

Международный семинар «Математическая, статистическая и компьютерная поддержка качества измерений»

С 28 по 31 мая 2018 г. в Санкт-Петербурге при непосредственной организации ВНИИМ им. Д. И. Менделеева состоялся седьмой международный семинар «Математическая, статистическая и компьютерная поддержка качества измерений». Семинар проводится с 2000 г. под эгидой Евро-Азиатского сотрудничества государственных метрологических учреждений (КОOMET). Подходы и алгоритмы обработки данных, обсуждаемые на семинарах, внедрены в ряде рекомендаций КОOMET.

Основной задачей семинара является развитие подходов и методов оценивания результатов измерений в метрологии и других прикладных областях. К кругу вопросов, рассматриваемых на семинарах, следует отнести: методологические аспекты применения теоретико-вероятностных методов; использование Байесовского подхода, методов регрессионного анализа, статистических методов планирования эксперимента и принятия решений. Объектами применения математического аппарата являются, прежде всего, задачи эталонных измерений (сличения и калибровка эталонов), межлабораторных сличений, измерений при контроле и принятии решений (идентификация, распознавание).

Сегодня одним из стимулов развития теоретической метрологии является расширение понятий «измеряемая величина» и «измерение». Разработанные в метрологии методологические подходы, в частности выражение и оценивание качества, точности и метрологической прослеживаемости результатов измерений, распространяются на результаты измерений в химии, медицине и биологии. В рамках семинара впервые были проведены секции по использованию методов интервального анализа и метрологии в медицине. Традиционно в работе семинара приняли участие специалисты национальных метрологических институтов и вузов. Предлагаем вниманию читателей ряд статей, посвящённых методам интервального анализа для обработки результатов измерений.

DOI: 10.32446/0368-1025it.2019-2-6-12

УДК 519.612

Применение интервального подхода для спектрального анализа. Исследование разрешимости задачи с использованием распознающего функционала

А. Н. Баженов^{1,2}, П. А. Затылкин¹

¹Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, Институт прикладной математики и механики, Санкт-Петербург, Россия, e-mail: bazhenov_an@spbstu.ru

²Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе, Санкт-Петербург, Россия

Рассмотрено применение интервального анализа в линейной постановке (линейная задача о допусках) к конкретной задаче спектрального анализа. Основная методическая цель работы – продемонстрировать применение распознающего функционала как метода исследования. Изучены способ интервализации правой части интервальной системы линейных алгебраических уравнений (ИСЛАУ) без привлечения моделей формы фона под пиком, а также вид объединённых множеств решений ИСЛАУ для рассматриваемой задачи. Исследована разрешимость ИСЛАУ по знаку распознающего функционала. Показано, что в исходной постановке система неразрешима. Рассмотрены способы достижения разрешимости за счёт ослабления допусков правой части системы и модификации матрицы и обсуждены результаты использования обоих способов.

Ключевые слова: интервальный анализ, переопределённые системы уравнений, линейная задача о допусках, распознающий функционал, интервальная система линейных алгебраических уравнений, спектральный анализ.

В процессе измерений, связанных с регистрацией излучения различной природы (атомный эмиссионный анализ, рентген-флуоресцентный) или с масс-спектрометрическим анализом необходимо регистрировать спектры органических веществ. При этом возникают ситуации, когда регистрируется не одна компонента данного элемента или молекулы, а не-

сколько. В такой ситуации желательно использовать информацию обо всех регистрируемых компонентах анализируемого вещества (далее – аналита). Во многих случаях сигнал компонент слабой интенсивности (минорных компонент) служит для качественной оценки присутствия искомого аналита и его идентификации. При этом количественный анализ проводится

по «сильной» мажорной компоненте. Нередко возникает ситуация, когда сходные по строению объекты (атомы, молекулы) дают близкие, а в пределе недостаточного разрешения прибора – совпадающие сигналы мажорных компонент. В таком случае необходимо применять количественную информацию от минорных компонент. При этом нельзя полностью игнорировать мажорные компоненты, поскольку их присутствие подтверждает факт идентификации аналита и показывает верхний предел его концентрации.

При нахождении концентрации аналита с использованием сигналов всех компонент получают переопределённую систему уравнений относительно неизвестных концентраций компонент аналитов. Решение таких задач часто осуществляется методом наименьших квадратов. Применение квадратичных функционалов имеет недостатки, например, нечувствительность к знаку отклонения решения от истинного значения.

