

УДК 519.65  
MSC2010 97M50

© В. Г. Назаров<sup>1</sup>

## Задача частичной идентификации неизвестного вещества

В работе рассматривается задача частичной идентификации химического состава неизвестной среды методом многократного просвечивания этой среды коллимированным потоком рентгеновского излучения. Сформулирована математическая модель для задачи идентификации и дано её сравнение с задачей нахождения химического состава среды. Предложен метод решения задачи идентификации, основанный на построении специальной функции, названной индикатором различимости веществ. В качестве иллюстрации приводятся результаты расчетов, выполненных для различных конкретных групп химических элементов.

Ключевые слова: *радиография сплошной среды, идентификация химического состава вещества, сингулярное разложение матрицы, точность вычислений.*

### Введение

Задача нахождения химического состава вещества и задача идентификации вещества радиографическими методами интересны с точки зрения теории и имеют несомненную практическую ценность. Радиографические методы полезны в тех случаях, когда требуется выполнить неразрушающий контроль изделия или когда непосредственный доступ к объекту исследования затруднен или нежелателен. Количество научных публикаций на эту тему как российских, так и зарубежных исследователей остается достаточно высоким; отметим среди них [1–3]. При этом авторы используют различные подходы к решению рассматриваемой задачи, и эти подходы могут заметно отличаться в зависимости от конкретной ситуации.

В данной работе рассматривается задача частичной идентификации химического состава среды методом многократного просвечивания среды коллимированным рентгеновским излучением. Эта задача тесно связана с задачей нахождения химического состава. В то же время она обладает спецификой, которая в определенных случаях позволяет в десятки и более раз снизить требования к точности измерительных приборов, необходимой для успешного решения проблемы. Это вызвано

---

<sup>1</sup> Институт прикладной математики ДВО РАН, 690041, г. Владивосток, ул. Радио, 7. Электронная почта: naz@iam.dvo.ru

тем, что в задаче частичной идентификации изначально не требуется найти химический состав исследуемого вещества  $X_0$ , а нужно лишь показать (доказать), что это вещество не входит в список некоторых известных, заранее указанных веществ  $Z = \{Z_1, Z_2, \dots, Z_M\}$ , в котором нет повторов. В список  $Z$  могут входить, например, некоторые взрывчатые, ядовитые и опасные вещества, запрещенные для провоза на транспорте. Если вещество таковым не является, то его можно провозить, а химический состав при этом не существен. Такой подход к проблеме вполне приемлем, к примеру, при таможенном досмотре.

## 1. Предварительные замечания и постановка задачи

Далее мы считаем, что исследуемый образец  $G_0$  неизвестного вещества  $X_0$ , является однородным по химическому составу, и все химические элементы (или простые химические соединения, которые мы дальше также будем называть элементами), входящие в состав  $X_0$ , присутствуют в некотором заранее заданном перечне элементов  $X_1, \dots, X_N$ , который нам известен. Образец  $G_0$  имеет толщину  $l$  и подвергается облучению потоком фотонов, коллимированным как по направлению, так и по энергии и идущим вдоль некоторой фиксированной прямой. В ходе каждого измерительного эксперимента все фотоны имеют некоторую энергию  $E_k$  из фиксированного (дискретного) набора энергий излучения.

$$0.1 \text{ МэВ} = E_1 < E_2 < \dots < E_{\bar{N}} = 20 \text{ МэВ}; \quad N \leq \bar{N}. \quad (1)$$

Далее при проведении численных экспериментов мы будем пользоваться числовыми данными для конкретных веществ и энергий, взятых из таблиц [4, 5], где приводятся данные для 20 значений энергии. Мы ограничимся случаем  $\bar{N} = 20$ .

Пусть  $h_k = h(E_k)$  — плотность потока излучения, входящего в  $G_0$ ,  $H_k = H(E_k)$  — плотность потока излучения, выходящего из  $G_0$ , для энергии  $E_k$ ,  $k = 1, \dots, N$ ,  $\mu_{0k} = \mu_0(E_k)$  — коэффициент ослабления излучения для вещества  $X_0$ ,  $\mu_{xik} = \mu_{xi}(E_k)$  — коэффициенты ослабления излучения для  $X_i$ ,  $i = 1, \dots, N$ ,  $\rho_0$  — плотность вещества  $X_0$ ,  $\rho_{xi}$  — плотность  $X_i$ ,  $w_i$  — массовая доля элемента  $X_i$ , входящего в состав вещества  $X_0$ .

Расположение коллиматоров перед исследуемым веществом и после него позволяет выделить из начального потока излучения преимущественно только те фотоны, которые не вступали во взаимодействие с веществом и своей начальной энергии не потеряли. В таком случае и при введенных обозначениях уравнение переноса излучения [6, 7] принимает простой вид и его следствием является экспоненциальное затухание плотности потока излучения в веществе. Поэтому для каждого значения энергии  $E_k$  мы можем записать равенство  $H_k = h_k \exp(-l\mu_{0k})$ ;  $k = 1, \dots, N$ , откуда  $\ln(H_k/h_k) = -l\mu_{0k}$ . Согласно [4, 5] справедлива формула

$$\mu_{0k} = \rho_0 \sum_{i=1}^N w_i \frac{\mu_{xik}}{\rho_{xi}}.$$

В итоге мы получаем следующую систему уравнений [8]

$$\sum_{i=1}^N \frac{\mu_{xik}}{\rho_{xi}} \cdot (l\rho_0 w_i) = \ln \frac{h_k}{H_k}; \quad k = 1, \dots, N. \quad (2)$$

В этой системе известная величина  $l$  намеренно помещена не в правую часть, а в левую, для того чтобы все уравнения были безразмерными. Массовые доли  $w_i$  элементов  $X_i$ , входящих в состав вещества  $X_0$ , удовлетворяют соотношению

$$\sum_{i=1}^N w_i = 1 \quad (3)$$

и условиям

$$w_i \geq 0; \quad i = 1, \dots, N. \quad (4)$$

Далее нам придется сравнивать задачу идентификации с ранее рассмотренной в [8] задачей химии, поэтому приведем формулировки обеих задач.

**Задача 1.** (задача химии) *Найти величины  $\rho_0, w_i, i=1, \dots, N$ , удовлетворяющие уравнениям (2), (3) и неравенствам (4) при условии, что все остальные величины, входящие в (2), нам известны.*

**Задача 2.** (задача идентификации) *Пусть для вещества  $X_0$  неизвестного состава известны величины  $l, h_k = h(E_k)$  и  $H_k = H(E_k)$ , выполняются уравнения (2), (3) и неравенства (4). Выяснить, входит ли вещество  $X_0$  в список веществ  $Z = \{Z_1, \dots, Z_M\}$  известного химического состава.*

Возможно, приведенная формулировка задачи 2 выглядит несколько расплывчатой, поэтому сделаем пояснение.

1) В задаче 2 не требуется определять величины  $\rho_0, w_i, i=1, \dots, N$  (но и не возвращается).

2) Энергии, на которых исследователь может проводить просвечивание образца  $G_0$ , могут выбираться произвольными, но все они обязаны входить в перечень (1).

3) Количество различных проведенных серий измерений величин  $h_k = h(E_k)$  и  $H_k = H(E_k)$  может быть любым конечным. Серия состоит из  $N$  экспериментов, в которых образец просвечивается на каждой энергии  $E_1^{(p)}, E_2^{(p)}, \dots, E_N^{(p)}$  и находятся (с ошибками) величины  $b_k = \ln(h_k/H_k); k=1, \dots, N$ .

Далее для большей определенности будем считать (если не оговорено противное), что для каждой энергии  $E_k$  нам известна одна пара значений –  $h_k = h(E_k)$  и  $H_k = H(E_k)$ . Другие возможные варианты постановки задачи 2 и их решения станут ясны из дальнейшего изложения. Перепишем (2) в виде  $Ax = b$ , или

$$\sum_{i=1}^N A_{ki} x_i = b_k; \quad k = 1, \dots, N, \quad (5)$$

где  $A_{ki} = \mu_{xik}/\rho_{xi} = \mu_{xi}(E_k)/\rho_{xi}; x_i = l\rho_0 w_i; b_k = \ln(h_k/H_k)$ .

Будем рассматривать (5) как систему линейных алгебраических уравнений, в которой  $A$  и  $b$  известны, а  $x$  – неизвестный вектор,  $x^T = (l\rho_0 w_1, \dots, l\rho_0 w_N)$ . Конкретное

значение известной величины  $l$  для нас будет несущественным, поэтому для упрощения обозначений далее считаем  $l=1$ .

