Обчислювальна та прикладна математика
Вип. 82, 1997, стор. 45–49

Computational and Applied Mathematics
No. 82, 1997, pp. 45–49

МАТЕМАТИЧЕСКИЕ И ИНФОРМАЦИОННЫЕ ПРОБЛЕМЫ ЭЛЕМЕНТНОГО АНАЛИЗА ВЕЩЕСТВА И ИЗЛУЧЕНИЯ НА БАЗЕ РАДИОЛОГИЧЕСКИХ МЕТОДОВ ИЗМЕРЕНИЙ И КОНТРОЛЯ

УДК 519.67

П. Н. ЗАИКИН И Т. Б. ПОДОСЕНОВА

РЕЗЮМЕ. Рассматриваются математические и информационные проблемы элементарного анализа вещества и излучения на базе радиологических методов измерений и контроля. Предложена технология решения проблем элементарного анализа на алгоритмическом уровне. Представлены некоторые результаты работы интеллектуальных систем обработки данных.

Радионуклидные методы пробоотборного анализа (элементного анализа проб), основанные на природной или наведенной активности вещества, позволяют быстро и сравнительно дешево оценить относительное содержание компонентов в анализируемых пробах и реально проводить паспортизацию работы предприятий и состояния объектов и регионов; применение неразрушающих спектрометрических методов пробоотборного анализа является основой ряда современных систем контроля и оптимизации управления технологическими процессами. При этом стремление к получению максимума достоверной информации из результатов наблюдений, повышение требований по защите окружающей среды и персонала привело к значительному усложнению измерительных устройств, моделей и прикладного математического обеспечения.

На концептуальном уровне схема элементного анализа достаточно прозрачна и, в случае определения элементного состава вещества/излучения методами ядерной спектроскопии, состоит в следующем. Измеряется интенсивность радиационного (натурного или инициированного) излучения (альфа-, гамма- и др.) вещества как функция энергии/времени. Требуется определить относительное содержание элементов в пробе.

Исходные данные (измеряемые спектры) после регистрации преобразуются к дискретному виду и помещаются в буферную память экспериментальной установки (регистрирующие устройства трансформируют информацию к дискретному (числовому) виду с помощью аналого-цифровых преобразователей). Буферная память прибора состоит из набора ячеек, эти ячейки часто называют каналами. Диапазон энергий регистрируемых частиц (для разных приборов он может быть свой) разбивается на поддиапазоны, количество которых соответствует числу каналов; в канале накапливается информация о числе зарегистрированных частиц с энергиями из соответствующего поддиапазона.

Математическая модель регистрируемых данных рассматривается обычно в виде суммы локальных резонансных унимодальных функций, гладкой фоновой (базовой)

©1997 ТВіМС, Наукове видавництво

компоненты, часто носящей мешающий характер, и шумовой компоненты. В пробоотборном анализе резонансные компоненты связаны с проявлением отдельных фрагментов "линейчатых" спектров интересующих нас компонент вещества, а фоновая компонента есть результат рассеянного (отраженного, тормозного и др.) излучения.

Вследствие наличия процесса дискретизации при регистрации данных, в модели данных необходимо учитывать функцию эффективности (прибора, аппаратуры) и калибровочные зависимости. Связь между двумя шкалами измерений — энергии и каналов — обычно называют "калибровкой". Калибровочные зависимости представляют собой аппроксимационные модели и имеют вид полиномов невысоких степеней, быть может, с точкой разрыва (старшей) производной. К сожалению, коэффициенты функций калибровки изменяются во времени, и потому подлежат коррекции; существенным фактором является также невозможность фиксации параметрических характеристик этих функций в паспорте прибора или устройства. В силу этого задачи оценивания и моделирования калибровочных зависимостей и функции эффективности включаются в технологию обработки результатов измерений.

Гипотетически часто полагают, что спектры альфа-, гамма- излучения (ядер, вещества) являются (в идеале) линейчатыми, т.е. представляют собой суперпозицию одиночных линий типа дельта-функций, положения которых совпадают с энергиями излучения ядер, а весовые коэффициенты пропорциональны их парциальным интенсивностям и числу ядер. Однако измерительная аппаратура привносит значительные искажения в теоретическое представление спектра. Механизм регистрации излучения часто описывают интегральным оператором; ядро интегрального преобразования представляет собой аппаратную функцию — функцию отклика прибора на излучение.

