\Sigma(x, x)^{1/2}$. а) Метод спектрального окна, $Sp A_R = 6,00$, $Sp \Sigma = 2,56 \cdot 10^5$; б) итерационный метод, $Sp A_R = 5,01$, $Sp \Sigma = 6,07 \cdot 10^4$; в) метод Тихонова, $Sp A_R = 5,46$, $Sp \Sigma = 9,40 \cdot 10^4$; з) дуальный метод, $Sp A_R = 5,43$, $Sp \Sigma = 1,02 \cdot 10^5$

В уже упоминавшейся нами работе [11], в которой решение искалось в виде разложения по B -сплайнам, предложен свой метод выбора параметра регуляризации. В рассматриваемом нами подходе этот метод можно интерпретировать как выбор параметра из условия

$$\sum_l f(\lambda_l, \alpha) \leq N_0,$$

где N_0 — число статистически значимых коэффициентов в спектральном представлении оценки.

Использование априорной информации. Иногда известно, что измеряемое дифференциальное сечение близко к известной функции $S_0(x)$. В этом случае естественно искать оценку в виде $\hat{S}(x) = S_0(x) + Z(x)$, где $Z(x)$ — неизвестная функция. Тогда связь между измерениями Y_n и $Z(x)$ можно записать в виде

$$Y_n = Y_n^0 + \int dx A_n(x) Z(x) + \varepsilon_n,$$

где $Y_n^0 = \int dx A_n(x) S_0(x)$, и, более коротко,

$$\tilde{Y}_n = \int dx A_n(x) Z(x) + \varepsilon_n, \quad (62)$$

где $\tilde{Y}_n = Y_n - Y_n^0$. Выражение (62) формально совпадает с (3). Поэтому, используя для $Z(x)$ выражение (14) с заменой Y_n на \tilde{Y}_n , мы имеем для $\hat{S}(x)$

$$\hat{S}^+(x) = S_0(x) + \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} (Y_m - Y_m^0). \quad (63)$$

Усредняя выражение (63), получим

$$\begin{aligned} \overline{\hat{S}^+(x)} &= S_0(x) - \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} \int dx' A_m(x) S_0(x) + \\ &+ \sum_{n,m} A_n(x) G_{nm}^{-1} \int dx' A_m(x) S(x). \end{aligned} \quad (64)$$

Вспоминая, что выражение (15) является проектором на «измеримое» пространство, видим, что $\hat{S}^+(x)$ равно $S_0(x)$, из которой удалена ее проекция на «измеримое» пространство и вставлена проекция истинной функции $S(x)$. Шумовая составляющая $\hat{S}^+(x)$ по-прежнему определяется выражением (17) для $\Sigma^+(x, x')$. Очевидно, что, как и раньше, тот или иной метод регуляризации сведется к замене матрицы G на соответствующую матрицу \tilde{G} . На рис.8 приведены две оценки сечения (96) при $Q^2 = 50 \text{ ГэВ}^2/c^2$ без и с использованием $S_0(x) = c/x$.

Использование другой, общего характера, априорной информации $S(x) > 0$ будет рассмотрено в следующем разделе.

В заключение подчеркнем:

Рис.8. Сравнение оценок сечения, полученных с использованием априорной информации (штриховая линия, $S_0(x) = c/x$) и без нее (штрихпунктирная). На нижнем рисунке приведены соответствующие разности сечения и оценок

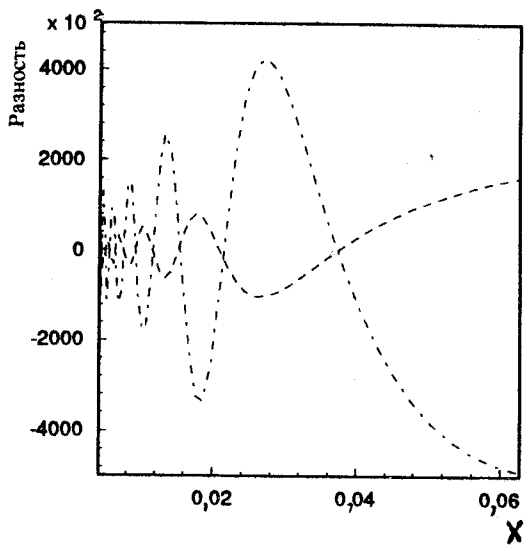
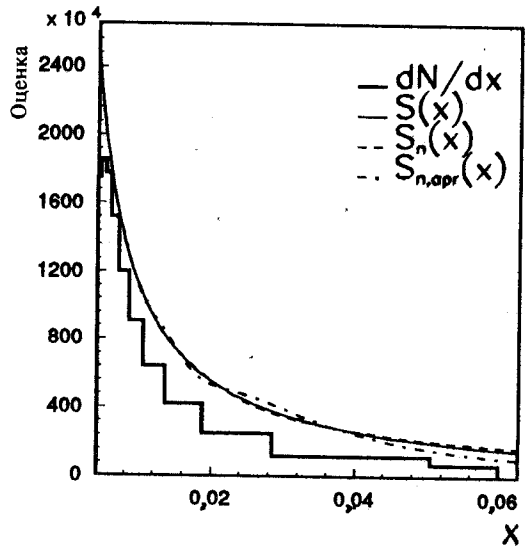
1) при использовании гистограмм в качестве экспериментальной информации выражения $A_R(x, x')$ в дуальном методе и методе Тихонова, а также $D^2, \Sigma(x, x')$ во всех методах становятся приближенными из-за необходимости использовать $K_{nm} \approx \delta_{nm} Y_n$;

2) все рассмотренные нами методы получения оценок сводятся к регуляризации МНК оценки (псевдорешения) путем замены матрицы G на соответствующую $\tilde{G}(\alpha)$;

3) поставленной цели — получить модельно- и детекторно-независимую оценку — мы полностью, вообще говоря, не достигли; остаточная аппаратная функция не равна δ -функции, она зависит от аппаратных функций $A_n(x)$, которые опреде-

ляются свойствами детектора и, кроме того, функции $A_n(x)$ могут быть модельно-зависимыми.

Использование линейных оценок $\hat{S}(x)$ при параметрическом анализе. Когда существует параметрическая модель для $S(x): S(x) = f(x|a)$, где a — вектор параметров, встает задача оценивания и про-



верки гипотезы о том, что $f(x|a)$ не противоречит экспериментальным данным Y_n .

Часто это делают следующим образом. Сначала решают обратную задачу и находят оценку $S(x)$. Затем переходят от этой оценки к M независимым статистикам Z_m :

$$\hat{Z}_m = \int dx \varphi_m(x) \hat{S}(x),$$

где $\varphi_m(x)$ — набор линейно независимых функций, а $M \leq N$. Например, $\varphi_m(x)$ может быть характеристической функцией m -го бина гистограммы или $\varphi_m(x) = \delta(x - x_m)$, где x_m — координаты центра m -го бина. Оценку параметров \hat{a} ищут из минимума функционала

$$\Phi = \sum_{n,m} [\hat{Z}_n - \langle \varphi_n | f(x|a) \rangle] D(Z)_{nm}^{-1} [\hat{Z}_m - \langle \varphi_m | f(x|a) \rangle],$$

где $D(Z)$ — матрица ошибок статистик \hat{Z}_m . Для определенности будем считать, что оценка $\hat{S}(x)$ имеет вид

$$\hat{S}(x) = \sum_{n,m} A_n(x) \tilde{G}_{nm}^{-1} Y_m.$$

Подставляя ее в выражение для \hat{Z}_m , получаем

$$\hat{Z}_m = \sum_{n,l} \langle \varphi_m | A_n \rangle \tilde{G}_{nl}^{-1} \langle A_l | S \rangle.$$

Из этой формулы видно, что \hat{Z}_m отличается от $Z_m = \langle \varphi_m | S \rangle$, даже если $\varphi_m = A_m$, но $\tilde{G}^{-1} \neq G^{-1}$ (т.е. использовался какой-либо из методов регуляризации). Это, вообще говоря, может приводить к смещенности оценки а даже при $N \rightarrow \infty$.

Как нам представляется, наиболее последовательный подход при параметрическом анализе — отказаться от использования $\hat{S}(x)$ и вернуться к непосредственным измерениям Y_n . Это означает, что оценку вектора параметров а нужно искать, следуя методу наименьших квадратов (χ^2 -методу) из минимума функционала

$$\Phi = \sum_{n,m} (Y_n - \langle A_n | f(x|a) \rangle) K_{nm}^{-1} (Y_n - \langle A_m | f(x|a) \rangle).$$

2. НЕЛИНЕЙНЫЕ ОЦЕНКИ

Нелинейные оценки — это нелинейные функции измерений, что приводит к значительным трудностям получения $\Sigma(x, x')$ и отсутствию $A_R(x, x')$. Поэтому их применение, по нашему мнению, оправданно при использовании априорной информации $S(x) > 0$, когда без нее линейные оценки оказываются неприемлемо плохими.

Метод корректирующих множителей. Этот метод очень широко используется в настоящее время, хотя не существует публикаций, обосновывающих его. Поэтому будем опираться на свою работу [15].

Существует два варианта метода корректирующих множителей (МКМ). Начнем с наиболее распространенного — метода корректировки бина в бин (см., например, [16]):

— по методу Монте-Карло генерируются события, у которых распределение по переменной x описывается функцией $S_0(x)$;

— по ним строится гистограмма $S_n^{(0)}$ по переменной x на входе в детектор;

— затем — гистограмма $Y_n^{(0)}$ после обработки отклика детектора на эти события;

— в качестве откорректированных данных берется гистограмма

$$\hat{S}_n^{(1)} = \frac{S_n^{(0)}}{Y_n^{(0)}} Y_n \equiv \frac{S_n^{(0)}}{\int dx A_n(x) S_0(x)} Y_n. \quad (65)$$

На рис.9 приводятся гистограмма $\hat{S}_n^{(1)}$ и гистограмма S_n , полученная из $S(x)$, ($S(x)$ взято из примера предыдущего раздела, $S_0(x)$ получено из $S(x)$ при 10% изменении параметров $S(x)$):

$$S_n = \int dx \chi_n(x) S(x),$$

$$\chi_n(x) = \begin{cases} 1/(x_{n+1} - x_n), & x \in [x_n, x_{n+1}] \\ 0, & x \notin [x_n, x_{n+1}]. \end{cases}$$

Из рис.9 видно, что $\hat{S}_n^{(1)}$ остались близки к самим измерениям Y_n . Объяснение этому можно видеть из следующих рассуждений.