Исследования, проведенные ранее и описанные в [8] для различных групп элементов  $X_1, \dots, X_N$  для значений  $N$  от 2 до 10, показали, что матрица  $A$  остается невырожденной практически при любом выборе значений энергий просвечивания образца  $E_1, \dots, E_N$ , входящих в набор (1). Далее будем считать, что во всех рассматриваемых случаях матрица  $A$  не вырождена, тогда задача химии имеет решение и оно единственно [9]. В [8,9] было показано, что даже небольшие ошибки правой части системы (5), вызванные неточностью измерений входящего и выходящего потоков излучения  $h_k$  и  $H_k$ , могут привести к значительным ошибкам решения. Для изучения вопроса о возможной ошибке решения задачи химии вернемся к рассмотрению системы уравнений (5).

## 2. Возмущение решения задачи химии

Пусть  $b = b_T + \delta b$ , где  $b_T$  — вектор "точных" значений правой части системы (5), то есть таких значений  $b_k = \ln(h_k/H_k)$ ,  $k = 1, \dots, N$ , которые мы имели бы в случае отсутствия ошибок измерения,  $\delta b$  — вектор возмущения, вызванный измерительными ошибками,  $x = x_T + \delta x$ , где  $x_T$  — точное, а  $x$  — возмущенное решение (5), так что выполняются равенства  $A(x_T + \delta x) = b_T + \delta b$ ,  $Ax_T = b_T$ , и  $A(\delta x) = \delta b$ . Тогда

$$\delta x = A^{-1} \delta b. \quad (6)$$

Напомним известные факты о сингулярном разложении матрицы [11, 12]. Пусть  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$  — собственные числа матрицы  $G = A^T A$ , а  $v_1, \dots, v_N$  — собственные векторы  $G$ , соответствующие  $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ . Поскольку  $A$  не вырождена, то все  $\lambda_i > 0$ . Пусть  $V$  и  $U$  есть  $N \times N$  матрицы такие, что столбцы  $V$  образованы векторами  $v_1, \dots, v_N$ , а столбцы  $U$  — векторами  $u_i = Av_i / \sqrt{\lambda_i}$ . Тогда справедливо разложение

$$A = USV^T, \quad (7)$$

где  $S$  есть диагональная матрица,  $S = \text{diag}\{\sigma_1, \dots, \sigma_N\}$ ;  $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ ;  $i = 1, \dots, N$ . При этом обе матрицы,  $V$  и  $U$ , ортогональные и справедлива формула

$$A^{-1} = VS^{-1}U^T, \quad (8)$$

причем  $S^{-1} = \text{diag}\{\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_N^{-1}\}$ . Числа  $\sigma_i$  называются сингулярными числами матрицы  $A$ , а векторы  $v_1, \dots, v_N$  — сингулярными векторами матрицы  $A$ .

Далее для удобства будем считать, что собственные числа матрицы  $G$  всегда занумерованы так, что  $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ , тогда  $\sigma_1^{-1} \geq \sigma_2^{-1} \geq \dots \geq \sigma_N^{-1}$ .

Спектральную норму матрицы  $A$  обозначим  $\|A\|_S$ , согласно [11]

$$\|A\|_S = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sqrt{\lambda_{\max}} = \sigma_{\max}, \quad (9)$$

а число обусловленности  $C_S$  матрицы  $A$  определяется формулой  $C_S = C_S(A) = \|A\|_S \cdot \|A^{-1}\|_S$  и равно

$$C_S = \sqrt{\lambda_{\max}/\lambda_{\min}} = \sigma_{\max}/\sigma_{\min}. \quad (10)$$

Из равенства  $\delta x = A^{-1}\delta b$  и (8) при  $\delta b = u_i$  получаем

$$\delta x^{(i)} = A^{-1}u_i = VS^{-1}U^T u_i = \sigma_i^{-1}v_i. \quad (11)$$

Отсюда несложно увидеть, что если в качестве множества возмущений правой части системы (5) взять единичную сферу  $\Omega = \{\delta b \mid \delta b \in \mathbb{R}^N, \|\delta b\| = 1\}$ , то множество  $A^{-1}(\Omega) \subset \mathbb{R}^N$ , состоящее из возмущений решения  $x_T$ , будет эллипсоидом, главные полуоси которого направлены вдоль сингулярных векторов  $v_1, \dots, v_N$  и по длине равны  $\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_N^{-1}$ .

Далее мы будем использовать следующие обозначения.  $\widehat{\Omega} = \{\delta b \mid \delta b \in \mathbb{R}^N, \|\delta b\| \leq 1\}$ , через  $E^{(p)} = (E_1^{(p)}, E_2^{(p)}, \dots, E_N^{(p)})$ , где  $p$  — целое положительное число, будет обозначаться какой-нибудь вектор, сформированный из поднабора энергий  $\{E_1^{(p)}, E_2^{(p)}, \dots, E_N^{(p)}\}$ , входящих в набор (1) и удовлетворяющих условию  $E_1^{(p)} < E_2^{(p)} < \dots < E_N^{(p)}$ .

Нетрудно увидеть, что всего существует  $C_{20}^N = 20!/[N! \cdot (20 - N)!]$  таких векторов и они естественным образом (лексикографически) упорядочены. Это означает, что векторы  $E^{(p)} = (E_1^{(p)}, E_2^{(p)}, \dots, E_N^{(p)})$  и  $E^{(q)} = (E_1^{(q)}, E_2^{(q)}, \dots, E_N^{(q)})$  находятся в отношении  $E^{(p)} < E^{(q)}$  тогда и только тогда, когда выполнено одно из следующих условий: либо  $E_1^{(p)} < E_1^{(q)}$ , либо  $E_k^{(p)} = E_k^{(q)}$  при  $1 \leq k \leq r < N$  и  $E_{r+1}^{(p)} < E_{r+1}^{(q)}$ .

Таким образом, верхний индекс  $p$  в записи  $E^{(p)}$  есть порядковый номер вектора  $E^{(p)}$  при данном упорядочивании. Для удобства через  $P$  будем обозначать набор целых положительных чисел  $\{1, 2, \dots, C_{20}^N\}$ .

Каждому вектору  $E^{(p)}$  соответствует (невырожденная) матрица  $A = A(E^{(p)})$  системы (5), элементы которой  $A_{ki} = \mu_{xik}/\rho_{xi} = \mu_{xi}(E_k^{(p)})/\rho_{xi}$ ,  $k, i = 1, \dots, N$ .

Дальнейшее решение задачи 2 основано на анализе сингулярных чисел и векторов матрицы  $A = A(E^{(p)})$  для всевозможных наборов энергий  $\{E^{(p)}; p \in P\}$ .

Теперь изложим вкратце основную идею работы, из которой станет понятна цель всех дальнейших построений и рассуждений. Проще всего это сделать в двумерном случае ( $N = 2$ ).

Пусть  $\rho_T^{(0)}, w_{T1}^{(0)}, w_{T2}^{(0)}$  — точные значения плотности и массовых долей элементов  $X_1, X_2$ , входящих в состав неизвестного нам вещества  $X_0$ , так что величины  $\rho_T^{(0)}, w_{T1}^{(0)}, w_{T2}^{(0)}$  нам не известны, так же как и координаты точки  $x_T^{(0)} = (x_{T1}^{(0)}, x_{T2}^{(0)}) = (\rho_T^{(0)} w_{T1}^{(0)}, \rho_T^{(0)} w_{T2}^{(0)})$  в пространстве решений. Мы пытаемся выяснить, совпадает ли вещество  $X_0$  с заданным веществом  $Z_1$  из списка  $Z$ .

Пусть  $\rho_T^{(1)}, w_{T1}^{(1)}, w_{T2}^{(1)}$  — значения плотности и массовых долей элементов  $X_1, X_2$ , входящих в состав вещества  $Z_1$  а  $x_T^{(1)} = (x_{T1}^{(1)}, x_{T2}^{(1)}) = (\rho_T^{(1)} w_{T1}^{(1)}, \rho_T^{(1)} w_{T2}^{(1)})$  — соответствующая ему точка в пространстве решений; ее координаты нам известны. Зафиксируем какой-нибудь набор энергий  $E^{(p)}$ , для которого матрица  $A(E^{(p)})$  не вырождена. В результате решения системы  $Ax = b$  мы найдем с ошибками точку  $x^{(0)} = (x_1^{(0)}, x_2^{(0)}) = (\rho^{(0)} w_1^{(0)}, \rho^{(0)} w_2^{(0)})$ .

Пусть  $\hat{a} \geq 0$  — амплитуда погрешности измерительного прибора (далее АПП). Это такое минимальное неотрицательное число, что в любой серии измерений выполняется неравенство  $\|b - b_T\| \leq \hat{a}$ . Ясно, что точка  $x^{(0)}$  всегда принадлежит множеству  $x_T^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}\widehat{\Omega})$ , а точка  $x_T^{(0)}$  всегда принадлежит множеству  $x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}\widehat{\Omega})$ . Далее в

утверждении 3 будет показано, что для любого  $N$  и для любой точки  $x^{(0)}$  (полученной для заданного  $\hat{a}$ ) справедливо включение  $x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}\hat{\Omega}) \subset x_T^{(0)} + A^{-1}(2\hat{a}\hat{\Omega})$ .

