

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ АГЕНТСТВО
ПО ТЕХНИЧЕСКОМУ РЕГУЛИРОВАНИЮ И МЕТРОЛОГИИ**

ГОСУДАРСТВЕННАЯ СЛУЖБА СТАНДАРТНЫХ СПРАВОЧНЫХ ДАННЫХ

**ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ
ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
МЕТРОЛОГИЧЕСКОЙ СЛУЖБЫ
(ФГБУ «ВНИИМС»)**

РЕКОМЕНДАЦИЯ

**Государственная система обеспечения единства измерений
ОЦЕНКИ НЕОПРЕДЕЛЕННОСТИ/ПОГРЕШНОСТИ ПАРАМЕТРОВ
МОДЕЛЬНОЙ ЗАВИСИМОСТИ, ОЦЕНЕННЫХ НА ОСНОВЕ
СОГЛАСОВАННЫХ МЕЖДУ СОБОЙ ИЗМЕРЕНИЙ**

МИ 3663-2022

Москва 2021

ПРЕДИСЛОВИЕ

РАЗРАБОТАНА	Главный научный метрологический центр «Стандартные справочные данные о физических константах и свойствах веществ и материалов» (ГНМЦ «ССД»)
УТВЕРЖДЕНА	Всероссийский научно-исследовательский институт метрологической службы (ФГБУ «ВНИИМС») «9» декабря 2021 г.
ЗАРЕГИСТРИРОВАНА	ФГБУ «ВНИИМС» «14» января 2022 г.
РАЗРАБОТАНА	впервые

СОДЕРЖАНИЕ

1	Область применения	4
2	Нормативные ссылки	4
3	Термины и определения	5
4	Общие положения	6
5	Постановка задачи. Статистическая модель	6
6	Определение согласованности экспериментальных данных между собой в одномерной задаче теории оценивания	7
7	Методы оценки	8
8	Верификация результатов оценки	9
9	Примеры	11
Приложение А	Оценка вектора параметров модельной функции и ковариационной матрицы погрешностей параметров по результатам измерений методом наименьших квадратов	17
Приложение Б	Оценка вектора параметров модельной функции и ковариационной матрицы погрешностей параметров по результатам измерений методом наименьших квадратов в случае нелинейной модельной функции	19
	Библиография	22

ГОСУДАРСТВЕННАЯ СИСТЕМА ОБЕСПЕЧЕНИЯ ЕДИНСТВА ИЗМЕРЕНИЙ Оценки неопределенности/погрешности параметров модельной зависимости, оцененных на основе согласованных между собой измерений;	МИ 3663-2022
--	--------------

Дата введения 2022-02-01

Настоящая рекомендация разработана на основе и в дополнение ГОСТ Р 8.614, ГОСТ Р 8.985 по заказу Госкорпорации «Росатом».

1 Область применения

1.1 Настоящая рекомендация предназначена для использования в задачах оценки параметров модельной зависимости и расчета неопределенностей оцененных параметров, на основе согласованных между собой результатов измерений.

1.2 Настоящая рекомендация предназначена для применения при разработке стандартных и рекомендуемых справочных данных в области использования атомной энергии.

2 Нормативные ссылки

В настоящей рекомендации использованы ссылки на следующие нормативные документы:

ГОСТ 34100.3-2017/ISO/IEC Guide 98-3:2008 Неопределенность измерения. Часть 3. Руководство по выражению неопределенности измерения;

ГОСТ 34100.3.2-2017/ISO/IEC Guide 98-3/Suppl 2:2011 Неопределенность измерения. Часть 3. Руководство по выражению неопределенности измерения. Дополнение 2. Обобщение на случай произвольного числа выходных величин;

ГОСТ Р 8.614-2018 Государственная система обеспечения единства измерений. Государственная служба стандартных справочных данных. Основные положения;

ГОСТ Р 8.985-2020 Государственная система обеспечения единства измерений. Служба стандартных справочных данных в области использования атомной энергии. Общие положения;

РМГ 29-2013 Государственная система обеспечения единства измерений. Метрология. Основные термины и определения.

СТО 95 12067-2020 Приборы и аппаратура для измерения или обнаружения ионизирующих излучений. Обработка результатов измерений.

3 Термины и определения

3.1 В настоящей рекомендации использованы термины и определения в соответствии с ГОСТ 34100.3, ГОСТ 34100.3.2, ГОСТ Р 8.614, ГОСТ Р 8.985, РМГ 29-2013, СТО 95 12067-2020:

3.1.1 **верификация справочных данных:** Проверка полученных справочных данных, включая показатели точности, на соответствие (непротиворечие) физическим и математическим законам и опытным данным.

3.1.2 **достоверность справочных данных:** Качественное понятие, отражающее полноту сведений, касающихся исследованного объекта; полноту и правильность учета всех факторов, влияющих на показатели точности справочных данных (методы, средства и условия измерений; методики обработки данных; процедуры оценки показателей точности).

