

УДК 519.65+519.673+519.254

MSC2020 97M50+78-10

© В. Г. Назаров¹

Оценка эффективности метода гиперплоскостей в задаче частичной идентификации неизвестного вещества

Исследуется задача частичной идентификации однородной среды неизвестного химического состава. Среда подвергается многократному просвечиванию потоками рентгеновского излучения, коллимированными по энергии и направлению. По результатам измерения плотности потоков излучения, входящего и выходящего из среды, необходимо установить отличие химического состава среды от некоторых заранее заданных веществ. Предполагается, что измерения потоков излучения содержат ошибки, для которых известны их максимальные относительные значения. В качестве математической основы исследования взят метод гиперплоскостей. Рассматриваются результаты численных расчетов, выполненных для задач различной размерности для ряда групп конкретных химических элементов. В результате компьютерных вычислений показано, что любая из 1287 рассмотренных пар органических веществ является хорошо различимой, если суммарная относительная ошибка измерения потока зондирующего излучения не превышает 9.7%. Дано обоснование того, что метод гиперплоскостей будет эффективным при решении задачи для других групп химических элементов и точность идентификации не ухудшится с ростом размерности задачи.

Ключевые слова: *численное моделирование, радиография сплошной среды, идентификация химического состава вещества, точность вычислений.*

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202319>

Введение

Задачи радиографического исследования среды 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

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

исследователей остается достаточно высоким, среди них можно отметить [1–4]. При этом разные авторы используют различные подходы к решению рассматриваемой задачи, и эти подходы могут заметно отличаться в зависимости от конкретной ситуации.

Данная работа продолжает изучение задачи идентификации методом гиперплоскостей, предложенным автором в [5]. Там было дано теоретическое обоснование метода гиперплоскостей и получены основные формулы, необходимые для расчетов при работе с конкретными веществами. Также был кратко описан один пример расчетов, относящийся к размерности задачи $N = 2$ для группы углеводов. Дать обоснованную оценку эффективности метода гиперплоскостей, опираясь только на полученные теоретические результаты и приведенный в [5] пример невозможно. Это вызвано тем обстоятельством, что для любой пары веществ свойство “быть хорошо различимой” зависит от нескольких факторов, в том числе от расстояния в пространстве решений между веществами, образующими пару, и от направления вектора, образованного этой парой. В свою очередь эти два фактора определяются химическим составом веществ и их плотностью. По указанной причине для оценки эффективности метода гиперплоскостей проведение численных экспериментов на группах конкретных веществ различного химического состава является необходимой частью исследования.

Мы рассмотрим ряд важных вопросов, касающихся задачи идентификации и не затронутых в [5], в том числе следующие. Как точность решения зависит от размерности задачи N , то есть от количества химических элементов, которые предположительно могут входить в состав исследуемого неизвестного вещества? Как точность решения задачи при фиксированном N зависит от конкретного выбора химических элементов? Что будет происходить с точностью решения при увеличении диапазона энергии, на котором решается задача, и на каких энергиях излучения лучше всего проводить рентгеновское просвечивание неизвестного вещества?

1. Предварительные замечания и постановка задачи

Сформулируем математическую постановку задачи идентификации, останавливаясь только на нужных нам аспектах. Более подробно эта задача рассматривалась в работах [5–7]. Мы считаем, что исследуемый образец G_0 неизвестного вещества X_0 является однородным по химическому составу и все химические элементы, входящие в состав X_0 , входят в заранее заданный список элементов X_1, X_2, \dots, X_N , который нам известен. Образец G_0 подвергается облучению потоком фотонов, коллимированным как по направлению, так и по энергии и идущим вдоль некоторой фиксированной прямой. Использование коллиматоров перед исследуемым веществом и после него позволяет выделить из начального потока излучения преимущественно только те фотоны, которые не вступали во взаимодействие с веществом X_0 . Мы также пренебрегаем взаимодействием фотонов с воздушной средой и считаем, что ослабление потока происходит только на участке траектории длиной l , проходящем через образец G_0 . В ходе каждого измерительного эксперимента все фотоны имеют некоторую

энергию E_k из фиксированного (дискретного) набора энергий излучения

$$0.001\text{MeV} = E_1 < E_2 < \dots < E_{\bar{N}} = 20\text{MeV}. \quad (1)$$

Далее при проведении расчетов для конкретных веществ и энергий мы пользуемся нужными нам числовыми данными, взятыми из таблиц [8, 9], где эти данные приводятся для 36 значений энергии. Поэтому мы ограничимся случаем $2 \leq N \leq \bar{N} = 36$.

Пусть $h_k = h(E_k)$ и $H_k = H(E_k)$ — плотности потоков излучения, входящего и выходящего из G_0 для энергии E_k , $k = 1, \dots, \bar{N}$, $\mu_{0k} = \mu_0(E_k)$ — коэффициент ослабления излучения для вещества X_0 , $\mu_{xik} = \mu_{xi}(E_k)$ — коэффициенты ослабления излучения для X_i , $i = 1, \dots, N$, ρ_0 — плотность вещества X_0 , ρ_{xi} — плотность X_i , w_i — массовая доля элемента X_i , входящего в состав вещества X_0 . С учетом физики процесса переноса излучения [10] считаем, что всегда $\mu_{0k}, \mu_{xik}, \rho_0, \rho_{xi} > 0$; $w_i \geq 0$; $i = 1, 2, \dots, N$; $k = 1, 2, \dots, \bar{N}$. Проведя просвечивание образца G_0 на N различных энергиях E'_1, E'_2, \dots, E'_N из списка (1), можно получить следующую систему уравнений и условий [5].

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

Для массовых долей w_i справедливы соотношения

$$\sum_{i=1}^N w_i = 1; \quad w_i \geq 0; \quad i = 1, \dots, N. \quad (3)$$

Обозначив $A_{ki} = \mu_{xik}/\rho_{xi} = \mu_{xi}(E'_k)/\rho_{xi}$, $x_i = l\rho_0 w_i$, $b_k = \ln(h_k/H_k)$ и переписав (2) в виде

$$\sum_{i=1}^N A_{ki} x_i = b_k; \quad k = 1, \dots, N, \quad (4)$$

мы получим систему алгебраических уравнений $Ax=b$, в которой матрица A и вектор $b = (b_1, \dots, b_N)^T$ известны, а $x = (x_1, \dots, x_N)^T = (l\rho_0 w_1, \dots, l\rho_0 w_N)^T$ — неизвестный вектор (верхний индекс T здесь и далее означает транспонирование). Конкретное значение известной величины l для нас будет несущественным, поэтому для упрощения обозначений далее считаем $l = 1$ см. Размерность компонент вектора x есть g/cm^2 .

Как показали ранее проведенные исследования [6], практически при любом выборе набора энергий E'_1, E'_2, \dots, E'_N и химических элементов X_1, X_2, \dots, X_N матрица A не вырождена, но плохо обусловлена. Поэтому даже небольшие ошибки детекторов излучения, измеряющих величины h_k и H_k , могут приводить к значительным ошибкам при нахождении решений системы (4). Помимо этого, с ростом размерности задачи возникает ряд других трудностей, в том числе вычислительных.

В работе [5] был предложен новый способ решения задачи идентификации, названный методом гиперплоскостей, который не требует нахождения решения системы (4), отличается существенной простотой и позволяет находить приемлемые решения задачи идентификации даже при ее большой размерности. Перед тем как сформулировать задачу идентификации и изложить основную идею метода гиперплоскостей введем несколько обозначений и сделаем необходимые пояснения.

