

УДК 519.65+519.673+519.254

MSC2020 97M50+78-10

© В. Г. Назаров¹

Использование критических чисел в задаче идентификации неизвестного вещества

Рассматривается задача идентификации химического состава однородной среды на основе имеющихся приближенных данных о значениях коэффициента ослабления рентгеновского излучения в этой среде для заданного конечного набора энергий из промежутка $[0.001 - 20]$ МэВ. Предполагается, что среда является одним из веществ, входящих в заданный список. Для каждого вещества этого списка известны точные значения коэффициента ослабления при всех значениях энергий из набора. Данные о коэффициентах ослабления среды известны с заданной погрешностью. Вводится понятие критического числа для пары веществ и энергии. На первом этапе решения задачи находится множество всех критических чисел для всевозможных пар веществ из списка всех веществ и всех используемых энергий. После этого изучаются характеристики множества всех критических чисел и по этой информации находится вещество, наиболее подходящее в качестве решения задачи идентификации. Такая постановка задачи выглядит обоснованной с точки зрения вопросов таможенного контроля или медицинской томографии. Рассмотрен вопрос о единственности решения задачи идентификации. Приведены примеры расчетов для набора конкретных веществ с использованием некоторых результатов ранее выполненных исследований.

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

DOI: <https://doi.org/10.47910/FEMJ202421>

Введение

Проблема изучения среды неизвестного химического состава радиографическими методами продолжает привлекать внимание исследователей. Наибольший интерес к этой проблеме, наверное, проявляют таможи различных стран, и связано это с необходимостью обнаружения грузов, перемещение которых через границу запрещено или строго нормируется законодательствами выпускающей и принимающей грузы стороны. Число научных публикаций, посвященных этой проблеме, остается

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

высоким, отметим среди них работы [1–6]. При этом, в зависимости от специфики рассматриваемой задачи, подходы к этой задаче различных исследователей могут заметно отличаться.

В задачах идентификации вещества неизвестного химического состава радиографическими методами часто можно выделить два этапа. На первом этапе образец вещества подвергается облучению, например, потоками фотонов, коллимированными по направлению и энергии. Затем, используя полученную при этом информацию о плотностях потоков входящего и выходящего из образца излучения, а также некоторые заранее известные данные о самом образце (например, его толщину), находят (приближенные) значения коэффициентов ослабления излучения неизвестного вещества.

На втором этапе решения задачи идентификации, найденные с ошибками значения коэффициентов, сравниваются со значениями тех же коэффициентов для заранее известных веществ. По степени близости этих величин делается вывод о том, на какое из известных веществ больше всего похоже неизвестное вещество.

В настоящей работе первый этап исследования — этап нахождения коэффициентов ослабления для неизвестного вещества не рассматривается. Мы изучаем вопрос о том, как следует обрабатывать полученную на первом этапе информацию, содержащую неизвестные нам ошибки.

Таким образом, мы предполагаем, что неизвестное вещество M_0 входит в заранее известное конечное множество веществ M . Поэтому известны точные значения коэффициентов ослабления излучения для каждого вещества этого множества для некоторого набора значений энергии E_1, E_2, \dots, E_N . Также известны значения коэффициентов ослабления $\mu'_{k0} = \mu'_{0}(E_k)$ неизвестного вещества $M_0 \in M$ с некоторыми ошибками. Требуется указать, при какой максимально возможной относительной ошибке значений μ'_{k0} задача нахождения вещества M_0 имеет единственное решение. Оказывается, что для ответа на этот вопрос достаточно изучить метрическую структуру множества всех значений коэффициентов ослабления μ_{ki} для всех веществ $M_i \in M$. Такая постановка задачи уместна, например, в таможенном контроле. В этом случае в качестве M может быть список веществ, перемещение которых за границу или перевозка авиационным транспортом запрещены или строго регламентированы. В медицинской компьютерной томографии M может быть списком тканей человеческого тела и материалов, широко используемых в хирургических операциях. Перейдем к более подробному описанию постановки задачи.

1. Предварительные замечания и постановка задачи

Введем следующие обозначения. Пусть E_1, E_2, \dots, E_N — набор значений энергии фотонов,

$$0.001 \text{ Mev} = E_1 < E_2 < \dots < E_N = 20 \text{ Mev}.$$

При проведении расчетов для конкретных веществ и энергий мы пользовались числовыми данными, взятыми из таблиц [7], где, в частности, приводятся вся необходимая нам информация для 36 значений энергии. Поэтому мы ограничимся случаем $1 \leq N \leq 36$. Пусть $M = M_1, \dots, M_q$ — заданный набор попарно различных веществ

известного химического состава, $q \geq 2$, M_0 — неизвестное нам вещество, входящее в множество M , так что $M_0 = M_n$ при некотором n , $1 \leq n \leq q$; μ_{ki} — точное (взятое из [7]) значение коэффициента ослабления излучения фотонов для вещества M_i на энергии E_k .

Мы считаем, что все μ_{ki} при $1 \leq k \leq N$, $1 \leq i \leq q$ нам известны и строго положительны. Предполагается, что в результате каких-либо исследований неизвестного вещества M_0 были найдены с некоторыми (неизвестными нам) ошибками значения $\mu'_{k0} > 0$, $1 \leq k \leq N$ для M_0 . Далее для краткости изложения через M'_0 будем обозначать «фиктивное» вещество, коэффициенты ослабления которого равны μ'_{k0} , $1 \leq k \leq N$. Вещества M_i и $M_j \in M$ мы будем называть различными и писать $M_i \neq M_j$ тогда и только тогда, когда $\mu_{ki} \neq \mu_{kj}$ для некоторого k , $1 \leq k \leq N$. Таким образом, вещества M_i и M_j одинаковы ($M_i = M_j$) тогда и только тогда, когда $\mu_{ki} = \mu_{kj}$ для всех k , $1 \leq k \leq N$. Сформулируем задачу идентификации неизвестного вещества.

Задача идентификации Пусть все μ_{ki} при $1 \leq k \leq N$, $1 \leq i \leq q$ известны и строго положительны и для некоторых k известны $\mu'_{k0} > 0$. Указать, при какой максимально возможной относительной ошибке $\delta(E_k) = \delta_k \in (0, 1)$ для этих k

$$\frac{|\mu_{k0} - \mu'_{k0}|}{\mu_{k0}} \leq \delta_k \quad (1)$$

неизвестное вещество $M_0 \in M$ может быть однозначно идентифицировано.