Альтернативным является подход к регуляризации с сохранением первого порядка компонент в выражениях для оценивающего функционала. Примером такого подхода является метод распознающего функционала для доказательного определения разрешимости задачи о линейных допусках [1]. Этот метод построен на аппарате интервального анализа. С применением метода распознающего функционала исследуют объекты, для которых предполагается существование минимального и максимального значений без знания характера распределения вероятности между этими пределами. В [1] обобщены идеи регуляризации Лаврентьева [2] и показано, что при интервальном расширении матрицы исходной системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) линейным поисковым функционалом можно получить доказательную оценку разрешимости системы, а также решение этой системы (если она разрешима) или наилучшее по метрике псевдорешение. Знак распознающего функционала является признаком разрешимости системы.

Математическая постановка задачи. Спектральный анализ – нахождение состава (атомы, молекулы) по измерениям излучения смеси объектов. Рассмотрим пример рентгеновского спектрального анализа по характеристическим линиям. При облучении смеси веществ жёстким рентгеновским излучением с внутренних оболочек атомов выбиваются электроны. На освободившиеся вакансии атомы захватывают электроны – возникает так называемое характеристическое рентгеновское излучение. Для каждого элемента существуют характерные наборы спектральных линий (K-, L-, M-серии). Расшифровка спектра смеси неизвестного состава проводится с использованием таблиц спектральных линий. Строение электронных оболочек атомов имеет закономерности, поэтому наборы спектральных линий сходны для элементов в одинаковых столбцах Периодической системы элементов Менделеева. Математически определение неизвестных интенсивностей (расшифровку спектра) можно представить как решение СЛАУ

$$Ax=b, \quad (1)$$

где A – матрица, характеризующая прибор, с конкретным набором каналов регистрации (длины волн фотонов или

энергии атомных переходов); $x=[x_1, x_2, \dots, x_n]$ – неизвестные концентрации элементов 1, 2, ..., n ; b – зарегистрированный прибором сигнал.

Рассмотрим структуру матрицы A . В столбцах располагаются относительные интенсивности для характеристических линий конкретных элементов:

$$A=\begin{pmatrix} a_{11} & \dots & \dots \\ a_{12} & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{pmatrix} \leftarrow \begin{Bmatrix} E_1 \\ E_2 \\ \dots \end{Bmatrix}, \quad (2)$$

где E_1, E_2 – энергии характеристических линий аналита.

При измерениях обычно регистрируют достаточно широкий диапазон энергий (длин волн), в который попадает одна или несколько спектральных линий элементов. В этом случае в строках матрицы находятся теоретические значения интенсивностей спектральных линий K-, L- и других серий соответствующих длин волн. Энергии характеристических линий являются справочными данными с высокой степенью достоверности, а интенсивности конкретных линий – величинами гораздо более низкой достоверности.

Применительно к регистрации излучения конкретным прибором матрицу A необходимо умножить на матрицу, характеризующую прибор. Для определения характеристической матрицы прибор калибруют. Для простоты изложения пока будем считать эту матрицу единичной. Для наглядности изложения далее будем полагать, что неизвестными являются концентрации двух элементов, т. е. $x=[x_1, x_2]$.

Правую часть СЛАУ (1) образуют величины, полученные из измеренных спектров. Детали формирования вектора b будут рассмотрены ниже. Общая методология постановки задачи и терминология взяты из [3] в части постановки линейной задачи о допусках и рассмотрения различных типов множеств решений с использованием кванторного формализма.

Пусть имеем интервальную систему линейных алгебраических уравнений (ИСЛАУ)

$$A \cdot x = b \quad (3)$$

с интервальной матрицей $A=a_{ij}$ и вектором $b=b_i$ – это формальная запись, обозначающая семейство точечных линейных систем $Ax=b$ той же структуры с $A \subseteq A, b \subseteq b$. Во многих практических ситуациях имеет смысл объединять в единую совокупность решения каждой системы линейных алгебраических уравнений $A \cdot x = b$, матрица которой взята из интервальной матрицы A , а правая часть b – из b . Таким образом получается так называемое объединённое множество решений (united solution set):

$$\Xi_{\text{uni}}(A, b) = \{x \in \mathbb{R}^n | (\exists A \in A)(\exists b \in b)(Ax = b)\}. \quad (4)$$

Это наиболее простое и естественное понимание «решения» ИСЛАУ.