Теперь предположим, что вещества  $X_0$  и  $Z_1$  различны (но нам это пока что неизвестно), так что  $x_T^{(0)} \neq x_T^{(1)}$ , и что мы можем менять АПП от 0 до  $\infty$ . Обозначим через  $B$  (от слова Best – лучший) и  $W$  (от слова Worst – худший) точки пересечения прямой  $\{(x_T^{(1)} - x_T^{(0)}) \cdot t \mid t \in \mathbb{R}\}$  с эллипсом  $x_T^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}\hat{\Omega})$ , как показано на рис.1. Выберем достаточно малое  $\hat{a}$ , при котором  $x_T^{(1)} \notin x_T^{(0)} + A^{-1}(2\hat{a}\hat{\Omega})$ .

Начнем увеличивать  $\hat{a}$ . При некотором  $\hat{a} = \hat{a}_0$  точка  $x_T^{(1)}$  окажется на эллипсе  $x_T^{(0)} + A^{-1}(2\hat{a}_0\hat{\Omega})$ , то есть  $x_T^{(1)} \in x_T^{(0)} + A^{-1}(2\hat{a}_0\hat{\Omega})$ .

Это означает, что при  $\hat{a} < \hat{a}_0$ , какова бы ни была ошибка правой части системы (5), точка  $x_T^{(1)}$  не будет принадлежать множеству  $x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}_0\hat{\Omega})$ . Значит, при любой ошибке правой части в результате одной-единственной серии измерений мы сможем утверждать, что  $x_T^{(1)} \neq x_T^{(0)}$ , т.е. вещества  $X_0$  и  $Z_1$  различны.

Если  $\hat{a} = \hat{a}_0$  и после проведения первой серии измерений и вычисления  $x^{(0)} = A^{-1}(b)$  окажется, что  $x^{(0)} \neq W$ , то мы получим  $x_T^{(1)} \notin x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}_0\hat{\Omega})$ , и снова вещества  $X_0$  и  $Z_1$  различны. Однако, если при  $\hat{a} = \hat{a}_0$  произойдет так, что  $x^{(0)} = W$ , то  $x_T^{(1)} \in x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}_0\hat{\Omega}) = W + A^{-1}(\hat{a}_0\hat{\Omega})$  и у нас нет оснований утверждать, что вещества  $X_0$  и  $Z_1$  различны.

Наконец, при  $\hat{a} > \hat{a}_0$  и достижимости любого  $\delta b \in \hat{a}\hat{\Omega}$  существует бесконечно много различных  $\delta x$  в (6), при которых реализуются как случай  $x_T^{(1)} \in x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}\hat{\Omega})$ , так и случай  $x_T^{(1)} \notin x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}\hat{\Omega})$ , поэтому гарантировать, что неравенство  $X_0 \neq Z_1$  будет установлено за конечное число серий измерений, нельзя.

При  $\hat{a} \rightarrow \infty$  случаи  $x_T^{(1)} \notin x^{(0)} + A^{-1}(\hat{a}_0\hat{\Omega})$  (при которых мы получаем  $X_0 \neq Z_1$ ) реализуются тогда и только тогда, когда точка  $x^{(0)} = A^{-1}(b)$  попадает в достаточно малую окрестность точки  $B$ .

Таким образом, для любого набора энергий  $E^{(p)}$  (для которого матрица  $A$  не вырождена), любой (сколь угодно большой) АПП и любой малости  $\|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\|$  есть шанс установить неравенство  $X_0 \neq Z_1$  всего за одну серию измерений.

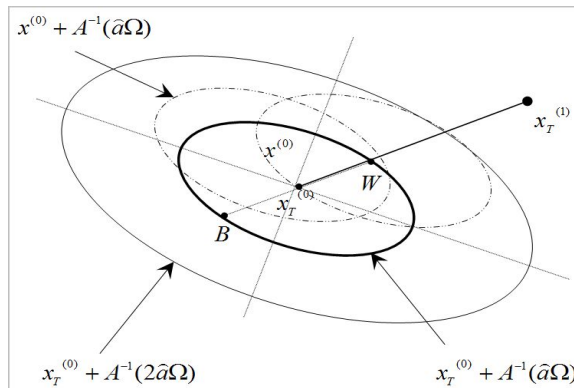


Рис. 1. Различные эллипсы возмущения решения для  $N = 2$  и  $\hat{a} < \hat{a}_0$ .

Подчеркнем еще раз, что величина  $\widehat{a}_0$  равна **половине** радиуса сферы возмущения правой части системы (5), при котором имеет место включение  $x_T^{(1)} \in x_T^{(0)} + A^{-1}(2\widehat{a}_0\Omega)$ . Из сказанного ясно, что  $\widehat{a}_0$  зависит от вектора  $x_T^{(1)} - x_T^{(0)}$  и от матрицы  $A^{-1}$ , а значит, от набора энергий  $E^{(p)} = (E_1^{(p)}, E_2^{(p)}, \dots, E_N^{(p)})$ , на которых происходило просвечивание неизвестного вещества.

Эти утверждения без труда переносятся на произвольный  $N$ -мерный случай. Перед тем как перейти к его рассмотрению, сформулируем несколько несложных утверждений.

**Утверждение 1.** а) Пусть  $V = V(N, N)$  – произвольная невырожденная матрица,  $\varphi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  – произвольная функция,

$$D = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \varphi(x) = 0\}, \quad (12)$$

тогда

$$VD = \{y \in \mathbb{R}^N \mid \varphi(V^{-1}y) = 0\}. \quad (13)$$

б) Пусть  $d_1, \dots, d_N$  – положительные числа, функция  $\varphi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  определена равенством

$$\varphi(x) = \varphi(x_1, \dots, x_N) = \sum_{k=1}^N x_k^2/d_k^2 - 1, \quad (14)$$

$\widehat{D} = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \varphi(x) \leq 0\}$  и  $V = V(N, N)$  – ортогональная матрица, тогда

$$VD = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{k=1}^N (x^T V)_k^2/d_k^2 - 1 = 0\} \quad (15)$$

$$V\widehat{D} = \{x \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{k=1}^N (x^T V)_k^2/d_k^2 - 1 \leq 0\} \quad (16)$$

**Доказательство.** а) Обозначим через  $R_1$  и  $R_2$  правые части в равенствах (12) и (13). Пусть  $y_0 \in VD$ , тогда  $y_0 = Vx_0$ , где  $x_0 \in D$ , значит,  $x_0 = V^{-1}y_0$  и  $\varphi(x_0) = \varphi(V^{-1}y_0) = 0$ , значит,  $y_0 \in R_2$ . Наоборот, если  $y_0 \in R_2$ , то  $\varphi(V^{-1}y_0) = 0$ , тогда для точки  $x_0 = V^{-1}y_0$  имеем  $\varphi(x_0) = 0$ , значит,  $x_0 = V^{-1}y_0 \in R_1 = D$ , откуда  $y_0 \in VD$ .

б) В силу пункта а) множество  $VD$  определено уравнением  $\varphi(V^{-1}x) = 0$ . Поскольку  $V^{-1} = V^T$ , то это уравнение можно записать в виде

$$\varphi(V^T x) = \varphi\left(\sum_{j=1}^N V_{1j}^T x_j, \dots, \sum_{j=1}^N V_{Nj}^T x_j\right) = \varphi\left(\sum_{j=1}^N V_{j1} x_j, \dots, \sum_{j=1}^N V_{jN} x_j\right) = 0,$$

или, с учетом (14),  $\left(\sum_{j=1}^N V_{j1} x_j\right)^2/d_1^2 + \dots + \left(\sum_{j=1}^N V_{jN} x_j\right)^2/d_N^2 - 1 = 0$ , или окончательно

но  $\sum_{k=1}^N \left[ \left(\sum_{j=1}^N V_{jk} x_j\right)^2/d_k^2 \right] - 1 = \sum_{k=1}^N (x^T V)_k^2/d_k^2 - 1 = 0$ . Поскольку  $D$  есть граница выпуклого множества  $\widehat{D}$ , то (16) следует из (15).  $\square$

**Утверждение 2.** Пусть  $\omega = (\omega_1, \dots, \omega_N)$  – единичный вектор в  $\mathbb{R}^N$ ,  $V = V(N, N)$  – ортогональная матрица, тогда

а) прямая  $r(t) = \omega \cdot t$ ,  $-\infty < t < \infty$  пересекается с  $VD$  при

$$t_1 = \pm \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 \right]^{-1/2} \quad (17)$$

в точках

$$r^{(1)} = \omega \cdot \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 \right]^{-1/2}, \quad r^{(-1)} = -\omega \cdot \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 \right]^{-1/2} \quad (18)$$

так что

$$\|r^{(1)}\| = \|r^{(-1)}\| = |t_1| = \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 \right]^{-1/2}. \quad (19)$$

б) точка  $r(t) \in \widehat{D}$  тогда и только тогда, когда  $-|t_1| \leq t \leq |t_1|$