Запишем соотношение (3) в виде

$$Y_n = \int dx A_n(x) S_0(x) \frac{S(x)}{S_0(x)} + \varepsilon_n. \quad (66)$$

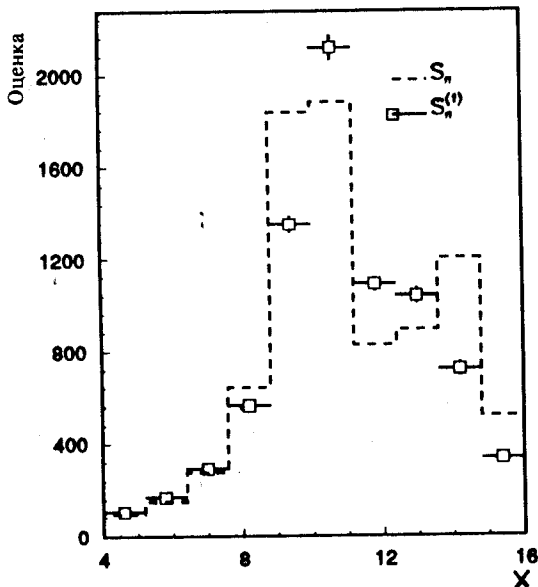


Рис.9. S_n — гистограмма, полученная из функции $S(x)$; $\hat{S}_n^{(1)}$ — оценка S_n по МКМ после первой итерации

Если выполняется хотя бы одно из условий: а) функции $A_n(x)$ являются достаточно узкими и концентрируются около точки $\bar{x}_n = (x_{n+1} + x_n)/2$ (хорошее разрешение, узкий бин), б) функция $S_0(x)$ достаточно близка к функции $S(x)$, так что $S(x)/S_0(x) \approx \text{const}$ в окрестности \bar{x}_n , то можно записать приближенное равенство

$$Y_n \approx \frac{S(\bar{x}_n)}{S_0(\bar{x}_n)} \int dx A_n(x) S_0(x) + \varepsilon_n$$

или

$$S(\bar{x}_n) \approx \frac{S_0(\bar{x}_n)}{\int dx A_n(x) S_0(x)} Y_n. \quad (67)$$

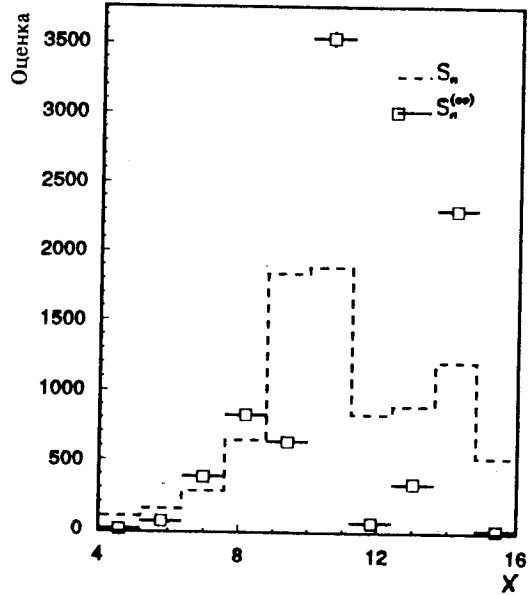
Умножая (67) на $x_{n+1} - x_n$, мы получим приближенный аналог выражения (65). Из этих рассуждений видно, что плохое разрешение и значительное отличие $S_0(x)$ от $S(x)$ приводят к тому, что $\hat{S}_n^{(1)}$ не ушли заметно от исходных измерений Y_n .

Другой, более сложный вариант МКМ заключается в том, что соотношение (65) рассматривается как первый шаг итерационного процесса

$$S_n^{(i)} = \frac{S_n^{(i-1)}}{\int dx A_n(x) S^{(i-1)}(x)} Y_n, \quad (68)$$

где $S^{(i-1)}(x) = \sum_n S_n^{(i-1)} \chi_n(x)$. На рис. 10 показано \hat{S}_n^∞ , полученное в конце итерационного процесса по условию $\max |(S_n^{(i)} - S_n^{(i-1)})/S_n^{(i)}| < 0,01$

Рис.10. S_n — гистограмма, полученная из функции $S(x)$; $\hat{S}_n^{(\infty)}$ — оценка S_n по МКМ при стабилизации решения



(число итераций 85). Из него видно, что нестабильность решения задачи по отношению к флуктуациям Y_n , упомянутая нами при изложении МНК, проявляется и в этом подходе. Это можно понять из следующих рассуждений.

Запишем знаменатель соотношения (68) в виде

$$\int dx A_n(x) \sum_m S_m^{(i-1)} \chi_m(x) = \sum_m A_{nm} S_m^{(i-1)},$$

где $A_{nm} = \langle A_n | \chi_m \rangle$. Условие стабилизации итерационного процесса означает, что

$$\frac{Y_n}{\sum_m A_{nm} S_m^{(i-1)}} \approx 1,$$

т.е. при стабилизации приближенно выполняется равенство*

$$\sum_m A_{nm} S_m^{(i-1)} \approx Y_n. \tag{69}$$

Однако, матрица A_{nm} , аналогично матрице Грама G_{nm} , может иметь малые собственные значения, что и приводит к неприемлемо большой шумовой составляющей $\hat{S}_n^{(\infty)}$.

Картина радикально меняется, если заменить Y_n на \bar{Y}_n , т.е. в отсутствие флуктуаций Y_n (рис.11). Гистограмма $\hat{S}_n^+ = \int dx \hat{S}^+(x) \chi_n(x)$, полу-

*Отметим, что изложенная схема МКМ является методом Голда [17] решения (69).

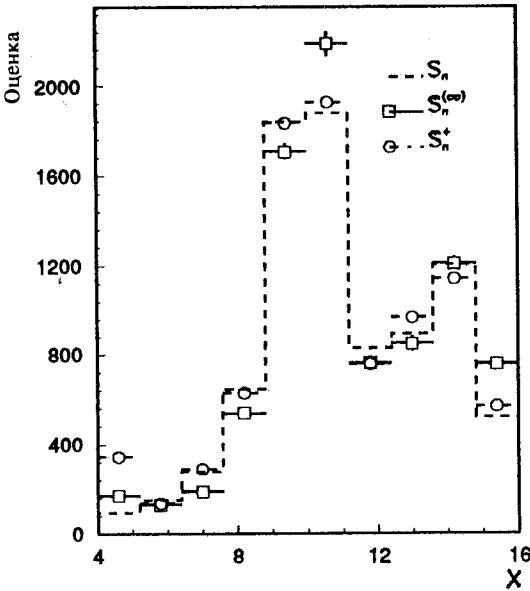


Рис.11. Сравнение оценок по МКМ и МНК при отсутствии ошибок в измерениях. S_n — гистограмма, полученная из функции $S(x)$; $\hat{S}_n^{(\infty)}$ — оценка по МКМ при стабилизации решения; \hat{S}_n^+ — оценка по МНК

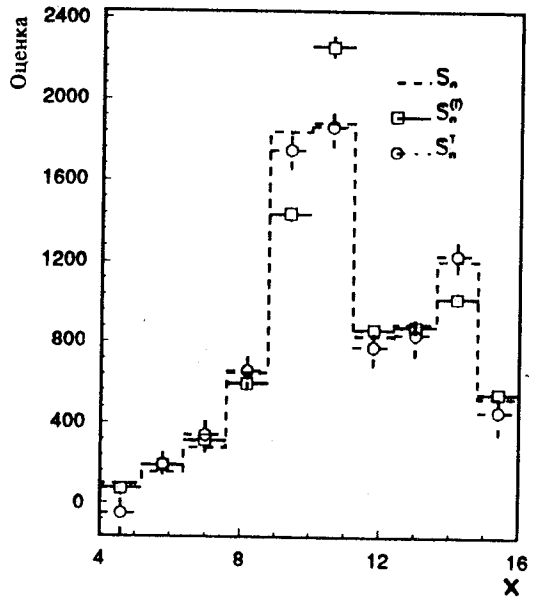
ченная из решения МНК, оказывается заметно ближе к S_n . Это отражает тот факт, что \hat{S}_n^+ искалось в виде линейной комбинации функций $A_n(x)$, являющихся базисом «измеримого» пространства, а $\hat{S}_n^{(\infty)}(x)$ в виде линейной комбинации $\chi_n(x)$.
Отличие $\hat{S}_n^{(\infty)}$ и \hat{S}_n^+ от S_n ха-

актеризует минимальную систематическую ошибку МКМ и МНК.

Итак, вообще говоря, МКМ есть метод регуляризации, параметром которого является число итераций. Если выбирать число итераций из условия минимума $D^2 = \sum_n (S_n^{(i)} - S_n)^2$, то получатся $\hat{S}_n^{(i)}$,

на рис.12 (число итераций 4). Там же приведены $\hat{S}_n^T = \int dx \hat{S}^T(x) \chi_n(x)$, где $\hat{S}^T(x)$ — оценка по методу Тихонова при минимальном $\overline{D^2} = \int dx [S^T(x) - S(x)]^2$. В этом случае получаются разумные оценки $\hat{S}_n^{(i)}$, но обе оценки $\hat{S}_n^{(i)}$ и \hat{S}_n^T приобретают дополнительную смещенность из-за регуляризации. Из-за нелинейной процедуры получения оценок невозможно ни вычислить их статистические ошибки, ни дать характеристику систематической ошибки в аналитическом виде. Отметим только, что в МКМ в качестве статистических дают ошибки, получающиеся на первой итерации, которые мы приводим на рисунках. Как видно из сравнения рис.9 и 10, это будут явно заниженные ошибки, поскольку с ростом числа итераций они возрастают. Заметим, что величины $\hat{S}_n^{(i)}$ становятся коррелированными, начиная со второй итерации. В то же время для \hat{S}_n^T мож-

Рис.12. Сравнение оценок по МКМ и по методу Тихонова из условия минимума D^2 при наличии ошибок в измерениях. S_n — гистограмма, полученная из функции $S(x)$; $\hat{S}_n^{(i)}$ — оценка по МКМ; \hat{S}_n^T — оценка по методу Тихонова



но вычислить матрицу ошибок Σ и остаточную аппаратную функцию $A_{Rn}(x)$:

$$\Sigma = A^T \tilde{G}^{-1} K \tilde{G}^{-1} A,$$

$$A_{Rn}(x) =$$

$$= \sum_{kl} A_{nk}^T \tilde{G}_{kl}^{-1} A_l(x) \neq \chi_n(x).$$

При анализе реальных данных D^2 , естественно, неизвестно, и для выбора оптимального значения параметра регуляризации — числа итераций — необходимо использовать другие критерии, нежели минимум D^2 . В предыдущем разделе рассмотрена проблема выбора оптимального значения параметра регуляризации для линейных оценок на основе анализа $Sp \Sigma, Sp A_R, \chi^2$. В случае МКМ доступной для анализа остается величина χ^2 . Согласно принципу невязки [14], параметр регуляризации определяется из условия $\chi^2 = N$. Для рис.12 $\chi^2 = 22,9$. Из него видно, что при оптимальном числе итераций значение χ^2 может значительно отличаться от N .

В эксперименте NA4 (см., например, [18]) при оценивании структурной функции $F_2(x, Q^2)$ использовался итерационный процесс, основанный на соотношении (67). Однако, в отличие от предыдущего рассмотрения (соотношение (68)), он записывается в виде

$$S^{(i)}(\bar{x}_n) = \frac{S^{(i-1)}(\bar{x}_n)}{\int dx A_n(x) S^{(i-1)}(x|a)} Y_n, \tag{70}$$

где $S^{(i-1)}(x|a)$ — параметрическая функция, параметры a которой определяются из фита $S^{(i-1)}(x|a)$ к $S^{(i-1)}(\bar{x}_n)$. В этом случае условие стабилизации приводит к приближенному равенству

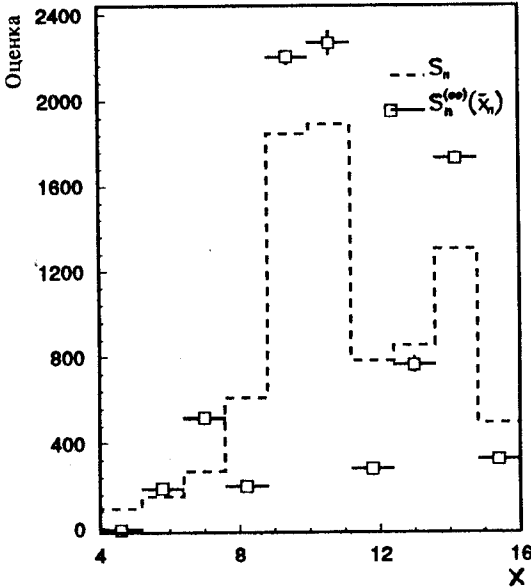


Рис.13. S_n — гистограмма, полученная из функции $S(x)$; $\hat{S}_n^{(\infty)}(\bar{x}_n)$ — оценка по МКМ (уравнение (70)) при условии стабилизации

$$\int dx A_n(x) S^{(i-1)}(x|a) \approx Y_n \quad (71)$$

На рис.13 приведены $\hat{S}_n^{(\infty)}(\bar{x}_n)$ для такого подхода (число итераций 20).

Отметим, однако, что мы использовали вместо параметрической функции сплайн-аппроксимацию $\hat{S}^{(i-1)}(\bar{x}_n)$.

Из рис.13 видно, что в этом подходе шумовая составляющая $\hat{S}_n^{(\infty)}(\bar{x}_n)$ оказывается неприемлемо большой. Однако сравнение его с рис.10 показывает, что шумовая составляющая меньше, чем при ступенчатой аппроксимации $\hat{S}_n^{(\infty)}$. Видимо, алгоритм (70) более стабилен к флуктуациям Y_n . Если вместо Y_n использовать \bar{Y}_n , результат получается лучше, чем на рис.10. Однако систематическая ошибка все равно достаточно велика.