Суть предлагаемого метода идентификации удобнее всего изложить, начав с самого простого случая, когда $q = 2$ и $N = 1$. В этом случае $M = \{M_1, M_2\}$, M_0 является одним из веществ M_1 или $M_2 \neq M_1$, известны величины $\mu_{k1} = \mu_1(E_k)$ для вещества M_1 , $\mu_{k2} = \mu_2(E_k)$ для вещества M_2 для некоторой фиксированной энергии E_k и $\mu'_{k0} = \mu'_0(E_k)$ для вещества M_0 . Изложим схему нахождения решения задачи идентификации в данном упрощенном случае. Предварительно докажем несколько несложных вспомогательных утверждений.

Утверждение 1. Для любого числа $\delta \in (0, 1)$ справедливы неравенства

$$\frac{(1 - \delta)}{(1 + \delta)} < (1 - \delta) < \frac{1}{(1 + \delta)} < 1 < (1 + \delta) < \frac{1}{(1 - \delta)} < \frac{(1 + \delta)}{(1 - \delta)}. \quad (2)$$

Доказательство. Поскольку

$$(1 - \delta^2) = (1 - \delta)(1 + \delta) < 1,$$

то

$$(1 - \delta) < \frac{1}{(1 + \delta)}, \quad (1 + \delta) < \frac{1}{(1 - \delta)}.$$

Отсюда следуют второе и пятое неравенства в (2). Остальные неравенства в (2) очевидны. \square

Из условий (1) получаем

$$|\mu_{k0} - \mu'_{k0}| \leq \delta_k \mu_{k0}. \quad (3)$$

Далее для определенности будем считать, что $M_0 = M_1$, так что $\mu'_{k0} = \mu'_{k1}$, тогда

$$-\delta_k \mu_{k1} \leq \mu_{k1} - \mu'_{k1} \leq \delta_k \mu_{k1}.$$

Отсюда получаем неравенства $\mu'_{k1} \leq \mu_{k1}(1 + \delta_k)$ и $\mu_{k1}(1 - \delta_k) \leq \mu'_{k1}$, значит,

$$\frac{\mu'_{k1}}{1 + \delta_k} \leq \mu_{k1} \leq \frac{\mu'_{k1}}{1 - \delta_k}, \quad (4)$$

$$\mu_{k1}(1 - \delta_k) \leq \mu'_{k1} \leq \mu_{k1}(1 + \delta_k). \quad (5)$$

Утверждение 2. *Соотношение*

$$\mu_{k2} \notin \left[\frac{\mu_{k1}(1 - \delta_k)}{(1 + \delta_k)}, \frac{\mu_{k1}(1 + \delta_k)}{(1 - \delta_k)} \right] \quad (6)$$

справедливо тогда и только тогда, когда выполняется неравенство

$$0 < \delta_k < \delta_C = \frac{|\mu_{k1} - \mu_{k2}|}{\mu_{k1} + \mu_{k2}}. \quad (7)$$

Доказательство. Пусть выполняется (6), тогда либо

$$\mu_{k2} < \frac{\mu_{k1}(1 - \delta_k)}{(1 + \delta_k)}, \quad (8)$$

либо

$$\mu_{k2} > \frac{\mu_{k1}(1 + \delta_k)}{(1 - \delta_k)}. \quad (9)$$

Несложно проверить, что из (8) следует

$$\mu_{k2} < \mu_{k1}; \quad \delta_k < \frac{\mu_{k1} - \mu_{k2}}{\mu_{k1} + \mu_{k2}}, \quad (10)$$

а из (9) следует

$$\mu_{k2} > \mu_{k1}; \quad \delta_k < \frac{\mu_{k2} - \mu_{k1}}{\mu_{k1} + \mu_{k2}}. \quad (11)$$

Значит выполняется неравенство (7).

Наоборот, пусть выполняется неравенство (7). Тогда, как несложно проверить, либо выполняются неравенства (10), и из этого следует неравенство (8), либо выполняются неравенства (11), и из этого следует неравенство (9). Значит, выполняется неравенство (6). Утверждение 2 доказано. \square

Замечание 1. Число δ_C можно назвать **критическим числом** для пары чисел (μ_{k1}, μ_{k2}) и энергии E_k (или для пары веществ (M_1, M_2) и энергии E_k). Отметим, что критическое число δ_C «симметрично» относительно перестановки чисел μ_{k1} и μ_{k2} . Кроме этого, если ввести обозначения $r_{21} = \mu_{k2}/\mu_{k1}$ и $r_{12} = \mu_{k1}/\mu_{k2}$, то справедливы равенства

$$\delta_C = \frac{|1 - r_{21}|}{1 + r_{21}} = \frac{|1 - r_{12}|}{1 + r_{12}} = \frac{|\mu_{k1} - \mu_{k2}|}{\mu_{k1} + \mu_{k2}}.$$

Пусть \mathbb{R}^+ — множество всех вещественных положительных чисел. Определим множество $T_k = T(\mu'_{k1}, \delta_k)$ равенством

$$T_k = \{ \mu \in \mathbb{R}^+ \mid |\mu - \mu'_{k1}| \leq \delta_k \mu \} = \left[\frac{\mu'_{k1}}{1 + \delta_k}, \frac{\mu'_{k1}}{1 - \delta_k} \right]. \tag{12}$$

Поскольку μ'_{k1} нам по условию известно, то множество T_k нам тоже известно. Включение $\mu'_{k1} \in T_k$ очевидно. Так как μ_{k1} удовлетворяет условию (4), то $\mu_{k1} \in T_k$. Значит, при выполнении условия (7) в силу соотношения (6) справедливы соотношения

$$\mu_{k2} \notin T_k = \left[\frac{\mu'_{k1}}{1 + \delta_k}, \frac{\mu'_{k1}}{1 - \delta_k} \right] \subset \left[\frac{\mu_{k1}(1 - \delta_k)}{(1 + \delta_k)}, \frac{\mu_{k1}(1 + \delta_k)}{(1 - \delta_k)} \right].$$

На рисунке 1 приведен (абстрактный) пример расположения различных «окрестностей» точки μ_{k1} . По горизонтальной оси отложено значение коэффициента ослабления. Отрезок $[\mu_{k1}(1 - \delta_k), \mu_{k1}(1 + \delta_k)]$, определенный неравенствами (5), изображен верхней серой полоской. Он симметричен относительно точки μ_{k1} . Согласно (5) все возможные значения μ'_{k1} обязаны лежать в этом отрезке. Ниже него изображен отрезок

$$\left[\frac{\mu_{k1}(1 - \delta_k)}{(1 + \delta_k)}, \frac{\mu_{k1}(1 + \delta_k)}{(1 - \delta_k)} \right] = \bigcup_{\mu' \in [\mu_{k1}(1 - \delta_k), \mu_{k1}(1 + \delta_k)]} \left[\frac{\mu'}{1 + \delta_k}, \frac{\mu'}{1 - \delta_k} \right]. \tag{13}$$

Он всегда содержит точку μ_{k1} , несимметричен относительно μ_{k1} и его «правое крыло» всегда больше «левого крыла». Отрезок (13) всегда содержит отрезок $[\mu_{k1}(1 - \delta_k), \mu_{k1}(1 + \delta_k)]$.