Доказательство. Полагая  $x_j = \omega_j t_1$  и используя (15), получим уравнение

$$\sum_{k=1}^N \left[ \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} \omega_j t_1 \right)^2 / d_k^2 \right] - 1 = 0,$$

или

$$t_1^2 \cdot \sum_{k=1}^N \left[ \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} \omega_j \right)^2 / d_k^2 \right] = t_1^2 \cdot \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 = 1,$$

значит,  $t_1 = \pm \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 \right]^{-1/2}$ , откуда и следует а). Далее,

$$\|r^{(1)}\| = \|r^{(-1)}\| = \|\omega t_1\| = |t_1| \cdot \|\omega\| = |t_1| = \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 / d_k^2 \right]^{-1/2}$$

Последний пункт утверждения очевиден.  $\square$

**Утверждение 3.** Пусть  $V = V(N, N)$  – ортогональная матрица, тогда справедливо равенство

$$B_V = \bigcup_{y \in VD} (y + V\widehat{D}) = \{z = (z_1, \dots, z_N) \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{k=1}^N (z^T V)_k^2 / (2d_k)^2 \leq 1\} = 2V\widehat{D}. \quad (20)$$

Доказательство. Равенства (20) означают, что объединение всех множеств  $y + V\widehat{D}$ ,  $y \in VD$  приводит к “удвоению” размера начального множества  $\widehat{D}$ .

Докажем это равенство сначала для случая, когда  $V$  – единичная матрица. В этом случае последнее равенство в (20) следует из утверждения 2.



Пусть  $B = \bigcup_{y \in D} (y + \widehat{D})$ ,  $z \in B$  и  $z = y + x$  для некоторых  $y \in D$  и  $x \in \widehat{D}$ , тогда

$$\sum_{k=1}^N y_k^2/d_k^2 = 1 \quad \text{и} \quad \sum_{k=1}^N x_k^2/d_k^2 \leq 1. \quad (21)$$

Поскольку  $(x_k - y_k)^2 = x_k^2 + y_k^2 - 2x_k y_k \geq 0$ , то  $2x_k y_k \leq x_k^2 + y_k^2$ , откуда  $(x_k + y_k)^2 = x_k^2 + y_k^2 + 2x_k y_k \leq 2(x_k^2 + y_k^2)$ . Тогда  $(x_k + y_k)^2/2 \leq (x_k^2 + y_k^2)$  и из (21) получаем  $\sum_{k=1}^N (x_k + y_k)^2/(2d_k^2) \leq \sum_{k=1}^N (x_k^2 + y_k^2)/d_k^2 \leq 2$ , откуда  $\sum_{k=1}^N (x_k + y_k)^2/(2d_k)^2 \leq 1$ , значит,  $z \in 2\widehat{D}$ .

Наоборот, пусть  $z \in 2\widehat{D}$ . Если  $z = 0$ , то  $z = y + x$ , например, для  $y = (d_1, 0, \dots, 0)$  и  $x = (-d_1, 0, \dots, 0)$ ; при этом  $y \in D$ ,  $x \in D$  и  $z \in B$ . Пусть теперь  $z = (z_1, \dots, z_N) \neq 0$ . Определим единичный вектор  $\omega$  формулой  $z = \omega \|z\|$ . Пусть

$$t_1 = \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k^2/d_k^2 \right]^{-1/2} = \|z\| \left[ \sum_{k=1}^N z_k^2/d_k^2 \right]^{-1/2};$$

$$t_2 = \left[ \sum_{k=1}^N \omega_k^2/(2d_k)^2 \right]^{-1/2} = \|z\| \left[ \sum_{k=1}^N z_k^2/(2d_k)^2 \right]^{-1/2} = 2t_1.$$

Поскольку  $z \in 2\widehat{D}$ , то  $0 < \|z\| \leq t_2 = 2t_1$ . Представим  $z$  в виде суммы векторов  $z = \omega t_1 + (z - \omega t_1) = \omega t_1 + \omega(\|z\| - t_1)$ , тогда, в силу утверждения 2 точка  $\omega t_1 \in D$ . Поскольку  $0 < \|\omega(\|z\| - t_1)\| = \|\|z\| - t_1\| \leq t_1$ , то точка  $\omega(\|z\| - t_1) \in \widehat{D}$ , значит,  $z \in B$  и утверждение 3 доказано для случая, когда  $V$  — единичная матрица, то есть

$$B = \bigcup_{y \in D} (y + \widehat{D}) = \left\{ z = (z_1, \dots, z_N) \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{k=1}^N (z_k)^2/(2d_k)^2 \leq 1 \right\} = 2\widehat{D}. \quad (22)$$

Пусть  $V$  — произвольная ортогональная матрица. Тогда, действуя матрицей  $V$  слева на множества в (22), получим:

- 1)  $V B = V \bigcup_{y \in D} (y + \widehat{D}) = \bigcup_{y \in D} V(y + \widehat{D}) = \bigcup_{y \in D} (Vy + V\widehat{D}) = \bigcup_{z \in VD} (z + V\widehat{D}) = B_V$ ,
- 2)  $V(2\widehat{D}) = 2V\widehat{D}$ ,

3) равенство  $2V\widehat{D} = \{z = (z_1, \dots, z_N) \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{k=1}^N (z^T V)_k^2/(2d_k)^2 \leq 1\}$  следует из утверждения 1.

Итак, формула (20), а вместе с ней и утверждение 3, доказаны.  $\square$

### 3. Индикатор различимости веществ

Вернемся к системе уравнений (5). Зафиксируем некоторый набор энергий  $E^{(p)}$ ; пусть  $A = A(E^{(p)})$  — соответствующая ему матрица,  $\sigma_1, \dots, \sigma_N$  — её сингулярные числа,  $V$  — матрица сингулярных векторов для  $A$ ,  $\varphi: \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$  — функция, определенная

равенством (14) при  $d_k = \sigma_k^{-1}$ ;  $k=1, \dots, N$ . Тогда, в силу формулы (8) и утверждения 1, множество  $A^{-1}\Omega = VS^{-1}\Omega$  определяется в пространстве решений  $\mathbb{R}^N$  уравнением  $\varphi(V^{-1}x) = 0$ , или

$$\sum_{k=1}^N \left[ \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} x_j \right)^2 \sigma_k^2 \right] - 1 = 0.$$

Пусть  $a \geq 0$  — амплитуда возмущения, входящая в правую часть системы  $Ax = b = b_T + a \cdot \delta b$ ,  $\delta b \in \Omega$  и  $x_T^{(0)} = A^{-1}(b_T)$ , тогда множество (эллипсоид)

$$A^{-1}(b_T + a\Omega) = A^{-1}(b_T) + VS^{-1}(a\Omega) = x_T^{(0)} + aVS^{-1}(\Omega)$$

определяется уравнением

$$\frac{1}{a^2} \sum_{k=1}^N \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} (x_j - x_{Tj}^{(0)}) \right)^2 \sigma_k^2 - 1 = 0$$

или

$$\sum_{k=1}^N \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} (x_j - x_{Tj}^{(0)}) \right)^2 \sigma_k^2 = a^2.$$

Отсюда следует, что произвольная точка  $x_T^{(1)} = (x_{T1}^{(1)}, \dots, x_{TN}^{(1)})$  в пространстве решений принадлежит множеству  $A^{-1}(b_T + a\Omega)$  тогда и только тогда, когда

$$\sum_{k=1}^N \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} (x_{Tj}^{(1)} - x_{Tj}^{(0)}) \right)^2 \sigma_k^2 = a^2.$$

Это произойдет при

$$a = a_0 = \left( \sum_{k=1}^N \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} (x_{Tj}^{(1)} - x_{Tj}^{(0)}) \right)^2 \sigma_k^2 \right)^{1/2}. \quad (23)$$

Пусть

$$x_T^{(1)} \neq x_T^{(0)} \quad \text{и} \quad \omega = (\omega_1, \dots, \omega_N) = \frac{x_T^{(1)} - x_T^{(0)}}{\|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\|},$$

тогда

$$\omega_j = \frac{x_{Tj}^{(1)} - x_{Tj}^{(0)}}{\|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\|} = \frac{(x_T^{(1)} - x_T^{(0)}, e_j)}{\|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\|} \quad \text{и} \quad x_T^{(1)} - x_T^{(0)} = \|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\| \omega_j.$$

Отсюда и из формулы (23) получаем

$$a_0 = \|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\| \cdot \left( \sum_{k=1}^N \left( \sum_{j=1}^N V_{jk} \omega_j \right)^2 \sigma_k^2 \right)^{1/2} = \|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\| \cdot \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V)_k^2 \sigma_k^2 \right)^{1/2}. \quad (24)$$