3.1.3 **ковариационная матрица:** Квадратная симметричная неотрицательно определенная матрица, на диагонали которой располагаются дисперсии случайной векторной величины или совокупности скалярных величин, а недиагональные элементы — ковариации между компонентами.

3.1.4 **модельная функция:** Математическая функция, описывающая модель измерений.

3.1.5 **неопределенность результата измерения:** Неотрицательный параметр, характеризующий рассеяние значений величины, приписываемых измеряемой величине на основании измерительной информации, выраженный в виде среднего квадратического отклонения.

3.1.6 **несмещенная погрешность результата измерения:** Погрешность, математическое ожидание которой равно нулю.

3.1.7 **оценка справочных данных:** Процедура определения значений справочных данных и их показателей точности на основании совокупности результатов измерений и/или модельных расчетов.

3.1.8 **погрешность результата измерения:** Разность между результатом измерения и гипотетическим истинным значением этой величины.

3.1.9 **показатели точности результата измерения:** Значения неопределенности или других характеристик погрешности результата измерения. К показателям точности результата измерения относят среднее квадратическое отклонение (точечная характеристика), доверительные границы погрешности (интервальная характеристика) или суммарную стандартную (точечная характеристика) и расширенную (интервальная характеристика) неопределенность.

4 Общие положения

4.1 Исходная информация включает результаты измерений и положительно определенную ковариационную матрицу погрешностей результатов измерений.

4.2 Погрешности результатов измерений предполагаются несмещенными.

4.3 Вид модельной функции не конкретизируется, т. е. приведенные в рекомендации формулы справедливы для всех модельных функций, имеющих конечную ненулевую первую производную.

4.4 В настоящей рекомендации рассматривается многомерная задача теории оценивания.

4.5 Значения независимой переменной, для которых выполнены измерения, считаются известными точно, т. е. погрешностью этих значений можно пренебречь в силу близости к нулю.

4.6 Вид распределения погрешностей измерений не определен.

5 Постановка задачи. Статистическая модель

5.1 Результаты измерений анализируют в рамках следующей статистической модели. Каждое из измерений $y_{i_k}^k$ есть сумма значений модельной функции $f(x_{i_k}^k, \vec{\theta})$ и декларируемых экспериментаторами погрешностей измерений $\varepsilon_{i_k}^k$

$$y_{i_k}^k = f(x_{i_k}^k, \vec{\theta}) + \varepsilon_{i_k}^k, \quad i_k = 1, \dots, n_k, \quad k = 1, \dots, M \quad (1)$$

с математическими ожиданиями

$$E\varepsilon_{i_k}^k = 0 \quad (2)$$

и ковариациями

$$\text{cov}(\varepsilon_{i_k}^k, \varepsilon_{j_l}^l) = V_{ij}^k \delta_{kl} \quad (3)$$

для любого набора индексов i, j, k, l . Верхние индексы в соотношениях (1)–(3) определяют номер эксперимента, нижние индексы фиксируют нумерацию измерений в пределах эксперимента. Распределение погрешностей измерений $\varepsilon_{i_k}^k$ не определено. Значения $x_{i_k}^k$ считаются известными точно (погрешность пренебрежимо мала). Ковариационная матрица погрешностей результатов измерений V положительно определена. В формуле (1) n_k – число измерений в эксперименте k ; M – число экспериментов; $\sum_k n_k = N$ – число измерений в M экспериментах; $\vec{\theta}$ – вектор неизвестных параметров, подлежащий оценке.

6 Определение согласованности экспериментальных данных между собой в одномерной задаче теории оценивания

6.1 Результаты независимых несмещенных измерений y_t , $t = 1, \dots, N$ некоторого неизвестного параметра θ с неопределенностями σ_t (ковариационная матрица V погрешностей измерений – диагональная) согласованы между собой, если для произвольной величины a справедливо следующее соотношение

$$\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y_t - a)^2 - \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \sigma_t^2 < 0, \quad (4)$$

$$\text{где } a = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N y_t.$$

Результаты независимых измерений параметра θ согласованы между собой, если их разброс не превышает среднюю декларируемую экспериментаторами дисперсию результатов измерений.

6.2 В случае когда ковариационная матрица V погрешностей измерений недиагональная, следует использовать ортогональное преобразование

$$\bar{z} = Q \bar{y}, \quad (5)$$

где Q – ортогональная матрица собственных векторов матрицы V . При этом вектору \bar{z} будет соответствовать диагональная ковариационная матрица U

$$U = Q^T V Q. \quad (6)$$

В формуле (6) Q^T – транспонированная матрица для матрицы Q . В результате ортогонального преобразования (5) неравенство (4) преобразуется следующим образом

$$\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (z_t - a)^2 - \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N u_t^2 < 0, \quad (7)$$

$$\text{где } u_t \equiv U_{tt}, \quad a = \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N z_t.$$

6.3 Если неравенство (4) не выполняется, надо использовать алгоритмы, предусматривающие корректировку исходных данных [1].

6.4 Проверка согласованности экспериментальных данных при решении многомерной задачи оценивания (число параметров модельной функции больше одного) сводится к проверке неравенств, приведенных в пп. 6.1 и 6.2.

