

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

<http://semr.math.nsc.ru>

Том 14, стр. 821–837 (2017)
DOI 10.17377/semi.2017.14.069УДК 519.65
MSC 35Q20,78A40МЕТОД СИНГУЛЯРНОГО РАЗЛОЖЕНИЯ МАТРИЦЫ В
ЗАДАЧЕ НАХОЖДЕНИЯ ХИМИЧЕСКОГО СОСТАВА СРЕДЫ

В.Г. НАЗАРОВ

ABSTRACT. The problem of finding the chemical composition of a homogeneous medium by the method of multi-energy radiography is considered. The main attention is paid to the choice of optimal energy values of X-ray radiation and to derivation of accurate estimates of the perturbation of the solution of the system of equations for given perturbations of the right-hand side. For this purpose the method of Singular Value Decomposition of the matrix was used. Singular numbers and singular vectors corresponding to a number of groups of chemical elements, often encountered in practice, are calculated. Optimum values of X-ray radiation energy for these groups of elements are found. The results obtained has been compared with the case of overdetermined system solution. Several examples of the solution of the problem for media of different chemical composition have been constructed.

Keywords: radiation transfer equation, radiography of a continuous medium, finding the chemical composition of the medium, singular value decomposition.

1. ВВЕДЕНИЕ

Изучение структуры и химического состава среды методами, основанными на использовании проникающего (в частности рентгеновского) излучения, представляет как теоретический, так и большой прикладной интерес. Количество публикаций и особенно патентов, появившихся на эту тему в последние годы, достаточно велико. При этом авторы используют различные подходы к

NAZAROV, V.G., METHOD OF SINGULAR VALUE DECOMPOSITION AT THE PROBLEM OF DETERMINING THE CHEMICAL COMPOSITION OF A MEDIUM.

© 2017 Назаров В.Г.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского научного фонда (проект №14-11-00079).

Поступила 5 мая 2017 г., опубликована 18 августа 2017 г.

решению рассматриваемой задачи, которые могут заметно отличаться, в зависимости от целей, преследуемых авторами. В этой связи можно отметить работы [1-8]. Но, к сожалению, авторы часто не уделяют внимания вопросу выбора оптимальных значений энергии излучения, используемого для зондирования среды, и не дают никаких оценок погрешностей используемого ими метода. Данная работа направлена в первую очередь на изучение этих вопросов с использованием метода сингулярного разложения матрицы.

2. ПРЕДВАРИТЕЛЬНЫЕ ЗАМЕЧАНИЯ И ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Прежде чем перейти к математической постановке задачи сделаем ряд замечаний. В данной работе при изучении задачи нахождения химического состава среды для просвечивания материала мы предполагаем использовать потоки фотонов с энергиями 0.1 МэВ – 20 МэВ, коллимированные как по направлению, так и по энергии, поэтому для нас, в первую очередь, важна зависимость (линейного) коэффициента ослабления μ от энергии излучения E . Качественно эта зависимость сходна для большинства химических элементов и на промежутке энергии 1 кэВ – 20 МэВ характеризуется сначала уменьшением $\mu(E)$ с ростом энергии E (приблизительно до 10 МэВ) примерно на пять порядков, а затем сравнительно небольшим ростом $\mu(E)$ для всех элементов с атомными номерами больше 15. В качестве примера на рис.1 приведена зависимость массового коэффициента $\mu(E)/\rho$ для вольфрама.

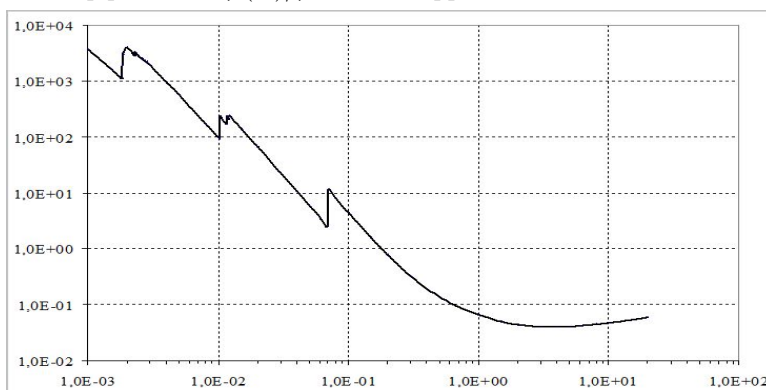


Рис.1. Зависимость $\mu(E)/\rho$ для вольфрама.

При изучении задачи мы используем таблицы [9], которые, среди прочего, содержат зависимости массовых коэффициентов ослабления $\mu(E)/\rho$ от энергии, представленные как сеточные функции для всех химических элементов от водорода до урана и еще для 48 веществ сложного состава, представляющих интерес для дозиметрии. Далее для наших целей мы будем пользоваться различными выборками значений энергий излучения из набора

$$(1) \quad 0.1 \text{ МэВ} = E_1 < E_2 < \dots E_{20} = 20 \text{ МэВ},$$

содержащего ровно двадцать величин. Ниже в таблице 1 приведен полный перечень этих энергий E_j с указанием порядкового номера энергии j . Более подробные данные о зависимости $\mu(E)/\rho$ на диапазоне энергий от 1 кэВ до 100 ГэВ можно получить на информационном ресурсе [10].

Таблица 1. Соответствие между номером энергии излучения j и значением энергии E_j (МэВ)

j	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
E_j (МэВ)	0.1	0.15	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.8	1	1.25
j	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20
E_j (МэВ)	1.5	2	3	4	5	6	8	10	15	20

Для формулировки математической модели изучаемой задачи введем следующие обозначения. Пусть исследуемый образец G_0 является однородным по химическому составу веществом X_0 , причем 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 , $1 \leq N \leq 20$, который нам известен. Образец G_0 имеет толщину l и подвергается облучению коллимированным потоком излучения, идущим вдоль некоторой фиксированной прямой (см. рис.2.). Пусть E_1, \dots, E_N – набор значений энергий, на которых поочередно происходит облучение G_0 и которые присутствуют в наборе энергий (1), $h_k = h(E_k)$ – 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 , $i = 1, \dots, N$, ρ_0 – плотность вещества X_0 , ρ_{xi} – плотности X_i , w_i – массовая доля элемента X_i , входящего в состав вещества X_0 . Химический состав вещества X_0 образца G_0 нам не известен и подлежит определению по результатам измерения входящих и выходящих из G_0 потоков излучения $h(E_k)$ и $H(E_k)$ для известных E_k .

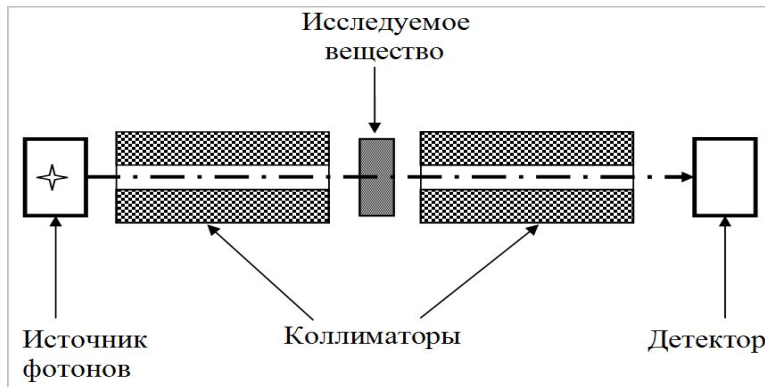


Рис.2. Схема проведения эксперимента.

