

ДЕКОМПОЗИЦІЯ СКЛАДНОГО КОНТУРА ЧИСЕЛЬНИМИ ТА ЕВРИСТИЧНИМИ МЕТОДАМИ

Третяк А.О., *студент*; Шовкопляс О.А., *ст. викладач*;

Лопаткін Ю.М., *професор*

Сумський державний університет

Проведена робота з удосконалення авторської програми аналізу апаратурного спектра та запропонований новий підхід до вирішення задачі декомпозиції.

Вихідні дані отримують у вигляді дискретного оптичного спектра. Використання чисельних методів для вирішення поставленої задачі передбачає апроксимацію результатів експерименту деякою функцією. Залежно від мети дослідження та накладених вимог точності обробки спектральної інформації програма дозволяє вибрати один із методів подальшої роботи (поліноміальна апроксимація, наближення раціональними функціями, сплайнами тощо). За наявності аналітичного спектра проводиться математична процедура пошуку індивідуальних компонент із використанням лінійного методу найменших квадратів (МНК) для підбору їх характеристик. Внесені зміни в основний функціонал програми дозволяють аналізувати апаратурний контур в системі “частота – екстинкція”, використовуючи гауссівську форму смуг.

Програмний додаток доповнився новою розробкою, яка забезпечує стійку достатню ефективність генетичного пошуку багато-параметричної задачі. Експериментатору надається можливість порівняти традиційний підхід із результатами, отриманими за допомогою генетичних алгоритмів (ГА). Евристичний метод моделює еволюцію в природі, основний механізм якої – природний відбір. Користуючись прийнятою термінологією, кожна “особина” певного “виду” являє собою один із можливих розв’язків поставленої задачі. Від покоління до покоління особини видозмінюються, схрещуються та стають більш “приспособленими”. У роботі досліджено умови, за яких бажано надати перевагу ГА для ефективності процедури оптимізації. Залучення додаткової напівемпіричної інформації про досліджуваний об’єкт може суттєво вплинути на вибір методу розв’язання.

Програма апробована при обробці коливальних спектрів полімерних шарів із комплексом $\text{Cl}(\text{HgNH}_3)_4\text{Cl}$.