7 Методы оценки

7.1 В соответствии с теорией оценивания [2] для решения задачи оценки неизвестных параметров модельной функции по результатам измерений в самой общей постановке в настоящей рекомендации используют метод наименьших квадратов.

7.2 Оценка методом наименьших квадратов для задачи (1) – (3) есть значение вектора параметров, доставляющее минимум функционала, представляющего собой квадратичную форму

$$S(\vec{\theta}) = (\vec{y} - f(x, \vec{\theta}))^T V^{-1} (\vec{y} - f(x, \vec{\theta})). \quad (8)$$

В соответствии с приложением А минимум функционала (8) для значения вектора параметров имеет вид:

$$\hat{\vec{\theta}} = (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \vec{y}, \quad (9)$$

где X – матрица коэффициентов чувствительности модельной функции относительно параметров

$$X_{ij} = \frac{\partial f(x_i, \vec{\theta})}{\partial \theta_j}. \quad (10)$$

7.3 Ковариационная матрица погрешностей оцененных параметров $W_{ij} = cov(\delta\theta_i, \delta\theta_j)$ определяют формулой (приложение А):

$$W = (X^T V^{-1} X)^{-1}. \quad (11)$$

На диагонали матрицы W расположены квадраты неопределенностей оцененных параметров.

Ковариационная матрица $R_{ij} = cov(\delta f(x_i, \vec{\theta}), \delta f(x_j, \vec{\theta}))$ погрешностей оцененных значений модельной функции имеет вид

$$R = X W X^T, \quad (12)$$

7.4 Модельная функция $f(x, \vec{\theta})$ линейна относительно параметров, если для произвольных действительных чисел α и β справедливо равенство

$$f(x, \alpha \vec{\theta}_1 + \beta \vec{\theta}_2) = \alpha f(x, \vec{\theta}_1) + \beta f(x, \vec{\theta}_2)$$

для любого значения x и векторов $\vec{\theta}_1, \vec{\theta}_2$.

Решение задачи (1) – (3) для нелинейной по параметрам модельной функции $f(x, \vec{\theta})$ сводят к линейризации задачи и последовательному решению задач типа (1) – (3) для линейной модельной функции. Значения вектора параметров и ковариационной матрицы погрешностей вектора параметров вычисляют следующим образом (приложение Б)

$$\vec{\theta}_{k+1} = \vec{\theta}_k + \left(X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) \right)^{-1} X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} (\vec{y} - f(\vec{\theta}_k)), \quad (13)$$

$$W(\vec{\theta}_k) = \left(X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) \right)^{-1}. \quad (14)$$

Итерационная процедура прекращается, когда относительное изменение значения минимизируемого функционала на двух последовательных итерациях не превышает десятой доли процента

$$\left| \frac{S(\vec{\theta}_{k+1}) - S(\vec{\theta}_k)}{S(\vec{\theta}_k)} \right| < 0,001.$$

8 Верификация результатов оценки

8.1 Оценка задачи (1) – (3) с линейной модельной функцией $f(x, \vec{\theta})$ методом наименьших квадратов представлена формулами (9) и (11). В этом случае справедливы следующие соотношения [3]

$$\sum_i c_i \hat{y}_i = \sum_i c_i y_i, \quad (15)$$

$$\sum_i \sum_j c_i R_{ij} c_j = \sum_i \sum_j c_i V_{ij} c_j, \quad (16)$$

где веса c_i определены следующим образом:

$$c_i = \frac{\sum_j (V^{-1})_{ji}}{\sum_k \sum_j (V^{-1})_{jk}}. \quad (17)$$

Соотношение (15) устанавливает взаимосвязь между измеренными и оцененными значениями модельной функции, в то время как соотношение (16) связывает ковариационные матрицы погрешностей результатов измерений и оцененных значений.

Оцененные значения \hat{y}_i и ковариации R_{ij} есть результат перераспределения экспериментальных данных y_i и ковариаций V_{ij} . Характер перераспределения устанавливается весовыми коэффициентами c_i .

Естественно определить соотношения (15) и (16) как статистические инварианты векторного преобразования G , представленного в виде

$$\hat{y} = G(\vec{y}) = f(x, \hat{\theta}(\vec{y})) = f(x, (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \vec{y}).$$

8.2 Смысл статистических инвариантов.

Соотношение (15) есть усредненное (взвешенное специальным образом) значение модельной функции в заданном интервале изменения независимой переменной. В свою очередь, соотношение (16) представляет собой дисперсию усредненного значения модельной функции.

8.3 Из соотношений (15) и (16) следуют важные неравенства, ограничивающие возможные значения элементов ковариационной матрицы погрешностей результатов измерений

$$\frac{\sum_j (V^{-1})_{ji}}{\sum_k \sum_j (V^{-1})_{jk}} \geq 0, \quad (18)$$

$$\sum_k \sum_j (V^{-1})_{jk} > 0. \quad (19)$$

Ковариации погрешностей величины неизмеримы и подлежат расчету. Неравенства (18) и (19) используют для верификации рассчитанных ковариаций погрешностей результатов измерений.