Далее N -мерное векторное пространство, содержащее всевозможные векторы x обозначим через \mathcal{X} и будем считать его евклидовым с естественным ортонормированным базисом e_1, e_2, \dots, e_N , так что

$$x = \sum_{k=1}^N x_k e_k = \sum_{k=1}^N \rho_0 w_k e_k, \quad \|x\| = \left(\sum_{k=1}^N (\rho_0 w_k)^2 \right)^{1/2}.$$

Пусть $Z = \{Z_1, \dots, Z_M\}$ — список веществ известного химического состава. Предполагается, что каждое $Z_k \in Z$ так же, как и неизвестное вещество X_0 , содержит только те химические элементы, которые входят в список X_1, X_2, \dots, X_N , и для Z_k известны точные (взятые из справочника) массовые доли этих элементов $w_{T1}^{(k)}, w_{T2}^{(k)}, \dots, w_{TN}^{(k)}$, плотность $\rho_T^{(k)}$ вещества Z_k и коэффициент ослабления излучения при любой энергии E_s из списка (1). Здесь и далее нижний индекс T происходит от слова True — точный, истинный. Таким образом, используя эти данные при заданных l и $h(E_k)$, мы всегда сможем найти величину $H_k = H(E_k)$, которая соответствует любому веществу $Z_i \in Z$. Пусть $x_T^{(k)} = (x_{T1}^{(k)}, \dots, x_{TN}^{(k)})^T = (\rho_T^{(k)} w_{T1}^{(k)}, \dots, \rho_T^{(k)} w_{TN}^{(k)})^T$ — точка в \mathcal{X} , соответствующая Z_k . Пусть $\rho_T^{(0)}, w_{T1}^{(0)}, w_{T2}^{(0)}, \dots, w_{TN}^{(0)}$ — точные значения плотности и массовых долей элементов X_1, \dots, X_N , входящих в состав X_0 , а $x_T^{(0)} = (x_{T1}^{(0)}, \dots, x_{TN}^{(0)})^T = (\rho_T^{(0)} w_{T1}^{(0)}, \dots, \rho_T^{(0)} w_{TN}^{(0)})^T$ — соответствующая X_0 точка в \mathcal{X} .

Уточним, в каких случаях мы будем говорить, что вещества X_0 и Z_k различны. Будем говорить, что X_0 и Z_k одинаковы и писать $X_0 = Z_k$, если $\rho_T^{(0)} = \rho_T^{(k)}$ и $w_{Ti}^{(0)} = w_{Ti}^{(k)}$; $i = 1, \dots, N$, и что X_0 и Z_k различны ($X_0 \neq Z_k$) в противном случае. Далее мы всегда полагаем, что $\rho_T^{(0)} > 0$, $\rho_T^{(k)} > 0$, $x_T^{(0)} \neq 0$, $x_T^{(k)} \neq 0$. В [7] было показано, что $X_0 = Z_k$ тогда и только тогда, когда $x_T^{(0)} = x_T^{(k)}$. Теперь сформулируем задачу идентификации.

Задача идентификации Пусть для вещества X_0 известны величины l , h_k и H_k , выполняются уравнения (2) и соотношения (3). Требуется установить, входит ли вещество X_0 в список веществ $Z = \{Z_1, \dots, Z_M\}$ известного химического состава.

Сделаем пояснения. Во-первых, в список Z могут входить, например, огнеопасные, взрывчатые, ядовитые, отравляющие и наркотические вещества, запрещенные для свободного провоза на транспорте. Списки таких веществ, как правило, заранее известны и сравнительно невелики. Если неизвестное вещество X_0 не входит в список Z , то его можно провозить, а химический состав X_0 при этом не существен. Если же вещество X_0 невозможно отличить от какого-нибудь вещества $Z_k \in Z$, то его необходимо изучить другими методами. Такой подход к проблеме вполне приемлем, к примеру, при таможенном досмотре груза.

Во-вторых, энергии, на которых проводится просвечивание образца G_0 , могут выбираться произвольными, но все они обязаны входить в список (1). Количество этих энергий тоже может быть произвольным. В каждом измерительном эксперименте находится (с некоторыми измерительными ошибками) пара величин $h_k = h(E_k)$

и $H_k = H(E_k)$. Для определенности считаем, что на каждой энергии E_k проводится только один измерительный эксперимент.

Задача идентификации заметно отличается от задачи нахождения химического состава неизвестного вещества (задачи химии) и, как показал ряд численных экспериментов, во многих случаях для успешного решения требует гораздо меньшей точности измерительных приборов.

Пусть a_h и a_H — известные нам максимальные относительные ошибки измерения входящего и выходящего излучений, которые допускают измерительные приборы для любой энергии E_k и $0 \leq a_h < 0.5$, $0 \leq a_H < 0.5$. Тогда, обозначив $a_S = (a_h + a_H)$, можно получить [11] нужную нам для дальнейшего оценку абсолютной ошибки прайвх частей

$$|\delta b_k| \leq \frac{a_h + a_H}{1 - (a_h + a_H)} = \frac{a_S}{1 - a_S} = a. \quad (5)$$

2. Основные построения метода гиперплоскостей

Пусть $t \in \mathbb{R}$, $\Gamma^{(k)}(t)$ — гиперплоскость в \mathcal{X} , определенная формулой

$$\Gamma^{(k)}(t) = \left\{ x \in \mathcal{X} \mid \sum_{i=1}^N A_{ki}(E_k)x_i = t \right\}, \quad (6)$$

Ясно, что при $t_1, t_2 \in \mathbb{R}, t_1 \neq t_2$, гиперплоскости $\Gamma^{(k)}(t_1)$ и $\Gamma^{(k)}(t_2)$ не пересекаются и параллельны друг другу. При каждом $k = 1, \dots, N$ и $t = b_{Tk}$ множество $\Gamma^{(k)}(b_{Tk})$ содержит точное решение $x_T^{(0)}$ системы (4), однако, в силу существования измерительных ошибок, точное значение вектора $b_T = (b_{T1}, \dots, b_{TN})^T$ нам не известно.

Приведем без доказательства нужные для дальнейшего утверждения 1)–4) из [5], справедливые при любом N .

1) Пусть

$$A_{k0} = \left(\sum_{j=1}^N A_{kj}^2 \right)^{1/2}, \quad \eta^{(k)} = \left(\eta_1^{(k)}, \dots, \eta_N^{(k)} \right)^T = A_{k0}^{-1} \cdot (A_{k1}, \dots, A_{kN})^T \in \mathcal{X}, \quad (7)$$

тогда $\eta^{(k)}$ — единичный вектор в \mathcal{X} , ортогональный $\Gamma^{(k)}(0)$, причем все $\eta_j^{(k)} > 0$.

2) Пусть $\beta_1, \beta_2 \in \mathbb{R}$, тогда расстояние $d_{01} = d(0, \Gamma^{(k)}(\beta_1))$ между точкой $0 \in \mathcal{X}$ и $\Gamma^{(k)}(\beta_1)$ задается формулой $d_{01} = A_{k0}^{-1} \cdot |\beta_1|$, а расстояние $d_{12} = d(\Gamma^{(k)}(\beta_1), \Gamma^{(k)}(\beta_2))$ между $\Gamma^{(k)}(\beta_1)$ и $\Gamma^{(k)}(\beta_2)$ — формулой

$$d_{12} = A_{k0}^{-1} \cdot |\beta_1 - \beta_2|. \quad (8)$$

Далее через $b_k^{(j)}$ обозначим значение правой части k -го уравнения в (4), найденное с (возможными) измерительными ошибками для энергии E_k , в случае, когда G_0 состоит из вещества $Z_j \in Z$. Запись $b_{Tk}^{(j)}$ обозначает значение правой части k -го уравнения в (4) в предположении, что все измерительные ошибки равны нулю. Записи $b_k^{(0)}$ и $b_{Tk}^{(0)}$ относятся к случаю, когда G_0 состоит из вещества X_0 .