На рис.14 дана оценка $\hat{S}^{(i)}(\bar{x}_n)$ ($i = 3, \chi^2 = 6,5$), полученная из условия минимума $D^2 = \sum_n (S(\bar{x}_n) - \hat{S}^{(i)}(\bar{x}_n))^2$, и значения $\hat{S}^T(\bar{x}_n)$, полученные по методу Тихонова.

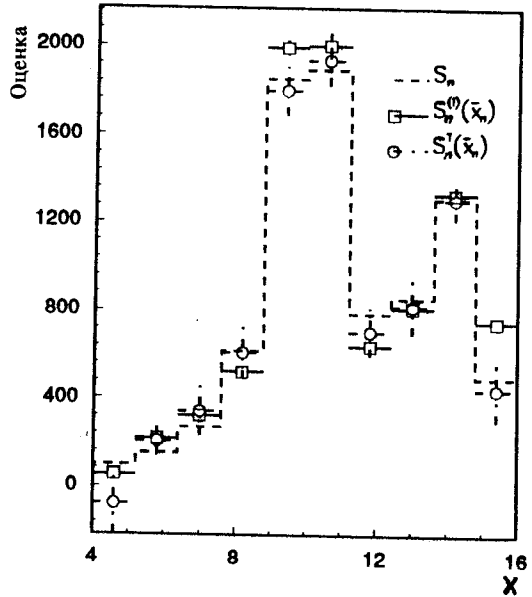
Итак, для решения по МКМ после одной итерации можно вычислить характеристику шума, но это решение содержит систематическую ошибку, которая зависит от функции $S_0(x)$ (модельная зависимость).

По поводу решения МКМ по итерационной схеме можно в заключение отметить следующее:

— МКМ сходится к решениям систем уравнений (69), (71) при отсутствии шума в Y_n ;

— выход из итерационного процесса по критерию стабилизации может приводить к неприемлемо большой статистической ошибке;

Рис.14. Сравнение оценок по МКМ (уравнение (70)) и по методу Тихонова. S_n — гистограмма, полученная из функции $S(x)$; $\hat{S}_n^{(i)}(\bar{x}_n)$ — оценка по МКМ; $\hat{S}_n^T(\bar{x}_n)$ — оценка по методу Тихонова



— выбором меньшего, оптимального числа итераций статистическую ошибку можно сделать приемлемой;
 — оценку по МКМ трудно интерпретировать, так как из-за нелинейности процедуры невозможно вычислить характеристики шума и систематики в оценке;

— оценка по методу Тихонова оказалась лучше и для нее можно вычислить характеристики шума и систематики.

Примеры использования других нелинейных итерационных схем можно найти в работах [9,19,20]. Однако, как нам кажется, такие нелинейные оценки без привлечения априорной информации имеют лишь одно достоинство — простой алгоритм вычисления, но при этом теряется возможность их статистической интерпретации.

Более оправданным нам кажется использование нелинейных оценок, которые получены с использованием априорной информации о положительности $S(x)$.

Оценки, удовлетворяющие свойству $\hat{S}(x) > 0$. В работе [21] функционал метода Тихонова (35) при $k = 0$ алгебраизуется: используется какая-либо численная квадратурная формула и интегралы заменяются на суммы, а функция $S(x)$ — на вектор S ее значений в узлах интегрирования $S_i = S(x_i)$, $i = 1, \dots, I$. Тогда

$$\Phi = \sum_{n,m} (Y_n - \sum_{i=1}^I A_{ni} S_i) W_{nm} (Y_m - \sum_{j=1}^I A_{mj} S_j) + \alpha \sum_i S_i^2. \quad (72)$$

В качестве оценки \hat{S}_i принимается вектор S_i , минимизирующий (72) при ограничениях $S_i > 0$. Численно задача решается итерационным методом

[22]. В работе [23] оценка $\hat{S}_i > 0$ ищется из функционала (72), где $\sum_i S_i^2$ заменена на $\sum_i (S_{i+2} - 2S_{i+1} + S_i)^2$, что отвечает методу Тихонова при $k = 2$. Детали этого подхода можно найти в [24,25]. К сожалению, авторы не анализируют ни систематику, ни статистические ошибки, возникающие при таком методе оценивания $S(x)$. Очевидным является лишь тот факт, что уже переход от $S(x)$ к $S(x_i)$ с интерполяцией между узлами x_i во время интегрирования ведет к систематической ошибке. Стремление уменьшить эту ошибку ведет к большому значению I и, соответственно, к большой размерности задачи. Отметим, что размерность задач получения линейных оценок всегда равна числу измерений Y_n .

Более продвинутым в смысле интерпретации оценки является подход, предложенный в работе [3]. В ней оценка $S(x)$ ищется в виде $S(x) = \exp\{Z(x)\}$, что автоматически обеспечивает ее положительность. Далее задача также алгебраизуется заменой $Z(x)$ на $Z_i = Z(x_i)$. При вычислении интегралов $\int dx A_n(x) S(x)$ между узлами x_i делалась линейная интерполяция $Z(x)$. Для оценивания Z_i использовался метод Тихонова при $k = 2$. Минимизация нелинейного в этом случае функционала проводилась с помощью программы FUMILI [26]. Программа, помимо минимизации, оценивает матрицу ошибок параметров Z_i , что, в свою очередь, позволяет вычислить приближенную матрицу оценок величин $S(x_i)$. Более того, в работе получено выражение A_R «квазиостаточной» аппаратной матрицы для Z_i , отличие которой от единичной характеризует систематику в оценивании величин Z_i :

$$(A_R)_{kj} = \sum_{i,m} Z_{ki}^{-1} \frac{\partial f_n}{\partial Z_i} W_n \frac{\partial f_n}{\partial x_j}, \quad (73)$$

где

$$Z_{ki} = \sum_n \frac{\partial f_n}{\partial Z_k} W_n \frac{\partial f_n}{\partial Z_i} + \alpha \sum_l \frac{\partial g_l}{\partial x_k} \frac{\partial g_l}{\partial x_i},$$

$$f_n = \int dx A_n(x) \exp\{Z(x)\},$$

$$g_l(Z) = Z_{l+2} - 2Z_{l+1} + Z_l,$$

$g_l(Z)$ — конечно-разностная вторая производная. Коридор ошибок функции $S(x)$ приближенно дается выражением

$$S^\pm(x_i) = \exp\{\hat{Z}_i \pm (\Sigma_{ii}^Z)^{1/2}\},$$

где

$$\Sigma_{km}^Z = \sum_{i,j,n} Z_{ki}^{-1} \frac{\partial f_n}{\partial Z_i} W_n \frac{\partial f_n}{\partial Z_j} Z_{jm}^{-1}.$$

Численные примеры, приведенные в [3], показывают, что выражения для A_R и Σ^Z , вычисленные на последней итерации, являются достаточно точными. В этой же работе рассмотрен вопрос о систематической и статистической ошибке функционалов от $S(x)$

$$D = \int dx D(x) S(x).$$

Программа, написанная на основе изложенного подхода, много лет используется в ИФВЭ для оценивания спектров рассеянных нейтронов с помощью сфер Боннера. В этом случае $A_n(x)$, $n = 1, \dots, N = 5-7$, — функции отклика N независимых детекторов. Небольшое количество измерений, весьма «широкие» функции $A_n(x)$ делают здесь использование информации $S(x) > 0$ просто необходимым. Это иллюстрирует рис.15, где приводятся оценки $\hat{S}(x)$ по методу Тихонова с и без использования этой информации.

Принцип максимума энтропии. Этот принцип получения оценки $S(x)$ пользуется довольно большой популярностью [27—31, 40]. Дело в том, что этот принцип обеспечивает не только положительность оценки $\hat{S}(x)$, но и имеет информационно-статистическое обоснование. Если, например, метод Тихонова предлагает из всех функций $S(x) = Cp(x)$, подчиняющихся данным экспериментальным ограничениям, выбирать решение с минимальной нормой $\|S\|$, то этот принцип предлагает выбирать

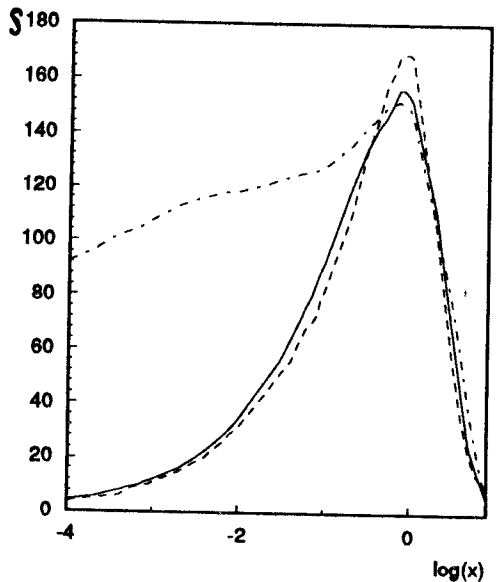


Рис.15. Восстановление спектра ^{252}Cf : сплошная кривая — истинный спектр, штрихпунктирная — линейный метод оценивания, штриховая — нелинейный метод

то, которое обладает максимальной энтропией H , равной

$$H(p) = - \int dx \ln p(x)p(x). \quad (74)$$

Разумность выбора (74) в качестве меры неопределенности $p(x)$ хорошо демонстрируют классические примеры использования принципа максимума энтропии.

1. Максимизирующим энтропию на отрезке $[a, b]$ является равномерное распределение $p(x) = 1/(b-a)$.

2. На оси $(-\infty, \infty)$ функцией, максимизирующей (74) и имеющей $\bar{x} = \mu$, $\overline{(x-\mu)^2} = \sigma^2$, является гауссово распределение с этими параметрами μ , σ .

В работе [27] рассмотрен случай, когда о распределении ϵ_n ничего неизвестно. В изложении мы будем придерживаться работы [28].

Для решения рассматриваемой нами задачи естественно искать оценку $p(x)$ из условия экстремума функционала

$$\Phi = \sum_n w_n [Y_n - C \int dx A_n(x)p(x)]^2 - \alpha H(p) + \lambda [\int dx p(x) - 1], \quad (75)$$

где $C = 1/\int dx S(x)$, λ — множитель Лагранжа при члене, учитывающем нормированность $p(x)$. Функция $\hat{p}(x)$, доставляющая экстремум функционала (75) при заданном α , во-первых, должна быть совместимой с экспериментальными данными Y_i и удовлетворять условию нормировки, а во-вторых, обладать максимальной энтропией, т.е. быть минимально информативной оценкой. При этом уменьшается риск включить в $\hat{p}(x)$ информацию, которая не нужна для описания экспериментальных данных. В этом и состоит главная привлекательность использования принципа максимума энтропии для регуляризации.

Кроме того, использование $H(p)$ в качестве стабилизатора приводит, как мы увидим дальше, к положительности $\hat{p}(x)$, т.е. к автоматическому учету единственно доступной априорной информации общего характера.

Рассмотрим вначале случай, когда C известно, т.е. $E(x) = 1$ и $1/C = \sum_n Y_n$. Вариация функционала (75) по $p(x)$ дает следующее уравнение для $p(x)$:

$$\frac{\delta \Phi}{\delta p(x)} = \alpha \ln p(x) + \alpha - 2 \sum_n w_n [Y_n - C \int dx' A_n(x')p(x')] CA_n'(x) + \lambda = 0. \quad (76)$$

Вводя обозначения

$$a_n = \frac{2Cw_n}{\alpha} [Y_n - C \int dx A_n(x)p(x)], \quad \gamma = -1 - \lambda/\alpha, \quad (77)$$

мы можем записать формальное решение уравнения (76) в виде

$$\hat{p}(x) = \exp\{\gamma + \sum_i a_i A_i(x)\}. \quad (78)$$

Из выражения (78) видно, что положительность оценки $\hat{p}(x)$ обеспечена ее функциональной формой.