Пусть  $\rho = \|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\|$  и  $S^{(N-1)}$  — единичная  $(N-1)$ -мерная сфера в  $\mathbb{R}^N$ . Сингулярные числа  $\sigma_k$  и векторы  $V_k$  зависят от набора энергий  $E^{(p)} = (E_1^{(p)}, \dots, E_N^{(p)})$ , на которых происходят просвечивания образца, поэтому неотрицательную величину  $a_0$ , определенную формулой (24), можно считать функцией следующих переменных:  $a_0 = a_0(E^{(p)}, \rho, \omega)$ ,  $p \in P = \{1, \dots, C_{20}^N\}$ . Для любых  $(\rho, \omega) \in (0, +\infty) \times S^{(N-1)}$  определено число

$$a^* = a^*(\rho, \omega) = \max_{p \in P} \{a_0(E^{(p)}, \rho, \omega)\} = \rho \cdot \max_{p \in P} \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{1/2}. \quad (25)$$

Пусть

$$\Phi(\omega) = a^*(1, \omega) = \max_{p \in P} \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{1/2}, \quad (26)$$

тогда  $a^*(\rho, \omega) = \rho \cdot \Phi(\omega)$ . Таким образом, формулы (25) и (26) определяют функции  $a^* : (0, +\infty) \times S^{(N-1)} \rightarrow \mathbb{R}$  и  $\Phi : S^{(N-1)} \rightarrow \mathbb{R}$ . Несложно увидеть, что  $\Phi(\omega) > 0$  и  $\Phi(\omega) = \Phi(-\omega)$ . Из дальнейшего также будет ясно, что функция  $\Phi$  непрерывна.

С функцией  $\Phi(\omega)$  тесно связана (присоединенная к  $\Phi(\omega)$ ) функция  $\Phi_P : S^{(N-1)} \rightarrow \{E^{(p)}; p = 1, \dots, C_{20}^N\}$ . Областью ее значений является (конечное дискретное) множество  $\{E^{(p)}; p = 1, \dots, C_{20}^N\}$ , состоящее из всевозможных наборов энергий  $E^{(p)} = (E_1^{(p)}, E_2^{(p)}, \dots, E_N^{(p)})$ , которые определялись ранее в разделе 2.

По определению  $\Phi_P(\omega)$  есть множество всех тех наборов энергий  $E^{(p)}$ , при которых достигается максимум в формуле (26); при конкретном значении вектора  $\omega$  максимум может достигаться одновременно для нескольких различных наборов  $E^{(p)}$ . Из дальнейшего будет ясно, что такая ситуация является вполне естественной и даже необходимой. Таким образом, функция  $\Phi_P$  является многозначной. Иногда для краткости мы также будем писать  $\Phi_P(\omega) = p$ , имея в виду то  $p \in P$ , которое входит в запись  $E^{(p)}$ .

Также с функцией  $\Phi$  тесно связана (зеркальная к ней) функция  $\Phi_Z : S^{(N-1)} \rightarrow \mathbb{R}$ , которая определяется формулой  $\Phi_Z(\omega) = [\Phi(\omega)]^{-1}$ . График этой функции имеет простую (и полезную) интерпретацию, в связи с чем докажем следующее утверждение.

**Утверждение 4.** а) Для любого  $\omega \in S^{(N-1)}$  справедливо равенство

$$\begin{aligned} \Phi_Z(\omega) &= [\Phi(\omega)]^{-1} = \\ &= \left[ \max_{p \in P} \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{1/2} \right]^{-1} = \min_{p \in P} \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{-1/2}, \end{aligned} \quad (27)$$

причем в последнем равенстве  $\max$  слева и  $\min$  справа достигаются на одних и тех же  $p \in P$ .

б) Пусть  $D^{(p)} = [A(E^{(p)})]^{-1}\Omega$ ,  $\widehat{D}^{(p)} = [A(E^{(p)})]^{-1}\widehat{\Omega}$ ,  $\Pi = \bigcap_{p \in P} \widehat{D}^{(p)}$ , тогда

$$D^{(p)} = V^{(p)}(S^{(p)})^{-1}\Omega, \quad \widehat{D}^{(p)} = V^{(p)}(S^{(p)})^{-1}\widehat{\Omega} \quad (28)$$

и

$$\partial\Pi = \left\{ \omega \cdot \Phi_Z(\omega) \mid \omega \in S^{(N-1)} \right\}. \quad (29)$$

Доказательство. а) Обозначим

$$f(p, \omega) = \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{1/2}.$$

Покажем, что  $[\max_{p \in P} f(p, \omega)]^{(-1)} = \min_{p \in P} [f(p, \omega)]^{(-1)}$ . Зафиксируем  $\omega$ . Пусть  $\max_{p \in P} f(p, \omega)$  достигается при  $p = p_1$ , тогда  $f(p_1, \omega) \geq f(p_2, \omega) \forall p_2$ , т.е.  $[f(p_1, \omega)]^{(-1)} \leq [f(p_2, \omega)]^{(-1)} \forall p_2$ . Значит,  $\min_{p \in P} [f(p, \omega)]^{(-1)}$  достигается при  $p = p_1$  и

$$\min_{p \in P} [f(p, \omega)]^{(-1)} = [f(p_1, \omega)]^{(-1)} = [\max_{p \in P} f(p, \omega)]^{(-1)}.$$

б) Формулы (28) следуют из разложения  $(A(E^{(p)}))^{(-1)} = V^{(p)} \cdot (S^{(p)})^{-1} \cdot (U^{(p)})^T$  — см. (8). Пусть  $x \in \partial\Pi$ . Ясно, что все  $\widehat{D}^{(p)}$  замкнуты, выпуклы,  $x \neq 0$  и определен вектор  $\omega = x/\|x\|$ . В силу утверждения 2 несложно увидеть, что при  $d_k = 1/\sigma_k$  для некоторого  $p_1 \in P$ , при котором достигается  $\min_{p \in P} \left( \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{-1/2}$ , справедливо включение  $x \in \partial\widehat{D}^{(p_1)} = D^{(p_1)}$ . Отсюда и из а) мы получаем

$$x = \omega \cdot \|x\| = \omega \cdot \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p_1)})_k^2 (\sigma_k^{(p_1)})^2 \right]^{-1/2}$$

и

$$\|x\| = \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p_1)})_k^2 (\sigma_k^{(p_1)})^2 \right]^{-1/2} = \min_{p \in P} \left[ \sum_{k=1}^N (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right]^{-1/2} = \Phi_Z(\omega).$$

Значит,  $x = \omega \cdot \|x\| = \omega \cdot \Phi_Z(\omega)$  и справедливо включение

$$\partial\Pi \subset \left\{ \omega \cdot \Phi_Z(\omega) \mid \omega \in S^{(N-1)} \right\}.$$

Обратное включение доказывается аналогично.  $\square$

Функция  $\Phi(\omega)$  оказывается весьма полезной при анализе того, насколько хорошо или плохо могут быть “различимы” (или “отделимы” друг от друга) два различных конкретных вещества, поэтому её можно назвать **индикатором различимости веществ**. В некотором отношении эта функция напоминает **индикатор видимости среды**, введенный в компьютерную томографию Д. С. Аниконовым [13].

Построим график функции  $\Phi(\omega)$  в двумерном случае ( $N=2$ ). Согласно ранее сказанному, далее мы будем использовать множество всевозможных наборов энергий  $\{E^{(p)} = (E_1^{(p)}, E_2^{(p)}); 1 \leq p \leq C_{20}^2 = 190\}$ .

При  $N=2$  вектор

$$\omega = (\omega_1, \omega_2) = \frac{x_T^{(1)} - x_T^{(0)}}{\|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\|}$$

удобно представлять в виде  $\omega = (\cos \varphi, \sin \varphi)$ , где  $\varphi$  — угол между осью  $x_1$  и вектором  $\omega$ , а функцию  $\Phi(\omega)$  записывать в виде

$$\Phi(\varphi) = \max_{p \in P} \left( \sum_{k=1}^2 (\omega^T V^{(p)})_k^2 (\sigma_k^{(p)})^2 \right)^{1/2}; \quad 0 \leq \varphi < 2\pi, \quad \omega_1 = \cos \varphi, \quad \omega_2 = \sin \varphi.$$

Была написана компьютерная программа, которая для заданной пары химических элементов  $X_1, X_2$  на основе таблиц [4, 5] находит все сингулярные числа  $\sigma_k$  и векторы  $V_k$  (столбцы матрицы  $V$ ) для каждого набора  $E^{(p)}$ , а затем вычисляет функции  $\Phi(\varphi)$ ,  $\Phi_Z(\varphi)$  и  $\Phi_P(\varphi)$  на промежутке  $0 \leq \varphi < 2\pi$ , в узлах равномерной сетки с шагом  $1^\circ$ .