Сильному согласованию параметров и данных соответствует так называемое допусковое множество решений ИСПЛАУ – tolerable solution set. Это множество решений всевозможных точечных систем $Ax=b$, для которых произведение Ax при любых $A \in \mathbf{A}$ попадает в интервалы правых частей b :

$$\Xi_{\text{tol}}(A, b) := \{x \in \mathbb{R}^n | (\forall A \in \mathbf{A})(\exists b \in \mathbf{b})(Ax = b)\}. \quad (5)$$

Допусковое множество решений может оказаться пустым, если интервалы правой части слишком узки в сравнении с интервалами элементов матрицы:

$$\Xi_{\text{tol}}(\mathbf{A}, \mathbf{b}) \subseteq \Xi_{\text{uni}}(\mathbf{A}, \mathbf{b}),$$

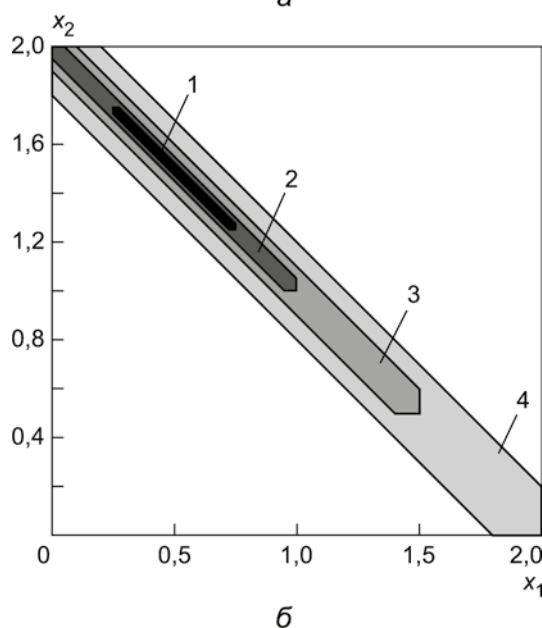
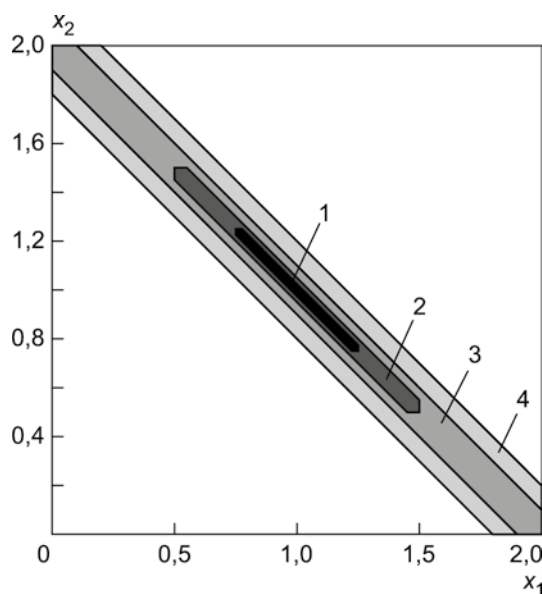


Рис. 1. Объединённое множество решений для случая неразрешимых сильных компонент бинарной смеси при равных (а) и неравных (б) концентрациях компонент анализируемой смеси для четырёх брусков правой части разной ширины: 0,025 (1); 0,05 (2); 0,1 (3); 0,2 (4)

т. е. допусковое множество решений всегда является подмножеством объединённого множества решений. В терминах задачи восстановления зависимостей это означает, что если имеет место сильное согласование параметров и данных, то тогда тем более справедливо обычное согласование.

Рассмотрим модельную ситуацию. Пусть минорные спектральные линии в 10 раз слабее перекрывающихся мажорных, а интенсивность компонент одинакова. Тогда СЛАУ (1) имеет вид

$$A = \begin{pmatrix} 0,1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 0 & 0,1 \end{pmatrix}, b = \begin{pmatrix} 0,1 \\ 2 \\ 0,1 \end{pmatrix}. \quad (6)$$

Вид объединённого множества решений ИСПЛАУ (4) представлен на рис. 1, а для четырёх случаев ширины (брусков) компонент векторов – разности верхней и нижней границы правой части СЛАУ (6) разной ширины: от 0,025 до 0,2 [4]. Для построения множеств использовались функции EqnWeak2D (объединённое множество решений) и EqnTol2D (допусковое множество решений) пакета int2lind [5]. Область объединённого множества решений вытянута вдоль прямой $x_1 + x_2 = 2$, симметрична относительно переменных x_1, x_2 , но не имеет чётко выраженной локализации. Такая форма соответствует тому, что сингулярные числа матрицы отличаются в десятки раз. Если концентрации компонент не равны, то расположение объединённого множества утрачивает симметрию и перемещается вдоль прямой $x_1 + x_2 = 2$ (см. рис. 1, б).