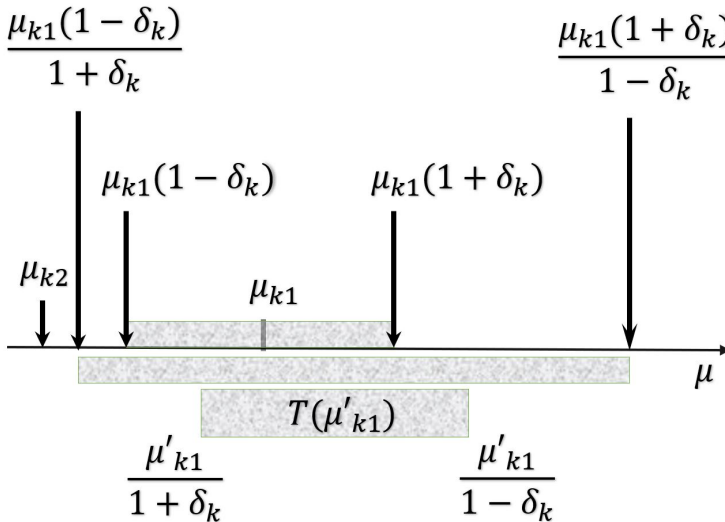


Рис. 1. Пример возможного расположения различных «окрестностей» точки μ_{k1} .

Еще ниже изображен отрезок $T(\mu'_{k1})$, заданный формулой (12). Он всегда содержит точки μ'_{k1} и μ_{k1} , не симметричен относительно μ'_{k1} и всегда содержится в отрезке (13). Когда μ'_{k1} принимает свое минимально возможное значение $\mu'_{k1} = \mu_1(1 - \delta_k)$ левые границы отрезков (13) и $T(\mu'_{k1})$ совпадают. Когда μ'_{k1} принимает свое максимально возможное значение $\mu'_{k1} = \mu_{k1}(1 + \delta_k)$ правые границы отрезков (13) и $T(\mu'_{k1})$ совпадают.

Рис. 1 сделан в предположении, что $\mu_{k2} < \mu_{k1}$ и $\delta_k < \delta_C$. Поскольку условие (11) «симметрично» относительно перестановки μ_{k1} и μ_{k2} , то, если бы мы изначально предположили, что $M_0 = M_2$ и строили бы множество $T(\mu'_{k2}, \delta_k)$ аналогично «вокруг» точки μ'_{k2} , то получили бы аналогичный результат, то есть соотношения $\mu'_{k2} \in T(\mu'_{k2}, \delta_k)$, $\mu_{k2} \in T(\mu'_{k2}, \delta_k)$ и $\mu_{k1} \notin T(\mu'_{k2}, \delta_k)$. Отсюда следует утверждение 3.

Утверждение 3. Пусть $T = T(\mu'_{k0}, \delta_k) = \{\mu \in \mathbb{R}^+ \mid |\mu - \mu'_{k0}| \leq \delta_k \mu\}$, выполнены условия (3) и $\delta_k < \delta_C$, тогда выполняются соотношения $\mu'_{k0} \in T(\mu'_{k0}, \delta_k)$, $\mu_{k0} \in T(\mu'_{k0}, \delta_k)$. При этом μ_{k0} совпадает с одним (и только одним) из известных нам чисел μ_{k1} или μ_{k2} , а второе из этих чисел (далее обозначенное $\mu_{k \times}$) не содержится в числовом множестве $T(\mu'_{k0}, \delta_k)$.

Таким образом, утверждение 3 дает нам достаточное условие существования и единственности решения задачи идентификации в случае $q = 2$. Процедура нахождения этого решения заключается в том, что для известных нам чисел μ_{k1} , μ_{k2} , μ'_{k0} нужно сначала найти критическое значение δ_C для μ_{k1}, μ_{k2} , убедиться в том, что $\delta_k \in (0, \delta_C)$, построить отрезок

$$T(\mu'_{k0}, \delta_k) = \left[\frac{\mu'_{k0}}{1 + \delta_k}, \frac{\mu'_{k0}}{1 - \delta_k} \right]$$

и выяснить, какое из чисел $\mu_{kn} \in \{\mu_{k1}, \mu_{k2}\}$ принадлежит этому отрезку. Соответствующее ему вещество M_n является решением задачи идентификации.

Замечание 2. Можно показать, что если $\delta_k \geq \delta_C$, то число $\mu_{k \times}$ может попасть (а может и не попасть) в отрезок $T(\mu'_{k0}, \delta_k)$.

2. Моноэнергетический случай при $q > 2$

Теперь рассмотрим случай, когда количество различных веществ $q > 2$ и задача идентификации рассматривается, как и раньше, на одной энергии E_k . Пусть нам известны все значения $\mu_{k1}, \mu_{k2}, \dots, \mu_{kq}$ для всех веществ M_1, \dots, M_q из M на энергии E_k и величина μ'_{k0} для неизвестного вещества M_0 из M . Рассмотрим множество всевозможных различных пар (μ_{ki}, μ_{kj}) ; $1 \leq i \neq j \leq q$. Для каждой такой пары найдем свое критическое число

$$\delta_{Ckij} = \delta_C(k, i, j) = \frac{|\mu_{ki} - \mu_{kj}|}{\mu_{ki} + \mu_{kj}}. \quad (14)$$

Пусть

$$\delta_{CBk} = \min_{1 \leq i \neq j \leq q} \delta_C(k, i, j), \quad (15)$$

$$T_k = T(\mu'_{k0}, \delta_k) = \{\mu \in \mathbb{R}^+ \mid |\mu - \mu'_{k0}| \leq \delta_k \mu\}$$

и $0 < \delta_k < \delta_{CBk} < 1$, тогда, в силу справедливости утверждения 2, выполняются соотношения $\mu'_{k0} \in T(\mu'_{k0}, \delta_k)$, $\mu_{k0} \in T(\mu'_{k0}, \delta_k)$ и $\mu_{kj} \notin T(\mu'_{k0}, \delta_k)$ для любого $\mu_{kj} \neq \mu_{k0}$. Таким образом, процедура нахождения решения задачи в случае $q > 2$ по существу не отличается от случая, когда $q = 2$; однако при большом количестве веществ q критическое число δ_{Ckij} может при этом оказаться весьма небольшим. Если $0 < \delta_{CBk} \leq \delta_k < 1$, то $T(\mu'_{k0}, \delta_k)$ обязательно содержит числа μ'_{k0}, μ_{k0} и, возможно, некоторые другие числа $\mu_{k,i1}, \dots, \mu_{k,is}$ из набора $\{\mu_{k1}, \mu_{k2}, \dots, \mu_{kq}\}$. В этом случае мы не сможем однозначно найти решение задачи, но сможем ограничить круг веществ-«претендентов» на это решение.