Подстановка (78) в уравнение

$$\frac{\partial \Phi}{\partial \lambda} = \int dx p(x) - 1 = 0 \quad (79)$$

позволяет исключить γ и записать $\hat{p}(x)$ в виде

$$\hat{p}(x|a) = \exp\{\sum_n a_n A_n(x)\} / Z(a), \quad (80)$$

где

$$Z(a) = \int dx \exp\{\sum_n a_n A_n(x)\}. \quad (81)$$

Уравнения для параметров a_n получаются подстановкой (80) в (77):

$$F_n \equiv Y_n - CC_n(a) - \frac{\alpha}{2Cw_n} a_n = 0, \quad (82)$$

где

$$C_n(a) = \int dx A_n(x) \hat{p}(x|a).$$

Система (82) является нелинейной по параметрам a_n . Используемый нами метод ее решения мы опишем ниже.

Пусть теперь $E(x) \leq 1$, т.е. параметр C неизвестен. Дифференцирование функционала (75) по C даст дополнительное уравнение, объединяя которое с системой (82), приходим к системе $N + 1$ уравнений на параметры a_n, C :

$$\begin{aligned} F_n &\equiv Y_n - CC_n(a) - \frac{\alpha}{2Cw_n} a_n = 0, \quad n = 1, \dots, N, \\ F_{N+1} &\equiv \sum_n w_n C_n(a) |Y_n - CC_n(a)| = 0. \end{aligned} \quad (83)$$

На рис.16 приведен результат численного эксперимента по восстановлению $S(x) = Cp(x)$ из первого раздела.

Следует отметить, что включение C в число искомых параметров приводит к ухудшению сходимости итерационного процесса. Это является следствием того, что последнее уравнение системы (83) при $\alpha = 0$ мо-

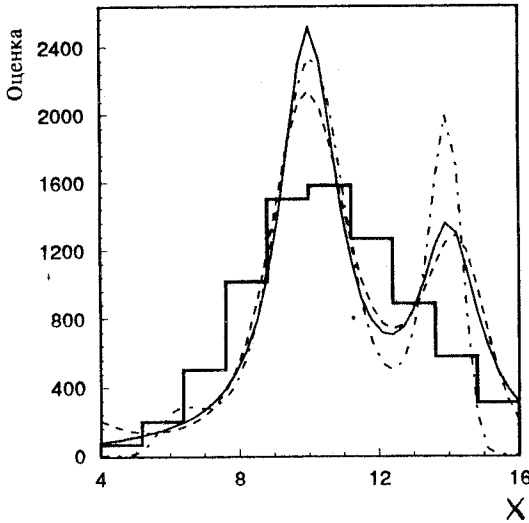


Рис.16. Восстановление $S(x) = Cp(x)$ по принципу максимума энтропии для примера из первого раздела: штриховая линия — C известно, штрихпунктирная — C является параметром

жет быть получено из первых N уравнений. Более того, при неизвестном C область значений α , в которой достигается значительное улучшение разрешения, существенно меньше области при известном C [28]. Решение систем (82), (83) определялось путем минимизации $\sum_n (F_n)^2$ с по-

мощью программы FUMILI [26] и достигалось при известном C за число итераций ~ 10 , а при неизвестном ~ 25 .

Из выражения (80) видно, что, вообще говоря, оценка $\hat{p}(x)$ является смещенной и разность $p(x) - \hat{p}(x)$ определяется возможностью описать $\ln p(x)$ линейной комбинацией $A_n(x)$. Кроме того, к дополнительной смещенности приводят члены $\alpha a_n / 2Cw_n$ в системе (83).

Рассмотрим шумовую составляющую оценки $\hat{p}(x)$. Она определяется матрицей ошибок параметров a , которая приближенно может быть получена следующим образом. Пусть \tilde{a}_j — решение системы (83) при $\varepsilon_n = 0$, а $a_j = \tilde{a}_j + \Delta a_j$ при $\varepsilon_n \neq 0$, т.е. при $Y_n = \bar{Y}_n + \varepsilon_n$. Запишем систему (83) в виде

$$F_i(\tilde{a}_j + \Delta a_j, Y_n = \bar{Y}_n + \varepsilon_n) = 0, \quad j, i = 1, \dots, N+1, \quad n = 1, \dots, N, \quad (84)$$

и разложим F_i по Δa_j и ε_n , ограничиваясь линейными членами по Δa_j , ε_n , ($a_{N+1} \equiv C$). Имеем

$$F_i(\tilde{a}_j, \bar{Y}_n) + \sum_j \frac{\partial F_i}{\partial a_j} \Delta a_j + \sum_n \frac{\partial F_i}{\partial Y_n} \varepsilon_n = 0.$$

По определению $F_i(\tilde{a}_j, \bar{Y}_n) = 0$, поэтому можно записать

$$\begin{aligned}
 \Delta a &= -B^{-1}D\epsilon, \quad B_{ij} = \frac{\partial F_i}{\partial a_j}, \quad D_{in} = \frac{\partial F_i}{\partial Y_n}, \\
 B_{ij} &= -CC_{ij} - \frac{\alpha}{2Cw_i} \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, N, \\
 B_{N+1,j} &= \sum_i w_i Y_i C_{ij} - 2C \sum_i w_i C_i C_{ij}, \\
 B_{i,N+1} &= -C_i + \frac{\alpha}{2C^2 w_i} C_i, \quad B_{N+j,N+1} = - \sum_i w_i C_i^2, \\
 D_{ij} &= \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \dots, N, \quad D_{N+1,i} = w_i C_i, \\
 C_{ij} &= \frac{\partial C_i(a)}{\partial a_j}.
 \end{aligned} \tag{85}$$

Из (85) получаем, что матрица ошибок a_j есть

$$\Sigma^a = B^{-1}D\sigma^2 D^T B^{T-1}, \quad \sigma_{nm}^2 = \frac{\epsilon_n \epsilon_m}{Y_n} = Y_n \delta_{nm}. \tag{86}$$

Матрица Σ_{ij}^a , $i, j = 1, \dots, N$, есть матрица ошибок параметров a_i , $i = 1, \dots, N$, через которую мы приближенно получаем оператор ошибок $\hat{p}(x)$:

$$\Sigma^p(x, x') = \sum_{i,j=1}^N \frac{\partial \hat{p}(x|\hat{a})}{\partial a_i} \Sigma_{ij}^a \frac{\partial \hat{p}(x'|\hat{a})}{\partial a_j}. \tag{87}$$

Существует класс задач, в которых известно, что искомое распределение $p(x)$ должно быть близко к некоторому данному $p_0(x)$. В этом случае естественно использовать расстояние* Кульбака — Лейблера [32,33]

$$\Omega(p) \equiv I(p, p_0) = \int dx p(x) \ln |p(x)/p_0(x)| \geq 0,$$

которое достигает минимума при $p(x) = p_0(x)$. В случае, если $p_0(x)$ — равномерное распределение $p_0(x) = 1/L$, где L — длина интервала изменения величины x в эксперименте, то

$$I(p, p_0) = \int dx p(x) \ln p(x) - \int dx p(x)(1/L) = -H(p) - 1/L,$$

*Термин «расстояние» в этом случае носит условный характер, так как $I(p, p_0)$ не удовлетворяет условию симметрии расстояния $\rho(p, p_0) = \rho(p_0, p)$. Сам Кульбак называет $I(p, p_0)$ средней информацией для разделения p и p_0 относительно p [32].

т.е. принцип максимума энтропии эквивалентен минимизации $I(p, p_0)$, когда $p_0(x)$ — равномерное распределение. Таким образом, принцип минимума расстояния Кульбака — Лейблера обобщает принцип максимума энтропии при заданном априорном распределении p_0 , совпадая с ним, когда p_0 — равномерное распределение.

Итак, будем искать оценку $p(x)$ из условия экстремума функционала

$$\Phi = \sum_n w_n |Y_n - C \int dx A_n(x) p(x)|^2 + \alpha I(p, p_0) + \lambda [\int dx p(x) - 1].$$

Варьируя функционал Φ по $p(x)$ и используя условие нормировки, можно получить

$$\hat{p}(x|a) = p_0(x) \exp\left[\sum_n a_n A_n(x)\right] / Z(a), \quad (88)$$

где

$$Z(p) = \int dx p_0(x) \exp\left[\sum_n a_n A_n(x)\right],$$

$$a_n = \frac{2Cw_n}{\alpha} [Y_n - C \int dx p(x) A_n(x)].$$

Подстановка полученного выражения $\hat{p}(x|a)$ в последнее равенство приводит к системе уравнений

$$F_n \equiv Y_n - CC_n(a) - \frac{\alpha}{2Cw_n} a_n = 0, \quad (89)$$

где

$$C_n(a) = \int dx A_n(x) \hat{p}(x|a).$$

Система (89) формально совпадает с системой (82) так же, как и уравнение $\partial F / \partial C$. Отличие заключается лишь в появлении функции $p_0(x)$ под интегралом в определении $C_n(a)$:

$$C_n(a) = \int dx A_n(x) p_0(x) \exp\left[\sum_n a_n A_n(x)\right] / Z(a).$$

Следует отметить, что распределение вида (88) получается при минимизации $I(p, p_0)$ при условии, что

$$\int dx A_n(x) p(x) = Y_n,$$

и называется сопряженным [34].

В работе [31] оценка $S(x)$ ищется из минимума функционала (75) при известном C , а функция $p(x)$ аппроксимируется ступенчатой функ-

цией, однако анализ систематической и статистической ошибок метода не приводится.

В работе [29] предлагается использование принципа максимума энтропии в задаче корректировки экспериментального распределения по множественности $0(m)$, равного

$$0(m) = \sum_{n=1}^N P_{mn} T(n), \quad m = 1, \dots, M, \quad (90)$$

где $T(n)$ — изучаемое распределение, P_{mn} — матрица, описывающая искажения детектора. Однако вместо минимизации дискретного аналога функционала (75) в работе предлагается максимизировать энтропию распределения $T(n)$ при условии равенства моментов

$$\langle m^q \rangle = \sum_{n=1}^M m^q 0(m) = \sum_{n=1}^N \left(\sum_{m=1}^M m^q P_{mn} \right) T(n) \quad (91)$$

их экспериментальным значениям. Задача решается по методу множителей Лагранжа. Число используемых связей увеличивается, пока χ^2 не достигнет значения M , переменная критерия серий — $M/2$. Использование не всей экспериментальной информации $0(m)$, а лишь нескольких моментов обосновывается автором простотой задачи по сравнению с минимизацией χ^2 . Однако этот подход также приводит к задаче решения нелинейных уравнений. Анализ систематической и статистической ошибок отсутствует. Численные эксперименты, проведенные автором, дали удовлетворительные результаты.

В работе [30] оценка распределения ищется из условия максимума энтропии этого распределения при условии равенства χ^2 числу экспериментальных данных. Задача решается методом множителей Лагранжа, фактически это отвечает выбору параметра регуляризации α в функционале (75) по принципу невязки [14], что не гарантирует оптимальное значение α и, следовательно, оптимальность оценки $\hat{S}(x)$.

3. ОЦЕНКИ СТРУКТУРНЫХ ФУНКЦИЙ ПО ДАННЫМ ГЛУБОКОНЕУПРУГОГО ЛЕПТОН-НУКЛОННОГО РАССЕЯНИЯ

Одной из основных задач экспериментов по глубоконеупругому лептон-нуклонному рассеянию является модельно-независимое извлечение структурных функций нуклона. Последние служат для получения партонных распределений в рамках КХД партонной модели.