Исследование разрешимости ИСПЛАУ методом распознающего функционала. Рассмотрим пример из области физики полупроводников [6]. Элементный состав образца определялся на сканирующем электронном микроскопе (СЭМ) FEI Quanta 200 с рентгеноспектральным Si(Li) микроанализатором (PCMA) марки EDAX. Расчётная стехиометрическая формула образца $\text{Mg}_3\text{Ge}_2\text{O}_5(\text{OH})_4$ (гидрогерманат магния). Требуется определить относительные концентрации Mg и Ge в подложке путём регистрации характеристического рентгеновского излучения. Окончательный состав осаждённого вещества неизвестен, поэтому нахождение концентрации элементов обязательно, поскольку изменение расчётного соотношения Mg и Ge может повлиять на фазовый состав и морфологию образца.

Относительные интенсивности линий излучения указаны в справочных таблицах [7]. На рис. 2 показан спектр, полученный с использованием методики EDX (Energy-dispersive X-ray spectroscopy). Обсудим применение интервального анализа для совместного определения относительных концентраций интересующих элементов. Запишем матрицу СЛАУ (2) в виде

$$A = \begin{pmatrix} 111 & 0 \\ 60 & 0 \\ 0 & 150 \\ 51 & 0 \\ 1000 & 0 \\ 6 & 0 \\ 60 & 0 \\ \text{Ge} & \text{Mg} \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} 1188 \\ 1218 \\ 1254 \\ 9855 \\ 9886 \\ 10978 \\ 10982 \\ E, \text{ эВ} \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Из рис. 2 следует, что спектральные линии с энергиями 1188 эВ (Ge $L\alpha_{12}$), 1218 эВ (Ge $L\beta$), 1253 эВ (Mg $K\alpha_{12}$) неразрешимы и регистрируются как один пик (см. рис. 2, пик LE). Для расчётов объединим их в группу низкоэнергетических Low Energy (LE). Подобным образом поступим с высокоэнергетическими спектральными линиями High Energy (группы HE 1, 2). В матрице неразрешимые спектральные линии объединим построчно по группам: LE – строки 1–3; HE1, HE2 – строки 4, 5 и 6, 7 соответственно. Получим матрицу (2) СЛАУ в виде

$$A(XRF) = \begin{pmatrix} 176 & 150 \\ 151 & 0 \\ 66 & 0 \end{pmatrix} \leftarrow \begin{cases} LE \\ HE1 \\ HE2 \end{cases} \quad (8)$$

Все дальнейшие вычисления будут производиться с матрицей $A(XRF)$ (XRF – X-ray fluorescence). Окончательный шаг построения СЛАУ – вычисление её правой части. Аналогично объединению строк матрицы объединим данные построчно в интервалах LE, HE1, HE2. При этом в правой части в значениях данных необходимо учесть влияние фона. Фоновое излучение обусловлено различными процессами в приборе, имеющими сложную физическую природу. Учёт фона – важная часть работы по корректному построению правой части СЛАУ. Фон в области спектральной линии неизвестен. Если нет априорной информация о виде спектра фона, корректно применить безмодельный подход. Выберем область (окно) пика и найдём в нем сумму значений сигнала. Из рис. 2 следует, что фон слева и справа от пика различный, поэтому вычислим его в окнах, равных ширине окна пика, и будем считать фон интервальной величиной. Таким образом, справедливо равенство

$$b(XRF) = S - BG, \quad (9)$$

где S – отсчёты детектора в области пика; BG – фон в интервальном представлении,

$$BG = [\underline{BG}, \overline{BG}]. \quad (10)$$

Верхнее и нижнее подчеркивание в формуле (10) означает традиционное взятие минимума и максимума множества. Поскольку вычитание фона проводится в интервальной арифметике, то сигнал также становится интервальной величиной. ИСЛАУ (3) запишем как

$$A(XRF) \cdot x = b(XRF). \quad (11)$$

Таким образом, подготовительная часть постановки задачи закончена.