3. Многоэнергетический случай при $q > 2$

Как и ранее, мы предполагаем, что выполняются неравенства (1), так что

$$|\mu_{ki} - \mu'_{ki}| \leq \delta_k \mu_{ki}; \quad 0 \leq i \leq q, \quad 1 \leq k \leq N.$$

Многоэнергетический случай заметно отличается от ранее рассмотренных, поскольку в условиях задачи идентификации увеличивается количество известной информации, которой мы располагаем. Поэтому можно ожидать, что единственное решение задачи идентификации будет получено при менее жестких условиях, наложенных на максимально допустимые относительные ошибки δ_k . Такая возможность может появиться при переходе к многоэнергетическому случаю, а может и не появиться. Поясним это на абстрактном примере.

Пусть задача ставится при $N = 2$, $q = 3$ для веществ M_1, M_2, M_3 и энергий E_1, E_2 . Для каждой энергии E_k и каждой пары различных веществ (M_i, M_j) мы имеем своё критическое число δ_{Ckij} , определенное формулой (14). С учетом того, что $i \neq j$ и $\delta_{Ckij} = \delta_{Ckji}$, мы можем получить (как максимум) шесть различных критических чисел δ_{Ckij} ; $1 \leq i < j \leq 3$, $1 \leq k \leq 2$. Предположим, что эти числа связаны соотношениями $\delta_{C113} < \delta_{C123} < \delta_{C112}$ для E_1 и $\delta_{C213} < \delta_{C212} < \delta_{C223}$ для E_2 .

Графически эта ситуация представлена на рис 2. По горизонтали на нем отложены значения энергии E_1 и E_2 , а по вертикали — значения δ_{Ckij} . Каждое δ_{Ckij} находится в своем прямоугольнике, и ордината верхней границы этого прямоугольника равна соответствующему значению δ_{Ckij} . Далее символом δ_{Ckij}^* будем обозначать произвольное число из интервала $(0, \delta_{Ckij})$, близкое к δ_{Ckij} (например, это может быть число $\delta_{Ckij}^* = 0.999 \cdot \delta_{Ckij}$).

Ясно, что мы заинтересованы в том, чтобы в формуле (15) все числа δ_{CBk} , $1 \leq k \leq N$ были как можно больше, поскольку тогда нам будет проще удовлетворить условие $\delta_k < \delta_C$ в утверждениях 2 и 3.

Обратимся снова к рис. 2. Для каждой пары чисел (i, j) , $1 \leq i < j \leq 3$ найдем такое $k = k(i, j)$, для которого δ_{Ckij} принимает свое максимальное значение $\max\{\delta_{C1ij}, \delta_{C2ij}\}$. На рис. 2 такие δ_{Ckij} выделены серой заливкой, при этом $\delta_{C123} < \delta_{C223}$, $\delta_{C113} < \delta_{C213}$ и $\delta_{C212} < \delta_{C112}$. Поскольку числа δ_{C112} , δ_{C223} , δ_{C213} соответствуют всем возможным парам веществ, то несложно увидеть, что число $\delta_{CP1} = \min\{\delta_{C112}, \delta_{C223}, \delta_{C213}\}$ является самым большим из всех чисел δ_{Ckij} , которые позволяют нам получить единственность решения задачи идентификации при

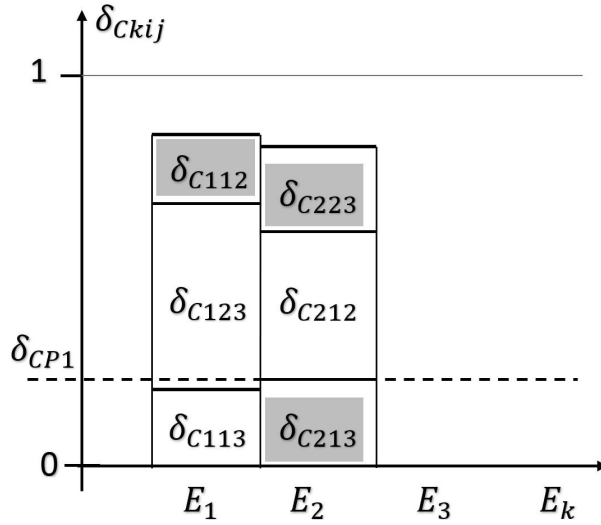


Рис. 2. Взаимное расположение различных критических чисел для энергии E_1 и E_2 в «плохом» случае.

выполнении условия $\delta_2 < \delta_C = \delta_{C213}$ для любого значения неизвестного M_0 . При этом данные для энергии E_1 нам не нужны, а условия (1) принимают вид

$$|\mu_{2i} - \mu'_{2i}| / \mu_{2i} \leq \delta^*_{C213}; \quad 0 \leq i \leq 3.$$

Значит, в случае, представленном на рис. 2, использование двух энергий E_1 и E_2 не принесло нам преимуществ по сравнению со случаем использования одной лишь энергии E_2 .

Теперь рассмотрим ситуацию, представленную на рис. 3 для тех же самых трех веществ M_1, M_2, M_3 , но уже для новой пары энергий E_1, E_3 . Повторим ранее проделанную процедуру. Опять для каждой пары чисел $(i, j), 1 \leq i < j \leq 3$ найдем такое $k = k(i, j)$, для которого δ_{Ckij} принимает свое максимальное значение $\max\{\delta_{C1ij}, \delta_{C3ij}\}$. На рис. 3 такие δ_{Ckij} выделены серой заливкой, при этом $\delta_{C113} < \delta_{C313}$, $\delta_{C312} < \delta_{C112}$ и $\delta_{C323} < \delta_{C123}$. Опять числа $\delta_{C112}, \delta_{C123}, \delta_{C313}$ соответствуют всем возможным парам веществ. Выберем числа $\delta_1 = \delta^*_{C123}$ и $\delta_3 = \delta^*_{C313}$. Пусть выполняются условия

$$|\mu_{1i} - \mu'_{1i}| / \mu_{1i} \leq \delta_1; \quad |\mu_{3i} - \mu'_{3i}| / \mu_{3i} \leq \delta_3; \quad 0 \leq i \leq 3.$$

Построим множества $T_1 = T(\mu'_{10}, \delta^*_{C113})$ и $T_3 = T(\mu'_{30}, \delta^*_{C313})$ и посмотрим, какие результаты мы получим при различных «значениях» неизвестной нам «величины» — вещества M_0 .