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 и своей начальной энергии не потеряли.

С учетом сказанного, для каждого значения энергии E_k мы можем записать равенство $H_k = h_k \exp(-l\mu_{0k})$; $k = 1, \dots, N$, откуда $\ln(H_k/h_k) = -l\mu_{0k}$, или

$$(2) \quad -l\mu_{0k} = \ln(H_k/h_k).$$

Согласно [9], коэффициент ослабления μ_{0k} для вещества X_0 связан с коэффициентами ослабления входящих в его состав элементов X_1, \dots, X_N равенством

$$(3) \quad \mu_{0k} = \rho_0 \sum_{i=1}^N w_i \frac{\mu_{xik}}{\rho_{xi}}.$$

Подставляя это выражение в (2) получаем

$$(4) \quad \sum_{i=1}^N \frac{\mu_{xik}}{\rho_{xi}} \cdot (l\rho_0 w_i) = \ln \frac{h_k}{H_k}; \quad k = 1, \dots, N,$$

Массовые доли w_i элементов X_i , входящих в состав вещества X_0 по своему определению удовлетворяют соотношению

$$(5) \quad \sum_{i=1}^N w_i = 1,$$

и условиям

$$(6) \quad w_i \geq 0; \quad i = 1, \dots, N.$$

Итого, задача нахождения химического состава формулируется так:

Задача 1. Найти величины $l, \rho_0, w_i, i = 1, \dots, N$, удовлетворяющие уравнениям (4), (5) и неравенствам (6) при условии, что все остальные величины, входящие в (4) нам известны.

Таким образом, мы получили (нелинейную) систему уравнений (4), (5) для нахождения искомых величин. Перепишем (4) в виде $Ax = b$, тогда

$$(7) \quad \sum_{i=1}^N A_{ki} x_i = b_k; \quad k = 1, \dots, N,$$

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

Далее будем рассматривать (7) как систему линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) в которой A и b известны, а x – неизвестный вектор, $x^T = (l\rho_0 w_1, \dots, l\rho_0 w_N)$. Пусть A не вырождена и $B = \|B_{ij}\| = A^{-1}$, тогда для решения β системы (7) имеем: $\beta = Bb$, $\beta^T = (\beta_1, \dots, \beta_N)$ или

$$(8) \quad \beta_i = l\rho_0 w_i = \sum_{k=1}^N B_{ik} b_k; \quad i = 1, \dots, N.$$

С учетом (5) отсюда получим

$$(9) \quad \beta_0 = \sum_{i=1}^N \beta_i = \sum_{i=1}^N l\rho_0 w_i = l\rho_0 \sum_{i=1}^N w_i = l\rho_0,$$

Далее, из (8), (9) имеем

$$(10) \quad w_i = \frac{\beta_i}{l\rho_0} = \frac{\beta_i}{\beta_0}, \quad i = 1, \dots, N, \quad \rho_0 = \frac{\beta_0}{l}.$$

Если величина l нам заранее не известна, то сначала из равенств (8) мы находим все β_i , затем из (9) вычисляем β_0 , и, наконец из (10) находим все массовые доли w_i . При этом величины l и ρ_0 по отдельности остаются неизвестными, но из (9) нам известно их произведение $\beta_0 = l\rho_0$. Если же l заранее известна, то из (9) мы получим $\rho_0 = \beta_0/l$ и, тем самым, решение поставленной задачи химии будет полностью завершено.

3. ЗАДАЧА НАХОЖДЕНИЯ НАБОРА ЭНЕРГИЙ ДЛЯ ПРОСВЕЧИВАНИЯ

Проведенные исследования 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). При этом, однако, с одной стороны, величина максимально возможной ошибки решения системы (7) заметно возрастает с ростом числа N , а с другой, при заданном N и фиксированном наборе X_1, \dots, X_N существенно зависит от выбора набора энергий E_1, \dots, E_N и может при этом меняться на четыре, пять и более порядков. Для изучения вопроса о выборе наиболее подходящего для решения задачи химии семейства значений энергий вернемся к рассмотрению системы уравнений (7) и введем следующие обозначения.

Перепишем систему (7) в виде

$$(11) \quad Ax = b$$

и будем далее считать, что матрица A не вырождена. Пусть $b = b_T + \delta b$, где b_T - вектор "точных" значений правой части системы (7), т.е. таких значений $b_k = \ln(h_k/H_k)$, $k = 1, \dots, N$, которые мы имели бы в случае отсутствия ошибок измерения, δb - вектор возмущения, вызванный измерительными ошибками, $x = x_T + \delta x$, где x_T - точное, а x - возмущенное решение (11), так что $A(x_T + \delta x) = b_T + \delta b$, $Ax_T = b_T$, и $A(\delta x) = \delta b$. Тогда

$$(12) \quad \delta x = A^{-1}\delta b = VS^{-1}U^T(\delta b).$$

Пусть $\|\cdot\|$ - евклидова норма в \mathbb{R}^N . Исходя из сказанного, сформулируем вторую задачу, которой мы в основном будем заниматься в оставшейся части статьи.

Задача 2. Пусть задано число N , выбран некоторый набор химических элементов X_1, \dots, X_N , матрица A размера $N \times N$ не вырождена и известно, что норма возмущения правой части системы (11) удовлетворяет условию $\|\delta b\| = 1$. Требуется найти такое семейство значений энергий E_1, \dots, E_N , входящий в набор (1), для которого норма возмущения решения $\|\delta x\|$ системы (11) будет минимальной.

Для решения этой задачи мы будем использовать известный метод сингулярного разложения матрицы [12], суть которого сводится к следующему.

Пусть $\lambda_1, \dots, \lambda_N$ - собственные значения матрицы $G = A^T A$, а ν_1, \dots, ν_N - собственные вектора 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 ν_1, \dots, ν_N , а столбцы U - векторами $u_i = A\nu_i/\sqrt{\lambda_i}$. Тогда справедливо разложение

$$(13) \quad A = USV^T,$$

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 имеет место разложение

$$(14) \quad A^{-1} = VS^{-1}U^T,$$

причем, $S^{-1} = \text{diag}\{\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_N^{-1}\}$. Числа σ_i называются сингулярными числами матрицы A , а вектора ν_1, \dots, ν_N - сингулярными векторами матрицы A .

Далее для удобства будем считать, что $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$, тогда $\sigma_1^{-1} \geq \sigma_2^{-1} \geq \dots \geq \sigma_N^{-1}$. Из равенства $\delta x = A^{-1}\delta b$ и (14) получаем

$$(15) \quad \delta x^{(i)} = A^{-1}\delta b^{(i)} = VS^{-1}U^T(\delta b^{(i)}) = VS^{-1}U^T u_i = \sigma_i^{-1}v_i.$$

Отсюда несложно видеть, что если в качестве множества всевозможных возмущений правой части системы (11) взять единичную сферу $\Omega = \{\delta b \in \mathbb{R}^N : \|\delta b\| = 1\}$, то множество $A^{-1}(\Omega) \subset \mathbb{R}^N$, состоящее из всевозможных возмущений решения x_T будет эллипсоид, главные полуоси которого направлены вдоль сингулярных векторов v_1, \dots, v_N и по длине равны $\sigma_1^{-1}, \dots, \sigma_N^{-1}$.