8.4 В задачах оценки справочных данных используют преобразования случайных векторов (например, (9)).

Положительность дисперсий производных от случайных векторов величин определяет положительную определенность ковариационных матриц.

Произвольное преобразование случайного вектора $\vec{\theta}$ (размерности L) с ковариационной матрицей W может быть представлено в виде

$$\vec{\mu} = \vec{F}(\vec{\theta}) = (F_1(\vec{\theta}), \dots, F_M(\vec{\theta}))^T, \quad (20)$$

где $F_1(\vec{\theta}), \dots, F_M(\vec{\theta})$ – различные функции случайного вектора $\vec{\theta}$.

В первом порядке теории возмущений ковариационная матрица U вектора $\vec{\mu}$ может быть выражена через ковариационную матрицу W :

$$U = F^T W F,$$

где $F_{ki} = \frac{\partial F_i(\vec{\theta})}{\partial \theta_k}$ – матрица коэффициентов чувствительности.

Положительная определенность матрицы W влечет положительную определенность матрицы U в зависимости от соотношения между рангом матрицы коэффициентов чувствительности F и размерностью вектора $\vec{\mu}$:

$$W > 0 \Rightarrow \begin{cases} U \geq 0, & \text{при } (L \geq M \text{ и } \text{Rang}(F) < M) \text{ или при } (L < M), \\ U < 0 & \text{при } (L \geq M \text{ и } \text{Rang}(F) = M). \end{cases}$$

где $W > 0$ означает положительную определенность матрицы W .

9 Примеры

9.1 Оценка периода полураспада ^{111}Bi .

Экспериментальные данные по периоду полураспада ^{111}Bi приведены в таблице 1.

Таблица 1 – Результаты измерений периода полураспада ^{111}Bi

Номер эксперимента, t	Ссылка на источник	y_t , результат измерения периода распада, мин.	σ_t , неопределенность результата измерения периода распада, мин.
1	[4]	2,16	0,08
2	[5]	2,15	0,02
3	[6]	2,13	0,03
4	[7]	2,22	0,06

В соответствии с разделами 5 и 6 результаты измерений, приведенные в таблице 1, являются взаимно согласованными, поскольку справедливо неравенство (4)

$$\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (y_i - a)^2 - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i^2 = 0,00136 - 0,00283 < 0.$$

Рассматриваемая задача является однопараметрической; модельная функция $f(x, \vec{\theta}) = \theta$. Коэффициенты чувствительности $X_{ij} = 1, i = 1, j = 1 \dots 4$. Оценка периода полураспада и ее неопределенность определяют формулами (9) и (11)

$$\hat{\theta} = (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \vec{y} = 2,150;$$

$$W = (X^T V^{-1} X)^{-1} = 2,56 \cdot 10^{-4}.$$

В целях верификации результатов оценки проверим равенства (15) и (16): $\sum_i c_i \hat{y}_i = 2,15$, $\sum_i c_i y_i = 2,15$, $\sum_i \sum_j c_i R_{ij} c_j = 0,000247$, $\sum_i \sum_j c_i V_{ij} c_j = 0,000247$, т. е. равенства выполняются.

Таким образом, оценка периода полураспада ^{111}Bi по результатам измерений, приведенным в таблице 1, имеет вид

$$\delta\theta = \sqrt{W} = 0,016;$$

$$\hat{\theta} = 2,150 \pm 0,016.$$

9.2 Оценка периода полураспада ^{212}Po .

Результаты измерений периода полураспада ^{212}Po собраны в таблице 2.

Таблица 2 - Результаты измерений периода полураспада ^{212}Po

Номер эксперимента, t	Ссылка	y_t , результат измерения периода распада, наносекунды	σ_t , неопределенность результата измерения периода распада, наносекунды
1	[8]	304	4
2	[9]	305	25
3	[10]	305	5
4	[11]	304	8
5	[12]	300	8
6	[13]	296	2

Номер эксперимента, t	Ссылка	y_t , результат измерения периода распада, наносекунды	σ_t , неопределенность результата измерения периода распада, наносекунды
7	[14]	309	11
8	[15]	260	30
9	[16]	294,7	1,0
10	[17]	293,9	1,2
11	[18]	294,8	1,9

В соответствии с критерием, приведенном в разделе 5, результаты измерений из таблицы 2 взаимно согласованы, т.к. выполняется неравенство (4)

$$\frac{1}{N} \sum_{t=1}^N (y_t - a)^2 - \frac{1}{N} \sum_{t=1}^N \sigma_t^2 = 163,9 - 165,9 < 0.$$

Неравенство (4) выполняется из-за включения в анализ результатов измерений из работы [15]. Возможное исключение этих экспериментальных данных из анализа потребует использования других алгоритмов расчета периода полураспада.