1. При $M_0 = M_1$ мы получим: $\mu_{12} \notin T_1$ (поскольку $\delta_1 = \delta^*_{C123} < \delta_{C112}$), значит, $M_0 \neq M_2$. $\mu_{13} \notin T_3$ (поскольку $\delta_3 = \delta^*_{C313} < \delta_{C313}$), значит, $M_0 \neq M_3$. Остается случай $M_0 = M_1$.

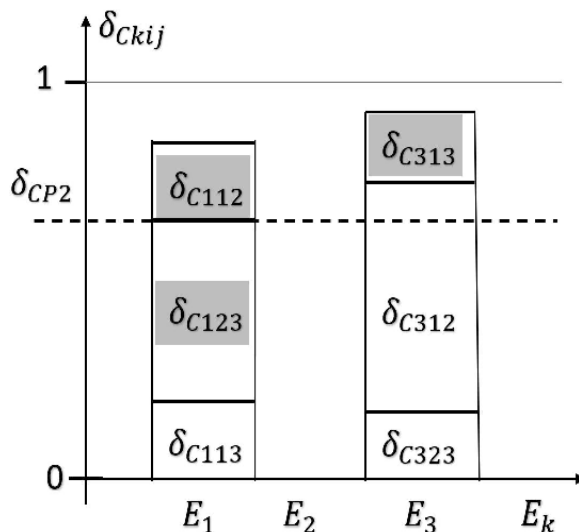


Рис. 3. Взаимное расположение различных критических чисел для энергии E_1 и E_3 в «хорошем» случае.

2. При $M_0 = M_2$ мы получим: $\mu_{11} \notin T_1$ (поскольку $\delta_1 < \delta_{C112}$), значит, $M_0 \neq M_1$. $\mu_{13} \notin T_1$ (поскольку $\delta_1 < \delta_{C123}$), значит, $M_0 \neq M_3$. Остается случай $M_0 = M_2$. В этом случае нам даже не нужно использовать множество T_3 и информацию о μ'_{30} .

3. При $M_0 = M_3$ мы получим: $\mu_{12} \notin T_1$ (поскольку $\delta_1 = \delta^*_{C123} < \delta_{C123}$), значит, $M_0 \neq M_2$. $\mu_{13} \notin T_3$ (поскольку $\delta_3 = \delta^*_{C313} < \delta_{C313}$), значит, $M_0 \neq M_1$. Остается случай $M_0 = M_3$. В итоге мы в любом случае получим правильный ответ.

Как видно на рис. 2, 3 число $\delta_{CP2} = \min\{\delta_{C112}, \delta_{C123}, \delta_{C213}\}$ примерно в три раза больше δ_{CP2} . Значит, возможны ситуации, когда использование нескольких энергий для решения задачи идентификации дает ощутимый положительный эффект.

4. Численные эксперименты

Все ранее приведенные примеры носили чисто умозрительный характер, поскольку не были связаны с числовыми значениями μ_{ki} для конкретных веществ и энергий E_k . Для того чтобы оценить полезность предложенного метода идентификации, была написана компьютерная программа и проведен ряд численных экспериментов. Из базы данных [7] было выбрано 31 вещество, большая часть веществ является биологическими тканями тела человека и веществами, представляющими интерес для медицинской компьютерной томографии. В таблице 1 приводится пронумерованный список этих веществ.

Перед тем как обсуждать результаты численных экспериментов, введем некоторые нужные для дальнейшего изложения обозначения и сделаем ряд пояснений. При выполнении вычислений использовался полный список из 36 энергий для то-

Таблица 1. Список веществ, входящих в множество M

1. Пластик А-150	17. Винилтолуин
2. Жировая ткань	18. Полиэтилен
3. Сухой воздух	19. Пластик Мулар
4. Аланин	20. Полиметил метакрилат
5. В-100 пластик	21. Полистирол
6. Бакелит	22. Тефлон
7. Кровь в целом	23. Полихлорвинил
8. Костная ткань	24. Ткань гонад
9. Ткань мозга	25. Мягкая ткань
10. Ткань груди	26. Мягкая ткань 4-компонентная
11. Пластик С-552	27. Ткань, эквив. газу
12. Раствор сульфата аммония	28. Ткань, эквив. газу 2
13. Глазная линза	29. Вода
14. Ткань легких	30. Этиловый спирт (Этанол)
15. Ткань мускульная	31. Метиловый спирт (Метанол)
16. Ткань яичника	

го, чтобы собрать максимум возможной информации обо всех возможных ситуациях. Несложно увидеть, что 31 вещество образует 465 различных упорядоченных пар (i, j) ; $1 \leq i < j \leq 31$. Множество всех этих пар обозначим через AP (от слов All Pairs). Через TP_k (от слов Top Pairs) обозначим множество всех тех и только тех пар (i, j) из AP , для которых максимум

$$\delta_{CT}(i, j) = \max_{1 \leq t \leq 36} \delta_C(t, i, j)$$

достигается на энергии E_k . Теоретически для некоторых пар (i, j) такой максимум может достигаться на нескольких энергиях одновременно. В этом случае выберем какую-нибудь одну энергию (например, наиболее удобную для нас). В нашем случае при обработке данных таблиц [7] этого никогда не происходило и для каждой пары максимум всегда был один. Поэтому множество AP представляется в виде дизъюнктного объединения множеств TP_k ,

$$AP = \bigcup_{k=1}^{36} TP_k.$$

Каждое множество TP_k представляет интерес по той причине, что каждая входящая в него пара $(i, j) \in TP_k$ лучше всего «различима» именно на энергии E_k .

Через BP_k (от слов Bottom Pairs) обозначим множество всех тех и только тех пар (i, j) из AP , для которых минимум

$$\delta_{CB}(i, j) = \min_{1 \leq t \leq 36} \delta_C(t, i, j)$$

достигается на энергии E_k . У нас опять получилось так, что для каждой пары минимум всегда был один. Поэтому множество AP представляется в виде дизъюнктного объединения множеств BP_k ,

$$AP = \bigcup_{k=1}^{36} BP_k.$$

Каждое множество BP_k также представляет некоторый интерес по той причине, что каждая входящая в него пара $(i, j) \in BP_k$ хуже всего «различима» именно на энергии E_k . Ясно, что если $\delta_C(k, i, j) = 0$, то, в силу равенства (14), $\mu_{ki} = \mu_{kj}$ и вещества M_i и M_j на энергии E_k неразличимы. Обработка результатов вычислений показала, что существует всего лишь две таких пары из множества AP : это пара (7, 25) и пара (9, 24).