Используются разнообразные функции для описания адекватных математических моделей спектральных кривых. В зависимости от используемой в эксперименте измерительной аппаратуры формы одиночных линий спектра могут модифицироваться от симметричных к асимметричным слева или справа относительно положения линии. Наличие аддитивных процессов, протекающих при детектировании гамма-квантов или альфа-частиц, приводит к тому, что одиночная линия спектра является суммой компонент, моделирующих соответствующие процессы.

К числу особенностей рассматриваемых нами классов процессов и моделей данных отнесем неотрицательность компонент весовой функции, функции эффективности регистрации и всех линейных (квазилинейных) параметров, за исключением коэффициентов калибровочной зависимости. Отметим также, что гладкость нормировочных и масштабирующих функций калибровки и эффективности и экспоненциальный или квазиэкспоненциальный вид резонансных неоднородностей позволяют во многих случаях пренебрегать необходимостью численного интегрирования по каналу в прямых задачах моделирования, что весьма важным является выявление возможной асимметрии весовой функции даже в случае полностью изолированного резонанса, при этом количественные характеристики сдвига и искажений изменяются при учете влияния соседних линий и принципиально не могут быть сформулированы в общем случае в рамках явных функциональных зависимостей, что приводит к необходимости активного использования машинной симуляции объектов и процессов предметной области.

Итак, основной вывод, который следует сделать в результате проведенного анализа: проблема определения элементного состава вещества/излучения относится к

категории так называемых обратных задач и для своего решения требует построения регулярных или регуляризирующих алгоритмов. Для их построения предлагается, с одной стороны, активно привлекать накопленную экспертами фактографическую оцененную информацию из банков знаний об экспоненциальных показателях компонент в суперпозиции, с другой — использовать имеющуюся в тех же банках информацию о пропорциональных соотношениях между интенсивностями компонент в моделях линейчатых спектров для ансамблей (серий) каждого элемента, изотопа, изомера.

Интегрированная интеллектуальная среда решения задач обработки данных, описываемых математическими моделями типа вложенных интегральных либо алгебраических операторов, включает в себя алгоритмы и методы, позволяющие по информации из банков данных и результатам наблюдений оценить или идентифицировать линейные (квазилинейные) характеристики каждого оператора, определить нелинейные параметры характеристик структур локальных неоднородностей резонансного типа, найти параметры искажений афинного типа в наблюдаемых данных. Математической основой разрабатываемых компьютерных систем обработки данных являются:

прецизионные (многопараметрические) математические модели, аппроксимирующие весовую функцию регистрирующей аппаратуры, различные калибровочные зависимости и базовую компоненту;

оригинальные численные методы оценивания параметров моделей и количественного содержания компонентов в пробе из сравнения экспериментальных спектров и моделируемых из банков оцененных данных с учетом прецизионных моделей резонансных компонентов, базовой подложки и калибровочных зависимостей;

оценивание качества подгонки (приближения) с применением методов математической статистики, эмпирических методик и др.

Кроме этого, важно отметить, что в наших системах оптимизация характеристик математических моделей и вычислительных методов проводится из анализа конечных целей эксперимента или технологического процесса, а не промежуточных результатов на этапах обработки.

Программные средства, реализующие методики обработки данных, включают в себя оригинальные мониторы, позволяющие осуществить как пошаговую обработку, так и более сложные схемы анализа данных. Они практически реализуют интеллектуальные автоматизированные рабочие места на ПЭВМ.

Существенной особенностью этих программных средств является активное использование банков накопленных фактографических (справочных) данных и элементов баз знаний, диалого-графических интерфейсов. Эта диалого-графическая среда позволяет оперировать с графическими образами объектов, составлять на специальном языке и запускать (активизировать) сложные схемы обработки данных и вычислений конечных результатов, позволяет включать в компьютерные системы такие элементы экспертно-методической поддержки, как статусная строка на экране, перекрестные семантически согласованные ссылки (в системе "помощи"), советы и подсказки на различных этапах обработки данных.