Исследование разрешимости ИСЛАУ в исходной постановке. Согласно общей методике исследования [2] исследуем разрешимость системы. Для этого из различных типов множеств решений выбираем самое узкое – допустовое множество. В терминах кванторного формализма это АЕ-множества (для любого значения бруса правой части в допустовом множестве найдется представитель, доставляющий значение в пределах данного бруса). На множестве предполагаемых решений (обычно это интервальная оболочка объединённого множества, вычисленная любым методом, например Гаусс-

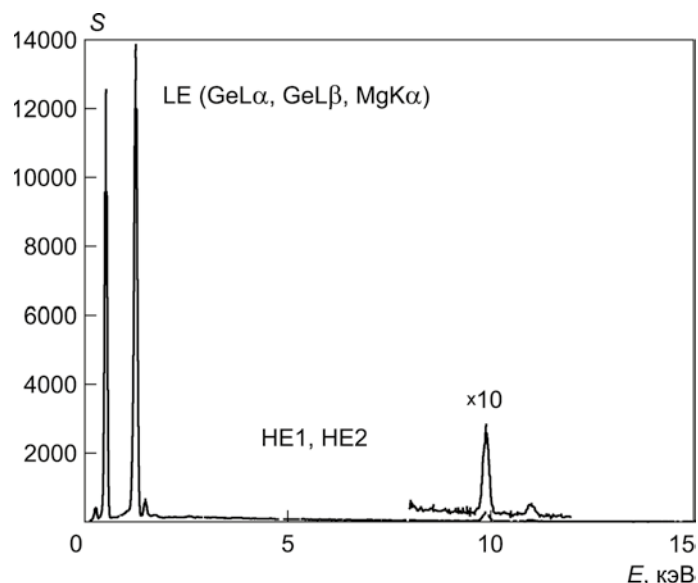


Рис. 2. Пример спектра LE для случая неразрешимых сильных компонент бинарной смеси 1188 эВ (Ge $L\alpha_{12}$), 1218 эВ (Ge $L\beta$), 1253 эВ (Mg $K\alpha_{12}$); увеличение по вертикали в 10 раз для частей спектра HE1 – 9855 эВ (Ge $K\alpha_2$) и 9886 эВ (Ge $K\alpha_1$) и HE2 – 10978 эВ (Ge $K\beta_3$) и 10982 эВ (Ge $K\beta_1$). По оси абсцисс отложена энергия квантов, по оси ординат – количество S отсчётов детектора

са–Зайделя, Кравчика и др.) вводится функция $Tol(x, A, b)$, с интервальными параметрами – матрицей и правой частью ИСЛАУ (3):

$$Tol(x, A, b) = \min_{1 \leq i \leq m} \left\{ radb_i - \left| midb_i - \sum_{j=1}^n a_{ij} x_j \right| \right\}, \quad (12)$$

где $radb_i$, $midb_i$ – соответственно радиусы и середины брусков правых частей; $i=1, 2, \dots, n$ – номер уравнения ИСЛАУ (11); в фигурных скобках покомпонентно вычисляются отклонения модулей отклонений от середины бруса с радиусами брусков компонент.

Для случая точечных данных максимизация распознающего функционала равносильна минимизации чебышёвской нормы невязки решения:

$$\max Tol(x) = \max_{x \in \mathbb{R}^n} \|(-Ax - b)\|_{\infty} = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|(Ax - b)\|_{\infty}. \quad (13)$$

В работе [3] приведено доказательство того, что принадлежность аргумента x допустовому множеству $\mathbb{R}^n$ равносильно неотрицательности функционала

$$Tol(x, A, b) \geq 0. \quad (14)$$

Факт положительности выражения (14) соответствует тому, что все отклонения от средних правых частей находятся в пределах радиусов. Тем самым все условия постановки линейной допустовой задачи удовлетворены. Также в [3] доказано, что функционал $Tol(x)$ вогнутый и достигает конечного максимума на всём пространстве $\mathbb{R}^n$. Эти факты обосновыва-

ют применение $Tol(x)$ для установления разрешимости к исследованию ИСЛАУ.