3) Если

$$\left| b_k^{(0)} - b_{T_k}^{(1)} + a \right| + \left| b_k^{(0)} - b_{T_k}^{(1)} - a \right| > 2a, \quad (9)$$

то $x_T^{(0)} \neq x_T^{(1)}$ и $X_0 \neq Z_1$.

Подчеркнем, что все величины, стоящие в (9), нам известны в результате просвечивания на энергии E_k . Таким образом, данное условие является достаточным для установления неравенства $X_0 \neq Z_1$.

Введем несколько нужных для дальнейшего обозначений. Пусть

$$J^{(k)}(t; a) = \bigcup_{-a \leq \beta \leq a} \Gamma^{(k)}(t + \beta).$$

Для произвольного положительного числа α и целого s , $1 \leq s \leq 36$, пусть

$$\Pi^{(s)}(0; \alpha) = \bigcap_{k=s}^{36} J^{(k)}(0; \alpha)$$

— пересечение всех множеств $J^{(k)}(0; \alpha)$. Ясно, что множество $\Pi^{(s)}(0; \alpha)$ выпукло и симметрично относительно нуля. Границу этого множества обозначим $\partial\Pi^{(s)}(0; \alpha)$. Пусть $S^{[N-1]}$ — единичная сфера в \mathcal{X} и функция $\Phi_{\Gamma Z}^{(s)}: S^{[N-1]} \rightarrow \mathbb{R}$ определена равенством

$$\Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega) = \min_{s \leq k \leq 36} \left\{ \left| \sum_{i=s}^N A_{ki} \omega_i \right|^{-1} \right\}. \quad (10)$$

Справедлива формула

$$\partial\Pi^{(s)}(0; \alpha) = \left\{ \omega \cdot \alpha \Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega) \mid \omega \in S^{[N-1]} \right\},$$

то есть функция $\omega \cdot \alpha \Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega)$ задает границу множества $\Pi^{(s)}(0; \alpha)$ в полярных координатах в пространстве \mathcal{X} .

4) Пусть вещество X_0 (а значит, и координаты точки $x_T^{(0)}$) известны,

$$\omega^{(1,0)} = \left(\omega_1^{(1,0)}, \dots, \omega_N^{(1,0)} \right) = \frac{\left(x_T^{(1)} - x_T^{(0)} \right)}{\left(\left\| x_T^{(1)} - x_T^{(0)} \right\| \right)}, \quad d^{(1,0)} = \left\| x_T^{(1)} - x_T^{(0)} \right\|$$

и

$$a_S < \frac{d^{(1,0)}}{2\Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega^{(1,0)}) + d^{(1,0)}} = a_S^*, \quad (11)$$

тогда найдется по крайней мере одно E_k , $s \leq k \leq 36$, такое, что выполнится неравенство (9). В частности, (9) будет справедливо для числа k , при котором в (10) достигается минимум и различие веществ $X_0 \neq Z_1$ будет установлено при любом результате эксперимента по просвечиванию образца G_0 на энергии E_k . Пару веществ X_0 и Z_i , для которой выполняется соотношение (11), далее будем называть хорошо различимой на промежутке энергий $[E_s, E_{36}]$ при данном значении a_S .

Подчеркнем, что величина $\Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega^{(1,0)})$ может быть найдена до проведения экспериментов по просвечиванию. Данное условие представляется весьма полезным, когда нужно знать, какой максимально допустимой ошибкой должны обладать измерительные датчики, чтобы различие известных веществ X_0 и Z_1 было гарантированно установлено в результате единственного эксперимента по просвечиванию на энергии E_k .

В работе [5] была введена функция $\Phi_{\Gamma P}^{(s)}: S^{[N-1]} \rightarrow \{E_s, E_{s+1}, \dots, E_{36}\}$. Областью ее значений является множество всех энергий, на которых может просвечиваться образец. Согласно [5] $\Phi_{\Gamma P}^{(s)}(\omega)$ есть такое значение энергии E_k , при котором в формуле (10) достигается минимум. Значит, для пары веществ X_0 и Z_1 энергия $\Phi_{\Gamma P}^{(s)}(\omega^{(1,0)})$ лучше всего подходит для установления различия $X_0 \neq Z_1$.

3. Результаты расчетов, выполненных для некоторых групп органических веществ

Для выяснения того, насколько метод гиперплоскостей может быть эффективен на практике, были выполнены расчеты для нескольких групп химических элементов и соответствующих этим элементам веществ. Мы остановились на органических веществах различной степени сложности, исходя из следующего.

Во-первых, эти вещества должны представлять практический интерес. Ранее в замечании к постановке задачи идентификации мы их уже упоминали — это огнеопасные, взрывчатые, ядовитые и др. вещества.

Во-вторых, нам необходимо установить, как точность решения задачи изменяется при постепенном росте ее размерности N . При этом для каждого фиксированного N желательно, чтобы соответствующая группа веществ была достаточно большой и располагалась в пространстве решений \mathcal{X} по возможности максимально «рассредоточенным» образом. Также желательно, чтобы все эти вещества состояли из одних и тех же химических элементов X_1, X_2, \dots, X_N . В этом случае мы сможем получить большой набор разных направлений для вектора $\omega^{(1,0)}$ и числовых значений для расстояния $d^{(1,0)}$, которые входят в формулу (11). За счет этого будет складываться более полная картина того, с чем можно столкнуться на практике.

Кроме того, поскольку наиболее эффективные результаты в методе гиперплоскостей получаются при использовании малых энергий излучения для просвечивания, желательно, чтобы коэффициенты ослабления излучения μ_{xik} на малых энергиях не были слишком большими — иначе трудно будет просвечивать образец вещества.

Группы органических веществ лучше всего соответствуют всем перечисленным требованиям. Такие группы весьма многочисленны по количеству входящих в них веществ. Кроме этого, многие вещества часто имеют большое количество изомеров, которые в нашем случае можно отличить друг от друга только за счет их различной плотности.

Далее мы дадим краткое сравнение метода гиперплоскостей с методом сингулярного разложения матрицы, который ранее использовался в работе [7]. В частности поэтому здесь мы используем те же группы химических элементов, что и в [7]. При

$N=2$ это водород и углерод — (H,C), при $N=3$ — (H,C,O), при $N=4$ — (H,C,N,O), при $N=5$ — (H,C,O,F,P).

Автором была сформирована небольшая база данных радиационных характеристик некоторых веществ с использованием информации из источников [8, 9], а также [12, 13]. Она, в частности, содержит нужные значения массовых коэффициентов ослабления излучения $A_{ki} = \mu_{xik}/\rho_{xi} = \mu_{xi}(E_k)/\rho_{xi}$ для различных веществ для 36 значений энергии E_k , массовые доли w_{Ti} химических элементов, образующих эти вещества и плотности этих веществ.

Сначала достаточно подробно рассмотрим случай размерности $N=2$, поскольку многие обстоятельства использования метода легко проиллюстрировать на рисунке. В качестве группы веществ взяты 40 различных углеводородов, а задача идентификации рассматривается на промежутке энергии $[E_1, E_{36}]$, то есть $0.001\text{Mev} - 20\text{Mev}$. Эти вещества выбраны автором в основном из источников [12, 13] без каких-либо предпочтений, но все же так, чтобы по возможности охватить ту часть пространства решений \mathcal{X} , которая соответствует реальным веществам из группы углеводородов, находящимся в жидкой и твердой фазах при комнатной температуре. Полный список этих веществ и их химические формулы здесь не приводятся по причине их большого числа.

