

Использование формальных критериев адекватности моделей для автоматизации анализа сложных спектров

Котляров К.И., студ.

Классический частный университет, г. Запорожье

Задача анализа сложных спектров, представляющих сумму однотипных компонент, описываемых функциями заданного вида, является актуальной для многих областей физики и техники. В частности, это относится к спектрам внутреннего трения твердых тел [1] и спектральным методам исследования полупроводников [2]. В [1] предложено использовать для автоматизации анализа набор формальных статистических критериев адекватности. Он в частности, может включать анализ коэффициента детерминации модели, автокорреляции ее остатков по критерию Дарбина-Уотсона, а также близости дисперсий остатков и экспериментальных погрешностей по критерию Фишера. В докладе показана возможность использования такого подхода для автоматизации анализа сложных спектров рентгеновской фотоэмиссии, аппроксимируемых суммой нескольких лоренцевских пиков. Данные о параметрах пиков для тестирования методики были взяты близкими к приводимым в [3]. Полученные результаты показали, что рассматриваемый подход позволяет решить важную задачу – устранить субъективизм исследователя при определении числа компонент спектра и является полезным для разработки общей методологии анализа сложных спектров.

Руководитель: Бахрушин В.Е., проф.

1. В.Є. Бахрушин, А.В. Чиріков, *Моделі та механізми механічної релаксації, пов'язаної з перебудовою домішково-дефектної підсистеми кристалів* (Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ": 2004).
2. В.Е. Бахрушин, *Получение и свойства слаболегированных слоев многослойных композиций* (Запоріжжя: ГУ "ЗІДМУ": 2001).
3. Л.Е. Мордвинова, А.В. Шамшурин, *Аппроксимация функциями Лоренца спектральных данных о составе детонационных наноалмазов* (Международный научный журнал «Альтернативная энергетика и экология» 2007).