Проиллюстрируем все сказанное парой конкретных расчетов, выполненных по вышеприведенным формулам. В первом случае просвечиваемый материал – морская вода. В данном случае мы полагаем, что $N = 2$, причем X_1 – это чистая вода H_2O , а X_2 – морская соль. Просвечивание производится на энергиях $E_1 = 0.1$ МэВ и $E_2 = 0.3$ МэВ. Ниже на рис.3 одновременно представлены два графика.

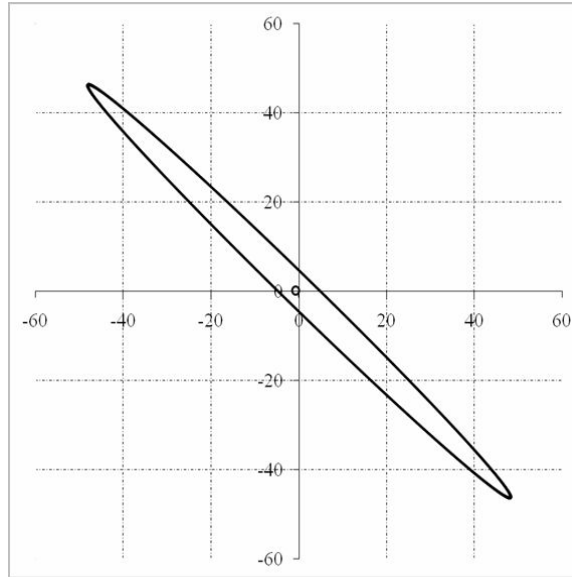


Рис.3. Графики множества $\Omega = \{\delta b \in \mathbb{R}^2 : \|\delta b\| = 1\}$ – окружность радиуса 1 и $A^{-1}(\Omega) \subset \mathbb{R}^2$ – эллипсоид для системы уравнений, соответствующей веществу – морская вода.

Первый график (очень маленькая окружность) – это множество $\Omega = \{\delta b \in \mathbb{R}^N : \|\delta b\| = 1\}$, а по осям откладываются компоненты вектора возмущения правой части δb . Второй график (эллипс) – это множество $A^{-1}(\Omega) \subset \mathbb{R}^N$, по осям откладываются компоненты вектора возмущения решения δx . Связь между точкой δb на окружности Ω и соответствующей ей точкой δx на эллипсе задается равенством (20). В результате расчетов было получено:

$$\lambda_1 = 2.2406 \cdot 10^{-4}, \quad \lambda_2 = 8.9657 \cdot 10^{-2},$$

$$\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = 1.4969 \cdot 10^{-2}, \quad \sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = 2.9943 \cdot 10^{-1}.$$

Матрицы A , V , U и S^{-1} имеют вид

$$A = \begin{pmatrix} 0.171 & 0.189 \\ 0.119 & 0.105 \end{pmatrix}, \quad V = \begin{pmatrix} 0.721 & 0.693 \\ -0.693 & 0.721 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} -0.527 & 0.850 \\ 0.850 & 0.527 \end{pmatrix};$$

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_1^{-1} & 0 \\ 0 & \sigma_2^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 66.81 & 0 \\ 0 & 3.340 \end{pmatrix}.$$

Таким образом, возмущение решения системы уравнений (11) всегда больше возмущения правой части.

Во втором случае просвечиваемый образец изготовлен из сплава "победит". В его состав входят кобальт (10%) и карбид вольфрама (90%). Здесь мы также полагаем, что $N=2$, X_1 – это кобальт, X_2 – карбид вольфрама, $E_1=0.1$ МэВ и $E_2=0.3$ МэВ. Аналогично предыдущему, на рис.4 одновременно представлены два графика.

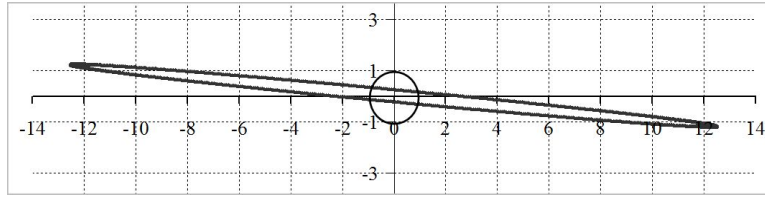


Рис.4. Графики множества $\Omega = \{\delta b \in \mathbb{R}^2 : \|\delta b\| = 1\}$ – окружность радиуса 1 и $A^{-1}(\Omega) \subset \mathbb{R}^2$ – эллипсоид для системы уравнений, соответствующей сплаву "победит".

В результате расчетов было получено: $\lambda_1 = 6.312 \cdot 10^{-3}$, $\lambda_2 = 17.69 \cdot 10^{-2}$, $\sigma_1 = \sqrt{\lambda_1} = 7.9448 \cdot 10^{-2}$, $\sigma_2 = \sqrt{\lambda_2} = 4.2059$.

Матрицы A , V , U и S^{-1} имеют вид

$$A = \begin{pmatrix} 0.395 & 4.175 \\ 0.109 & 0.310 \end{pmatrix}, V = \begin{pmatrix} 0.9954 & 0.0956 \\ -0.0956 & 0.9954 \end{pmatrix}, U = \begin{pmatrix} -0.0760 & 0.9971 \\ 0.9971 & 0.0760 \end{pmatrix};$$

$$S^{-1} = \begin{pmatrix} \sigma_1^{-1} & 0 \\ 0 & \sigma_2^{-1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12.59 & 0 \\ 0 & 0.2378 \end{pmatrix}.$$

Как и в первом случае, большая полуось эллипса возмущения решения намного больше малой полуоси, однако здесь есть и существенная разница. Теперь возмущение решения может оказаться как намного больше возмущения правой части, так и намного меньше. Кроме этого из формулы (15) видно, что наибольшее возмущение решения $\delta x^{(1)} = \sigma_1^{-1} \nu_1$ имеет место при $\delta b = u_1$, а направление вектора u_1 близко к направлению оси ординат, соответствующей измерению, проводимому при $E_2=0.3$ МэВ. Отсюда несложно видеть, что ошибки измерений на этой энергии вносят в известном смысле наибольший вклад в возмущение решения системы (11). Поэтому, можно порекомендовать исследователю тщательнее проводить измерения именно на этой энергии.

Как будет видно из дальнейшего, такие два вида возмущения решения (рис.3 и 4) являются наиболее типичными в задаче нахождения химического состава неизвестного вещества.

Обратимся к системе уравнений (11). Исходя из того, что коэффициенты $A_{ki} = \mu_{xik}/\rho_{xi} = \mu_{xi}(E_k)/\rho_{xi}$ матрицы A (а следовательно и все сингулярные числа $\sigma_1, \dots, \sigma_n$) зависят от выбираемого нами семейства энергий E_1, \dots, E_N , цель второй задачи можно переформулировать так: требуется найти такое семейство значений энергий E_1^*, \dots, E_N^* , входящий в набор (1) для которого минимальное собственное значение λ_{\min} (а с ним и $\sigma_{\min} = \sqrt{\lambda_{\min}}$) будет наибольшим. Для такого набора энергий E_1^*, \dots, E_N^* матрицу $A(E_1, \dots, E_N)$ можно считать наиболее подходящей для решения ранее сформулированной задачи химии, поскольку влияние измерительных ошибок на решение системы (11)

будет (в известном смысле) наименьшим. Не трудно видеть, что для нахождения набора E_1^*, \dots, E_N^* и соответствующего ему набора $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ нам достаточно провести поиск среди всех наборов E_1, \dots, E_N , каждый из которых удовлетворяет условию $E_1 < E_2 < \dots < E_N$. Общее количество таких наборов равно числу сочетаний $C_M^N = \frac{M!}{N!(M-N)!}$ из M элементов по N элементов. Далее M всегда равно 20 (см. (1) и табл.1), а N будет меняться в пределах от 2 до 10 в зависимости от выбранной группы химических элементов X_1, \dots, X_N .