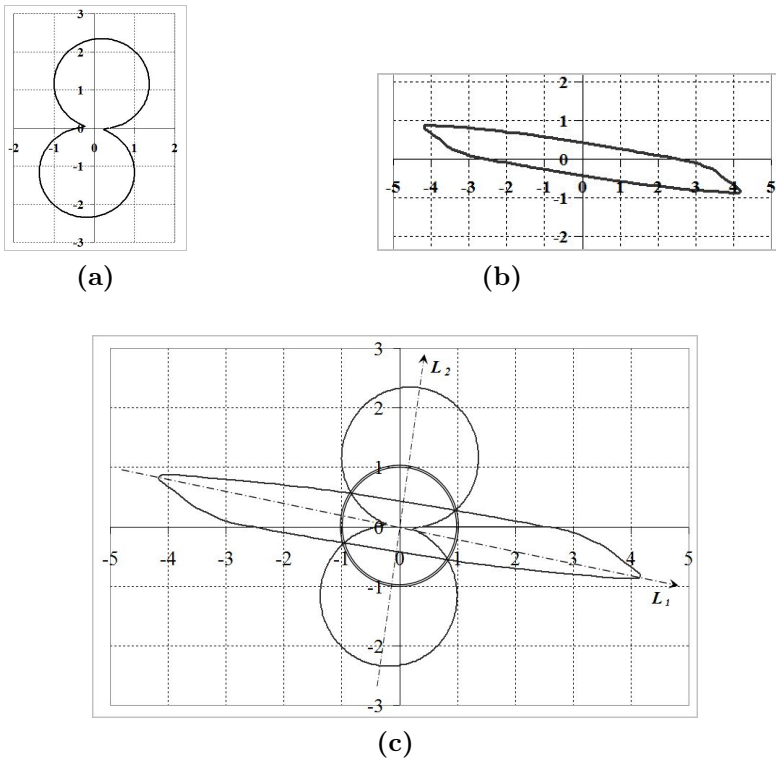


Рис. 2. Результаты численного эксперимента для пары Водород – Барий в полярных координатах в пространстве решений  $\mathbb{R}^2$ : (a) — график функции  $\Phi(\varphi)$ , (b) — график функции  $\Phi_Z(\varphi)$ , (c) — рисунки (a) и (b) после масштабирования наложены друг на друга и к ним добавлена единичная окружность.

В качестве первого примера рассмотрим пару элементов водород (H)–барий (Ba). Для нее графики функций  $\Phi(\varphi)$  и  $\Phi_Z(\varphi)$  в полярных координатах представлены на рис. 2 (a), (b).

На рис. 2 (c) эти два графика были наложены друг на друга и к ним был добавлен график единичной окружности. Причиной, по которой была выбрана эта пара элементов, состояла главным образом только в том, что для неё все три графика могут быть полностью расположены на одном рисунке (рис. 2 (c)). Значения функции  $\Phi_P$  для этой пары приведены в таблице 1; для краткости указан лишь порядковый номер  $p$  соответствующего набора энергий  $E^{(p)} = (E_1^{(p)}, E_2^{(p)})$ ;  $1 \leq p \leq C_{20}^2 = 190$ , а не сами значения энергий.

Отметим следующее. График функции  $\Phi_Z(\varphi)$  похож на эллипс, но им не является. Далее для краткости эту фигуру будем называть псевдоэллипсом (или, при  $N > 2$ , псевдоэллипсоидом).

На рис. 2 (c) прямая  $L_1$  проходит через точку (0,0) и две самые удаленные от (0,0) точки графика  $\Phi_Z(\varphi)$ . Прямая  $L_2$  проходит также через точку (0,0) и две самые близкие к ней точки графика. Для краткости будем называть  $L_1$  и  $L_2$  псевдоосями фигуры. В общем случае псевдооси не ортогональны друг другу, но, как показали расчеты для разных пар химических элементов, как правило, угол между ними близок к прямому. Интересно, что на рис. 2 (c) есть четыре точки, расположенные двумя парами, каждая из которых симметрична относительно точки (0,0). В этих точках одновременно пересекаются все три графика, как это и должно быть согласно формуле  $\Phi_Z(\omega) = [\Phi(\omega)]^{-1}$ .

**Таблица 1.** Функция  $\Phi_P(\varphi)$  для пары Водород–Барий.

Угол $\varphi$ , градусы	$0^\circ - 153^\circ$	$154^\circ - 160^\circ$	$161^\circ - 168^\circ$	$169^\circ$	$170^\circ - 174^\circ$	$175^\circ - 178^\circ$	$179^\circ$
Значение $p$	1	4	3	55	38	20	1

Функция  $\Phi_P(\varphi)$  периодична с периодом  $\pi$ , и в таблице 1 приводятся ее значения для периода. Принимаемое функцией  $\Phi_P(\varphi)$  множество значений состоит всего лишь из шести различных точек, причем на большей части области определения принимается значение  $E^{(1)} = (E_1, E_2) = (0.1 \text{ Mev}, 0.15 \text{ Mev})$ . Такая ситуация (доминирование какого-то одного набора  $E^{(p)}$ ) является типичной для многих различных наборов химических элементов. В некоторых точках (не представленных в таблице)  $\Phi_P(\varphi)$  принимает сразу два значения и они соответствуют точкам пересечения эллипсов  $D^{(p)}$  (см. утверждение 4), в которых максимум достигается сразу на нескольких различных наборах  $E^{(p)}$ .

**Таблица 2.** Некоторые основные характеристики матрицы  $A = A(E^{(p)})$  для пары Водород–Барий для некоторых значений вектора  $E^{(p)}$ .

Набор энергий $E^{(k)}$	Длины полуосей $\sigma_1^{-1}$ , $\sigma_2^{-1}$ и угол наклона $\psi$	Комментарий
$E^{(2)} = (E_1, E_3)$	$\sigma_1^{-1} = 5.45$ , $\sigma_2^{-1} = 0.44$ , $\psi = 171.45^\circ$	$\sigma_1^{-1}$ минимальна
$E^{(1)} = (E_1, E_2)$	$\sigma_1^{-1} = 6.71$ , $\sigma_2^{-1} = 0.42$ , $\psi = 171.03^\circ$	$\sigma_2^{-1}$ минимальна

Угол  $\psi$ , указанный в таблице 2 для наборов энергий  $E^{(1)}$  и  $E^{(2)}$ , есть угол между координатной осью  $x_1$  и первой (то есть соответствующей  $\sigma_1$ ) осью эллипса для  $E^{(1)}$  и  $E^{(2)}$  соответственно. Набор энергий  $E^{(1)}$  важен тем, что он чаще всего встречается в таблице 1 в качестве значений функции  $\Phi_P(\varphi)$ . Что касается набора  $E^{(2)}$ , то он лучше всего подходит для решения задачи химии, поскольку обеспечивает наименьшую норму ошибки решения. Однако интересно, что длина большой псевдооси множества  $\Pi$  меньше, чем  $\sigma_1^{-1} = 5.45$  для  $E^{(2)}$ .

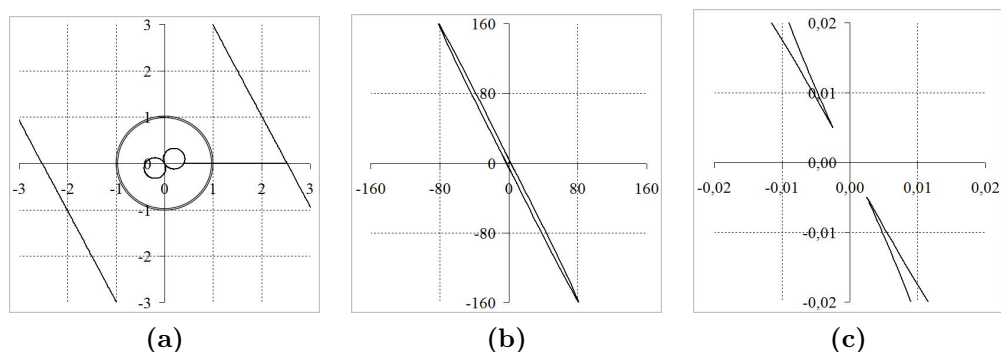


Рис. 3. Результаты численного эксперимента: (а) — Фрагмент центральной части графиков функций  $\Phi(\varphi)$ ,  $\Phi_Z(\varphi)$  и единичной окружности, наложенных друг на друга, для пары Водород–Углерод в полярных координатах в пространстве решений, (б) — уменьшенный в 80 раз рисунок (а), (с) — увеличенный в 100 раз фрагмент рисунка (а).

В качестве второго примера рассмотрена пара элементов водород (H)–углерод (C). Для нее графики функций  $\Phi(\varphi)$ ,  $\Phi_Z(\varphi)$  и единичная окружность в полярных координатах показаны на рис. 3 (а), (б), (с). Эта пара элементов может представлять гораздо больший практический интерес, поскольку число различных углеводородов весьма велико. Далее для этой пары приводятся результаты расчетов, относящихся к задаче идентификации.

Как видно, рис. 3 (а) значительно отличается от рис. 2 (с), и чтобы правильно представить себе картину в целом, его пришлось дополнить рисунками (б) и (с), сделанными в других масштабах. Данные для функции  $\Phi_P(\varphi)$  и некоторые основные характеристики матрицы  $A = A(E^{(p)})$  для этой пары приводятся в таблицах 3 и 4.