В качестве первого шага сделаем матрицу интервальной. Поскольку точность табличных данных неизвестна, положим её в качестве нижней оценки грубости этих данных, равной 10 %. Матрица СЛАУ (8) трансформируется к виду

$$A(XRF) \rightarrow A(XRF) = \begin{bmatrix} [154,188] & [135,165] \\ [136,166] & [0,0] \\ [65,79] & [0,0] \end{bmatrix}. \quad (15)$$

Разрешимость исследуем с помощью функции Tolsolvtу [8]. Функция Tolsolvtу возвращает величину разрешающего функционала $\max Tol$. Положительность этого функционала соответствует разрешимости ИСЛАУ (11). Также возвращаются $\max Arg$ (наиболее «верное» решение, даже при отсутствии разрешимости) и Env s (значения образующих распознающего функционала в точке его максимума).

Для конкретного случая имеем значение максимума (12): $\max Tol = -12072 \leq 0$.

В соответствии с признаком (13) ИСЛАУ (3) с матрицей $A(XFR)$ (15) неразрешима, допустовое множество решений пусто.

Причин неразрешимости системы может быть множество. Среди них и недостоверность данных, и некорректность матрицы. Есть несколько способов достичь разрешимости системы. Наиболее принципиальный и сложный подход – исследование способа построения матрицы с учётом особенностей измерений.

Коррекция правой части ИСЛАУ для достижения разрешимости. В рамках настоящей работы неполноту информации об ИСЛАУ можно обозначить как причину её неразрешимости. Достоверно неизвестно, насколько соотносятся измеренные величины с табличными значениями относительных интенсивностей. Ввиду того, что полной информации об условиях получения табличных значений нет, предпочтительны безмодельные способы коррекции задачи.

Наиболее простой способ достижения разрешимости – ослабление ограничения (расширение допуска) в правой части ИСЛАУ [3]. Эта операция увеличивает значение $Tol(x)$ и позволяет достичь разрешимости за счёт ослабления требований к точности решения. Обоснование этого факта следующее. Величины $b=b_i$ входят слагаемыми во все выражения для вычисления окончательного значения функционала. Если обозначить вектор «расширения» с «оператором расширения» $[-1; 1]$ как

$$e = ([-1; 1], [-1; 1], \dots, [-1; 1])^T, \quad (16)$$

Вектор правой части ИСЛАУ (11)

Номер уравнения ИСЛАУ (11)	Исходная ИСЛАУ	Модифицированная ИСЛАУ
1	[1,2475; 1,2566]	[1,2464; 1,3777]
2	[0,0408; 0,0435]	[0,0055; 0,0789]
3	[0,0055; 0,0075]	[-0,0198; 0,0329]

то для системы $Ax = b + Ce$ с уширенной правой частью $b_i + C$, $i=1, 2, \dots, m$, максимальное значение разрешающего функционала определится как

$$\max_x Tol(x, A, b + Ce) = \max_x Tol(x, A, b) + C. \quad (17)$$

Ширины различных компонент различны, поэтому более эффективно увеличивать их по-разному. Технически метод реализуется следующим образом. К правой части добавляются величины, «расширенные» во все стороны и пропорциональные некоторым весам v_i :

$$b_i + K v_i [-1; 1], \quad (18)$$

где b_i – исходные значения компонент правых частей ИСЛАУ; v_i – индивидуальные веса для разных компонент; K – общий множитель.

Если умножить на коэффициент $K=27$ радиусы ширин компонент в правой части уравнения (3), получим максимальное значение $\max Tol = 37,5$. Таким образом, модифицированная ИСЛАУ разрешима.

Оценим полученный результат. Ввиду того, что для достижения разрешимости использовалась модификация правой части, сведём в таблицу информацию о векторах данных. Можно проследить, что расширенный вектор правой части для минорных компонент расширился в разы. Для самой слабой компоненты нижняя граница перестала быть положительной. Непустота решения достигнута за счёт существенного огрубления задачи. Таким образом, решение задачи в данной постановке достижимо только в случае крайнего уменьшения точности, что делает такое решение малосодержательным.

Возможной и наиболее вероятной причиной такой ситуации при достаточно «аккуратных» данных может быть неудовлетворительная модель: при построении матрицы не учтена различная чувствительность прибора к разным регистрируемым энергиям. Если принять в качестве гипотезы дискриминацию данных при регистрации высоких энергий, то ситуация становится объяснима. В целом, в данном случае исследование разрешимости показывает неудовлетворительность или данных, или модели и служит отправной точкой для получения решения ИСЛАУ (11).