4. ЧИСЛЕННЫЕ РАСЧЕТЫ

С использованием информационного ресурса [14] была написана компьютерная программа, которая для заданного N и набора элементов X_1, \dots, X_N вычисляла все собственные значения $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ матрицы $G = (A^T A)(E_1, \dots, E_N)$ для каждого набора энергий $E_1 < E_2 < \dots < E_N$, а затем перебором находила "наилучший" набор энергий $E_1^* < E_2^* < \dots < E_N^*$, так что при этом

$$(16) \quad \lambda_1^* = \lambda_1^*(X_1, X_2, \dots, X_N) = \max_{\{E_1 < E_2 < \dots < E_N\}} \{\lambda_1\}$$

Аналогичным образом также находились: число обусловленности $C_S(A)$ матрицы A в спектральной норме $C_S(A) = \|A\|_S \cdot \|A^{-1}\|_S$, где $\|A\|_S$ – спектральная норма матрицы A , которая определяется формулами [12]

$$(17) \quad \|A\|_S = \max_{\|x\|=1} \|Ax\| = \sqrt{\lambda_{\max}} = \sigma_{\max},$$

и число обусловленности $C(A) = \|A\|_1 \cdot \|A^{-1}\|_1$ матрицы A в норме

$$(18) \quad \|A\|_1 = \max_{j=1, \dots, N} \{|A_{1j}| + |A_{2j}| + \dots + |A_{Nj}|\},$$

При этом, для каждого из чисел $C_S(A)$ и $C(A)$ находился свой "наилучший" набор энергий, при котором они достигали своих минимальных значений $C_{S \min}$ и C_{\min} . Делалось это с целью выяснить будет ли "наилучший" набор энергий одним и тем же для чисел λ_1^* , $C_{S \min}$ и C_{\min} или нет.

Максимальное значение числа сочетаний $C_{20}^{10} = 184756$ и для этого случая процесс всех вычислений и поиска занимал около 20 секунд.

В первой серии численных экспериментов число N менялось от $N=2$ до $N=10$ и каждый раз увеличивалось на единицу, а начальный набор X_1, X_2 , состоявший из водорода и углерода, на каждом шаге пополнялся одним новым химическим элементом. Конечный набор элементов X_1, \dots, X_{10} формировался без каких-то особых намерений, но он содержал большую часть всех известных органических соединений, общее число которых в настоящее время согласно [15] превышает 10 миллионов. В частности, в набор X_1, \dots, X_{10} входят все химические элементы, входящие в состав многих взрывчатых, отравляющих и огнеопасных веществ, и в этом отношении приведенная ниже таблица 2 представляет практический интерес. Общее количество полученной в результате расчетов информации было весьма велико, поэтому в таблице 2 приводится лишь наиболее интересная часть результатов расчетов.

Таблица 2. Основные характеристики для некоторых групп химических элементов

Группа химических элементов X_1, \dots, X_N	Основные характеристики для данной группы элементов
$N = 2$; $1.H + 6.C$	$l_1 = 230.6$; $\lambda_1^* = 1.880 \cdot 10^{-5}$; $\mathbf{V}_B = (5, 20)$ $C_{S \min} = 18.77$; $\lambda_1 = 1.130 \cdot 10^{-5}$; $\mathbf{V}_B = (15, 20)$ $C_{\min} = 21.89$; $\lambda_1 = 1.130 \cdot 10^{-5}$; $\mathbf{V}_B = (15, 20)$
$N = 3$; $1.H + 6.C + 8.O$	$l_1 = 1514$; $\lambda_1^* = 4.365 \cdot 10^{-7}$; $\mathbf{V}_B = (1, 5, 20)$ $C_{S \min} = 657.5$; $\lambda_1 = 4.365 \cdot 10^{-7}$; $\mathbf{V}_B = (1, 5, 20)$ $C_{\min} = 682.5$; $\lambda_1 = 4.365 \cdot 10^{-7}$; $\mathbf{V}_B = (1, 5, 20)$
$N = 4$; $1.H + 6.C + 7.N + 8.O$	$l_1 = 1.965 \cdot 10^4$; $\lambda_1^* = 2.589 \cdot 10^{-9}$; $\mathbf{V}_B = (1, 3, 6, 13)$ $C_{S \min} = 1.105 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 2.583 \cdot 10^{-9}$; $\mathbf{V}_B = (1, 3, 6, 20)$ $C_{\min} = 1.123 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 1.800 \cdot 10^{-9}$; $\mathbf{V}_B = (2, 3, 6, 12)$
$N = 5$; $1.H + 6.C + 8.O + 9.F + 15.P$	$l_1 = 4.254 \cdot 10^4$; $\lambda_1^* = 5.526 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 3, 4, 5, 12)$ $C_{S \min} = 2.110 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 3.125 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (6, 8, 11, 12, 16)$ $C_{\min} = 1.800 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 1.102 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (2, 3, 9, 10, 12)$
$N = 6$; $1.H + 6.C + 7.N + 8.O + 9.F + 15.P$	$l_1 = 4.873 \cdot 10^4$; $\lambda_1^* = 4.212 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 2, 4, 5, 9, 12)$ $C_{S \min} = 2.945 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 2.650 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (5, 6, 9, 11, 12, 15)$ $C_{\min} = 2.443 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 5.123 \cdot 10^{-11}$; $\mathbf{V}_B = (5, 6, 9, 11, 13, 18)$
$N = 7$; $1.H + 6.C + 7.N + 8.O + 9.F + 15.P + 16.S$	$l_1 = 5.908 \cdot 10^4$; $\lambda_1^* = 2.865 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 3, 4, 9, 11, 12, 15)$ $C_{S \min} = 4.206 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 2.570 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (3, 4, 5, 8, 11, 12, 15)$ $C_{\min} = 4.069 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 1.081 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 2, 4, 9, 12, 16, 19)$
$N = 8$; $1.H + 6.C + 7.N + 8.O + 9.F + 15.P + 16.S + 17.Cl$	$l_1 = 5.707 \cdot 10^4$; $\lambda_1^* = 3.070 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 2, 3, 4, 9, 11, 12, 15)$ $C_{S \min} = 4.467 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 2.381 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (3, 4, 8, 9, 10, 11, 12, 20)$ $C_{\min} = 4.015 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 2.388 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (3, 4, 5, 8, 10, 11, 12, 17)$
$N = 9$; $1.H + 6.C + 7.N + 8.O + 9.F + 11.Na + 15.P + 16.S + 17.Cl$	$l_1 = 6.482 \cdot 10^4$; $\lambda_1^* = 2.380 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 12, 15)$ $C_{S \min} = 6.936 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 2.380 \cdot 10^{-10}$; $\mathbf{V}_B = (1, 2, 3, 4, 5, 6, 8, 12, 15)$ $C_{\min} = 6.635 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 6.868 \cdot 10^{-12}$; $\mathbf{V}_B = (6, 11, 13, 14, 15, 17, 18, 19, 20)$
$N = 10$; $1.H + 6.C + 7.N + 8.O + 9.F + 11.Na + 12.Mg + 15.P + 16.S + 17.Cl$	$l_1 = 1.083 \cdot 10^5$; $\lambda_1^* = 8.521 \cdot 10^{-11}$; $\mathbf{V}_B = (1, 2, 4, 5, 7, 9, 10, 11, 14, 15)$ $C_{S \min} = 8.970 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 4.202 \cdot 10^{-11}$; $\mathbf{V}_B = (7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 16, 18)$ $C_{\min} = 7.941 \cdot 10^4$; $\lambda_1 = 4.126 \cdot 10^{-11}$; $\mathbf{V}_B = (5, 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13, 16, 18)$