Далее для избежания путаницы численных значений нижних индексов для $\mu_{k,i}$ и $\delta_C(k, i, j)$ мы будем отделять эти значения запятой. Было установлено, что на энергии $E_{27} = 1.5$ Мэв совпадают коэффициенты ослабления $\mu_{27,7} = \mu_{27,25} = 6.043 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$, и, как результат, $\delta_C(27, 7, 25) = 0$. На энергии $E_{31} = 5$ Мэв, $\mu_{31,9} = \mu_{31,24} = 3.132 \cdot 10^{-2} \text{ cm}^{-1}$, и в результате $\delta_C(31, 9, 24) = 0$. Различить эти пары веществ на указанных энергиях невозможно.

В то же время на энергии $E_{10} = 0.015$ Мэв для первой пары δ_C принимает наибольшее по всем энергиям для этой пары значение $\delta_C(10, 9, 24) = 1.307 \cdot 10^{-2}$. На энергии $E_3 = 0.002$ Мэв для второй пары δ_C принимает наибольшее по всем энергиям для этой пары значение $\delta_C(3, 9, 24) = 1.822 \cdot 10^{-2}$. Эти два новых значения $\delta_C(10, 9, 24)$ и $\delta_C(3, 9, 24)$, возможно, покажутся не такими уж хорошими, но это – лучшее из всех возможных вариантов.

Используя все 36 значений энергии, можно получить $36 \times 465 = 16740$ значений $\delta_C(k, i, j)$, часть которых оказываются одинаковыми. Остановимся на наиболее интересных и нужных, на наш взгляд результатах, полученных после их обработки; для этого обратимся к таблице 2.

В первом столбце таблицы указан номер k энергии, во втором столбце – значение энергии E_k . В третьем – число пар в множестве TP_k . В четвертом столбце указана величина

$$\delta_{CBT}(k) = \min_{(i,j) \in TP_k} \delta_C(k, i, j), \quad (16)$$

где минимум берется по всем парам из TP_k . Минимум в (16) достигается на некоторой паре $(i^*, j^*) \in TP_k$. В пятом столбце таблицы указано число i^* , а в шестом – число j^* . Если число пар в множестве TP_k равно нулю, то в четвертом, пятом и шестом столбцах стоят пробелы. Наконец, в седьмом столбце указано число пар в множестве BP_k .

Прокомментируем эти результаты. Первое, что привлекает внимание, это очень неравномерное распределение пар по энергиям E_k в третьем столбце. Мы видим, что для 17 значений энергии E_k множества TP_k оказались пустыми. Для оставшихся 19 значений энергии множество $TP_8 \cup TP_9$ содержит 250 различных пар (i, j) . То есть для более чем половины всех пар (i, j) величина $\delta_C(k, i, j)$ принимает максимальное значение либо при $k = 8$, либо при $k = 9$. Заметим, однако, что этим значениям k соответствуют энергии 8 и 10 КэВ, на которых коэффициенты ослабления

Таблица 2. Некоторые характеристики всех пар веществ

k	E_k (МэВ)	Число пар TP_k	$\delta_{CBT}(k)$	Вещ-во 1	Вещ-во 2	Число пар BP_k
1	0.001	11	$7.751 \cdot 10^{-3}$	9	15	32
2	0.0015	2	$1.750 \cdot 10^{-2}$	17	21	6
3	0.002	30	$4.677 \cdot 10^{-3}$	14	16	18
4	0.003	19	$9.225 \cdot 10^{-3}$	14	25	12
5	0.004	22	$1.517 \cdot 10^{-1}$	1	20	15
6	0.005	1	$9.970 \cdot 10^{-1}$	20	28	3
7	0.006	21	$7.929 \cdot 10^{-2}$	30	31	5
8	0.008	149	$3.847 \cdot 10^{-2}$	26	29	22
9	0.010	101	$9.707 \cdot 10^{-3}$	16	24	10
10	0.015	43	$1.248 \cdot 10^{-2}$	24	25	7
11	0.020	5	$1.143 \cdot 10^{-2}$	7	14	12
12	0.030	0	—	—	—	10
13	0.040	0	—	—	—	20
14	0.050	0	—	—	—	10
15	0.060	0	—	—	—	6
16	0.080	0	—	—	—	2
17	0.100	0	—	—	—	4
18	0.150	0	—	—	—	4
19	0.200	1	$3.160 \cdot 10^{-2}$	13	26	3
20	0.300	5	$8.608 \cdot 10^{-2}$	2	31	11
21	0.400	4	$1.437 \cdot 10^{-1}$	4	9	11
22	0.500	0	—	—	—	0
23	0.600	0	—	—	—	2
24	0.800	2	$9.974 \cdot 10^{-1}$	27	30	12
25	1.0	13	$2.510 \cdot 10^{-1}$	3	28	53
26	1.25	11	$1.130 \cdot 10^{-1}$	17	30	88
27	1.5	16	$6.549 \cdot 10^{-2}$	10	20	56
28	2	0	—	—	—	1
29	3	0	—	—	—	0
30	4	0	—	—	—	1
31	5	0	—	—	—	1
32	6	0	—	—	—	0
33	8	0	—	—	—	4
34	10	0	—	—	—	1
35	15	0	—	—	—	3
36	20	9	$8.660 \cdot 10^{-2}$	2	30	18

излучения весьма большие. Использовать их на практике как наилучшие можно, наверное, только в микротомографических исследованиях. Для сравнения отметим, что в последнем столбце таблицы указано число пар множества BP_k . Видно, что здесь распределение пар (i, j) по энергиям E_k гораздо равномернее, чем в третьем столбце, хотя для трех значений энергии множество BP_k оказалось пустым.

Вернемся к третьему столбцу таблицы и рассмотрим энергии E_k , для которых множество TP_k оказалось пустым. На первый взгляд может показаться, что они малополезны, поскольку не являются оптимальными, и их можно исключить из использования в томографических исследованиях. Однако это не так. Эти энергии, особенно в промежутке $12 \leq k \leq 18$ (30–150 КэВ), удобны с точки зрения технической возможности получать излучение на таких энергиях. Многие рентгеновские установки работают в этом диапазоне еще и потому, что вред, наносимый биологическим тканям на этих энергиях, сравнительно невелик.