Рассеяние мюона и электрона по каналу нейтрального тока. Пусть Y_n — числа событий в каналах гистограммы измеренного сечения $d^2\sigma/dxdQ^2$ при данном значении $s = (p_{\mu(e)} + p_N)^2$. Обозначим $d^2\sigma/dxdQ^2 \equiv S(x, Q^2 | s)$ для краткости; $E(x, Q^2)$ — вероятность регистрации события с данными x, Q^2 (акцептанс детектора); $K(x', Q^2 | x, Q^2, s)$ — вероятность в результате анализа события получить вместо истинных x, Q^2 измеренные x', Q^2 (функция, описывающая разрешение эксперимента, а также радиационное излучение лептона); ϵ_n — флуктуация числа событий Y_n ; \bar{Y}_n — ожидаемое число событий. Тогда Y_n может быть записано в следующем виде:

$$Y_n = \bar{Y}_n + \epsilon_n =$$

$$= L \int_{S_n} dx' dQ^2 \int dx dQ^2 K(x', Q^2 | x, Q^2, s) E(x, Q^2) S(x, Q^2 | s) + \epsilon_n, \quad (92)$$

где L — число, определяемое либо числом лептонов, сброшенных на мишень в эксперименте, и числом нуклонов в мишени (эксперимент на выведенном пучке), либо светимостью коллайдера и временем набора статистики (эксперимент на встречных пучках), S_n — площадь n -го бина экспериментальной гистограммы по величинам x, Q^2 . Для дальнейшего рассмотрения удобно выражение (92) записать в виде:

$$Y_n = \int dx dQ^2 A_n(x, Q^2, s) S(x, Q^2 | s) + \epsilon_n, \quad (93)$$

где

$$A_n(x, Q^2, s) = L \int_{S_n} dx' dQ^2 K(x', Q^2 | x, Q^2, s) E(x, Q^2).$$

Если не делать никаких модельных предположений о структурных функциях, то

$$S_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s) = f_L(y, Q^2) F_L(x, Q^2) + f_2(y, Q^2) F_2(x, Q^2) \mp f_3(y, Q^2) F_3(x, Q^2), \quad (94)$$

где

$$y = Q^2 / (s - M^2)x, \quad f_L(y, Q^2) = -4\pi \alpha^2 y^2 / xQ^4,$$

$$f_2(y, Q^2) = 4\pi \alpha^2(1 - y + y^2/2)/xQ^4, \quad f_3(y, Q^2) = 4\pi \alpha^2(y - y^2/2)/Q^4.$$

Задача упрощается, если предположить $F_L = 0$ (выполняется соотношение Каллана — Гросса). Сечения принимают вид:

$$S_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s) = f_2(y, Q^2)F_2(x, Q^2) \mp f_3(y, Q^2)F_3(x, Q^2). \quad (95)$$

Другое приближение для $S_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s)$ получается при пренебрежении членом, нарушающим четность:

$$S_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s) = f_L(y, Q^2)F_L(x, Q^2) + f_2(y, Q^2)F_2(x, Q^2). \quad (96)$$

И совсем простое выражение для $S_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s)$ получается при использовании обоих приближений:

$$S_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s) = f_2(y, Q^2)F_2(x, Q^2). \quad (97)$$

В настоящее время учет экспериментального разрешения и радиационных поправок делается согласно методу корректирующих множителей. Однако, как мы видели, это не лучший подход к задаче. Мы опишем подход, изложенный в работе [35].

Оценивание структурных функций по оценкам сечений. За основу оценивания структурных функций теперь положим равенство сечений в рамках одной из моделей (94), (95), (96), (97) их оценкам, согласно одному из методов первого раздела.

Модель (97). В этом случае модель содержит одну неизвестную структурную функцию $F_2(x, Q^2)$, следовательно, ее оценка есть

$$\hat{F}_2(x, Q^2) = \hat{S}_{NC}^{\pm}/f_2(x, Q^2, s) = \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s) \bar{G}_{nm}^{-1} Y_m^{\pm}/f_2(x, Q^2, s). \quad (98)$$

Используя тот факт, что в рамках этой модели

$$\bar{Y}_n^{\pm} = \int dx dQ^2 A_n(x, Q^2, s) f_2(x, Q^2, s) F_2(x, Q^2),$$

находим, что

$$\tilde{F}_2^{\pm}(x, Q^2) = \int dx' dQ^2 A_R(x, Q^2, x', Q^2, s) F_2(x', Q^2),$$

$$A_R(x, Q^2, x', Q^2, s) =$$

$$= \sum_{n,m} f_2^{-1}(x, Q^2, s) A_n(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} A_m(x', Q^2, s) f_2(x', Q^2, s),$$

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp } G\tilde{G}^{-1}. \quad (99)$$

Шумовая составляющая оценки (98) характеризуется оператором ошибок

$$\Sigma(x, Q^2, x', Q^2, s) = \sum_{n,m,k,l} f_2^{-1}(x, Q^2, s) A_n(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} K_{mk}^{\pm} \times \\ \times \tilde{G}_{kl}^{-1} A_l(x', Q^2, s) f_2^{-1}(x', Q^2, s),$$

где K^{\pm} — матрица ошибок измерений Y_n^{\pm} , а в целом*

$$\|F_{2\varepsilon}\|^2 = \text{Sp} \tilde{G}^{-1} K \tilde{G}^{-1} \langle f_2^{-1} A | f_2^{-1} A \rangle,$$

$$F_{2\varepsilon} = \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} \varepsilon_m^{\pm} / f_2(x, Q^2, s),$$

где матрица $\langle f_2^{-1} A | f_2^{-1} A \rangle$ есть $\langle f_2^{-1} A | f_2^{-1} A \rangle_{nm} = \int dx dQ^2 f_2^{-2} A_n A_m$.

Модель (96). В этом случае сечение содержит две неизвестные структурные функции $F_L(x, Q^2)$ и $F_2(x, Q^2)$ и требуется измерение, например, сечения $S_{NC}^{-}(x, Q^2 | s)$ при двух значениях s : s_1 и s_2 . Тогда после получения оценок $S_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_j)$ имеем систему уравнений

$$\left. \begin{aligned} f_L(x, Q^2, s_1) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_1) \hat{F}_2(x, Q^2) &= \hat{S}_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_1) \\ f_L(x, Q^2, s_2) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_2) \hat{F}_2(x, Q^2) &= \hat{S}_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_2) \end{aligned} \right\}. \quad (100)$$

Введем обозначение

$$C(x, Q^2) = \begin{pmatrix} f_L(x, Q^2, s_1) & f_2(x, Q^2, s_1) \\ f_L(x, Q^2, s_2) & f_2(x, Q^2, s_2) \end{pmatrix}.$$

Тогда оценка, например, $F_2(x, Q^2)$ может быть записана в виде

$$\hat{F}_2(x, Q^2) = \sum_j C_{2j}^{-1} \hat{S}_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_j) = \\ = \sum_{j,n,m} C_{2j}^{-1} A_n(x, Q^2, s_j) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_j) Y_m^j, \quad (101)$$

*Здесь и далее мы используем в качестве характеристики шумовой составляющей ее норму $\|F_{\varepsilon}\|^2$, равную $\text{Sp } \Sigma$ только в случае L_2 -нормы.

где Y_m^j — измерения при $s = s_j$. Из выражения (101) и того, что в рамках этой модели для \bar{Y}_n^j справедливо

$$\bar{Y}_n^j = \int dx dQ^2 A_n(x, Q^2, s_j) [f_1 F_L + f_2 F_2],$$

следует, что

$$\bar{\hat{F}}_2(x, Q^2) = \int dx' dQ'^2 A_{R2L} F_L + \int dx' dQ'^2 A_{R22} F_2, \quad (102)$$

где

$$\begin{aligned} A_{R2L}(x, Q^2, x', Q'^2) &= \\ &= \sum_{j,n,m} C_{2j}^{-1} A_n(x, Q^2, s_j) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_j) A_m(x', Q'^2, s_j) f_L(x', Q'^2, s_j), \\ A_{R22}(x, Q^2, x', Q'^2) &= \\ &= \sum_{j,n,m} C_{2j}^{-1} A_n(x, Q^2, s_j) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_j) A_m(x', Q'^2, s_j) f_2(x', Q'^2, s_j). \end{aligned}$$

Из выражения (102) следует, что, в отличие от модели (97), смещенность оценки $\hat{F}_2(x, Q^2)$ зависит не только от самой функции $F_2(x, Q^2)$, но и от функции $F_L(x, Q^2)$.

Аналогично для $\bar{\hat{F}}_L(x, Q^2)$ легко получить, что

$$\bar{\hat{F}}_L(x, Q^2) = \int dx' dQ'^2 A_{RLL} F_L + \int dx' dQ'^2 A_{RL2} F_2, \quad (103)$$

где

$$\begin{aligned} A_{RLL}(x, Q^2, x', Q'^2) &= \\ &= \sum_{j,n,m} C_{Lj}^{-1} A_n(x, Q^2, s_j) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_j) A_m(x', Q'^2, s_j) f_L(x', Q'^2, s_j), \\ A_{RL2}(x, Q^2, x', Q'^2) &= \\ &= \sum_{j,n,m} C_{Lj}^{-1} A_n(x, Q^2, s_j) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_j) A_m(x', Q'^2, s_j) f_2(x', Q'^2, s_j). \end{aligned}$$

Шумовые характеристики $\hat{F}_{ie}(x, Q^2)$ оценок $\hat{F}_i(x, Q^2)$ определяются оператором ошибок

$$\Sigma_i(x, Q^2, x', Q^2, s) = \sum_{j,n,m,l,k} C_{ij}^{-1} A_n(x, Q^2, s_j) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_j) K_{ml}^j \times \\ \times \tilde{G}_{lk}^{-1} A_k(x', Q^2, s_j) C_{ij}^{-1}, \quad (104)$$

где K^j — матрица ошибок измерений Y_n^j при $s = s_j$, и использован тот факт, что ошибки измерений при разных s_j независимы.

Модель (95). В этом случае оценки структурных функций F_2, F_3 можно искать либо по измерениям двух сечений S_{NC}^{\pm} при одном значении s , либо по измерениям одного сечения при двух значениях $s: s_1$ и s_2 . Рассмотрим сначала первый вариант. Приравнивая сечения их оценкам, имеем систему уравнений

$$\left. \begin{aligned} f_2(x, Q^2, s) \hat{F}_2(x, Q^2) + f_3(x, Q^2, s) \hat{F}_3(x, Q^2) &= \hat{S}_{NC}^-(x, Q^2 | s) \\ f_2(x, Q^2, s) \hat{F}_2(x, Q^2) - f_3(x, Q^2, s) \hat{F}_3(x, Q^2) &= \hat{S}_{NC}^+(x, Q^2 | s) \end{aligned} \right\}. \quad (105)$$

Из системы (105) получаем*

$$\left. \begin{aligned} \hat{F}_2(x, Q^2) &= \frac{1}{2}(\hat{S}_{NC}^- + \hat{S}_{NC}^+) \quad f_2 = \frac{1}{2} \sum_n A_n \tilde{G}_{nm}^{-1} (Y_m^- + Y_m^+) / f_2 \\ \hat{F}_3(x, Q^2) &= \frac{1}{2}(\hat{S}_{NC}^- - \hat{S}_{NC}^+) \quad f_3 = \frac{1}{2} \sum_n A_n \tilde{G}_{nm}^{-1} (Y_m^- - Y_m^+) / f_3 \end{aligned} \right\}. \quad (106)$$

В рамках этой модели

$$\bar{Y}_n^{\pm} = \int dx dQ^2 A_n(x, Q^2, s) [f_2 F_2 \mp f_3 F_3]. \quad (107)$$

Используя это выражение, находим, что

$$\begin{aligned} \tilde{F}_i(x, Q^2) &= \int dx' dQ^2 A_{Ri}(x, Q^2, x', Q^2, s) F_i(x', Q^2), \\ A_{Ri}(x, Q^2, x', Q^2, s) &= \\ &= \sum_{n,m} f_i^{-1}(x, Q^2, s) A_n(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} A_m(x', Q^2, s) f_i(x', Q^2, s), \end{aligned}$$

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp } G \tilde{G}^{-1}. \quad (108)$$

*Здесь и далее для простоты мы предполагаем, что $N^- = N^+$, бининг при измерении сечений S_{NC}^{\pm} одинаков ($A_n^+ = A_n^- = A_n$) и $\tilde{G}^+ = \tilde{G}^- = \tilde{G}$ (параметр регуляризации в оценках \hat{S}_{NC}^+ и \hat{S}_{NC}^- одинаков).