В первой колонке таблицы указаны различные группы (наборы) химических элементов X_1, \dots, X_N . Перед химической нотацией элемента стоит его атомный номер. Вторая колонка для каждой группы X_1, \dots, X_N состоит из трех строк.

В первой строке каждой колонки указаны: число $l_1 = (\lambda_1^*)^{-1/2}$, которое есть длина наибольшей полуоси эллипсоида $A^{-1}(\Omega)$, или, в соответствие с вышесказанным, это максимальное возмущение решения системы (11). Затем идут число λ_1^* , которое задается формулой (16), и целочисленный вектор \mathbf{V}_B , который показывает, при каких номерах энергии было достигнуто минимальное значение числа l_1 . Например, при $N=2$ запись $\mathbf{V}_B = (15, 20)$ означает, что наименьшее значение l_1 достигается на наборе энергий (E_{15}, E_{20}) , сами же значения энергий E_{15}, E_{20} и др. можно найти в таблице 1. Далее станет ясно, что такая запись удобнее, чем непосредственное указание значений энергий.

Во второй строке каждой колонки указаны: минимальное число обусловленности $C_{S \min}$ матрицы A , в норме (17), наименьшее собственное значение λ_1 (для матрицы G) и вектор \mathbf{V}_B , для которого было достигнуто $C_{S \min}$.

В третьей строке указаны: минимальное число обусловленности C_{\min} матрицы A , в норме (18), соответствующее наименьшее собственное значение λ_1 и вектор \mathbf{V}_B , для которого было достигнуто C_{\min} .

Прокомментируем полученные результаты. Наибольший интерес для нас, наверное, представляет число $l_1 = (\lambda_1^*)^{-1/2}$ – максимальное значение нормы возмущения решения системы (11) и соответствующий ей вектор энергии \mathbf{V}_B . Как видно, во всех случаях $l_1 > 1$.

Вторая строка таблицы при $N=2$ соответствует группе веществ, состоящих только из водорода и углерода. Это, в первую очередь природный газ, нефть и продукты их переработки на предприятиях нефтяной и газовой промышленности. Число различных веществ соответствующих $N=3$ и $N=4$, по-видимому, идет на многие сотни тысяч и уже поэтому таблица 2 интересна с практической точки зрения. Отметим также следующее:

1) При вычислении чисел l_1 , $C_S(A)$ и $C(A)$ для разных наборов энергии $E_1 < E_2 < \dots < E_N$ наблюдался большой разброс получаемых значений, так что перепад между минимальными и максимальными значениями для них составлял четыре, пять и более порядков. То же самое относится к разбросу собственных значений $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_N$ матрицы G для каждого набора энергий $E_1 < E_2 < \dots < E_N$.

2) Как правило, все три вектора \mathbf{V}_B , при которых достигаются минимальные значения l_1 , $C_S(A)$ и $C(A)$, различны внутри каждой группы элементов, но в некоторых случаях они совпадают, например при $N=3$. Кроме этого, при всех N число λ_1^* было не меньше чем числа λ_1 , соответствующие C_{\min} и $C_{S \min}$ (как и должно быть), и в некоторых случаях различия между ними были довольно большими, например при $N=9$ или при $N=5$.

3) При увеличении числа N вначале мы видим быстрый рост чисел l_1 , $C_{S \min}$ и C_{\min} , а затем он быстро замедляется.

4) Число случаев, когда матрица A оказывалась слишком плохой, так что невозможно было выполнить необходимые вычисления, было совсем небольшим и даже при больших N не превышало $0.001 \cdot C_{20}^N$.

5) При $N \leq 8$ все $\lambda_k^* < 1$, $k = 1, \dots, N$, так что возмущения решения всегда больше возмущений правой части системы (11). При $N = 9$ и $N = 10$ последнее (максимальное) собственное значение λ_N^* немного превышало 1 и в этих

случаях возмущения решения могли быть немного меньше возмущений правой части системы (11). Например, при $N=10$ для вектора $\mathbf{V}_B = (1, 2, 4, 5, 7, 9, 10, 11, 14, 15)$ было получено:

$$\begin{aligned} \lambda_1^* &= 8.52 \cdot 10^{-11}, & \lambda_2^* &= 1.01 \cdot 10^{-10}, & \lambda_3^* &= 1.64 \cdot 10^{-10}, & \lambda_4^* &= 5.89 \cdot 10^{-10}, \\ \lambda_5^* &= 1.58 \cdot 10^{-9}, & \lambda_6^* &= 5.13 \cdot 10^{-9}, & \lambda_7^* &= 1.05 \cdot 10^{-8}, & \lambda_8^* &= 1.22 \cdot 10^{-5}, \\ \lambda_9^* &= 3.12 \cdot 10^{-3}, & \lambda_{10}^* &= 1.08. \end{aligned}$$

Были выполнены ряд расчетов по нахождению решения системы (11) для некоторых конкретных веществ с использованием ранее полученных результатов. Во всех расчетах предполагалось, что толщина образца $l=1$, плотность потока входящего в образец излучения h_k всегда считалась точно известной и равной единице; $k = 1, \dots, N$. Выбиралась конкретная группа элементов X_1, \dots, X_N и вещество X_0 , состоящее из элементов X_1, \dots, X_N . В качестве набора значений энергий для просвечивания образца брался вышеупомянутый набор $E_1^* < E_2^* < \dots < E_N^*$ (для которого λ_1^* было максимальным). Задавались все необходимые величины ρ_{xi} , $\mu_{xi}(E_k^*)/\rho_{xi}$, μ_{0k} для $i, k = 1, \dots, N$ в основном с использованием источников [9,10,15,16], а затем вычислялись величины $H_k = H(k) = h_k \exp(-l\mu_{0k})$, $k = 1, \dots, N$.