Рассматриваемая задача является однопараметрической; модельная функция $f(x, \vec{\theta}) = \theta$. Коэффициенты чувствительности $X_{ij} = 1, i = 1, j = 1 \dots 11$. Оценка периода полураспада и ее неопределенность согласно формулам (9) и (11) равны

$$\hat{\theta} = (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \vec{y} = 295,2;$$

$$W = (X^T V^{-1} X)^{-1} = 0,422.$$

В целях верификации результатов оценки проверим равенства (15) и (16): $\sum_i c_i \hat{y}_i = 295,2, \sum_i c_i y_i = 295,2, \sum_i \sum_j c_i R_{ij} c_j = 0,422, \sum_i \sum_j c_i V_{ij} c_j = 0,422$, т. е. равенства выполняются.

Таким образом, оценка периода полураспада ^{212}Po по результатам измерений, приведенных в таблице 2, имеет вид

$$\delta\theta = \sqrt{W} \cong 0,649 \approx 0,6;$$

$$\hat{\theta} = 295,2 \pm 0,6.$$

9.3 Оценка интегрального сечения реакции ${}^9\text{Be}(d, \alpha_0)$ по результатам измерений дифференциальных сечений.

В библиотеке экспериментальных данных EXFOR [18] приводятся экспериментальные данные по дифференциальным сечениям (сечения, измеренные для фиксированных углов по отношению к пучку налетающих частиц). Для расчета интегрального сечения необходимо аппроксимировать результаты измерений дифференциальных сечений суперпозицией полиномов Лежандра. Свободный член в этом разложении есть интегральное сечение с точностью до константы. В связи с этим возникает необходимость решения задачи (1)–(3) с линейной модельной функцией:

$$f(\mu, \vec{\theta}) \equiv \sum_{k=0}^N \theta_N^k P_k(\mu), \quad (21)$$

где μ - косинус угла вылета вторичной частицы или в лабораторной системе координат, или в системе центра масс, $P_k(\mu)$ - полиномы Лежандра.

В настоящей рекомендации рассматривают такую задачу на примере аппроксимации результатов измерений дифференциальных сечений Generalov 2001 (ENTRY F0530, <https://www-nds.iaea.org/exfor/>), выполненных в ВНИИЭФ [18]. В таблице 3 приведены измеренные дифференциальные сечения реакции ${}^9\text{Be}(d, \alpha_0)$ для энергии дейтронов 3 МэВ. Решение задачи (1)–(3) для модельной функции (21) дается соотношениями (9) и (11). Минимальное значение функционала (8), нормированного на число степеней свободы, равно 1,075. Данное значение обеспечивает 5-параметрическая функция вида (21). Оцененные значения параметров и ковариационная матрица погрешностей параметров даны в таблицах 4 и 5. При этом оцененное значение интегрального сечения реакции ${}^9\text{Be}(d, \alpha_0)$ для энергии дейтронов 3 МэВ равно $37,30 \pm 0,75$. Оцененное дифференциальное сечение представлено на рисунке 1 в сравнении с экспериментальными данными.