Коррекция матрицы ИСЛАУ для достижения разрешимости. На основании полученных данных исследуем вопрос, можно ли достичь разрешимости ИСЛАУ (11) при её модификации. Выше показано, что попытка решения этой задачи за счёт ослабления требований к правой части ИСЛАУ (11) приводит к результатам, качество которых нельзя считать удовлетворительными. Наиболее существенно, что непустота допустового множества достигается при расширении вектора правой части по уравнению № 3 (см. таблицу) в отрицательную область. Таким образом, уравнение № 3 является наиболее вероятным кандидатом на исключение в процессе поиска совместности ИСЛАУ, если при его исключении достижима разрешимость ИСЛАУ.

Вид экспериментально полученного спектра свидетельствует о дискриминации данных при регистрации высоких энергий. Не имея информации о геометрии прибора, материале, тол-

щине чувствительного слоя, можно только ориентироваться на вид спектра и предполагать соотношение интенсивностей пиков $HE/LE \approx 1/10$. На это значение умножаются строки матрицы группы HE и матрица (15) без третьей строки трансформируется в матрицу

$$A(XRF) = \begin{pmatrix} [154; 188] & [135; 165] \\ [15; 30] & [0; 0] \end{pmatrix}. \quad (19)$$

После процедуры (18) по коррекции правой части разрешимость ИСПАУ (11) с матрицей вида (19) достигается с запасом для значения $K=3$. Результат работы распознающего функционала Tolsolvty:

$$\max Tol=880; \max Arg=[185; 611]. \quad (20)$$

На рис. 3 представлены объединённое (4) и допустовое (5) множества решений ИСПАУ с модифицированной матрицей, а также значение $\max Arg$ (20). Форма объединённого множества решения соответствует типу, представленному на рис. 1, б. Для матрицы ИСПАУ не имеется отдельного ограничения на переменную x_2 . В зависимости от ограничения на переменную x_1 , задаваемую вторым уравнением ИСПАУ (11) с матрицей (19), аргумент максимума распознающего функционала перемещается вдоль полосы, задаваемой первым уравнением системы (19). В решении (20) соотношение компонент стало сопоставимо с первичной стехиометрией анализируемого образца и уже содержит информацию о технологическом процессе. Допустовое множество решений узко относительно объединённого множества и представляет собой узкую «тропинку» (см. рис. 3). Такой вид характерен для «овражного» вида функционалов [9] в методах оптимизации и свидетельствует о плохой обусловленности задачи. Положительные значения образующих функционала показывают степень покомпонентной избыточности расширения допустового множества за счёт расширения правой части ИСПАУ (11). В работе [1] рассмотрены вопросы об интервальной регуляризации, обобщении метода Лаврентьева [2], которые также можно использовать для исследования плохо обусловленных задач.

Заключение. Интервальный подход применён к задачам спектрального анализа. Для конкретного типа проблемы рассмотрен вид объединённых множеств решений, т. е. значений неизвестных переменных, при которых удовлетворено хотя бы одно уравнение ИСПАУ. С использованием распознающего функционала показано, что в исходной постановке ИСПАУ неразрешима. Разрешимость достигается только за счёт чрезмерного огрубления задачи. При этом допустовое множество имеет форму четырёхугольника с очень большим отношением коротких и длинных сторон, что говорит о плохой обусловленности задачи. Из этого следует вывод о некорректности матрицы ИСПАУ в исходной постановке. С целью достижения разрешимости проведены следующие модификации. Во-первых, исключено уравнение системы для которого правая часть при огрублении теряла положительность.

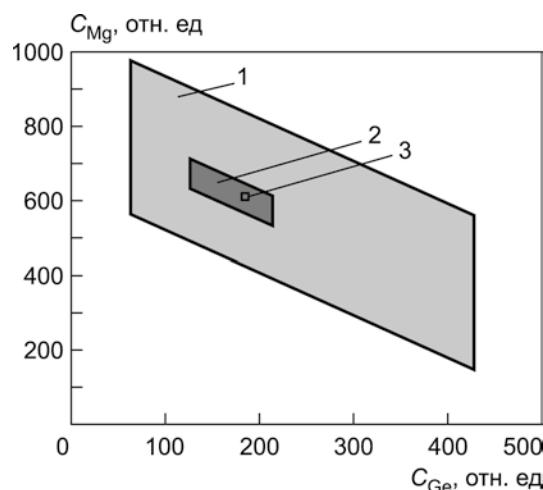


Рис. 3. Объединённое (1) и допустовое (2) множества решений для случая неразрешимых сильных компонент бинарной смеси Mg и Ge, а также значение $\max Arg$ (3). Коррекция матрицы

Во-вторых, проведена модификация матрицы ИСПАУ для учёта зависимости вероятности регистрации излучения компонента от энергии рентгеновских квантов. Для этого элементы строки матрицы для высоких энергий расширены в сторону их уменьшения пропорционально форме экспериментального спектра. Показано, что такая модификация матрицы улучшает форму допустового множества.