Измерительные ошибки в правой части системы (11), которые возникают на практике, имитировались следующим упрощенным образом. Пусть H_k и H'_k – точное и измеренное с ошибкой выходящее излучение, $b_k = \ln(h_k/H_k)$, $b'_k = \ln(h_k/H'_k)$ – соответствующие им значения правых частей. Будем считать, что относительная ошибка $|H'_k - H_k|/H_k$ при измерении H'_k для каждого $k = 1, \dots, N$ не превышает величины a , такой что $0 \leq a < 1$, тогда $H_k(1 - a) \leq H'_k \leq H_k(1 + a)$, откуда получим:

$$(19) \quad |(\delta b)_k| = |b_{Tk} - b'_{Tk}| = \left| \ln \frac{h_k}{H_k} - \ln \frac{h_k}{H'_k} \right| = \left| \ln \frac{h_k}{H_k} \cdot \frac{H'_k}{h_k} \right| \leq |\ln(1 - a)|.$$

Примем величину $|\ln(1 - a)|$ за максимально возможное возмущение для каждого b_k , тогда для нормы возмущения $\|\delta b\|$ правой части системы (11) получим

$$(20) \quad \|\delta b\| = \left[\sum_{i=1}^N (\delta b)_k^2 \right]^{1/2} = \sqrt{N} |\ln(1 - a)|.$$

В итоге, вектор возмущения δb задавался в виде $\delta b = \sqrt{N} |\ln(1 - a)| \cdot y$, где $y \in \mathbb{R}^N$: $\|y\| = 1$. После этого сначала численно решалась возмущенная система $Ax = b_T + \delta b$, находились все величины $x_i = l\rho_0 w_i$, а затем по вышеизложенной схеме находились все искомые величины $\rho_0, w_i, i = 1, \dots, N$. Найденные таким образом с ошибками величины $\rho_0, w_i, i = 1, \dots, N$ сравнивались с точными значениями этих величин ρ_{T0}, w_i , для чего вычислялись относительные разницы искомым величин $rel(\rho_0) = (\rho_0 - \rho_{T0})/\rho_{T0}$, а для $w_i \neq 0$, величин $rel(w_i) = (w_i - w_{Ti})/w_{Ti}$, $i = 1, \dots, N$.

В таблице 3 приведены результаты численных экспериментов по нахождению химического состава некоторых веществ.

Таблица 3. Пример численного расчета для вещества зарин ($N = 5$) и сплава "победит" ($N = 2$)

$N = 5$, Зарин ($(CH_3)_3O_2PF$)	$a = 0; u_1$	$a = 10^{-7}; u_1$	$a = 10^{-7}; u_2$	$a = 10^{-7}; u_5$
$\rho_{T0} = 1.11$	$-1.49 \cdot 10^{-12}$	$-2.41 \cdot 10^{-4}$	$4.89 \cdot 10^{-4}$	$-6.17 \cdot 10^{-7}$
$(H)w_{T1} = 0.071386$	$5.36 \cdot 10^{-12}$	$-1.07 \cdot 10^{-3}$	$-7.96 \cdot 10^{-3}$	$-2.21 \cdot 10^{-6}$
$(C)w_{T2} = 0.28356$	$1.05 \cdot 10^{-11}$	$2.81 \cdot 10^{-3}$	$1.12 \cdot 10^{-2}$	$2.64 \cdot 10^{-7}$
$(O)w_{T3} = 0.25181$	$1.58 \cdot 10^{-11}$	$2.12 \cdot 10^{-2}$	$-6.82 \cdot 10^{-3}$	$2.00 \cdot 10^{-7}$
$(F)w_{T4} = 0.14950$	$-5.75 \cdot 10^{-11}$	$-4.45 \cdot 10^{-2}$	$-6.37 \cdot 10^{-3}$	$-4.59 \cdot 10^{-8}$
$(P)w_{T5} = 0.24374$	$5.22 \cdot 10^{-12}$	$2.38 \cdot 10^{-3}$	$2.78 \cdot 10^{-4}$	$1.60 \cdot 10^{-7}$
$N = 2$, Сплав "победит" $Co + WC$	$a = 0; u_1$	$a = 10^{-4}; u_1$	$a = 10^{-4}; u_2$	
$\rho_{T0} = 14.4$	$1.97 \cdot 10^{-15}$	$1.11 \cdot 10^{-4}$	$2.55 \cdot 10^{-6}$	
$(Co)w_{T1} = 0.1$	$1.61 \cdot 10^{-14}$	$1.12 \cdot 10^{-3}$	$-3.15 \cdot 10^{-7}$	
$(WC)w_{T2} = 0.9$	$-1.85 \cdot 10^{-15}$	$-1.24 \cdot 10^{-4}$	$3.50 \cdot 10^{-8}$	

Прокомментируем полученные результаты. Расчеты для зарина (формула $(CH_3)_3O_2PF$, соответствует $N = 5$ в таблице 2), проводились для вектора энергии $\mathbf{V}_B = (1, 3, 4, 5, 12)$. Собственные значения для указанного \mathbf{V}_B составили: $\lambda_1^* = 5.53 \cdot 10^{-10}$, $\lambda_2^* = 2.78 \cdot 10^{-9}$, $\lambda_3^* = 7.64 \cdot 10^{-8}$, $\lambda_4^* = 7.25 \cdot 10^{-4}$, $\lambda_5^* = 4.84 \cdot 10^{-1}$, а соответствующие длины полуосей эллипсоида возмущений (для $\|\delta b\| = 1$):

$$\sigma_1^{-1} = 4.25 \cdot 10^4, \sigma_2^{-1} = 1.90 \cdot 10^4, \sigma_3^{-1} = 3.62 \cdot 10^3, \sigma_4^{-1} = 3.71 \cdot 10^1, \sigma_5^{-1} = 1.44.$$

В первой колонке указаны точные значения плотности ρ_{T0} зарина и массовые доли $(H)w_{T1}, \dots, (P)w_{T5}$ всех химических элементов, входящих в его состав.

Во второй колонке для случая $a = 0$, (когда $\|\delta b\| = 0$) и $y = u_1$ (это "наихудшее" возмущение правой части, соответствующее первому собственному значению λ_1^*) приведены величины rel для каждой переменной. Видно, что все они близки к нулю.

В третьей колонке для случая $a = 10^{-7}$ из формулы (20) мы получим $\|\delta b\| = 2.236 \cdot 10^{-7}$. Опять же для $y = u_1$ приведены величины rel и все они стали намного больше, но, наверное, полученные результаты можно считать приемлемыми.

В четвертой колонке $a = 10^{-7}$, $y = u_2$; часть величин rel увеличилась, но часть заметно уменьшилась. При переходе к случаям $y = u_3$ и $y = u_4$ (которые не приводятся) наблюдалась тенденция к заметному снижению всех величин rel , что естественно связано с заметным увеличением соответствующих собственных значений.

Наконец, в пятой колонке $a = 10^{-7}$, $y = u_5$; все величины rel стали совсем маленькими. Это, несомненно, наилучшая ситуация, которая может случиться в случае проведения реального эксперимента.

Вторая группа расчетов относилась к сплаву "победит", все необходимые параметры для которого приводились раньше (см. рис. 4). Расчеты здесь проводились для случая $a = 0$, (когда $\|\delta b\| = 0$) и $y = u_1$ (это наихудшее возмущение правой части, соответствующее первому собственному значению λ_1^*), а также для случаев $a = 10^{-4}$ (когда $\|\delta b\| = 1.414 \cdot 10^{-4}$) при $y = u_1$ и $y = u_2$. Как видно из таблицы 3 все относительные ошибки rel здесь гораздо меньше, чем в случае расчетов для зарина.