Шумовая составляющая оценки $\hat{F}_i(x, Q^2)$ характеризуется оператором ошибок

$$\Sigma_i(x, Q^2, x', Q^2, s) = \sum_{n,m,k,l} \frac{1}{4} f_i^{-1}(x, Q^2, s) A_n(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} K_{mk}^i \times \\ \times \tilde{G}_{kl}^{-1} A_l(x', Q^2, s) f_i^{-1}(x', Q^2, s), \quad (109)$$

где K^2 — матрица ошибок измерений $Y_n^- + Y_n^+$, K^3 — матрица ошибок измерений $Y_n^- + Y_n^+$, а в целом

$$\|F_{ie}\|^2 = \text{Sp } \tilde{G}^{-1} K^i \tilde{G}^{-1} \langle f_i^{-1} A | f_i^{-1} A \rangle.$$

Модель (94). Пусть даны измерения $\hat{S}_{NC}^\pm(x, Q^2 | s)$ при $s = s_1, s_2$. Тогда есть возможность оценить все три структурные функции $F_L(x, Q^2)$, $F_2(x, Q^2)$, $F_3(x, Q^2)$ согласно следующей схеме. Из системы уравнений при $s_1 > s_2$

$$\left. \begin{aligned} f_L(x, Q^2, s_1) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_1) \hat{F}_2(x, Q^2) + \\ + f_3(x, Q^2, s_1) \hat{F}_3(x, Q^2) = \hat{S}_{NC}^-(x, Q^2 | s_1), \\ f_L(x, Q^2, s_1) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_1) \hat{F}_2(x, Q^2) - \\ - f_3(x, Q^2, s_1) \hat{F}_3(x, Q^2) = \hat{S}_{NC}^+(x, Q^2 | s_1) \end{aligned} \right\} \quad (110)$$

имеем

$$\hat{F}_3(x, Q^2) = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{NC}^-(x, Q^2 | s_1) - \hat{S}_{NC}^+(x, Q^2 | s_1) \right) / f_3(x, Q^2, s_1), \\ f_L(x, Q^2, s_1) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_1) \hat{F}_2(x, Q^2) = \\ = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{NC}^-(x, Q^2 | s_1) + \hat{S}_{NC}^+(x, Q^2 | s_1) \right). \quad (111)$$

В этом случае

$$\bar{Y}_n^\pm = \int dx Q^2 A_n(x, Q^2, s_1) [f_L F_L + f_2 F_2 \mp f_3 F_3]. \quad (112)$$

Используя последнее соотношение, вычислим $\bar{F}_3(x, Q^2)$:

$$\bar{F}_3(x, Q^2) = \frac{1}{2} f_3^{-1}(x, Q^2, s_1) \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s_1) \tilde{G}_{nm}^{-1}(s_1) [Y_m^- - Y_m^+] =$$

$$\begin{aligned}
&= f_3^{-1}(x, Q^2, s_1) \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s_1) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_1) \int dx' dQ^2 A_m f_3 F_3 = \\
&= \int dx' dQ^2 A_{R3}(x, Q^2, x', Q^2) F_3(x', Q^2), \quad (113)
\end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned}
&A_{R3}(x, Q^2, x', Q^2) = \\
&= \sum_{n,m} f_3^{-1}(x, Q^2, s_1) A_n(x, Q^2, s_1) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_1) A_m(x', Q^2, s_1) f_3(x', Q^2, s_1).
\end{aligned}$$

Для оператора ошибок оценки $\hat{F}_3(x, Q^2)$ справедливо выражение

$$\begin{aligned}
\Sigma_3(x, Q^2, x', Q^2, s_1) &= \sum_{n,m,k,l} \frac{1}{4} f_3^{-1}(x, Q^2, s_1) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_1) (K^{-} + K^{+})_{mk} \times \\
&\times \bar{G}_{kl}^{-1}(s_1) A_l(x', Q^2, s_1) f_3^{-1}(x', Q^2, s_1). \quad (114)
\end{aligned}$$

Для получения оценки $F_L(x, Q^2)$ и $F_2(x, Q^2)$ привлечем полусумму сечений $\hat{S}_{NC}^{\pm}(x, Q^2 | s)$ при $s = s_2$. Вместе с уравнением (110) имеем

$$\left. \begin{aligned}
f_L(x, Q^2, s_1) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_1) \hat{F}_2(x, Q^2) &= \\
= \frac{1}{2} [\hat{S}_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_1) + \hat{S}_{NC}^{+}(x, Q^2 | s_1)], \\
f_L(x, Q^2, s_2) \hat{F}_L(x, Q^2) + f_2(x, Q^2, s_1) \hat{F}_2(x, Q^2) &= \\
= \frac{1}{2} [\hat{S}_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_2) + \hat{S}_{NC}^{+}(x, Q^2 | s_2)].
\end{aligned} \right\} \quad (115)$$

Вводя матрицу $C(x, Q^2)$, как мы это делали при решении системы (100), имеем для $\hat{F}_i(x, Q^2)$ выражение

$$\begin{aligned}
\hat{F}_i(x, Q^2) &= \frac{1}{2} \sum_j C_{ij}^{-1} [\hat{S}_{NC}^{-}(x, Q^2 | s_j) + \hat{S}_{NC}^{+}(x, Q^2 | s_j)] = \\
&= \frac{1}{2} \sum_j C_{ij}^{-1} \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s_j) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_j) [Y_m^{-}(s_j) + Y_m^{+}(s_j)]. \quad (116)
\end{aligned}$$

Используя выражение (112), получим $\hat{F}_i(x, Q^2)$:

$$\begin{aligned} \bar{F}_i(x, Q^2) &= \frac{1}{2} \sum_j C_{ij}^{-1} \sum_{n,m,k} A_n(x, Q^2, s_j) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_j) \times \\ &\times \int dx' dQ'^2 A_m(x', Q'^2, s_j) \sum_k f_k(x', Q'^2, s_j) F_k(x', Q'^2), \quad k = L, 2. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \bar{F}_i(x, Q^2) &= \sum_k \int dx' dQ'^2 A_{Rik}(x, Q^2, x', Q'^2) F_k(x', Q'^2), \\ A_{Rik}(x, Q^2, x', Q'^2) &= \\ &= \sum_j C_{ij}^{-1} \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s_j) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_j) A_m(x', Q'^2, s_j) f_k(x', Q'^2, s_j). \end{aligned} \quad (117)$$

Для оператора ошибок шумовой составляющей

$$\hat{F}_{ie}(x, Q^2) = \frac{1}{2} \sum_j C_{ij}^{-1} \sum_{n,m} A_n(x, Q^2, s_j) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_j) [\varepsilon_m^-(s_j) + \varepsilon_m^+(s_j)]$$

получаем следующее выражение:

$$\begin{aligned} \Sigma_i(x, Q^2, x', Q'^2) &= \frac{1}{4} \sum_j C_{ij}^{-1} \sum_{n,m,l,k} A_n(x, Q^2, s_j) \bar{G}_{nm}^{-1}(s_j) \times \\ &\times [K^-(s_j) + K^+(s_j)] \times \bar{G}_{lk}^{-1}(s_j) A_k(x', Q'^2, s_j) C_{ij}^{-1}. \end{aligned} \quad (118)$$

Как мы убедились, $\bar{S}(x, Q^2 | s) \neq S(x, Q^2 | s)$. Следовательно, использование нами равенства $S(x, Q^2 | s) = \hat{S}(x, Q^2 | s)$ является не совсем корректным и ведет к систематической ошибке в оценке структурных функций $F_i(x, Q^2)$. Поэтому представляется естественным оценивание структурных функций прямо по экспериментальным данным. Эти оценки, конечно, будут также смещены. Но априори, без проведения численных экспериментов, трудно отдать предпочтение одному из этих подходов.

Оценивание структурных функций F_L, F_2, F_3 по экспериментальным данным. *Модель (97)*. Пусть даны измерения Y_n , например, сечения $S_{NC}^-(x, Q^2 | s)$. В рамках этой простейшей модели их ожидаемые значения можно записать в виде

$$\bar{Y}_n = \int dx dQ^2 A_n^2(x, Q^2, s) F_2(x, Q^2),$$

где

$$A_n^2(x, Q^2, s) = A_n(x, Q^2, s) f_2(x, Q^2, s).$$

Следовательно, задача оценивания $F_2(x, Q^2)$ формально совпадает с задачей оценивания самого сечения $S_{NC}^-(x, Q^2 | s)$. Поэтому мы выпишем сразу выражение для оценки

$$\hat{F}^2(x, Q^2) = \sum_{n,m} A_n^2(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} Y_m,$$

где \tilde{G} — регуляризованная матрица Грама функций $A_n^2(x, Q^2, s)$, и ее характеристики

$$A_R(x, Q^2, x', Q^{2'}) = \sum_{n,m} A_n^2(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} A_m^2(x', Q^{2'}, s),$$

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp } G \tilde{G}^{-1},$$

$$\Sigma(x, Q^2, x', Q^{2'}) = \sum_{n,m,l,k} A_n^2(x, Q^2, s) \tilde{G}_{nm}^{-1} K_{ml} \tilde{G}_{lk}^{-1} A_k^2(x', Q^{2'}, s),$$

$$\|F_{2e}\| = \text{Sp } G \tilde{G}^{-1} K \tilde{G}^{-1}.$$

Модель (96). Пусть, как и раньше, даны измерения $Y_n(s_1)$ и $Y_n(s_2)$, $n = 1 \dots N$, например, сечения $S_{NC}^-(x, Q^2 | s)$ при двух значениях s . Запишем $\bar{Y}_n(s_i)$ в виде

$$\begin{aligned} \bar{Y}_n^i \equiv \bar{Y}_n(s_i) &= \int dx dQ^2 A_n^L(x, Q^2, s_i) F_L(x, Q^2) + \\ &+ \int dx dQ^2 A_n^2(x, Q^2, s_i) F_2(x, Q^2), \end{aligned} \quad (119)$$

где

$$A_n^L(x, Q^2, s_i) = A_n(x, Q^2, s_i) f_L(x, Q^2, s_i),$$

$$A_n^2(x, Q^2, s_i) = A_n(x, Q^2, s_i) f_2(x, Q^2, s_i).$$

Введем единый вектор измерений

$$\langle Y | = (Y_1 \dots Y_N Y_{N+1} \dots Y_{2N}),$$

его весовую матрицу W , его ковариационную матрицу K , вектор-функции

$$\langle A^L(x, Q^2) | = (A_1^L \dots A_N^L A_{N+1}^L \dots A_{2N}^L),$$

$$\langle A^2(x, Q^2) | = (A_1^2 \dots A_N^2 A_{N+1}^2 \dots A_{2N}^2)$$

и вектор структурных функций $\langle F(x, Q^2) | = (F_L, F_2)$. Выбирая различный вид стабилизатора в функционале метода Тихонова, можно получать различные оценки $|\hat{F}(x, Q^2)\rangle$. Выберем простейший:

$$\begin{aligned} \Phi &= (Y - \bar{Y})^T W (Y - \bar{Y}) + \alpha \int dx dQ^2 F_L^2 + \\ &+ \alpha \int dx dQ^2 F_2^2 \equiv (Y - \bar{Y})^T W (Y - \bar{Y}) + \alpha \|F\|^2. \end{aligned} \quad (120)$$

Рассмотрим оценку $|\hat{F}(x, Q^2)\rangle$ согласно функционалу (120). Вариация (120) по $F_L(x, Q^2)$, $F_2(x, Q^2)$ приводит к системе уравнений

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_L} = F_L - \langle A^L(x, Q^2) | W | Y - \bar{Y} \rangle = 0, \quad (121)$$

$$\frac{\delta \Phi}{\delta F_2} = F_2 - \langle A^2(x, Q^2) | W | Y - \bar{Y} \rangle = 0.$$

Из нее следует, что для $\hat{F}_L(x, Q^2)$, $\hat{F}_2(x, Q^2)$ справедливо выражение

$$\left\langle \begin{array}{l} \hat{F}_L(x, Q^2) \\ \hat{F}_2(x, Q^2) \end{array} \right\rangle = \frac{1}{\alpha} \sum_n \Delta_n \left\langle \begin{array}{l} A_n^L(x, Q^2) \\ A_n^2(x, Q^2) \end{array} \right\rangle, \quad (122)$$

где

$$|\Delta\rangle = W | Y - \bar{Y} \rangle. \quad (123)$$

Подстановка выражений (122) в (123) с использованием (119) приводит к следующей системе уравнений для Δ_n :

$$[\alpha K + \langle A^L | A^L \rangle + \langle A^2 | A^2 \rangle] |\Delta\rangle = |Y\rangle.$$