На рис. 1 показано расположение 23 углеводородов в пространстве решений \mathcal{X} . Трехзначные цифры на диаграмме соответствуют условному номеру вещества в базе данных о веществах, сформированной автором для своих целей. Например, 565 — это 3-Метилпентан $\text{CH}_3\text{CH}_2\text{CH}(\text{CH}_3)\text{CH}_2\text{CH}_3$, 563 — это н-Гексан $\text{CH}_3(\text{CH}_2)_4\text{CH}_3$. Далее для удобства мы используем краткие обозначения в химической нотации веществ, (например 565.C₆H₁₄, 563.C₆H₁₄ и т.д.). В такой записи легче увидеть количественное соотношение атомов различных химических элементов, входящих в состав

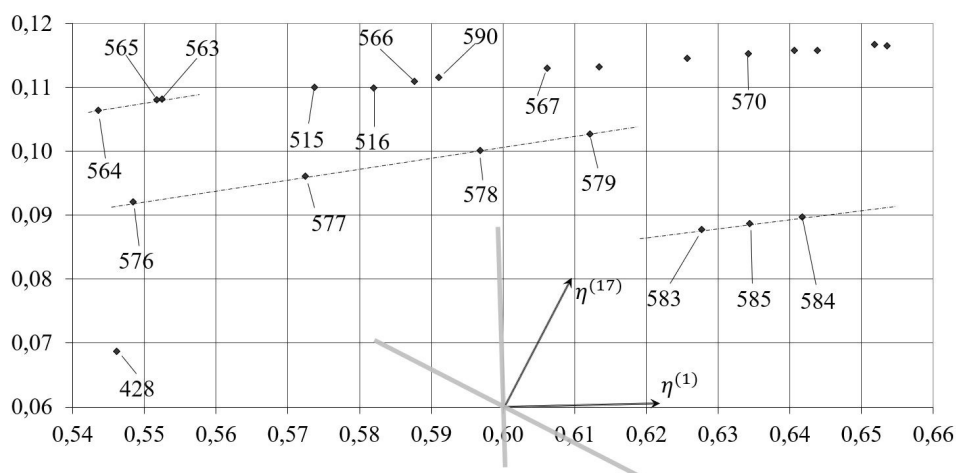


Рис. 1. Часть пространства \mathcal{X} , содержащая 23 углеводорода.

вещества, и опознать изомеры.

На рис. 1 горизонтальная ось x_1 соответствует углероду, а вертикальная x_2 — водороду. В точке (0.6, 0.06) (которая не связана ни с каким веществом) показано направление единичных векторов $\eta^{(1)}$ и $\eta^{(17)}$ (см. формулу (7)), соответствующих энергиям $E_1=0.001\text{Mev}$ и $E_{17}=0.1\text{Mev}$, и показано положение ортогональных к ним гиперплоскостей. Вектор $\eta^{(1)}$ направлен под углом 0.19° к x_1 . С увеличением энергии просвечивания E_k он сначала почти монотонно поворачивается против часовой стрелки до положения вектора $\eta^{(17)}$, образующего угол 62.78° с x_1 . При дальнейшем росте E_k до 20Mev положение $\eta^{(k)}$ меняется очень мало. Пунктирные отрезки являются участками прямых линий, проходящих через начало системы координат. В [7] доказано, что если какие-нибудь вещества Z_i и Z_j являются изомерами и имеют разную плотность, то соответствующие им точки $x_T^{(i)}$ и $x_T^{(j)}$ в \mathcal{X} различны и лежат на прямой, проходящей через начало координат. Например, это могут быть нормальный октан $590.\text{H}_{18}\text{C}_8$ и изооктан $516.\text{H}_{18}\text{C}_8$. Если же точки $x_T^{(i)}$ и $x_T^{(j)}$ различны и лежат на прямой, проходящей через начало координат, то они необязательно являются изомерами, например, это вещества $576.\text{H}_{10}\text{C}_5$, $577.\text{H}_{12}\text{C}_6$, $578.\text{H}_{14}\text{C}_7$, $579.\text{H}_{16}\text{C}_8$.

При проведении расчетов для случая $N=2$ преследовалось несколько целей. Первая цель заключалась в выяснении того, насколько сильно меняются функции $\alpha \cdot \Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\omega)$ и $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega)$ при изменении ω . При этом полагалось $\alpha=1/\sqrt{2}$, $\omega=(\cos\varphi, \sin\varphi)^T$, где φ — угол между осью x_1 и ω . Значение $\alpha=1/\sqrt{2}$ соответствует случаю, когда евклидова норма суммарной ошибки в нахождении правых частей системы (4) при $N=2$ равна единице. Обе функции вычислялись на окружности S^1 на дискретной по углу сетке с шагом $1/180^\circ$.

Было установлено, что на промежутке $0^\circ \leq \varphi \leq 180^\circ$ минимальное значение функции $\alpha \cdot \Phi_{\Gamma Z}^{(1)}$ достигалось в точке $\varphi = 89.806^\circ$ (при $\omega = \eta^{(1)}$), и составляло $\alpha \cdot \Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\eta^{(1)}) = 3.1981 \cdot 10^{-4}$. Максимальное значение функции $\alpha \cdot \Phi_{\Gamma Z}^{(1)}$ достигалось в точке $\varphi = 179.806^\circ$ при том значении $\omega = \omega_0$, для которого скалярное произведение $(\omega_0, \eta^{(1)})$ близко к нулю, при этом $\alpha \cdot \Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\omega_0) = 1.874$. Функция $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega)$ принимала значение $E_9 = 0.01\text{Mev}$ при $179.806^\circ \leq \varphi \leq 179.822^\circ$, то есть на очень небольшом промежутке углов $\Delta\varphi \approx 0.028^\circ$, $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega) = E_1 = 0.001\text{Mev}$, в остальных точках промежутка $0^\circ \leq \varphi \leq 180^\circ$. При этом множество $\partial\Pi^{(1)}(0; \alpha)$ оказалось сильно растянутым параллелограммом, для которого $\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\omega_0)/\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\eta^{(1)}) \approx 5860$.

Вторая цель состояла в вычислении значений величин a_S^* , определенных формулой (11). Была написана компьютерная программа, которая для упомянутой группы из 40 углеводородов формировала множество всевозможных различных пар $(x_T^{(n)}; x_T^{(m)})$ точек в пространстве \mathcal{X} , а затем для каждой такой пары вычисляла величину $a_S^* = d^{(1,0)} \cdot [2\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\omega^{(1,0)}) + d^{(1,0)}]^{-1}$ и находила значение $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)})$ для этой пары. Число таких пар — 780.

В результате проведенных расчетов было установлено, что минимальное значение $a_{S, \min}^* = 0.09726$, и $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)}) = E_1 = 0.001\text{Mev}$ для всех пар. Значит, согласно (11), если $a_S < a_{S, \min}^*$, то любая пара $(x_T^{(n)}; x_T^{(m)})$ является хорошо различимой и

просвечивание лучше всего проводить на энергии $E_1 = 0.001 \text{ Mev}$. Это значит, что если суммарная относительная ошибка измерений $a_S = a_h + a_n$ не превышает 9.726%, то любые два вещества $x_T^{(n)}$, $x_T^{(m)}$ из выбранной группы хорошо различимы. С прикладной точки зрения это неплохой результат.