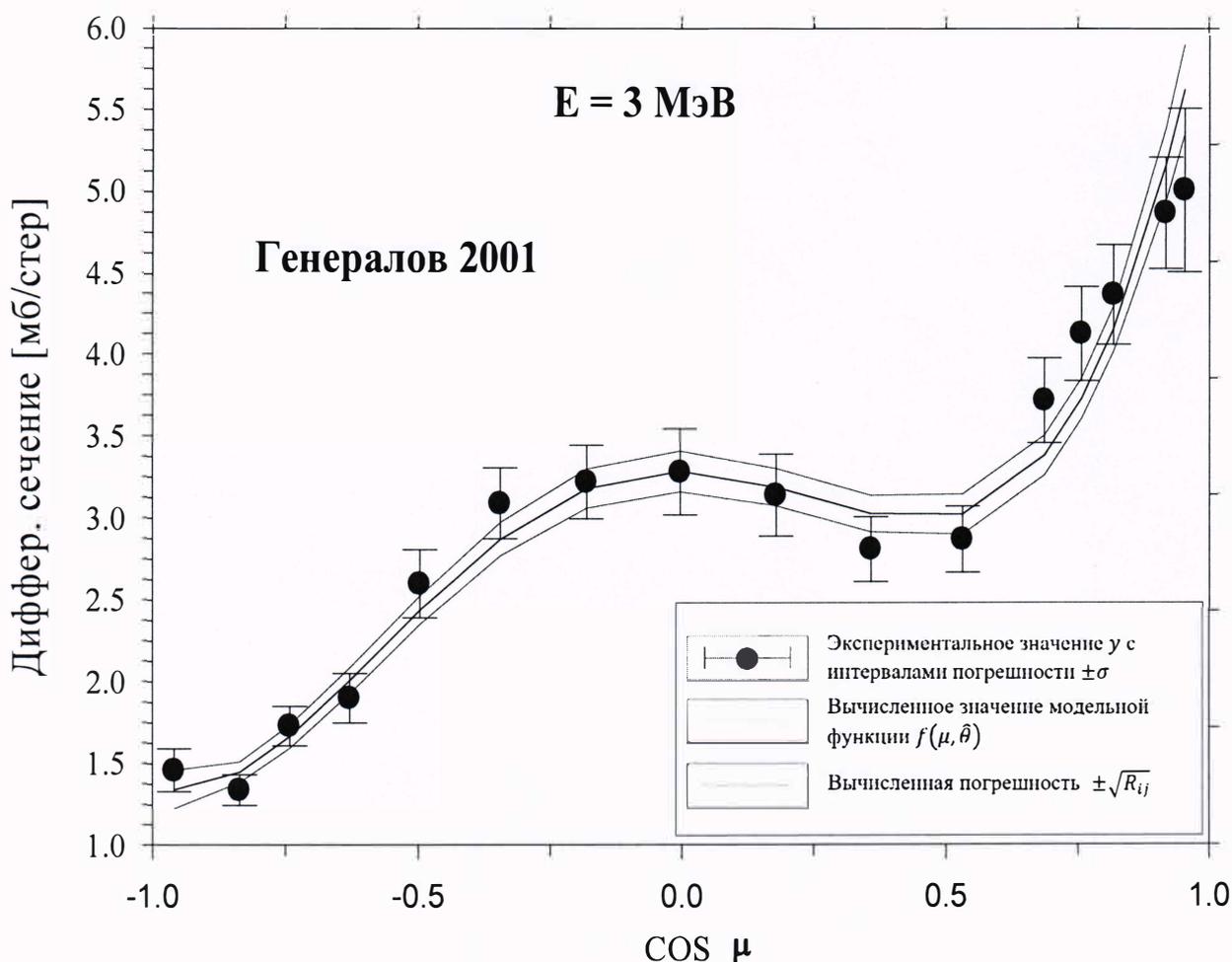


Рисунок 1 – Оцененное дифференциальное сечение реакции ${}^9\text{Be}(d, \alpha_0)$ в сравнении с экспериментальными данными Generalov 2001 при энергии дейтронов 3 МэВ

Таблица 3 – Результаты измерений дифференциальных сечений реакции ${}^9\text{Be}(d, \alpha_0)$ для энергии дейтронов 3 МэВ в системе центра масс [19]

Угол, ' град	Сечение, ' мб/стер	Неопределенность, ' %	Угол, ' град	Сечение, ' мб/стер	Неопределенность, ' %
17,7	5,01	10	90,2	3,28	8
23,5	4,87	7	100,4	3,22	7
35,2	4,37	7	110,2	3,09	7
40,9	4,13	7	119,8	2,60	8
46,7	3,72	7	129,0	1,90	8
57,9	2,87	7	137,9	1,73	7
69,0	2,81	7	146,7	1,34	7
79,7	3,14	8	163,5	1,46	9

Таблица 4 – Оцененные значения коэффициентов θ_4^k , $k = 0, \dots, 4$ суперпозиции полиномов Лежандра в представлении (21) для результатов измерений дифференциальных сечений реакции ${}^9\text{Be}(d,\alpha 0)$ для энергии дейтронов 3 МэВ в системе центра масс [19]

θ_4^0	θ_4^1	θ_4^2	θ_4^3	θ_4^4
29,68	14,64	0,01839	1,020	0,8686

Таблица 5 – Ковариационная матрица погрешностей оцененных значений коэффициентов θ_4^k , $k = 0, \dots, 4$ суперпозиции полиномов Лежандра в представлении (21) для результатов измерений дифференциальных сечений реакции ${}^9\text{Be}(d,\alpha 0)$ для энергии дейтронов 3 МэВ в системе центра масс [19]. Значения ковариаций домножены на 10^3

	Номер коэффициента	0	1	2	3	4
θ_4^0	0	3,517				
θ_4^1	1	1,770	7,577			
θ_4^2	2	-1,874	4,912	17,55		
θ_4^3	3	1,238	0,3945	6,929	23,78	
θ_4^4	4	2,701	0,1747	-0,7937	10,96	24,58

Приложение А

Оценка вектора параметров модельной функции и ковариационной матрицы погрешностей параметров по результатам измерений методом наименьших квадратов

Решением задачи (1) - (3) является вектор $\hat{\vec{\theta}}$, обеспечивающий минимум функционала

$$S(\vec{\theta}) = (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))^T V^{-1} (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta})), \quad (\text{A.1})$$

представляющего собой квадратичную форму для вектора отклонений результатов измерений от значений модельной функции. Выражение для вектора $\hat{\vec{\theta}}$ получают взятием производной квадратичной формы (A.1) по вектору $\vec{\theta}$

$$\begin{aligned} \frac{\partial S(\vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}} &= 2 (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))^T V^{-1} \frac{\partial (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))}{\partial \vec{\theta}} = \\ &= - 2 (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))^T V^{-1} \frac{\partial f(\vec{x}, \vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}} = \\ &= - 2 (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))^T V^{-1} X \end{aligned}$$

и приравниванием ее нулю

$$\frac{\partial S(\vec{\theta})}{\partial \vec{\theta}} = - 2 (\vec{y} - f(\vec{x}, \vec{\theta}))^T V^{-1} X = 0. \quad (\text{A.2})$$