Элементы матриц $\langle A^L | A^L \rangle$ и $\langle A^2 | A^2 \rangle$ имеют вид

$$\langle A^L | A^L \rangle_{nm} = \int dx dQ^2 A_n^L A_m^L,$$

$$\langle A^2 | A^2 \rangle_{nm} = \int dx dQ^2 A_n^2 A_m^2.$$

В дальнейшем для краткости будем использовать обозначение

$$R(\alpha) = \alpha K + \langle A^L | A^L \rangle + \langle A^2 | A^2 \rangle.$$

Итак, мы приходим к следующим оценкам $F_L(x, Q^2)$, $F_2(x, Q^2)$:

$$\begin{vmatrix} \widehat{F}_L(x, Q^2) \\ \widehat{F}_2(x, Q^2) \end{vmatrix} = \sum_{n,m} \begin{vmatrix} A_n^L(x, Q^2) \\ A_n^2(x, Q^2) \end{vmatrix} R_n^{-1}(\alpha) Y_m. \quad (124)$$

Используя выражение (119) для \bar{Y}_m , можно записать \widehat{F}_L и \widehat{F}_2 в виде

$$\begin{vmatrix} \widehat{F}_L \\ \widehat{F}_2 \end{vmatrix} = \int dx' dQ^2 A_R \begin{vmatrix} F_L \\ F_2 \end{vmatrix} = \int dx' dQ^2 \begin{pmatrix} A_{RLL} & A_{RL2} \\ A_{R2L} & A_{R22} \end{pmatrix} \begin{vmatrix} F_L \\ F_2 \end{vmatrix}, \quad (125)$$

где

$$A_{RLL} = \sum_{n,m} A_n^L(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) A_m^L(x', Q^2),$$

$$A_{RL2} = \sum_{n,m} A_n^L(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) A_m^2(x', Q^2),$$

$$A_{R2L} = \sum_{n,m} A_n^2(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) A_m^L(x', Q^2),$$

$$A_{R22} = \sum_{n,m} A_n^2(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) A_m^2(x', Q^2).$$

Из (124) следует, что оператор ошибок вектор-функции $|\widehat{F}\rangle$ есть

$$\Sigma(x, Q^2 | x', Q^2) = \begin{pmatrix} \Sigma_{LL} & \Sigma_{L2} \\ \Sigma_{2L} & \Sigma_{22} \end{pmatrix}, \quad (126)$$

где

$$\Sigma_{LL} = \sum_{n,m,l,k} A_n^L(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) K_{ml} R_{lk}^{-1}(\alpha) A_k^L(x', Q^2),$$

$$\Sigma_{L2} = \Sigma_{2L}^T = \sum_{n,m,l,k} A_n^L(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) K_{ml} R_{lk}^{-1}(\alpha) A_k^2(x', Q^2).$$

$$\Sigma_{22} = \sum_{n,m,l,k} A_n^2(x, Q^2) R_{nm}^{-1}(\alpha) K_{ml} R_{lk}^{-1}(\alpha) A_k^2(x', Q^2).$$

В целом оценку $|\widehat{F}(x, Q^2)\rangle$ характеризуют

$$\text{Sp } A_R = \text{Sp } R(0)R^{-1}(\alpha),$$

$$\overline{\|F_\varepsilon\|^2} = \text{Sp } R(0)R^{-1}(\alpha)KR^{-1}(\alpha).$$

Рассмотрим теперь, что в этом случае является «измеримой» и «неизмеримой» компонентами вектор-функции $|F\rangle$. Из определения (119) для \bar{Y}_n следует, что для «неизмеримой» компоненты F^\perp выполняется

$$\int dx dQ^2 A_n^L F_L^\perp + \int dx dQ^2 A_n^2 F_2^\perp = 0. \quad (127)$$

«Измеримая» компонента $|F^A\rangle$ должна быть ортогональна компоненте $|F^\perp\rangle$ при выбранном скалярном произведении в пространстве вектор-функций $|F^A\rangle$. Если его выбрать в соответствии со стабилизатором в функционале (120), то должно выполняться

$$\int dx dQ^2 F_L^A F_L^\perp + \int dx dQ^2 F_2^A F_2^\perp = 0.$$

Соотношение (127) будет выполнено, если

$$\langle F^A(x, Q^2) | = \langle \sum_n a_n A_n^L, \sum_n a_n A_n^2 |. \quad (128)$$

Можно убедиться, что подстановка $|F^A(x, Q^2)\rangle$, согласно (128), в функционал МНК и его минимизация по a_n приводит к оценке

$$\begin{pmatrix} \widehat{F}_L^+(x, Q^2) \\ \widehat{F}_2^+(x, Q^2) \end{pmatrix} = \sum_{n,m} \begin{pmatrix} A_n^L(x, Q^2) \\ A_n^2(x, Q^2) \end{pmatrix} R_n^{-1}(0) Y_m, \quad (129)$$

которая совпадает с (124) при $\alpha = 0$.

Рассмотрим еще один метод регуляризации $R(0)$ — метод спектрального окна. Введем вектор-функции $|\Psi_l(x, Q^2)\rangle$ согласно выражению

$$|\Psi_L\rangle = \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \sum_n r_n^{(l)} \begin{pmatrix} A_n^L \\ A_n^2 \end{pmatrix}, \quad (130)$$

где $r_n^{(l)}$ — собственные векторы матрицы $R(0)$, а λ_l — собственные значения.

Можно убедиться, что функции $|\Psi_l\rangle$ образуют ортогональный базис в «измеримом» пространстве при введенном ранее скалярном произведении:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_k | \Psi_l \rangle &= \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} r_n^{(l)} r_m^{(k)} \left[\langle A^L | A^L \rangle + \langle A^2 | A^2 \rangle \right]_{nm} = \\ &= \sum_{n,m} \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} r_n^{(l)} R_{nm}(0) r_m^{(k)} = \sum_n \frac{1}{\sqrt{\lambda_l}} \frac{1}{\sqrt{\lambda_k}} r_n^{(l)} \lambda_k r_m^{(k)} = \delta_{lk}. \end{aligned} \quad (131)$$

Заменяя в (129) $R^{-1}(0)$ на

$$\tilde{R}_{nm}^{-1} = \sum_l \frac{f(\lambda_l)}{\lambda_l} r_n^{(l)} r_m^{(l)}; \quad (132)$$

где $f(\lambda) \leq 1$ и $f(\lambda)/\lambda \rightarrow \text{const}$ при $\lambda \rightarrow 0$, имеем

$$\left\langle \begin{array}{l} \hat{F}_L(x, Q^2) \\ \hat{F}_2(x, Q^2) \end{array} \right\rangle = \sum_{l,n} |\Psi_l(x, Q^2)\rangle \frac{f(\lambda_l)}{\sqrt{\lambda_l}} r_n^{(l)} Y_n. \quad (133)$$

Самый простой выбор $f(\lambda)$ — это ступенчатая функция: $f(\lambda) = 1$ при $\lambda > \lambda_{NR}$ и $f(\lambda) = 0$ при $\lambda < \lambda_{NR}$. Поступая как и раньше, можно получить,

что в этом случае

$$A_R(x, Q^2, x', Q^2) = \sum_l |\Psi_l(x, Q^2)\rangle f(\lambda_l) \langle \Psi_l(x', Q^2) |,$$

$$\Sigma(x, Q^2, x', Q^2) = \sum_{l,n,m,k} |\Psi_l(x, Q^2)\rangle \frac{f(\lambda_l)}{\sqrt{\lambda_l}} g_n^{(l)} K_{nm} g_m^{(k)} \frac{f(\lambda_k)}{\sqrt{\lambda_k}} \langle \Psi_k(x', Q^2) |,$$

$$\|F_\varepsilon\|^2 = \sum_{l,m,n} \frac{1}{\lambda_l} f^2(\lambda_l) g_n^{(l)} K_{nm} g_m^{(l)}.$$

Другой ортогональный базис, при использовании которого выражения A_R , $\text{Sp}A_R$, Σ , $\|F_\varepsilon\|^2$ упрощаются, дан в [35].

Модель (95). Предположим, что даны измерения $S_{NC}^+(x, Q^2 | s)$ и $S_{NC}^-(x, Q^2 | s)$ при одном значении s . Тогда оценки $F_2(x, Q^2)$, $F_3(x, Q^2)$ могут быть построены следующим образом. Из выражения (95) можно вычислить структурные функции F_2 , F_3 через сечения $S_{NC}^+(x, Q^2 | s)$ и $S_{NC}^-(x, Q^2 | s)$:

$$F_2(x, Q^2) = (S_{NC}^-(x, Q^2 | s) + S_{NC}^+(x, Q^2 | s)) / 2f_2(y, Q^2),$$

$$F_3(x, Q^2) = (S_{NC}^-(x, Q^2 | s) - S_{NC}^+(x, Q^2 | s)) / 2f_3(y, Q^2).$$

Этот факт подсказывает целесообразность перехода от измерений Y_n^\pm к статистикам

$$Y_n^2 = \frac{1}{2}(Y_n^- + Y_n^+), \quad Y_n^3 = \frac{1}{2}(Y_n^- - Y_n^+).$$

Их математические ожидания в рамках этой модели равны

$$\bar{Y}_n^2 = \int dx dQ^2 A_n^2(x, Q^2, s) F_2(x, Q^2), \quad \bar{Y}_n^3 = \int dx dQ^2 A_n^3(x, Q^2, s) F_3(x, Q^2),$$

где

$$A_n^2(x, Q^2, s) = A_n(x, Q^2, s) f_2(x, Q^2, s),$$

$$A_n^3(x, Q^2, s) = A_n(x, Q^2, s) f_3(x, Q^2, s).$$

Следовательно, «измеримые» компоненты $F_2(x, Q^2)$, $F_3(x, Q^2)$ являются линейными комбинациями $A_n^2(x, Q^2, s)$ и $A_n^3(x, Q^2, s)$ соответственно. Поэтому будем искать оценки F_2 , F_3 в виде

$$\begin{aligned} \hat{F}_2(x, Q^2) &= \sum_{n=1}^N \hat{a}_n A_n^2(x, Q^2 | s), \\ \hat{F}_3(x, Q^2) &= \sum_{n=1}^N \hat{b}_n A_n^3(x, Q^2 | s). \end{aligned} \tag{134}$$

Оценки \hat{a}_n , \hat{b}_n согласно МНК получаем минимизацией функционалов

$$\Phi_2 = (Y^2 - \bar{Y}^2)^T W^2 (Y^2 - \bar{Y}^2),$$

$$\Phi_3 = (Y^3 - \bar{Y}^3)^T W^3 (Y^3 - \bar{Y}^3),$$

подставляя в них выражения (22) и (23):

$$\hat{a}_n = \sum_m (G_2)_{nm}^{-1} Y_m^2, \quad (G_2)_{nm} = \langle A_n^2 | A_m^2 \rangle,$$

$$\hat{b}_n = \sum_m (G_3)_{nm}^{-1} Y_m^3, \quad (G_3)_{nm} = \langle A_n^3 | A_m^3 \rangle.$$

Можно убедиться, что оценки

$$F_2^+(x, Q^2) = \sum_{n,m} A_n^2(x, Q^2, s) (G_2)_{nm}^{-1} Y_m^2, \tag{135}$$

$$F_3^+(x, Q^2) = \sum_{n,m} A_n^3(x, Q^2, s) (G_3)_{nm}^{-1} Y_m^3$$

являются несмещенными оценками «измеримых» компонент F_2 , F_3 с остаточными аппаратными функциями

$$A_R^{+(2)}(x, Q^2 | x', Q^{2'}) = \sum_{n,m} A_n^2(x, Q^2, s) (G_2)_{nm}^{-1} A_m^2(x', Q^{2'}, s),$$

$$A_R^{+(3)}(x, Q^2 | x', Q^{2'}) = \sum_{n,m} A_n^3(x, Q^2, s) (G_3)_{nm}^{-1} A_m^3(x', Q^{2'}, s)$$