Интересно отметить, что «наихудшей» парой оказались вещества 570.н-Додекан $C_{12}H_{26}$ и 585.3-Гексин C_6H_{10} . Она становится хорошо различимой при $a_S^* \leq a_{S,min}^* = 0.09726$. На первый взгляд это может показаться странным, поскольку на рис. 1 они расположены далеко друг от друга. Например, изомеры 565. $H_{14}C_6$ и 563. $H_{14}C_6$ намного ближе друг к другу, а для них $a_S^* = 0.740$. Однако если учесть, что вектор $\omega^{(1,0)}$ для первой пары почти перпендикулярен $\eta^{(1)}$ и скалярное произведение $(\omega^{(1,0)}, \eta^{(1)}) \approx 0$, то становится понятным, почему для хорошей различимости пары 570.н-Додекан – и 585.3-Гексин требуется столь малое значение a_S^* . Напомним, что все указанные результаты относились к промежутку энергии $[E_1, E_{36}]$, то есть $0.001 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$.

Для краткого сравнения метода гиперплоскостей (МГ) с методом сингулярного разложения матрицы (МСРМ) в задаче частичной идентификации вещества [7] была проведена еще одна серия расчетов. Эти расчеты относились к промежутку энергии $[E_{17}, E_{36}]$ то есть $0.1 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$, поскольку именно на таком промежутке выполнялись все вычисления в [7] для МСРМ.

Поскольку с ростом энергии E_k величины A_{ks} практически для всех химических элементов, как правило, быстро уменьшаются, то с ростом s в формуле (10) значение $\Phi_{GZ}^{(s)}(\omega)$ будет увеличиваться. Значит, для хорошей различимости фиксированной пары веществ, как правило, будет требоваться все меньшая и меньшая величина максимально допустимой суммарной относительной ошибки a_S .

Посмотрим на результаты расчетов, представленных в таблице 1 для набора значений a_S^* , который ранее в [7] использовался в методе МСРМ. В первой строке таблицы 1 указан некоторый набор убывающих чисел a_S^* , во второй — число пар веществ (а затем в скобках — их процент от общего числа 780), которые хорошо различимы в МСРМ для данного значения a_S^* . В третьей строке — соответствующие числа для метода гиперплоскостей. В обоих методах использовался промежуток энергии $[E_{17}, E_{36}]$, то есть $0.1 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$.

Как видно по таблице, результаты расчетов во всех случаях близки и практически совпадают при $a_S^* \leq 10^{-3}$. При этом результаты МСРМ всегда несколько хуже соответствующих результатов МГ, что вполне закономерно. Расчеты показали, что «наихудшей» парой для МГ оказалась пара 563. C_6H_{14} – 565. C_6H_{14} , которая становится хорошо различимой при $a_S^* < 6.992 \cdot 10^{-5}$ для $\Phi_{GP}^{(17)}(\omega^{(1,0)}) = E_{17} = 0.1 \text{ Mev}$. На

Таблица 1. Число и процент хорошо видимых пар при $N = 2$ для группы углеводородов для промежутка энергий $I_0 = 0.1 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$

	$a_S^* = 3 \cdot 10^{-2}$	$a_S^* = 10^{-2}$	$a_S^* = 5 \cdot 10^{-3}$	$a_S^* = 10^{-3}$	$a_S^* = 5 \cdot 10^{-4}$
МСРМ	33; (4.23%)	316; (40.5%)	533; (68.3%)	722; (92.6%)	754; (96.7%)
МГ	38; (4.87%)	332; (42.6%)	545; (69.9%)	723; (92.7%)	755; (96.8%)

промежутке $0^\circ \leq \varphi \leq 180^\circ$ функция $\Phi_{\Gamma P}^{(17)}(\omega)$ принимала в основном значение E_{17} , и только на маленьком промежутке $116.43^\circ \leq \varphi \leq 119.68^\circ$ она принимала значения E_{36}, E_{19}, E_{18} .

И еще несколько важных для нас результатов расчетов. $\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\eta^{(1)})/\sqrt{2} = 3.198 \cdot 10^{-4}$, $\Phi_{\Gamma Z}^{(17)}(\eta^{(17)})/\sqrt{2} = 2.136$, откуда $\Phi_{\Gamma Z}^{(17)}(\eta^{(17)})/\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\eta^{(1)}) \approx 6680$ — примерно во столько раз («при прочих равных условиях») может улучшиться качество идентификации пары веществ при переходе от промежутка энергии $0.1 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$ к промежутку $0.001 \text{ Mev} - 2 \text{ Mev}$. Конечно, если учесть, что направления векторов $\eta^{(1)}$ и $\eta^{(17)}$ при этом заметно меняются, то для конкретной пары веществ эта величина может оказаться как меньше, так и больше указанного числа.

Перейдем к рассмотрению результатов расчетов методом гиперплоскостей для $N > 2$ на промежутке энергии $0.001 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$. При $N = 3$ использовалась группа химических элементов (H, C, O), а при $N = 4$ — (H, C, N, O). При этом каждый раз подбиралась соответствующая группа из 23 веществ, в состав которых входили все эти элементы. Количество различных пар при этом составляло 253. Вычисления проводились по ранее описанной для $N = 2$ схеме. Основные результаты помещены в таблицу 2. Для удобства сравнения туда же помещены и результаты расчетов при $N = 2$. Если сравнить таблицу 2 с таблицей 1, то можно увидеть, что, несмотря на то, что значения, установленные для величины a_S^* были значительно увеличены, процент хорошо различимых пар тоже увеличился. При $N = 3$ и $N = 4$ в соответствующих им группах веществ присутствовало заметное число изомеров.

Подведем некоторые итоги. При $N = 2$ самой трудноразличимой оказалась пара $570. \text{C}_{12}\text{H}_{26} - 585. \text{C}_6\text{H}_{10}$, которую можно найти на рис. 1. Она становится хорошо различимой при $a_S^* \leq 0.0973$. Функция $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)})$ всегда принимала значение E_1 .

При $N = 3$ самой трудноразличимой оказалась пара $149. \text{Шеллак} \text{C}_{16}\text{H}_{24}\text{O}_5 - 435. \text{Метанал (формальдегид)} \text{CH}_2\text{O}$, для которой $a_S^* = 0.859$. Функция $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)})$ всегда принимала значение E_1 .

При $N = 4$ самой трудноразличимой оказалась пара изомеров $546. \text{o-Нитроанилин} \text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_2 - 547. \text{m-Нитроанилин} \text{C}_6\text{H}_6\text{N}_2\text{O}_2$, для которой $a_S^* = 0.366$. Функция $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)})$ дважды принимала значение E_2 и 251 раз — значение E_1 .

Из сказанного делаем вывод, что почти во всех случаях $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)})$ совпадает с нижней границей использованного интервала энергий. Это косвенным образом указывает на то, что в каждом случае множества $\Pi^{(i)}(0; \alpha)$ являются сильно вытянутыми многогранниками в пространствах \mathcal{X} соответствующих размерностей.

При $N = 5$ в базе данных нашлась только одна пара веществ — это ядовитые

Таблица 2. Число и процент хорошо видимых пар при $N = 2, 3, 4$, для промежутка энергий $I_1 = 0.001 \text{ Mev} - 20 \text{ Mev}$

	$a_S^* = 0.9$	$a_S^* = 0.6$	$a_S^* = 0.1$	$a_S^* = 0.05$	$a_S^* = 0.01$
N=2	743; (95.26%)	775; (99.36%)	779; (99.87%)	780; (100%)	780; (100%)
N=3	251; (99.21%)	253; (100%)	253; (100%)	253; (100%)	253; (100%)
N=4	249; (98.42%)	252; (99.60%)	253; (100%)	253; (100%)	253; (100%)

вещества 456.Зарин $(\text{CH}_3)_3\text{O}_2\text{PF}$ и 457.Зоман $(\text{CH}_3)_5\text{C}_2\text{O}_2\text{PFH}$. Для нее на промежутке $I_0 = 0.1\text{Mev} - 20\text{Mev}$ было получено $a_S^* = 8.377 \cdot 10^{-3}$, и функция $\Phi_{\Gamma P}^{(17)}(\omega^{(1,0)})$ принимала значение E_{17} . На промежутке $I_1 = 0.001\text{Mev} - 20\text{Mev}$ для этой пары $a_S^* = 0.9970$ и $\Phi_{\Gamma P}^{(1)}(\omega^{(1,0)}) = E_1$.