**Таблица 3.** Функция  $\Phi_P(\varphi)$  для пары Водород–Углерод

Угол $\varphi$ , градусы	$0^\circ - 116^\circ$	$117^\circ - 118^\circ$	$119^\circ - 179^\circ$
Значение $p$	1	190	20

Множество различных значений функции  $\Phi_P(\varphi)$  для пары водород–углерод состоит всего лишь из трех наборов  $E^{(p)}$ , причем  $E^{(85)}$ , для которого  $\sigma_1^{-1}$  минимальна,

среди них не присутствует. Таблица 4 аналогична таблице 2. Угол  $\psi$  для псевдоэллипса на рис. 3(а) равен  $117^\circ$ , половина диаметра (длина первой полуоси) псевдоэллипса равна 179, что заметно меньше всех значений  $\sigma_1^{-1}$  в таблице 4 и в пять с лишним раз меньше, чем  $\sigma_1^{-1}$  для  $E^{(1)} = (E_1, E_2)$ . При этом, заметим, что в таблице 3 значение  $p = 1$  соответствует почти всем углам.

**Таблица 4.** Некоторые основные характеристики матрицы  $A = A(E^{(p)})$  для пары Водород–Углерод, для некоторых значений вектора  $E^{(p)}$ .

Набор энергий $E^{(k)}$	Длины полуосей $\sigma_1^{-1}$ , $\sigma_2^{-1}$ и угол наклона $\psi$	Комментарий
$E^{(180)} = (E_{15}, E_{20})$	$\sigma_1^{-1} = 297.4$ , $\sigma_2^{-1} = 15.8$ , $\psi = 119.6^\circ$	$C_S = C_{Smin} = 18.82$
$E^{(85)} = (E_5, E_{20})$	$\sigma_1^{-1} = 230.7$ , $\sigma_2^{-1} = 4.68$ , $\psi = 116.9^\circ$	$\sigma_1^{-1}$ минимальна
$E^{(1)} = (E_1, E_2)$	$\sigma_1^{-1} = 926.1$ , $\sigma_2^{-1} = 2.24$ , $\psi = 117.1^\circ$	$\sigma_2^{-1}$ минимальна

Теперь вернемся к задаче 2. Рассмотрим сначала случай, когда в список  $Z$  входит лишь одно вещество  $Z_1$ . Пусть  $x_T^{(0)}, x_T^{(1)}$  — точки в пространстве решений  $\mathbb{R}^N$ , соответствующие  $X_0$  и  $Z_1$  (причем  $x_T^{(0)}$  нам не известна),  $\hat{a}$  — амплитуда погрешности прибора, так что для любого набора энергий  $E^{(p)}$ ,  $p \in P$ , и в любой серии измерений выполняется неравенство  $\|b - b_T\| \leq \hat{a}$ . Пусть  $x^{(0;p_1)}$  — (найденное с ошибкой) решение системы (5) по результатам просвечиваний вещества  $X_0$  на некотором наборе энергий  $E^{(p_1)}$ ,  $\hat{D}^{(p_1)} = [A(E^{(p_1)})]^{-1}\hat{\Omega}$ ,  $\Pi = \bigcap_{p \in P} \hat{D}^{(p)}$  — см утверждение 4.

**Утверждение 5.** При вышеприведенных обозначениях справедливо следующее.

а) Если для некоторого  $p_1 \in P$  точка  $x^{(0;p_1)} \notin x_T^{(1)} + \hat{a}\hat{D}^{(p_1)}$ , то  $x_T^{(0)} \neq x_T^{(1)}$  и  $X_0 \neq Z_1$ .

б) Если для некоторого  $p_1 \in P$  точка  $x_T^{(0)} \notin x_T^{(1)} + 2\hat{a}\hat{D}^{(p_1)}$ , то неравенство  $X_0 \neq Z_1$  всегда устанавливается по результатам одной серии просвечиваний на наборе энергий  $E^{(p_1)}$ .

в) Если  $x_T^{(0)} \in \mathbb{R}^N \setminus (x_T^{(1)} + 2\hat{a}\Pi)$ , то неравенство  $X_0 \neq Z_1$  всегда устанавливается по результатам одной серии просвечиваний на некотором наборе энергий  $E^{(p)}$ .

**Доказательство.** Пункт а) утверждения 5 следует из того, что при  $x_T^{(0)} = x_T^{(1)}$  включение  $x^{(0;p_1)} = x^{(1;p_1)} \in x_T^{(1)} + \hat{a}\hat{D}^{(p_1)}$  обязано выполняться для любого  $p_1 \in P$  в силу определения  $\hat{a}$ .

б) Из условия  $x_T^{(0)} \notin x_T^{(1)} + 2\hat{a}\hat{D}^{(p_1)}$  следует, что в результате одной серии просвечиваний на наборе энергий  $E^{(p_1)}$  всегда будет выполняться соотношение  $x^{(0;p_1)} \notin x_T^{(1)} + \hat{a}\hat{D}^{(p_1)}$ , откуда, в силу того, что выполняется условие пункта а), следует утверждение б).

в) В этом случае всегда найдется  $p \in P$  такое, что  $x_T^{(0)} \notin x_T^{(1)} + 2\hat{a}\hat{D}^{(p)}$ , откуда в силу того, что выполняется условие пункта б) и следует в).  $\square$

Таким образом, утверждение 5 а) дает достаточное условие, при выполнении которого устанавливается неравенство  $X_0 \neq Z_1$ . Что касается пунктов б) и в), то проверить выполнимость указанных в них условий до проведения серии просвечиваний



невозможно. Однако они весьма полезны, поскольку указывают на множество, каждая точка которого может быть “отделена” от точки  $x_T^{(1)}$  за одну серию измерений, то есть установлено отличие вещества, соответствующего этой точке от вещества  $Z_1$ .

В общем случае, когда список веществ  $Z = \{Z_1, \dots, Z_M\}$  содержит несколько веществ, вышеописанную процедуру нужно провести для каждой пары  $X_0 - Z_k$ .

Если для некоторого  $k$  вещество  $X_0$  совпадает с  $Z_k$ , то точно установить это за одну серию измерений можно лишь с помощью измерительного прибора, имеющего нулевую амплитуду погрешности.

Если  $X_0 \neq Z_k$ , но расстояние между  $x_T^{(0)}$  и  $x_T^{(k)}$  слишком мало, то можно провести несколько повторных серий измерений. Если при этом точка  $x^{(0)}$  попадет в достаточно маленькую окрестность точки  $B$  (см рис.1), то неравенство  $X_0 \neq Z_k$  будет все-таки установлено.

#### 4. Некоторые примеры

Проиллюстрируем предложенный метод частичной идентификации химического состава среды на примере углеводородов и сравним его с методом идентификации через решение задачи химии. Необходимые для этого физико-химические данные были взяты главным образом из [14].

На рис. 4 (а), (б) представлены фрагменты пространства решений, содержащие координаты некоторых углеводородов. Целые числа перед названиями веществ соответствуют условным номерам веществ в базе данных; в пространстве решений этим веществам соответствуют точки  $x^{(425)}$ ,  $x^{(451)}$  и т.д.

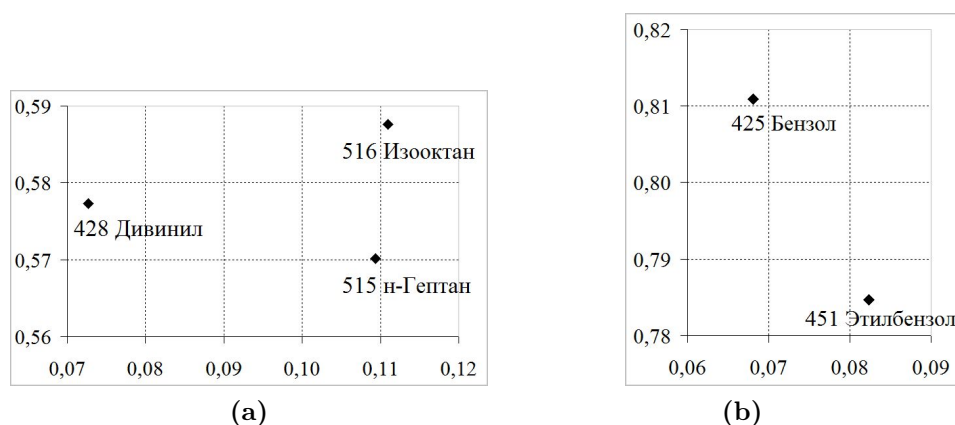


Рис. 4. (а), (б) — фрагменты пространства решений, содержащие координаты некоторых углеводородов.

Далее рассмотрим две пары веществ, в которых первое вещество будем предполагать неизвестным (это  $X_0$  и  $x^{(0)}$  в старых обозначениях), а второе — известным (это  $Z_1$  и  $x^{(1)}$ ).