и корреляционными операторами

$$\Sigma^{+(2)}(x, Q^2 | x', Q^{2'}) = \sum_{n,m,l,k} A_n^2(x, Q^2, s)(G_2)_{nm}^{-1} K_{ml}^2 (G_2)_{lk}^{-1} A_k^2(x', Q^{2'}, s),$$

$$\Sigma^{+(3)}(x, Q^2 | x', Q^{2'}) = \sum_{n,m,l,k} A_n^3(x, Q^2, s)(G_3)_{nm}^{-1} K_{ml}^3 (G_3)_{lk}^{-1} A_k^3(x', Q^{2'}, s).$$

В целом $\hat{F}^+(x, Q^2)$ удобно характеризовать величинами

$$\text{Sp}A_R^+ = \int dx dQ^2 A_R^+(x, Q^2 | x, Q^2) = N, \tag{136}$$

$$\overline{\|F_\epsilon^+\|^2} = \text{Sp}KG^{-1}, \quad F_\epsilon^+(x, Q^2) = \sum_{n,m} A_n(x, Q^2)G^{-1}\epsilon_m.$$

Модель (94). Предположим, что даны измерения $S_{NC}^\pm(x, Q^2 | s)$ при $s = s_1$ и $S_{NC}^-(x, Q^2 | s)$ при $s = s_2 < s_1 : Y^\pm(s_i)$. Математические ожидания последних можно записать в виде

$$\begin{aligned} \bar{Y}_n^\pm(s_i) = \int dx dQ^2 [A_n^L(x, Q^2, s)F_L(x, Q^2) + \\ + A_n^2(x, Q^2, s_i)F_2(x, Q^2) \mp A_n^3(x, Q^2, s_i)F_3(x, Q^2)], \end{aligned} \tag{137}$$

где

$$\begin{aligned} A_{in}^L &\equiv A_n^L(x, Q^2, s_i) = A_n(x, Q^2, s_i)f_L(x, Q^2, s_i), \\ A_{in}^2 &\equiv A_n^2(x, Q^2, s_i) = A_n(x, Q^2, s_i)f_2(x, Q^2, s_i), \\ A_{in}^3 &\equiv A_n^3(x, Q^2, s_i) = A_n(x, Q^2, s_i)f_3(x, Q^2, s_i). \end{aligned}$$

Упорядочим все измерения Y_n следующим образом: $Y_n = Y_n^+(s_1)$ при $n = 1, \dots, N$; $Y_n = Y_n^-(s_1)$ при $n = N+1, \dots, 2N$; $Y_n = Y_n^-(s_2)$ при $n = 2N+1, \dots, 3N$. Введем соответственно вектор-функции $|A_n\rangle$, равные

$$\begin{aligned} |A_n\rangle = \begin{cases} \left\langle \begin{matrix} A_n^L \\ A_n^2 \\ -A_n^3 \end{matrix} \right\rangle & n = 1, \dots, N; \\ \left\langle \begin{matrix} A_n^L \\ A_n^2 \\ A_n^3 \end{matrix} \right\rangle & n = N+1, \dots, 2N; \\ \left\langle \begin{matrix} A_n^L \\ A_n^2 \\ A_n^3 \end{matrix} \right\rangle & n = 2N+1, \dots, 3N. \end{cases} \end{aligned} \tag{138}$$

Используя выражения (137) и (138), видим, что среднее любого измерения Y_n может быть записано в виде скалярного произведения

$$\bar{Y}_n = \langle A_n | F \rangle, \quad n = 1, \dots, 3N, \quad (139)$$

где $\langle F | = (F_L, F_2, F_3)$. Отсюда следует, что «неизмеримая» компонента $|F^\perp\rangle$ удовлетворяет условиям

$$\langle A_n | F^\perp \rangle = 0, \quad n = 1, \dots, 3N.$$

Следовательно, если $|F^A\rangle$ искать в виде

$$|F^A\rangle = \sum_n a_n |A_n\rangle, \quad n = 1, \dots, 3N, \quad (140)$$

то условие ортогональности $\langle F^A | F^\perp \rangle$ «измеримой» и «неизмеримой» компонент будет выполнено.

Ищем МНК-оценку $|F\rangle$ подстановкой выражения (140) в функционал МНК:

$$\Phi = \sum_m (Y_m - \bar{Y}_m) W_m (Y_m - \bar{Y}_m)$$

и минимизацией по a_n .

В результате получаем следующее выражение для $|\hat{F}^+\rangle$:

$$|\hat{F}^+\rangle = \sum_{n,m} |A_m\rangle G_{nm}^{-1} Y_m, \quad (141)$$

где G — матрица Грама вектор-функций $|A_n\rangle$: $G_{nm} = \langle A_n | A_m \rangle$.

Используя (141), имеем

$$|\hat{F}^+\rangle = \sum_{n,m} |A_m\rangle G_{nm}^{-1} \langle A_m | F \rangle.$$

Следовательно, A_R в этом случае есть матричный интегральный оператор

$$A_{Rij}^+(x, Q^2, x', Q'^2) = \sum_{n,m} |A_n^i(x, Q^2)\rangle G_{nm}^{-1} \langle A^j(x', Q'^2) |. \quad (142)$$

Оператор ошибок шумовой составляющей

$$|\hat{F}_\epsilon^+\rangle = \sum_{n,m} |A_n\rangle G_{nm}^{-1} \epsilon_m \quad (143)$$

равен

$$\Sigma^+(x, Q^2, x', Q'^2) = \sum |A_n\rangle G_{nm}^{-1} K_{ml} G_{lk}^{-1} \langle A_k|. \quad (144)$$

При использовании того или иного метода регуляризации получают выражения (141) — (144) с заменой G на регуляризованную матрицу Грама \tilde{G} , а систематическую и статистическую ошибки $|\hat{F}\rangle$ характеризуют величины

$$\begin{aligned} \text{Sp } A_R &= \text{Sp } \tilde{G} \tilde{G}^{-1}, \\ \|\hat{F}_\varepsilon\|^2 &= \text{Sp } \tilde{G} \tilde{G}^{-1} K \tilde{G}^{-1}. \end{aligned}$$

Рассеяние (анти)нейтрино по каналу заряженного тока. Оценивание структурных функций нуклона в этом случае можно сделать методами, изложенными для рассеяния мюона и электрона. Однако прямо использовать приведенные выражения для оценок и их характеристик нельзя, так как в отличие от монохроматических пучков мюонов (электронов) пучки нейтрино (антинейтрино) имеют довольно широкие распределения по их энергии. Это существенным образом меняет упомянутые выражения. За недостатком места мы отсылаем читателя к работе [37]. В другой работе [37] можно найти подход, обобщающий использование B -сплайнов [11]. Отметим, что использование в работе только двумерных сплайнов, хотя задача зависит от трех переменных E_ν, x, Q^2 , приводит к неоправданным приближениям.

Использование оценок структурных функций для определения Λ в КХД. Очевидно, что рассуждения, приведенные в конце первого раздела относительно параметрического анализа, остаются справедливыми и для этой задачи. Использование исходных данных эксперимента Y_n для определения Λ КХД из несинглетного фита для данных с 15-футовой пузырьковой камеры можно найти в работе [38].

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Авторы выражают признательность соавторам по своим оригинальным работам, использованным в обзоре, — В.В.Аммосову, Е.А.Белогорлову, Т.Б.Косткиной, А.А.Спиридонову, З.У.Усубову; С.Н.Соколову, Л.А.Тяпкину, Ю.П.Пытьеву за плодотворные обсуждения; Е.В.Зайченко, Р.А.Макеевой за громадную помощь в подготовке текста и рисунков.

Результаты численных экспериментов и иллюстрации (кроме рис.15), использованные в обзоре, получены с помощью пакета программ SLIP1 (Solution of Linear Inverse Problem in 1-dimension) [39].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Жигунов В.П. — Препринт ИФВЭ 81-5, Серпухов, 1981; Zhigunov V.P. — Nucl.Instr. and Meth., 1983, vol.216, p.189.
2. Anykeyev V.B., Spiridonov A.A., Zhigunov V.P. — Nucl.Instr. and Meth., 1991, vol.A303, p.350.
3. Belogorlov E.A., Zhigunov V.P. — Nucl.Instr. and Meth., 1984, vol.A235, p.146.
4. Белогорлов Е.А., Жигунов В.П. — В сб.: Третья Всесоюзная конференция по защите от ионизирующих излучений ядерно-технических установок. Тбилиси, 1981. Тезисы докладов, Тбилиси, 1981, с.6.
5. Забрейко П.П. и др. — Интегральные уравнения, М.: Наука, 1968.
6. Bertero M. — INFN/TC-88/2,19 Gennaio, 1988.
7. Пытьев Ю.П. — Мат. методы интерпретации эксперимента. М.: Высшая школа, 1989.
8. Anykeyev V.B., Spiridonov A.A., Zhigunov V.P. — Preprint IHEP 89-15, Serpukhov, 1989.
9. Marchuk G.I. — Meth. of Num. Math. Springer, Berlin, 1975. Гилязов С.Ф. — Методы решения линейных некорректных задач. М.: МГУ, 1979.
10. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. — Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1979.
11. Blobel V. — Proc. of the 1984 CERN School of Computing, Aiguablava, Spain, CERN 85-09, 1985, p.88.
12. Burrus W.R., Verbinsky V.V. — Nucl.Instr. and Meth., 1969, vol.67, p. 181.
13. Backus G., Gilbert F. — Philos.Trans.Roy.Soc., 1970, vol.766, p.123.
14. Морозов В.А. — Регулярные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1987.
15. Anykeyev V.B., Spiridonov A.A., Zhigunov V.P. — NIM, 1992, vol.A322, p.280.
16. Aarnio P. et al. — CERN-EP/90-19, 1990.
17. Gold R. — ANL-6984, 1964.
18. Benvenuti A.C. et al. — CERN-EP/89-07, 1989.
19. Kondor A. — Nucl.Instr. and Meth., 1983, vol.A216, p.183.
20. Müllthel H.N., Schorr B. — Nucl.Instr. and Meth., 1984, vol.A257, p.371.
21. Chombless D.A., Broadway J.A. — Nucl.Instr. and Meth., 1981, vol.179, p.563.
22. Lawson C.L., Hanson R.J. — Solving Least Squares Problems, Prentice Hall, New York, 1974.
23. Behrend H.J. et al. — Z.Phys.C — Particles and Fields, 1989, vol.44, p.63.
24. Provencher S.W. — Compt. Phys. Comm., 1982, vol.27, p.213.
25. Rust B.W., Burrus W.R. — Mathematical Programming and the Numerical Solution of Linear Equations, New York, 1972.
26. Соколов С.Н., Силин И.Н. — Препринт ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961; Silin I.N. — FUMILI CERN Program Library, D510, 1971.
27. Сороко Л.М. — ЭЧАЯ, 1981, т.12, с.754.
28. Zhigunov V.P. et al. — Nucl.Instr. and Meth., 1988, vol.A273, p.362.
29. Fuglesang C. — Nucl.Instr. and Meth., 1989, vol.A278, p.765.
30. Sivia D.S. et al. — Nucl.Instr. and Meth., 1990, vol.A290, p.492.
31. Breakstone A. et al. — Z.Phys.C — Particles and Fields, 1989, vol.40, p.207.
32. Кульбак С. — Теория информации и статистика. М.: Наука, 1967.
33. Боровиков А.А. — Математическая статистика. М.: Наука, 1984. Kullback S., Leibler R.A. — Ann. Statist., 1951, vol.22, p.79.
34. Хинчин А.Я. — Математические основания статистической механики. М.: ГИТТЛ, 1943.
35. Anykeyev V.B., Zhigunov V.P. — Preprint IHEP, 91-74, Protvino, 1991.
36. Anykeyev V.B., Zhigunov V.P. — Preprint IHEP, 91-79, Protvino, 1991.
37. Bergsma F. et al. — Phys.Lett., 1983, vol.123B, p.269.
38. Ammosov V.V., Usubov Z.U., Zhigunov V.P. — Nucl.Instr. and Meth., 1990, vol.A295, p.224.
39. Anykeyev V.B., Spiridonov A.A., Zhigunov V.P. — Proc. of CHEP-92, 1992, Annecy, France.
40. Schmelling M. — CERN CN/93/3, 1993.