4. О решении задачи идентификации при произвольных N и X_1, X_2, \dots, X_N

Как было показано выше, для всех рассмотренных групп органических веществ и диапазона энергии I_1 задача идентификации имела успешное решение в том смысле, что было показано, что любые два различных вещества можно отличить друг от друга путем просвечивания на некоторой энергии при суммарной относительной ошибке детекторов излучения, не превышающей 9.726%. Почти всегда наилучшей энергией при этом была энергия $E_1 = 0.001\text{Mev}$. В то же время в таблице 2 мы увидели, что для диапазона энергии I_0 процент успешных решений стал заметно меньше. Обратимся к вопросу о том, как будет меняться доля успешных решений при увеличении N и соответствующем увеличении набора химических элементов X_1, X_2, \dots, X_N .

Дать всеобъемлющий и обоснованный ответ на этот вопрос на основании одних только теоретических результатов работы [7] и не проводя численных экспериментов невозможно. Однако можно получить ряд полезных подсказок, проливающих свет на проблему.

Рассмотрим задачу идентификации на промежутке I_1 и обратимся к формуле (11). Утверждения 1)–4) при сделанных предположениях справедливы для любых N и X_1, X_2, \dots, X_N . Пусть вещества X_0 и $Z_1 \in Z$ различны, тогда для соответствующих им точек $x_T^{(0)}$ и $x_T^{(1)}$ имеем $d^{(1,0)} = \|x_T^{(1)} - x_T^{(0)}\| > 0$. Верхний индекс s в формуле (11) равен 1, и пусть вектор $\omega^{(1,0)} = \eta^{(k)} = (\eta_1^{(k)}, \dots, \eta_N^{(k)})^T$. Тогда из (7) несложно получить равенство

$$\left| \sum_{i=1}^N A_{ki} \eta_i^{(k)} \right|^{-1} = A_{k0}^{-1}.$$

Положим в (8) $\beta_1 = 1$, $\beta_2 = -1$, тогда $d(E_k) = d_{12} = A_{k0}^{-1} \cdot |\beta_1 - \beta_2| = 2A_{k0}^{-1}$. Пусть p – целое число, для которого в (10) достигается минимум, тогда $2\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\eta^{(k)}) = 2A_{p0}^{-1} = d(E_p)$. Теперь рассмотрим сеточную функцию $d(E_k)$, $k = 1, \dots, 36$, определенную формулой

$$d(E_k) = d\left(\Gamma^{(k)}(b_{Tk}^{(0)} - 1), \Gamma^{(k)}(b_{Tk}^{(0)} + 1)\right) = 2 \cdot \left(\sum_{i=1}^N A_{ki}^2\right)^{-1/2} = 2\Phi_{\Gamma Z}^{(1)}(\eta^{(k)}). \quad (12)$$

На рис. 2 показана зависимость $d(E_k)$, $[g/cm^2]$ (по вертикали) от энергии E_k , $[Mev]$ (по горизонтали) на промежутке $I_1 = 0.001\text{Mev} - 20\text{Mev}$ для разных групп химических элементов. Графики построены с помощью формулы (12) и информационного ресурса [9]. Верхняя кривая соответствует паре элементов H, C. Вторая сверху –

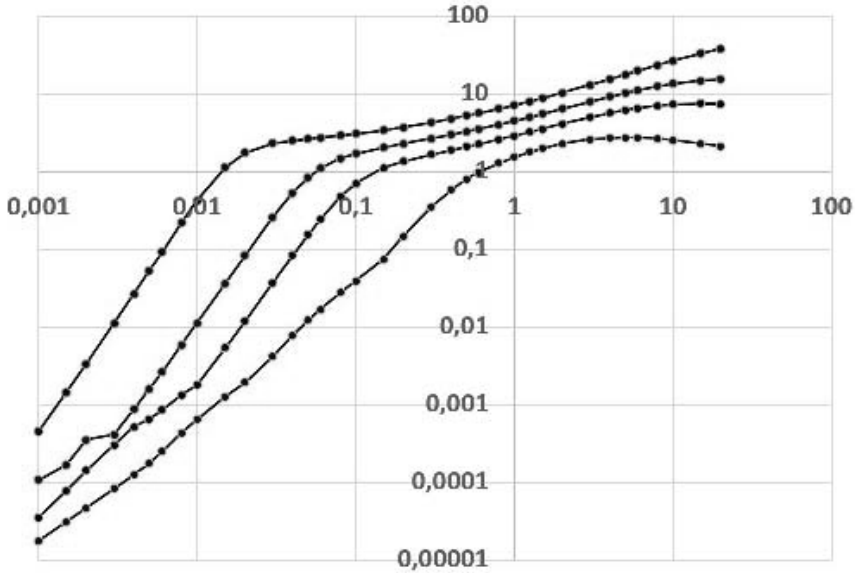


Рис. 2. Зависимость $d(E_k)$, $[g/cm^2]$ (по вертикали) от энергии E_k , $[MeV]$ (по горизонтали) на промежутке $I_1 = [0.001 - 20]MeV$ для разных групп химических элементов.

группе из десяти элементов H, C, N, O, F, Na, Mg, P, S, Cl. Третья сверху — группе из 30 элементов с атомными номерами от 1 до 30. Четвертая сверху — группе из 100 элементов с атомными номерами от 1 до 100. Как показывают графики, на промежутке I_1 с уменьшением E_k величина $d(E_k)$ уменьшается примерно в 10^5 раз.

Формула (11) показывает, что чем меньше величина $2\Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega^{(1,0)})$, тем больше будет правая часть в (11), а значит, тем проще будет достичь условия хорошей различимости веществ X_0 и $Z_1 \in Z$ если соответствующий им вектор $\omega^{(1,0)}$ достаточно близок к вектору $\eta^{(k)}$. Значит, на поставленный выше вопрос можно ответить так. По всей видимости, доля успешных решений не будет уменьшаться.

При взгляде на поведение графиков на рис. 2 может возникнуть впечатление, что с увеличением размерности задачи условие хорошей различимости для фиксированной пары веществ X_0 и $Z_1 \in Z$ будет улучшаться. Однако это не так. Пусть $x_T^{(0)}$ и $x_T^{(1)}$ — соответствующие им точки в N -мерном пространстве $\mathcal{X}^{(N)}$. Пополним старый набор химических элементов X_1, \dots, X_N для пространства $\mathcal{X}^{(N)}$ новым элементом X_{N+1} , и пусть $\mathcal{X}^{(N+1)}$ есть $(N+1)$ -мерное пространство, соответствующее новому набору химических элементов X_1, \dots, X_N, X_{N+1} . Тогда в $\mathcal{X}^{(N+1)}$ первые N координат точек, соответствующих X_0 и Z_1 , не изменятся, а последняя $(N+1)$ координата будет нулевой (поскольку элемент X_{N+1} не входит в их состав). Поэтому расстояние $d^{(1,0)}$ останется прежним, у соответствующего вектора $\omega^{(1,0)}$ появится нулевая последняя $(N+1)$ координата, значение новой функции $2\Phi_{\Gamma Z}^{(s)}(\omega^{(1,0)})$ не изменится, целое число p , при котором в (10) достигался минимум, не изменится, значение