5. СЛУЧАЙ ПЕРЕОПРЕДЕЛЕННОЙ СИСТЕМЫ УРАВНЕНИЙ

В ситуации, когда мы располагаем большим количеством измерений на различных уровнях энергий и число таких измерений превосходит число неизвестных N , естественно рассмотреть переопределенную систему уравнений

$$(21) \quad \hat{A}x = \hat{b},$$

которая получается путем добавления к системе (11) уравнений, соответствующих всем тем значениям энергий из набора (1), которых раньше в системе (11) не было. Здесь и далее $\hat{A} = \hat{A}(M, N)$ – прямоугольная матрица полного ранга, в которой M – число строк, N – число столбцов, x как и раньше неизвестный вектор с компонентами $x_i = l\rho_0 w_i$, $i = 1, \dots, N$, $\hat{b}_k = \ln(h_k/H_k)$, $k = 1, \dots, M$. В общем случае система (21) не совместна, однако для нее всегда определен вектор $x_{opt} \in \mathbb{R}^N$, называемый нормальным обобщенным решением СЛАУ [12], который обладает следующим свойством.

Пусть $\varphi : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ – функция невязки, определенная равенством $\varphi(x) = \|\hat{A}x - \hat{b}\|$, тогда x_{opt} есть вектор с минимальной нормой $\|x_{opt}\|$ среди всех векторов, на которых функция $\varphi(x)$ достигает своего минимума в \mathbb{R}^N .

Отметим также следующее. Пусть $\hat{A}^+(N, M)$ – матрица псевдообратная к $\hat{A}(M, N)$, тогда [12]

$$(22) \quad x_{opt} = \hat{A}^+(N, M)\hat{b}.$$

Кроме того, для $\hat{A}^+(N, M)$ справедливо разложение, аналогичное (14)

$$(23) \quad \hat{A}^+(N, M) = V(N, N)S^+(N, M)U^T(M, M),$$

где $V(N, N)$ и $U(M, M)$ – ортогональные матрицы, а $S^+(N, M)$ – прямоугольная диагональная матрица, на диагонали которой находятся числа $\sigma_1^{-1} = \lambda_1^{-1/2}, \dots, \sigma_N^{-1} = \lambda_N^{-1/2}$, где λ_i – собственные значения матрицы $\hat{G}(N, N) = A^T(N, M)A(M, N)$.

Если используемая математическая модель является точной и измерительные ошибки (ошибки правой части) равны нулю, то нормальное обобщенное решение x_{opt} совпадает с точным решением x_T системы (11). В противном случае, при наличии заметных измерительных ошибок, решение x_{opt} может оказаться более точным, чем решение системы (11).

Вместе с тем отметим, что на практике для нахождения решения x_{opt} может потребоваться гораздо больше исходных данных о просвечивании изучаемого образца (например, для анализа сплава "победит", о котором будет говориться дальше, нужно в 10 раз больше информации), что связано с дополнительными затратами времени, средств и определенными техническими проблемами. Например, при уменьшении расстояния между соседними уровнями энергии зондирования среды E_k и E_{k+1} требуются гарантии того, что соответствующее техническое устройство (рентгеновская трубка или ускоритель) может обеспечить достаточно хорошую колимацию луча по энергии, что может оказаться невыполнимым. Далее все эти проблемы мы будем игнорировать.

Для изучения вопроса о том, насколько заметно можно улучшить результаты в нашем случае, при решении задачи химии, была проделана работа по нахождению сингулярных чисел для переопределенной матрицы \hat{A} применительно к тем же группам химических элементов, что и ранее. Основные результаты этой работы приведены ниже в таблице 4.

Таблица 4. Основные характеристики для некоторых групп химических элементов для переопределенной системы

Группа химических элементов X_1, \dots, X_N	Основные характеристики для данной группы элементов
$N = 2;$ $1.H + 6.C$	$l_1 = 135.7;$ $C_S = 100.4;$ $\lambda_1 = 5.434 \cdot 10^{-5};$ $C = 1.207 \cdot 10^4$
$N = 3;$ $1.H + 6.C + 8.O$	$l_1 = 961.9;$ $C_S = 782.8;$ $\lambda_1 = 1.081 \cdot 10^{-6};$ $C = 8.136 \cdot 10^5$
$N = 4;$ $1.H + 6.C + 7.N +$ $8.O$	$l_1 = 1.515 \cdot 10^4$ $C_S = 1.335 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 4.354 \cdot 10^{-9};$ $C = 2.530 \cdot 10^8$
$N = 5;$ $1.H + 6.C + 8.O +$ $9.F + 15.P$	$l_1 = 3.070 \cdot 10^4$ $C_S = 2.900 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 1.061 \cdot 10^{-9};$ $C = 1.316 \cdot 10^9$
$N = 6;$ $1.H + 6.C + 7.N +$ $8.O + 9.F + 15.P$	$l_1 = 3.720 \cdot 10^4$ $C_S = 3.731 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 7.225 \cdot 10^{-10};$ $C = 1.607 \cdot 10^9$
$N = 7;$ $1.H + 6.C + 7.N +$ $8.O + 9.F + 15.P +$ $16.S$	$l_1 = 4.224 \cdot 10^4$ $C_S = 4.518 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 5.605 \cdot 10^{-10};$ $C = 2.972 \cdot 10^9$
$N = 8;$ $1.H + 6.C + 7.N +$ $8.O + 9.F + 15.P +$ $16.S + 17.Cl$	$l_1 = 4.399 \cdot 10^4$ $C_S = 4.973 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 5.167 \cdot 10^{-10};$ $C = 2.807 \cdot 10^9$
$N = 9;$ $1.H + 6.C + 7.N +$ $8.O + 9.F + 11.Na +$ $15.P + 16.S + 17.Cl$	$l_1 = 4.747 \cdot 10^4$ $C_S = 5.593 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 4.438 \cdot 10^{-10};$ $C = 4.627 \cdot 10^9$
$N = 10;$ $1.H + 6.C + 7.N +$ $8.O + 9.F + 11.Na +$ $12.Mg + 15.P +$ $16.S + 17.Cl$	$l_1 = 7.856 \cdot 10^4$ $C_S = 9.648 \cdot 10^4;$ $\lambda_1 = 1.620 \cdot 10^{-10};$ $C = 1.553 \cdot 10^{10}$

Сравним их коротко с данными таблицы 2. Поскольку просвечивание происходит на всех значениях энергии, вектор \mathbf{V}_B не указывается, а число λ_1 в каждой группе элементов осталось одно. По этой же причине указание на минимальность у чисел обусловленности теперь отсутствует.

Видно, что для каждой группы элементов число λ_1 в таблице 4 больше числа λ_1^* в таблице 2, и, соответственно, длина первой полуоси эллипсоида возмущения решения l_1 для каждой группы сократилась, причем, с ростом N степень этого сокращения, похоже, уменьшается. Тем не менее, в силу уменьшения l_1 во всех случаях максимально возможная норма возмущения решения уменьшилась, и мы можем утверждать, что решение x_{opt} переопределенной системы (21) в известном смысле лучше соответствующего решения системы (11) при

условии равенства норм возмущения правых частей. Числа обусловленности матриц C_S и C практически во всех случаях возрасли, причем это возрастание наиболее заметно в норме (18).

Для переопределенной системы (21) существует понятие параметра несовместности системы [12], который определяется формулой

$$(24) \quad \theta(\hat{A}, \hat{b}) = \frac{\|\hat{b} - \hat{A}x_{opt}\|}{\|\hat{A}x_{opt}\|}.$$

Мы увидим какие значения он принимает в конкретном случае, который мы дальше и рассмотрим.