Разработанные нами компьютерные системы являются конкурентоспособными по сравнению с отечественными и зарубежными аналогами, а по ряду характеристик и превосходят их. Достаточно отметить такие результаты, как:

— оригинальные алгоритмы автоматизированного определения начальных значений параметров весовой функции (без прямого участия пользователя) в случае отсутствия одиночных линий в наблюдениях, а также для предельно малых статистик;

— оригинальные, хорошо учитывающие физическую специфику задачи, алгоритмы предварительного оценивания и коррекции параметров базовой компоненты, обеспечивающие устойчивость процедуры ее выделения;
— предложенная технология решения проблем элементного анализа (от предварительного оценивания калибровки до оценивания количественного содержания нуклидов и коррекции параметров весовой функции и калибровки), базируясь на билинейной связи квазилинейных параметров и квазиэкспоненциальной зависимости от нелинейных параметров в аппроксимирующей модели, заключается в поочередном применении соответствующих групп вычислительных алгоритмов оценивания и компьютерного моделирования с использованием банков фактографических данных, тогда как известные аналоги обычно используют алгоритмы нелинейного метода наименьших квадратов; этот оригинальный подход обеспечил большую надежность и достоверность результатов;
— разработанные программные средства (ПС) представляют собой объединение вычислительных модулей, средств взаимодействия с банками фактографических данных, диалого-графического интерфейса и экспертно-методической поддержки; принципиальным является предоставление пользователю-эксперту средств адаптации (настройки) программного продукта на характеристики его потоков данных и особенности технологического процесса или эксперимента.

По результатам разработанных компьютерных технологий созданы и успешно эксплуатируются реальные интеллектуальные системы обработки излучений в радионуклидной спектрометрии, пробоотборного аналитического анализа и радионуклидного контроля технологических процессов, в частности, применяемых для контроля и мониторинга среды, объектов и сооружений, в медицинской радиологии, при ветеринарном контроле продуктов питания, при радионуклидном анализе стройматериалов и др.

Компьютерные системы иллюстрируют возможности достаточно надежного обнаружения на не слишком дорогостоящей аппаратуре даже малых доз примесей в анализируемых пробах (для альфа-спектрометрии) и при полном отсутствии одиночных откликов (линий) в наблюдаемых спектрах, а также количественного оценивания содержания этих примесей как на бедной, так и достаточно высокой статистике при значительном гладком дрейфе аппаратной функции.

Литература

1. P. N. Zaikin, T. B. Podosenova, Eu. Yu. Shchetinin, *Inverse problems and intellectual data processing technologies in the researcher's computer environment*, Programming and mathematical techniques in physics (Proceedings of the International Conference on programming and mathematical methods for solving physical problems; Dubna, 14–19 June 1993)., World Scientific Publisher Co.Pte.Ltd, Singapore, 1994, стор. 148–156.
2. П. Н. Заикин, Т. Б. Подосенова, *Информационно-методическое обеспечение программных средств пакетов прикладных программ обработки спектров Модели предметной области. Этапы обработки, алгоритмы и технологические приемы. Приложение к описанию пакетов SPECTRUM, SPECTR–2, ASA, ALPHA, RESOLVER и др. Аналитический обзор*, Деп. в ВИНИТИ РАН 15.11.95 N 3028-В95. (1994), 1–78.
3. П. Н. Заикин, И. И. Пециляк, Т. Б. Подосенова, *Диалого-графическая среда Tower Graphics как средство манипуляции с одномерными функциями*, Деп. в ВИНИТИ 15.11.95 N 3029-В95. (1995), 1–64.

4. П. Н. Заикин, Е. Ю. Щетинин, *Метод построения базовой компоненты в классе функций ограниченной вариации*, Численные методы в математической физике, Изд-во Моск.ун-та, Москва, 1996, стор. 137–146.

МОСКОВСКИЙ ГОСУНИВЕРСИТЕТ, Ф-Т ВЫЧИСЛ. МАТЕМ. И КИБЕРНЕТИКИ, РОССИЯ, 119899, МОСКВА, ВОРОБЬЕВЫ ГОРЫ, МГУ

Поступила 20.10.96