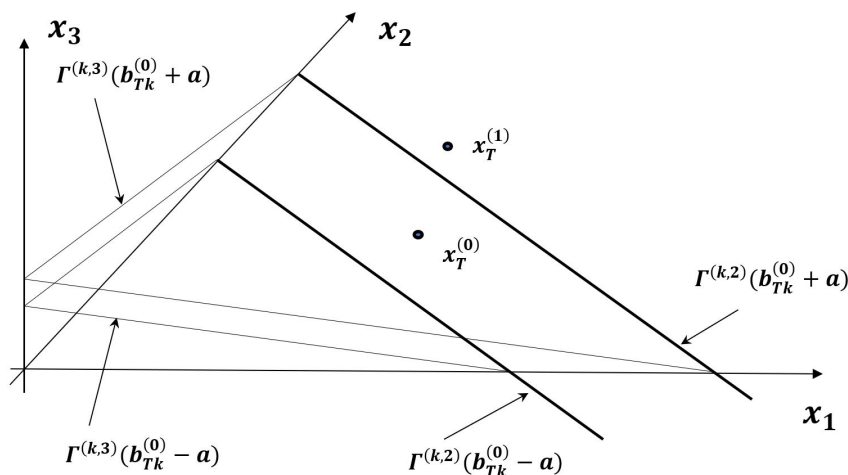


Рис. 3. Точки $x_T^{(0)}$ и $x_T^{(1)}$ соответствуют веществам X_0 и $Z_1 \in Z$. Абстрактный пример того, как пространство $\mathcal{X}^{(2)}$ изменяется до пространства $\mathcal{X}^{(3)}$ при добавлении к старому списку химических элементов X_1, X_2 нового химического элемента X_3 .

правой части в неравенстве (11) не изменится и, наконец, оптимальная энергия просвечивания E_p для пары X_0 и Z_1 не изменится.

Все сказанное проиллюстрировано на рис. 3 для размерности $N=2$. Точки $x_T^{(0)}$ и $x_T^{(1)}$ соответствуют веществам X_0 и $Z_1 \in Z$. Гиперплоскости $\Gamma^{(k,3)}(b_{Tk}^{(0)} - a)$ и $\Gamma^{(k,3)}(b_{Tk}^{(0)} + a)$ в пространстве $\mathcal{X}^{(3)}$ при пересечении с плоскостью $x_3=0$, соответствующей пространству $\mathcal{X}^{(2)}$, дают гиперплоскости $\Gamma^{(k,2)}(b_{Tk}^{(0)} - a)$ и $\Gamma^{(k,2)}(b_{Tk}^{(0)} + a)$. При $a=1$ расстояние $d(E_k) = d(\Gamma^{(k)}(b_{Tk}^{(0)} - 1), \Gamma^{(k)}(b_{Tk}^{(0)} + 1))$ между гиперплоскостями определяется формулой (12). Все гиперплоскости соответствуют энергии E_k .

5. Зависимость качества решения задачи от выбора химических элементов

Рассмотрим вопрос о том, как качество (или успешность) решения задачи при фиксированном N зависит от конкретного выбора химических элементов X_1, \dots, X_N . Напомним, что в формуле (12) нижний индекс k указывает на энергию E_k , а индекс i — на химический элемент X_i . В силу сделанных ранее предположений величину a естественно считать постоянной, то есть не зависящей от выбора группы элементов X_1, \dots, X_N и выбора энергии E_k . В то же время выражение $\left(\sum_{i=1}^N A_{ki}^2\right)^{-1/2}$ сильно зависит как от первого, так и от второго. Чтобы получить примерное представление об этой зависимости, была написана компьютерная программа, которая на основе базы данных [9] формировала файлы, содержащие зависимость массового коэффици-

циента ослабления энергии A_{ki} от атомного номера химического элемента. Каждый файл соответствовал некоторой фиксированной энергии E_k из набора (1) и содержал значения A_{ki} для $i = 1, 2, \dots, 100$. Таким образом, целочисленный индекс i соответствовал атомному номеру элемента и «пробегал» всю периодическую систему Менделеева для атомных номеров от $i = 1$ до $i = 100$. Некоторые результаты этой работы представлены на рис. 4 в виде четырех графиков. Эти графики соответствуют значениям энергии $E_1 = 0.001 \text{ Mev}$, $E_{10} = 0.015 \text{ Mev}$, $E_{17} = 0.1 \text{ Mev}$, $E_{36} = 20 \text{ Mev}$.

На рис. 4 по горизонтали (дискретно) отложены атомные номера, а по вертикали — значения A_{ki} [cm^2/g]. Прокомментируем кратко этот рисунок. Первое, на что можно обратить внимание — это наличие «пилы» в трех диаграммах, соответствующих энергиям E_1 , E_{10} и E_{17} , то есть наличие «скачков» или «разрывов» в зависимости A_{ki} от атомного номера. Они вызваны изменением строения атомных оболочек у химических элементов при увеличении атомного номера и наличием скачков в зависимости $A_{ki}(E_k)$ при фиксированном атомном номере i для большинства химических элементов. Причины возникновения и последующего исчезновения этой «пилы» примерно при $E > 0.15 \text{ Mev}$ следуют из данных и графиков, приведенных в [8, 9]. Отметим также, что на первом графике (при $E_1 = 0.001 \text{ Mev}$) первый зубец «пилы» образован парой элементов $i = 10$ — неон и $i = 11$ — натрий. При этом коэффициент $A_{1,1}$ для водорода примерно в 1000 раз меньше, чем $A_{1,10}$, для неона и в 100 раз меньше, чем $A_{1,11}$, для натрия.

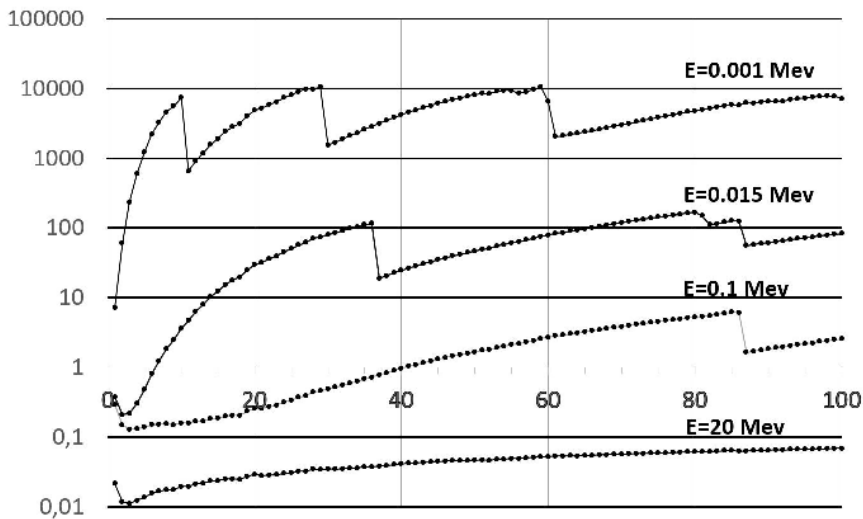


Рис. 4. Зависимость массового коэффициента ослабления $A_{ki} = \mu_{xik}/\rho_{xi} = \mu_{xi}(E_k)/\rho_{xi}$ (по вертикали) от атомного номера химического элемента (по горизонтали). Первый сверху график соответствует энергии $E_1 = 0.001 \text{ Mev}$, второй сверху — энергии $E_{10} = 0.015 \text{ Mev}$, третий — энергии $E_{17} = 0.1 \text{ Mev}$, четвертый — энергии $E_{36} = 20 \text{ Mev}$.