Исследование распознающего функционала является мощным инструментом, позволяющим сделать суждения о корректности постановки линейной задачи о допусках. Модификация правой части ИСПАУ и её матрицы на основании эвристических данных о задаче в совокупности с исследованием значений распознающего функционала и формы допустового множества даёт богатые возможности для математических исследований.

Литература

1. Шарый С. П. Интервальная регуляризация для решения систем линейных алгебраических уравнений // Труды Междунар. конф. «Марчуковские научные чтения – 2017». Новосибирск, Россия, 25 июня – 14 июля 2017 г. Новосибирск: Изд-во Института вычислительной математики и математической геофизики СО РАН, 2017. С. 975–982.
2. Лаврентьев М. М., Савельев Л. Я. Теория операторов и некорректные задачи. Монография / 2-е изд., перераб. и дополн. Новосибирск: Изд-во Ин-та математики, 2010. 912 с.
3. Шарый С. П. Конечномерный интервальный анализ. Новосибирск: XYZ, 2016.
4. Kearfott R. B., Nakao M. T., Neumaier A., Rump S. M., Shary S. P., van Hentenryck P. Standardized notation in interval analysis // Вычислительные технологии. 2010. Т. 15. № 1. С. 7–13.
5. Шарая И. IntLinInc2D – пакет программ для визуализации множеств решений интервальных линейных систем с двумя неизвестными. [Электрон. версия] URL: <http://www.nsc.ru/interval/Programing/MCodes/IntLinInc2D.zip> (Дата обращения 02.09.2018).

6. Красилин А. А., Храпова Е. К. Влияние условий гидротермальной обработки на формирование гидрогерманата никеля с пластинчатой морфологией // Журнал прикладной химии. 2017. 90(1). С. 25–30.

7. X-Ray Data Booklet Table 1-3. Photon energies and relative intensities of K-, L- and M-shell lines. [Электрон. версия] URL: http://xdb.lbl.gov/Section1/Table_1-3.pdf (Дата обращения 02.09.2018).

8. Интервальный анализ и его приложения. [Электрон. версия] URL: <http://www.nsc.ru/interval/Programing/MCodes/tolsolvtv.m> (Дата обращения 02.09.2018).

9. Стецюк П. И. Субградиентные методы ralgb5 и ralgb для минимизации овражных выпуклых функций // Вычислительные технологии. 2017. Т. 22. № 2. С. 127–149.

Дата принятия: 11.12.2018.

Interval approach for spectral analysis. Use of recognizing functional to study of the solvability of a problem

A. N. Bazhenov^{1,2}, P. A. Zatylnik¹

¹ Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University, Institute of Applied Mathematics and Mechanics, St. Petersburg, Russia, e-mail: bazhenov_an@spbstu.ru

² Ioffe Institute, St. Petersburg, Russia

The paper focuses on methodology on an application of interval methods to the specific problem of spectral analysis. The subject of the study is the mathematical formulation of the problem and its solution by the methods of interval analysis in a linear case, that is, the Linear Interval Tolerance Problem. The main methodological goal of the work is to demonstrate the use of the recognizing functional as a method of investigation. We suggest the way to construct the right-hand side of the interval system of linear algebraic equations (ISLAE) without involving models of the background shape under the peak, "natural intervalization". The forms of the united solution sets for the problem are considered. The sign of the recognizing functional serves for a study of the solvability of ISLAE. The study demonstrates that in the initial formulation the problem is unsolvable. Various methods for achieving solvability are considered: by the reducing the tolerances of the right-hand side of the system and the modification of the ISLAE matrix. The results of using both approaches are discussed.

Key words: interval analysis, overdetermined system of equations, linear tolerance problem, recognizing functional, interval system of linear algebraic equations, spectral analysis.