В (A.2) X есть матрица коэффициентов чувствительности модельной функции $f(x, \vec{\theta})$ по параметрам (координатам вектора $\vec{\theta}$)

$$X_{ij} = \frac{\partial f(x_i, \vec{\theta})}{\partial \theta_j}.$$

Из матричного уравнения (A.2) вычисляют оценку $\hat{\vec{\theta}}$ метода наименьших квадратов (МНК) неизвестного вектора параметров

$$\hat{\vec{\theta}} = (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \vec{y}. \quad (\text{A.3})$$

Ковариационную матрицу неопределенностей параметров W вычисляют на основе соотношения, используя матричную алгебру:

$$\begin{aligned}
\text{cov}(\hat{\theta}) &= \text{cov}((X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \tilde{y}) = \\
&= (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \text{cov}(\tilde{y}) ((X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1})^T = \\
&= (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \text{cov}(\tilde{y}) (X^T V^{-1})^T ((X^T V^{-1} X)^T)^{-1} = \\
&= (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} \text{cov}(\tilde{y}) ((V^{-1})^T (X^T)^T) (X^T V^{-1} X)^{-1} = \\
&= (X^T V^{-1} X)^{-1} X^T V^{-1} V (V^{-1}) X (X^T V^{-1} X)^{-1} = (X^T V^{-1} X)^{-1}.
\end{aligned}$$

Приложение Б

Оценка вектора параметров модельной функции и ковариационной матрицы погрешностей параметров по результатам измерений методом наименьших квадратов в случае нелинейной модельной функции

Пусть $\vec{\theta}_k$ есть некоторое приближение к искомому неизвестному вектору параметров. Тогда, сохраняя члены первого порядка малости в разложении модельной функции $f(x, \vec{\theta})$ по степеням $(\vec{\theta} - \vec{\theta}_k)$, имеем

$$f(x, \vec{\theta}) \approx f(x, \vec{\theta}_k) + X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} - \vec{\theta}_k), \quad (\text{Б.1})$$

где $X(\vec{\theta}_k)$ - матрица коэффициентов чувствительности модельной функции относительно параметров

$$X_{ij}(\vec{\theta}_k) = \left. \frac{\partial f(x_i, \vec{\theta})}{\partial \theta_j} \right|_{\vec{\theta}=\vec{\theta}_k} \quad (\text{Б.2}).$$

После подстановки (Б.1) в (8) функционал $S(\vec{\theta})$ принимает вид

$$S(\vec{\theta}) \approx \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) - X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) - X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)$$

Определим дифференциал Гато $DS(\vec{\theta}, \vec{h})$ в соответствии с [20]

$$DS(\vec{\theta}, \vec{h}) = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{S(\vec{\theta} + t\vec{h}) - S(\vec{\theta})}{t} \quad (\text{Б.3})$$

В точке минимума функционала $S(\vec{\theta})$ дифференциал Гато должен быть равным нулю.

Выполним промежуточные преобразования.

$$\begin{aligned} S(\vec{\theta} + t\vec{h}) - S(\vec{\theta}) &= \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) - X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} + t\vec{h} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) - \right. \\ &X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} + t\vec{h} - \vec{\theta}_k) \left. \right) - \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) - X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) - \right. \\ &X(\vec{\theta}_k)(\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \left. \right) = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \left[\left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) - \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} + t\vec{h} - \vec{\theta}_k) \right. \\
&\quad - \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} + t\vec{h} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) \\
&\quad \left. - \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} + t\vec{h} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} + t\vec{h} - \vec{\theta}_k) \right) \right] \\
&\quad - \left[\left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) \right. \\
&\quad - \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \\
&\quad - \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) \\
&\quad \left. + \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right) \right] = \\
&= - \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) t\vec{h} - \left(X(\vec{\theta}_k) (t\vec{h}) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) \\
&\quad + \left(X(\vec{\theta}_k) (t\vec{h}) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right) \\
&\quad + \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (t\vec{h}) \right) \\
&\quad + \left(X(\vec{\theta}_k) (t\vec{h}) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (t\vec{h}) \right).
\end{aligned}$$

Соответственно, дифференциал Гато $DS(\vec{\theta}, \vec{h})$ (формула (Б.3))

приобретает вид

$$\begin{aligned}
DS(\vec{\theta}, \vec{h}) \approx & - \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) \vec{h} - \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{h}) \right)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) + \\
& \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{h}) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right) + \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{h}) \right). \quad (Б.4)
\end{aligned}$$

Приравнивая нулю дифференциал Гато, приходим к соотношению

$$2\vec{h}^T \left(X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right) \right) = 2\vec{h}^T \left(X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) \right).$$

Поскольку последнее равенство справедливо для произвольного вектора \vec{h} ,

то

$$X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} \left(X(\vec{\theta}_k) (\vec{\theta} - \vec{\theta}_k) \right) = X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} \left(\vec{y} - f(x, \vec{\theta}_k) \right) \quad (Б.5)$$