Для первой пары  $(x^{(428)}, x^{(516)})$  — это 428. Дивинил  $C_4H_6$  и 516. Изооктан  $(C_8H_{18})_3CC_2H_4(C_8H_{18})_2$ . В результате расчетов получено следующее. Угол наклона  $\varphi_1$  вектора  $(x^{(516)} - x^{(428)})$  к оси  $x_1$   $\varphi_1 = 15.08^\circ$ ,  $\|x^{(516)} - x^{(428)}\| = 3.965 \cdot 10^{-02}$ ,  $\Phi(\varphi_1) = 0.435$ ,  $\Phi_P(\varphi_1) = E^{(1)} = (E_1, E_2) = (0.1 \text{ Mev}, 0.15 \text{ Mev})$ . Значение  $a_1^*$  — см. (25) — это амплитуда погрешности прибора, при которой точка  $x^{(1)}$  попадает на границу эллипсоида  $x^{(0)} + \widehat{D}^{(1)}$   $a_1^* = \|x^{(516)} - x^{(428)}\| \cdot \Phi(\varphi_1) = 1.726 \cdot 10^{-02}$ .

Для второй пары  $(x^{(451)}, x^{(425)})$  — это 451. Этилбензол  $C_6H_5C_2H_5$  и 425. Бензол  $C_6H_6$ . В результате расчетов получены другие данные. Угол наклона  $\varphi_2$  вектора  $(x^{(425)} - x^{(451)})$  к оси  $x_1$   $\varphi_2 = 118.5^\circ$ ,  $\|x^{(425)} - x^{(451)}\| = 2.988 \cdot 10^{-02}$ ,  $\Phi(\varphi_2) = 1.136 \cdot 10^{-02}$ ,  $\Phi_P(\varphi_2) = E^{(20)} = (E_2, E_3) = (0.15 \text{ Mev}, 0.2 \text{ Mev})$ . Значение  $a_2^*$ , при котором точка  $x^{(1)}$  попадает на границу эллипсоида  $x^{(0)} + \widehat{D}^{(20)}$   $a_2^* = \|x^{(425)} - x^{(451)}\| \cdot \Phi(\varphi_2) = 3.393 \cdot 10^{-04}$ .

Сравнивая результаты расчетов для первой и второй пары, получаем  $\Phi(\varphi_1)/\Phi(\varphi_2) = 38.329$ ;  $a_1^*/a_2^* = 50.86$  Первое число означает, что чувствительность метода для угла  $\varphi_1$  в 38.329 раз больше, чем для угла  $\varphi_2$ . Второе число означает, что “различить” пару 428. Дивинил — 516. Изооктан в 50.86 раз легче, чем пару 451. Этилбензол — 425. Бензол.

Теперь сравним  $\Phi(\varphi_1)$  и  $\Phi(\varphi_2)$  с удвоенной максимально допустимой амплитудой погрешности прибора, которая необходима для отличия двух различных веществ, состоящих из водорода и углерода, путем решения задачи 1 (задачи химии) при условии, что для них  $\|x^{(1)} - x^{(0)}\| = 1$ . Обозначим эту амплитуду через  $K_X$ . В этом случае мы должны использовать тот набор  $E^{(p)}$ , при котором  $\sigma_1^{-1}$  минимальна, а именно, набор  $E^{(85)}$ , поскольку он дает минимальную норму ошибки решения, которая при единичной норме возмущения правой части равна  $\sigma_1^{-1} = 230.7$ . Тогда  $K_X = 1/\sigma_1^{-1} = \sigma_1 = 4.3346 \cdot 10^{-03}$ ,  $\Phi(\varphi_1)/K_X = 100.36$ ,  $\Phi(\varphi_2)/K_X = 2.6208$ .

Последние два числа означают, что в предельной ситуации (различимость “на грани возможного”) для различения первой пары веществ методом идентификации достаточно точности измерительного прибора в 100 раз меньшей, чем требуется согласно методу нахождения химического состава. Для различения второй пары пары веществ достаточно точности в 2.6 раз меньшей.

Отсюда видно, что решение задачи идентификации через решение задачи химии невыгодно в обоих случаях.

## Закключение

Из приведенных здесь примеров для конкретных веществ, относящихся к случаю  $N = 2$  видно, что предложенный метод частичной идентификации вещества путем использования индикатора различимости веществ  $\Phi(\varphi_1)$  и последующего решения системы уравнений (5) может оказаться весьма эффективным. В то же время видно, что степень этой эффективности сильно зависит от расположения сравниваемых веществ  $X_0$  и  $Z_1$ , а конкретнее — от угла между первой псевдоосью  $L_1$  и вектором  $x^{(1)} - x^{(0)}$ . Проведенные ранее исследования для ряда наборов химических элементов показали, что с ростом  $N$  минимальная длина  $N$ -й полуоси  $\min_{p \in P} \left\{ \left( \sigma_N^{(p)} \right)^{-1} \right\}$  эллипсоидов уменьшается, поэтому есть основание полагать, что с ростом  $N$  эффективность предложенного метода будет только возрастать. Учитывая то, что с

ростом  $N$  количество различных веществ, используемых на практике, стремительно увеличивается, представляется полезным продолжить данные исследования.

## Список литературы

- [1] Sergei Osipov, Sergei Chakhlov, Andrey Batranin, Oleg Osipov, Van Bak Trinh, Juriy Kytmanov, “Theoretical study of a simplified implementation model of a dual-energy technique for computed tomography”, *NDT and E International*, **98**, (2018), 63–69.
- [2] S. P. Osipov, V. A. Udod, Yanzhao Wang, “Identification of Materials in X-Ray Inspections of Objects by the Dual-Energy Method”, *Russian Journal of Nondestructive Testing*, **53**:8, (2017), 568–587.
- [3] В. А. Клименов, С. П. Осипов, А. К. Темник, “Идентификация вещества объекта контроля методом дуальных энергий”, *Дефектоскопия*, **11**, (2013), 40–50.
- [4] J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, *Tables of X – Ray Mass Attenuation Coefficients and Mass Energy Absorption Coefficients 1 Kev to 20 Mev for Elements Z = 1 to 92 and 48 Additional Substances of Dosimetric Interest*, Preprint NISTIR-5632, Nat. Inst. of Standard and Technology, Gaithersburg, 1995.
- [5] M. J. Berger, J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, J. Chang, J. S. Coursey, R. Sukumar, D. S. Zucker, “XCOM: Photon Cross Section Database. National Institute of Standards and Technology. Gaithersburg. MD.”, 2005, <http://www.physics.nist.gov/xcom>.
- [6] Д. С. Аниконов, А. Е. Ковтаныук, И. В. Прохоров, *Использование уравнения переноса в томографии*, Логос, М., 2000.
- [7] D. S. Anikonov, A. E. Kovtanyuk, I. V. Prokhorov, *Transport Equation and Tomography*, VSP, Utrecht-Boston, 2002.
- [8] В. Г. Назаров, “О повышении точности вычислений в задаче нахождения химического состава среды”, *Дальневосточный математический журнал*, **18**:2, (2018), 219–232.
- [9] В. Г. Назаров, “Метод сингулярного разложения матрицы в задаче нахождения химического состава среды”, *Сибирские электронные математические известия*, **14**, (2017), 821–837.
- [10] В. Г. Назаров, “Выбор оптимальных значений энергии излучения в задаче нахождения химического состава среды”, *Математическое моделирование*, **30**, (2018), 91–102.
- [11] С. К. Годунов, А. Г. Антонов, О. П. Кирилюк, В. И. Костин, *Гарантированная точность решения систем линейных уравнений в евклидовых пространствах*, Наука. Сиб. отд-ние, Новосибирск, 1988.
- [12] Дж. Форсайт, М. Малькольм, К. Моулер, *Машинные методы математических вычислений*, Мир, М., 1980.
- [13] D. S. Anikonov, “Integro-differential heterogeneity indicator in tomography problem”, *J. Inv. Ill-Posed Problems*, **7**:1, (1999), 17–59.
- [14] А. И. Волков, И. В. Жарский, *Большой химический справочник*, Современная школа, Минск, 2005.

Поступила в редакцию  
26 февраля 2019 г.

*Nazarov V. G. Problem of partial identification of unknown medium. Far Eastern Mathematical Journal. 2019. V. 19. No 1. P. 43–62.*

#### ABSTRACT

The paper deals with the problem of partial identification of an unknown medium chemical composition by the method of repeated scanning of this medium by collimated x-ray flux. A mathematical model for the problem of identification is formulated and its comparison with the task of finding the chemical composition of the medium carried out. A method for solving the problem of identification is based on the construction of a special function, called the indicator of distinguishability of substances. By way of illustration, results of calculations performed for various specific groups of chemical elements are presented.

Key words: *radiography of a continuous medium, identification the chemical composition of a substance, singular value decomposition, calculation accuracy.*