Весьма информативным является четвертый столбец таблицы 2. Малое значение величины $\delta_{CBT}(k)$ для соответствующей ей пары $(i^*, j^*) \in TP_k$ указывает на то, что для однозначной идентификации вещества M_{i^*} (а также вещества M_{j^*}) потребуется высокая точность нахождения коэффициента μ'_{ki^*} (или μ'_{kj^*}). В таблице 2 наименьшее значение $\delta_{CBT}(k) = 4.677 \cdot 10^{-3}$. Это число соответствует паре веществ (14. Ткань легких, 16. Ткань яичника), достигается оно на энергии $E_3 = 2$ КэВ.

Пусть мы решаем задачу идентификации для указанного в таблице 1 списка веществ M , неизвестное вещество $M_0 = M_{14}$ (или $M_0 = M_{16}$), мы используем все те и только те энергии E_k , для которых множество TP_k не пусто, и для них $\delta_k < \delta_{CBT}(k)$ (в частности, $\delta_3 < \delta_{CBT}(3) = 4.677 \cdot 10^{-3}$). Тогда задача идентификации будет иметь **гарантированно** единственное решение $M_0 = M_{14}$ (или $M_0 = M_{16}$). Это был пример наиболее «трудных» для однозначной идентификации веществ в нашем случае.

В общем случае наиболее короткая и удобная, на наш взгляд, процедура нахождения решения задачи для $N = 36$ заключается в следующем.

1. Для каждого k , $1 \leq k \leq 36$, строим множество TP_k и далее рассматриваем только те («хорошие») k , для которых TP_k не пусто.

2. Для каждого такого k находим $\delta_{CBT}(k)$ по формуле (16) и строим множество

$$T_k = \left\{ \mu \in \mathbb{R}^+ \mid |\mu - \mu'_{k0}| \leq \delta_k \mu \right\} = \left[\frac{\mu'_{k0}}{1 + \delta_k}, \frac{\mu'_{k0}}{1 - \delta_k} \right]$$

(см. формулу (12)).

3. Пусть TM_k есть множество, состоящее из тех и только тех веществ $M_n \in M \cup M'_0$, для которых $\mu_{kn} \in T_k$. Из определения (16) ясно, что «фиктивное» вещество M'_0 всегда входит в TM_k , а вещество M_0 совпадает с некоторым $M_n \in M$ и входит в TM_k в силу выполнения условий (1).

4. Находим множество $TM_0 = \bigcap_k TM_k$. Если для всех указанных k выполняются условия $\delta_k \in (0, \delta_{CBT}(k))$, то TM_0 содержит вещества M_0 и M'_0 и не содержит $M_i \in M$ таких, что $M_i \neq M_0$. В этом случае решение задачи единственно и $M_0 = M_n \in M$.

5. Если условия $\delta_k \in (0, \delta_{CBT}(k))$ не выполняется для некоторых k (то есть относительная ошибка δ_k слишком велика), то TM_0 может содержать несколько веществ

Таблица 3. Некоторые результаты, полученные в работе [8] при идентификации ряда веществ на энергии $E_{14} = 50 \text{ KeV}$.

N	δ_{CB}	Δt 1ps	$R(1ps)$	Δt 3ps	$R(3ps)$	Δt 30ps	$R(30ps)$
2	$1.080 \cdot 10^{-2}$ 17	2; 17	$2.976 \cdot 10^{-3}$	2; 17	$2.590 \cdot 10^{-3}$	18; 2	$4.200 \cdot 10^{-2}$
8	$1.192 \cdot 10^{-1}$; 23	8; 23	$2.766 \cdot 10^{-3}$;	8; 23	$8.690 \cdot 10^{-3}$;	8; 23	$6.310 \cdot 10^{-2}$
26	$1.509 \cdot 10^{-3}$; 10	26; 10	$1.146 \cdot 10^{-4}$;	10; 26	$4.892 \cdot 10^{-3}$;	21; 17	$3.989 \cdot 10^{-2}$

$M_i \in M$ таких, что $M_i \neq M_0$. В этом случае можно сказать, что решение задачи идентификации не единственно.

Предложенный в настоящей работе метод идентификации можно было бы назвать методом использования критических чисел.

Теперь приведем (краткое) сравнение этого метода с другим методом идентификации, изложенным в работе [8]. В ней рассматривалось ограниченное тело в \mathbb{R}^3 неизвестного внутреннего строения, состоящее из конечного числа однородных по химическому составу подобластей G_i . На первом этапе исследования методом компьютерного моделирования тело подвергалось облучению потоками рентгеновского излучения различной длительности Δt на различных энергиях. При этом вычислялись плотности потоков прошедшего сквозь тело излучения. Затем по результатам этого исследования путем решения обратной задачи для нестационарного уравнения переноса излучения находились границы подобластей. Также находились приближенные значения μ'_{ki} коэффициентов ослабления излучения в каждой из подобластей G_i для некоторой энергии E_k . Далее рассматривалась задача идентификации химического состава в каждой из подобластей. Как и в нашей работе рассматривалось то же известное нам множество M из 31 известного вещества и так же предполагалось, что каждое неизвестное вещество M_{0i} , заполняющее подобласть G_i , входит в множество M .

Один из предложенных в [8] способов идентификации вещества $M_{0i} \in M$ состоял в следующем. Значение коэффициента μ'_{ki} , найденное с неизвестной нам ошибкой на энергии E_k сравнивалось с точными значениями μ_{ki} коэффициентов для веществ из M . Вещество $M_x \in M$, для которого число $|\mu'_{ki} - \mu_{kx}|$ было наименьшим, объявлялось решением задачи идентификации. В [8] было показано, что при $\Delta t \rightarrow 0$ ошибка $|\mu'_{ki}(\Delta t) - \mu_{kx}| \rightarrow 0$, поэтому предлагавшийся в [8] метод идентификации является обоснованным. Далее в таблице 3 приведены некоторые результаты, полученные в работе [8], и дано их сопоставление с результатами, полученными в настоящей работе.

В первой колонке таблицы 3 указан номер неизвестного вещества, которое требуется идентифицировать. Во второй — значение

$$\delta_{CB}(14, i) = \min_{1 \leq j \neq i \leq 31} \delta_C(14, i, j) \quad (17)$$

и номер j^* вещества, на котором достигается минимум в (17), в третьей — сначала номер i вещества с коэффициентом ослабления, ближайшим к $\mu'_{14,i}$, а затем — вторым по близости при длительности импульса облучения $\Delta t = 1ps$ (пикосекунда), в четвертой — относительная ошибка $R = (\mu_{14,i} - \mu'_{14,i}) / \mu_{14,i}$ для вещества с номером i . Пятый и шестой столбцы аналогичны третьему и четвертому, но уже для длительности импульса облучения $\Delta t = 3ps$, а седьмой и восьмой столбцы — для длительности импульса облучения $\Delta t = 30ps$.