Из (Б.5) следует вид рекуррентных соотношений для вычисления вектора

параметров $\vec{\theta}_{k+1}$ и ковариационной матрицы $W(\vec{\theta}_{k+1})$ погрешностей параметров

$$\vec{\theta}_{k+1} = \vec{\theta}_k + \left(X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) \right)^{-1} X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} (\vec{y} - f(\vec{\theta}_k)),$$

$$W(\vec{\theta}_k) = \left(X(\vec{\theta}_k)^T V^{-1} X(\vec{\theta}_k) \right)^{-1}.$$

БИБЛИОГРАФИЯ

- [1] ГСССД МО 268-2017 «Методика оценки значений характеристик распада и излучений радионуклидов практического назначения».
- [2] M.G.Kendall, A.Stuart, "The Advanced Theory of Statistics", vol.2 ("Inference and Relationship"), Second edition, Charles Griffin & Company Limited, London, 1961.
- [3] Proceedings of 14th International Symposium on Reactor Dosimetry, Bretton-Woods, New Hampshire, USA, May 22-27, 2011. ASTM Special Technical Publications (STP) 1550, p.131-140, 2012.
- [4] Curie M., Debierne A., Eve A.S., Geiger H., Hahn O., Lind S.C., Meyer S., Rutherford E., Schweidler E. The Radioactive Constants as of 1930 // Revs. Modern Phys. – 1931. – Vol. 3. – P. 427-445.
- [5] Mundschenk V.H. Uber ein Verfahren zur Abtrennung kurzlebiger Radionuklide unter Ausnutzung des Ruckstosseffektes // Radiochim. Acta. – 1970. – Vol. 14. – P. 72-74.
- [6] Nurmi M., Giessing D., Sievers W., Varga L. Studies of the Natural Actinium Radioactive Series // Ann. Acad. Sci. Fennicae, Ser.A VI, No.167. – 1965.
- [7] Spiess F.N. Alpha-Emitting Isomer: Polonium-211 // Phys. Rev. – 1954. – Vol. 94. – P. 1292-1299.
- [8] Bunyan D.E., Lundby A., Walker W. Experiments with the Delayed Coincidence Method, Including a Search for Short-Lived Nuclear Isomers // Proc. Phys. Soc.(London). – 1949. – Vol. 62A. – P. 253.
- [9] Flack F.C., Johnson J.E. The Gamma Radiation from ^{212}Po (ThC) // Proc. Phys. Soc. (London). – 1962. – Vol. 279. – P.10-13.
- [10] Astner G., Bergstrom I., Eriksson L., Fagerquist U., Holm G., Persson A. A Hindered E2 Ground State Transition in Po^{207} // Nucl. Phys. – 1963. – Vol. 45. – P. 49-53.
- [11] McBeth G.W., Winyard R.A. Isotope Identification and Radioassay by Time Interval Analysis // Int .J. Appl. Radiat. Isotop. – 1972. – Vol. 23. – P. 527-533.
- [12] Sanyal S., Garg R.K., Chauhan S.D., Gupta S.L., Pancholi S.C. Half-Life Measurement of the ^{212}Po Ground State. Phys. Rev. – 1975. – Vol. C12. – P. 318-319.

[13] Bohn H., Endres E., Faestermann T., Kienle P. Spectroscopy of Excited States in ^{212}Po , ^{210}Pb , and ^{213}At Employing ^{18}O Induced Few-Nucleon Transfer Reactions // *Z. Phys.* – 1981. – Vol. A302. – P. 51-59.

[14] Belli P., Bernabei R., Boiko R.S. e.a. Search for double- β decay processes in ^{106}Cd with the help of a $^{106}\text{CdWO}_4$ crystal scintillator. // *Phys. Rev. C.* – 2012. – Vol. 85. – P. 1-23.

[15] Bellini G., for the Borexino Collaboration. Lifetime measurements of ^{214}Po and ^{212}Po with the CTF liquid scintillator detector at LNGS. // *Eur. Phys. J. A.* – 2013. – Vol. 49. – P. 92. – URL: <https://doi.org/10.1140/epja/i2013-13092-9>

[16] Aprile E., for the XENON Collaboration. Results from a calibration of XENON100 using a source of dissolved radon-220. // *Phys. Rev. D.* – 2017. – Vol. 95. – P. 072008.

[17] Belli P., Bernabei R., Boiko R.S., e.a. Half-life measurements of ^{212}Po with thorium-loaded liquid scintillator. – URL: <http://jnppae.kinr.kiev.ua/19.3/html/19.3.0220.html>.

[18] Experimental Nuclear Reaction Data (EXFOR) Database Version of 2021-11-23. – URL: <https://www-nds.iaea.org/exfor/>.

[19] Generalov L.N., Abramovich C.N., Zvenigorodskiy A.G. Book of Abstracts “LI Meeting on Nuclear Spectroscopy and Nuclear Structure.” 2001. P. 187. Sarov: RFNC-VNIIEF [in Russian].

[20] Колмогоров А.Н., Фомин С.В., Элементы теории функций и функционального анализа, Главная редакция физико-математической литературы изд-ва «Наука», Москва, 1976.