Второе, на что стоит обратить внимание — это маленькие значения коэффициентов A_{ki} для элементов с малым атомным номером, особенно при E_1 для $i=1$ (водород), $i=2$ (гелий), $i=3$ (литий), $i=4$ (бериллий). Для этих элементов $A_{1,i}$ меньше, чем для любого другого элемента. С увеличением энергии до E_{10} список таких элементов заметно увеличивается. Значит, сумма, стоящая в формуле (12), для таких групп химических элементов будет заметно меньше, чем для групп элементов с большими значениями i при одном и том же N . Это дает основание предполагать, что результаты, которые представлены в таблицах 1 и 2 для сравнительно «легких» элементов, наверное, будут улучшаться для групп элементов с большими значениями i при одном и том же N . В то же время однозначно гарантировать этого нельзя, поскольку мы не знаем, как могут расположиться в пространстве \mathcal{X} сравниваемые вещества и насколько «подвижной» окажется в \mathcal{X} соответствующая гиперплоскость при изменении энергии E_k .

Заключение

В работе дана оценка эффективности метода гиперплоскостей в задаче частичной идентификации неизвестного вещества на основе ранее полученных теоретических результатов и серии выполненных компьютерных расчетов для нескольких групп органических соединений для размерностей задачи $N=2,3,4,5$. Первая группа веществ включала в себя 40 углеводородов, образующих 780 различных пар. Еще две группы содержали по 23 вещества, которые образовывали 253 различных пары каждая. Одна пара веществ была рассмотрена для размерности $N=5$. В целом было рассмотрено 88 веществ и получены численные оценки критерия хорошей различимости для 1287 различных пар органических соединений.

В результате проведенных компьютерных расчетов было установлено следующее. При использовании диапазона энергий $0.001\text{MeV} - 20\text{MeV}$ любая из 1287 рассмотренных пар веществ является хорошо различимой, если суммарная относительная ошибка измерения потока зондирующего излучения a_S^* не превышает 9.726%. Это значит, что различие веществ в любой паре будет установлено при любом результате эксперимента по просвечиванию образца неизвестного вещества. В подавляющем большинстве случаев наилучшей энергией E для просвечивания была энергия $E_1 = 0.001\text{MeV}$

Показано, что рост нижней границы диапазона используемых энергий приводит к быстрому сокращению числа хорошо различимых пар при заданном a_S^* . Например, для группы углеводородов при $a_S^* = 1\%$ и нижней границе энергии 0.1MeV процент числа хорошо различимых пар сокращается до 42,6%.

На основе проведенного компьютерного анализа табличных данных радиационных характеристик всех химических элементов таблицы Д. И. Менделеева с атомными номерами от 1 до 100 дано объяснение эффекту быстрого сокращения числа хорошо различимых пар веществ при повышении нижней границы диапазона используемых энергий. Для диапазона энергий $0.001\text{MeV} - 20\text{MeV}$ построена серия графиков, поясняющих этот эффект для размерности задачи идентификации $N = 2, 10, 30, 100$.

В результате проведенной работы и выполненных компьютерных расчетов показана достаточно высокая эффективность использования метода гиперплоскостей в задаче идентификации для групп органических соединений при использовании небольших значений энергии нижней границы выбранного диапазона излучения. Дано теоретическое обоснование эффективности метода для других групп веществ и больших размерностей задачи.

Показано, что энергия, на которой достигаются наилучшие результаты решения задачи идентификации, в большинстве случаев совпадает с нижней границей используемого диапазона.

Список литературы

- [1] Osama Mhmood Hamed Ahmed, YuShou Song, Zhaoyang Xie, “Material Identification Approach Based on the Counting Technique and Beam Hardening Correction Under Industrial X-Ray Computed Tomography: a Simulation Study”, *Brazilian Journal of Physics*, **52**:26 (2022).
- [2] S. P. Osipov, V. A. Udod, Wang Yanzhao, “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] S. P. Osipov, S. V. Chakhlov, A. V. Batranin, O. S. Osipov, Trinh Van Bak, J. Kytmanov, “Theoretical study of a simplified implementation model of a dual-energy technique for computed tomography”, *NDT & E International*, **98** (2018), 63–69.
- [4] С. П. Осипов, А. К. Темник, С. В. Чахлов, “Влияние физических факторов на качество идентификации веществ объектов контроля высокоэнергетическим методом дуальных энергий”, *Дефектоскопия*, 2014, № 8, 69–77.
- [5] В. Г. Назаров, “Метод гиперплоскостей в задаче идентификации неизвестного вещества”, *Сиб. журн. индустр. математики*, **24**:3 (2021), 39–54.
- [6] В. Г. Назаров, “Задача частичной идентификации неизвестного вещества”, *Дальневосточный математический журнал*, **19**:1 (2019), 43–62.
- [7] В. Г. Назаров, “Оценка точности вычислений в задаче частичной идентификации вещества”, *Сиб. журн. индустр. математики*, **23**:3 (2020), 91–104.
- [8] 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. Gaithersburg. MD. (Preprint / NISTIR-5632. National Institute of Standards and Technology).”, 1995.
- [9] M. J. Berger, J. H. Hubbell, S. M. Seltzer, J. Chang, J. S. Coursey, R. Sukumar, D. S. Zucker, “XCOM: Photon Cross Section Database // Gaithersburg: National Institute of Standards and Technology”, 2005.
- [10] D. S. Anikonov, A. E. Kovtanyuk, I. V. Prokhorov, *Transport Equation and Tomography*, VSP, Utrecht-Boston, 2002.
- [11] В. Г. Назаров, “Некоторые оценки ошибок в задачах радиографии сплошной среды”, *Дальневосточный математический журнал*, **20**:1 (2020), 82–89.
- [12] А. И. Волков, И. М. Жарский, *Большой химический справочник*, Современная школа, Минск, 2005.
- [13] И. Л. Кнунянц (гл. ред.), *Химическая энциклопедия: В 5т*, Сов. энцикл., М., 1988.

Поступила в редакцию
25 февраля 2023 г.

Работа выполнена в рамках НИОКТР
№ АААА-А20-120120390006-0.

*Nazarov V. G.*¹ Evaluation of the effectiveness of the hyperplane method in the problem of partial identification of an unknown substances. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2023. V. 23. No 2. P. 222–239.

¹ Institute for Applied Mathematics, Far Eastern Branch, Russian Academy of Sciences

ABSTRACT

The problem of partial identification of a homogeneous medium of unknown chemical composition is investigated. The medium is subjected to repeated transillumination by X-ray fluxes collimated in energy and direction. According to the results of measuring the flux density of radiation entering and leaving the medium, it is necessary to establish the difference in the chemical composition of the medium from some in advance given substances. It is assumed that the measurements of radiation fluxes contain errors for which their maximum relative values are known. As a mathematical basis for the study the method of hyperplanes proposed earlier by the author is taken. The results of numerical calculations performed for problems of various dimensions and for a number of groups of specific chemical elements. Numerical estimates have been obtained for several groups of organic substances, under which any two substances will be successfully distinguished from each other by the results one single measurement experiment on transillumination. Using the hyperplane method in the identification problem for groups of organic substances showed enough high efficiency. As a result of computer calculations, it is shown that that any of the 1287 considered pairs of organic substances is well distinguishable if the total relative measurement error of the probing radiation flux does not exceed 9.726 %. The analysis of the dependence of the mass attenuation coefficients of radiation from the atomic number for all chemical elements of the periodic system has been carried out and conclusions about the behavior of the identification accuracy with an increase in the dimension of the problem were done. A justification is given that the hyperplane method will be effective in solving the problem of identification for other groups of chemical elements and identification accuracy does not get worse as the dimension of the problem increases.

Key words: *numerical simulation, continuum radiography, identification of the chemical composition of a substance, accuracy of calculations.*