Во второй строке таблицы 3 помещена информация, относящаяся к идентификации неизвестного вещества 2. Жировая ткань. При длительности импульса $\Delta t = 1ps$ и $\Delta t = 3ps$ это вещество было идентифицировано правильно, а при $\Delta t = 30ps$ — неверно; ближайшей к $\mu'_{14,2}$ точкой оказалась точка $\mu_{14,18}$, соответствующая веществу 18. Полиэтилен.

Обратим особое внимание на то, что при $\Delta t = 1ps$ и $\Delta t = 3ps$ выполняется неравенство $R(\Delta t) < \delta_{CB}$, то есть то условие, при выполнении которого в утверждении 3 гарантируется единственность решения задачи идентификации. При $\Delta t = 30ps$ из табл. 3 мы видим, что $R(\Delta t) > \delta_{CB}$, и результат идентификации оказывается неверным. В третьей строке таблицы всегда выполняется неравенство $R(\Delta t) < \delta_{CB}$, и все результаты идентификации правильные. В четвертой строке таблицы при $\Delta t = 1ps$ мы имеем $R(\Delta t) < \delta_{CB}$, и неизвестное вещество идентифицировано правильно, а при $\Delta t = 3ps$ и $\Delta t = 30ps$ $R(\Delta t) > \delta_{CB}$, и неизвестное вещество идентифицировано неверно.

Таким образом, теоретические результаты настоящей работы согласуются с результатами работы [8], хотя метод идентификации в [8] был несколько иной.

Заключение

В заключение отметим следующее. В утверждении 3, на основе которого можно гарантировать единственность решения задачи идентификации, присутствует условие $\delta_k < \delta_C$. Величину δ_C мы можем легко найти для любой пары веществ из множества M и для любой энергии E_k . В то же время нахождение величины

$$\frac{|\mu_{k0} - \mu'_{k0}|}{\mu_{k0}}, \quad (18)$$

входящей в выражение (1), на практике может представлять заметную трудность, поскольку исследователь имеет дело только с ошибкой измерений прошедшего через среду сигнала (потока излучения). Для приближенного нахождения величины (18), которую, собственно, и естественно выбрать в качестве величины δ_k , можно предложить следующее. Изготовить «фантом» исследуемой на практике области, повторяющий геометрию области, и провести серию калибровочных испытаний в реальных условиях или методом математического моделирования, который использует исследователь при нахождении величины μ'_{k0} . В серии таких испытаний нужно поочередно заменять материал $M_0 \in M$ и каждый раз вычислять величину (18). Наибольшее значение величины (18), полученное в ходе этой серии испытаний, можно

взять в качестве величины δ_k . Несмотря на громоздкость такой работы, ее результаты, несомненно, будут полезны исследователю.

Перечислим основные результаты. В представленной работе сформулирована задача идентификации химического состава неизвестного вещества. Введено понятие критического числа $\delta_C(k, i, j)$ для пары веществ (M_i, M_j) и энергии E_k .

Получены достаточные условия существования и единственности решения задачи идентификации неизвестного вещества (утверждение 3).

Показано, что предварительное изучение множества всех критических чисел для всех возможных пар веществ и энергий позволяет найти конкретные числовые значения δ_k , входящие в достаточные условия единственности решения задачи идентификации.

Предложен способ нахождения тех значений энергии, которые лучше всего и хуже всего подходят для решения задачи.

Определенным недостатком предложенного метода идентификации является то, что для его эффективной реализации требуется заранее знать относительные ошибки δ_k , с которыми были получены приближенные значения коэффициентов ослабления излучения неизвестного вещества для всех используемых энергий.

Список литературы

- [1] Osama Mhmoed 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] Yokhana V. S. K., Arhatari B. D., Abbey B., “Materials Separation via the Matrix Method Employing Energy-Discriminating X-ray Detection”, *Appl. Sci.*, **12**:3198, (2022).
- [3] Komarskiy A., Korzhenevskiy S., Ponomarev A., Chepusov A., “Dual-Energy Processing of X-ray Images of Beryl in Muscovite Obtained Using Pulsed X-ray Sources”, *Sensors*, **23**:4393, (2023).
- [4] Osipov S. P., Udod V. A., 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.
- [5] Osipov S. P., Chakhlov S. V., Batranin A. V, Osipov O. S, “Theoretical study of a simplified implementation model of a dual-energy technique for computed tomography”, *NDT & E International*, **98**, (2018).
- [6] Osipov S. P., Temnik A. K., Chakhlov S. V., “The effects of physical factors on the quality of the dual high-energy identification of the material of an inspected object”, *Defektoskopiya*, **53**:8, (2014).
- [7] Berger M. J., Hubbell J. H., Seltzer S. M., Chang J., *XCOM: Photon Cross Section Database*, National Institute of Standards and Technology, Gaithersburg, 2005.
- [8] Nazarov V. G., Prokhorov I. V., Yarovenko I. P., “Identification of an Unknown Substance by the Methods of Multi-Energy Pulse X-ray Tomography”, *Mathematics*, **11**, (2023).

Поступила в редакцию
15 сентября 2024 г.

Работа выполнена в рамках государственного задания ИПМ ДВО РАН (№ 075-00459-24-00).

Nazarov V. G.¹ Using critical numbers in the problem of identifying an unknown substance. *Far Eastern Mathematical Journal*. 2024. V. 24. No 2. P. 235–251.

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

ABSTRACT

The problem of identifying the chemical composition of a homogeneous medium is considered based on the available approximate data on the values of the attenuation coefficient of X-ray radiation in this medium for a finite set of energies. It is assumed that the medium is one of the substances included in a predetermined finite set M . For each substance of the set M , the exact values of the attenuation coefficient are known for all energies from a predetermined finite set of energies E_1, \dots, E_N from the interval $[0.001-20]$ MeV. The data on the attenuation coefficients of the medium are known with a given error. The concept of a critical number for a pair of substances and energy is introduced. At the first stage of solving the problem, the set of all critical numbers for all possible pairs of substances from the set M and all the energies used is found. After that, the characteristics of the set of all critical numbers that are necessary for solving the problem are studied. Next, for each energy E_k , a set of substances close in value of the attenuation coefficient to the substance of the unknown medium is constructed. Then, from the resulting family of sets, the substance most suitable as a solution to the identification problem is selected. The formulation of the problem is considered justified in the problems of customs control and in medical tomography. The issue of the uniqueness of the solution to the identification problem is considered. Examples of calculations for a set of specific substances are given using some results of previously performed studies.

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