В таблице 5 приведен пример расчетов для переопределенной системы для сплава "победит", который не вошел в таблицы 2 и 4, но рассматривался ранее. Этот сплав интересен в том отношении, что при переходе к переопределенной системе (21) матрица $V(N, N)$ в разложении (23) для "победита" изменилась незначительно и приняла вид

$$V = \begin{pmatrix} 0.9944 & 0.1054 \\ -0.1054 & 0.9944 \end{pmatrix},$$

а число σ_1^{-1} уменьшилось с $\sigma_1^{-1} = 12.59$ до $\sigma_1^{-1} = 4.669$, т.е. почти в три раза. Для лучшего сопоставления с данными таблицы 3 для "победита" норма возмущения правой части (21) была оставлена прежней (вектора возмущения правой части (21) u_1 и u_2 естественно изменились).

Таблица 5. Пример численного расчета для сплава "победит" ($N = 2$) для переопределенной системы

$N = 2$, Сплав "победит" $Co + WC$	$a = 0; u_1$	$a = 10^{-4}; u_1$	$a = 10^{-4}; u_2$
$\rho_{T0} = 14.4$	$-1.74 \cdot 10^{-14}$	$4.08 \cdot 10^{-5}$	$2.38 \cdot 10^{-6}$
$(Co)w_{T1} = 0.1$	$-1.82 \cdot 10^{-13}$	$4.15 \cdot 10^{-4}$	$-9.83 \cdot 10^{-8}$
$(WC)w_{T2} = 0.9$	$2.01 \cdot 10^{-14}$	$-4.61 \cdot 10^{-5}$	$1.09 \cdot 10^{-8}$

Сравнивая эти результаты с соответствующими данными таблицы 3 мы видим, что при $a = 0$ относительные ошибки вычислений немного возросли (повидимому в силу увеличения числа машинных операций), а при $a = 10^{-4}$ эти ошибки уменьшились примерно в 3 раза, что и можно было заранее ожидать.

Для "победита" были также найдены для случая $a = 10^{-4}$, $y = u_1$: $\hat{b} = 59.24$, $\hat{A}x_{opt} = 58.55$, $\theta(\hat{A}, \hat{b}) = 0.01285$. Для случая $a = 10^{-4}$, $y = u_2$ эти числа практически те же в силу малости возмущений.

Повышение точности в расчетах для вещества зарин при переходе к переопределенной системе было незначительным (это можно было ожидать из сравнения таблиц 2 и 4 для $N = 5$) и поэтому они не приводятся.

6. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Предложенный метод определения химического состава исследуемого образца G_0 может быть использован в тех случаях, когда список элементов X_1, \dots, X_N , предположительно входящих в состав неизвестного вещества X_0 ,

сравнительно невелик, т.е. число N достаточно мало. Было показано, что точность решения задачи химии существенно зависит от выбора того набора энергий излучения E_1, \dots, E_N на котором происходит просвечивание образца.

В то же время, при одновременном использовании данных просвечивания на всех доступных для исследователя энергиях E_1, \dots, E_M ; $M > N$, и последующем нахождении нормального обобщенного решения x_{opt} переопределенной системы точность результатов решения задачи химии может быть повышена (при одной и той же норме возмущения правых частей) даже по сравнению со случаем выбора оптимального набора энергий E_1^*, \dots, E_N^* .

Была найдена точная верхняя оценка для нормы $\|\delta x\|$ возмущения решения задачи химии при заданной норме $\|\delta b\| = 1$ возмущения правой части для ряда групп химических элементов.

Отметим также следующее. Мы ограничились рассмотрением случая, когда образец G_0 пространственно однороден по своему химическому составу. Можно было бы отказаться от этого предположения и рассмотреть, например, случай, когда вещество X_0 является жидкостью или газом, находящимся в контейнере, параметры которого (толщина стенок и материал, из которого контейнер сделан) нам известны. Это несколько усложнило бы уравнения, но не повлияло бы качественно на полученные результаты.

В рассмотренной задаче также считалось, что плотность ρ_0 образца G_0 нам неизвестна. Во многих случаях от этого предположения можно отказаться. Точность нахождения оставшихся неизвестных при этом должна возрасти.

REFERENCES

- [1] D.S. Anikonov, A.E. Kovtanyuk, I.V. Prokhorov, *Transport Equation and Tomography*, Utrecht-Boston: VSP, 2002. MR2010670
- [2] D.S. Anikonov, V.G. Nazarov, and I.V. Prokhorov, *Poorly Visible Media in X-ray Tomography*, Utrecht. Boston: VSP, 2002. Zbl 1051.65128
- [3] S.V. Naidenov, V.D. Ryzhykov, *Ob opredelenii khimicheskogo sostava metodom multienergeticheskoi radiografii*, Pisma v ZHTF, **9** (2002), 6–13.
- [4] S.P. Osipov, A.K. Temnik, S.V. Chakhlov, *Vliianie fizicheskikh faktorov na kachestvo identifikatsii veshchestv objektov kontrolya vysokoenergeticheskimi metodami dualnykh energii*, Defektoskopiia, **8** (2014), 69–77.
- [5] V.M. Fedoseev, *Rentgenovskiy sposob obnaruzheniia veshchestva po znacheniiu ego effektivnogo atomnogo nomera*, Patent RF №2095795, (1997), Bull. №16, 2002.06.10.
- [6] V.G. Nazarov, *X-Ray Tomographic Determination of the Chemical Composition and Structure of an Inhomogeneous Medium*, Computational Mathematics and Mathematical Physics, **8** (2007), 1358–1367.
- [7] A.E. Kovtanjuk, V.G. Nazarov, I.V. Prokhorov, I.P. Jarovenko, *Method to identify materials by radiographic re-irradiation*, Patent RF №2426102. Date of publ. 10.08.2011, Bull. №22.
- [8] V.G. Nazarov, *Determining the Chemical Composition of an Inhomogeneous Body by Multi-Energy Radiography*, Journal of Applied and Industrial Mathematics, **2** (2011), 1–12.
- [9] 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.
- [10] M.J. Berger, J.H. Hubbell, S.M. Seltzer, J. Chang, J.S. Coursey, R. Sukumar, D.S. Zucker, and K. Olsen, *NIST Standard Reference Database 8 (XGAM)*, – URL: <http://physics.nist.gov/PhysRefData/Elements/index.html>
- [11] P. Lancaster, *Theory of matrices*, Academic Press, New York – London, 1969. MR0245579

- [12] S.K. Godunov, A.G. Antonov, O.P. Kiriliuk, V.I. Kostin, *Garantirovannaya tochnost' resheniya sistem lineinykh uravnenii v evklidovykh prostranstvakh*, Novosibirsk: Nauka, 1988. MR0983887
- [13] F.R. Gantmakher, *Teoriia matrits*, M.: Nauka, 1988. MR0986246
- [14] Computing Center, M.V. Lomonosov Moscow State University – URL: <http://num-anal.srcc.msu.ru/>
- [15] I.L. Knuniants (Chief Editor) et.al., *Khimicheskaiia entsiklopediia: In 5 vol.*, M.: Sovetskaia entsiklopediia, 1988.
- [16] A.I. Volkov, I.M. Zharskii, *Bolshoy khimicheskii spravochnik*, Minsk, Sovremennaia shkola, 2005.

VASILII GENNADIEVICH NAZAROV
INSTITUTE OF APPLIED MATHEMATICS FEBRAS,
ST. RADIO, 7,
690041, VLADIVOSTOK, RUSSIA
E-mail address: naz@iam.dvo.ru