На правах рукописи

Орлов Геннадий Сергеевич

# МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ДВУХМЕРНЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ОБРАБОТКИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

**Специальность 05.13.14 -**
**Системы обработки информации и управления**

АВТОРЕФЕРАТ

диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

**Рязань 1998**

Работа выполнена в Рязанской государственной радиотехнической академии.

Научный руководитель :

Заслуженный деятель науки и техники РФ,
академик международной академии информатизации,
доктор технических наук,
профессор Чураков Е. П.

Официальные оппоненты:

Доктор технических наук,
профессор Колосов О. С.,
кандидат технических наук,
доцент Богданов В. С.

Ведущее предприятие - Научно-исследовательский технологический институт, г. Рязань.

Защита состоится 23 декабря 1998 г. в 12$^{00}$ часов на заседании диссертационного совета ССД 063. 04.01 в Рязанской государственной радиотехнической академии по адресу : г.Рязань, 391000, ГСП, ул. Гагарина, д. 59/1.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке Рязанской государственной радиотехнической академии.

Автореферат разослан ....18....... ноября 1998 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
к.т.н., доцент

В.Н.Пржегорлинский

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность работы. Современный этап развития научно-технического прогресса немыслим без тщательного контроля за качеством сверхтонких пленок из сверхчистого вещества, которые являются исходным материалом в таких отраслях промышленности как радиотехника, микроэлектроника, машино- и приборостроение. Как известно, анализ таких пленок производится различными спектрометрическими методами, а полученные при этом данные обрабатываются на ЭВМ с использованием различных математических методов. Поэтому задача разработки новых более точных методов и алгоритмов является одной из наиболее актуальных в настоящий момент.

Диссертационная работа посвящена разработке математических методов и созданию на их основе программно-алгоритмического обеспечения для автоматизированных систем обработки спектрометрических данных, получаемых на выходе регистрирующего устройства в процессе исследования вещества методами электронной и ионной спектрометрии. Основной особенностью разрабатываемых в данной работе методов и алгоритмов является то, что они, в отличие от других известных методов и алгоритмов, учитывают исходную двухмерность физического явления вторичной электронной ( ионной ) эмиссии.

Хорошо известно, что с точки зрения математики задача обработки спектрометрической информации сводится к обратной некорректной задаче, поэтому основой применяемого в данной работе математического аппарата послужили известные принципы решения обратных некорректных задач, соответствующим образом спроецированные на решаемую инженерную задачу, а также новые оригинальные методы.

Главной особенностью рассматриваемой математической модели в форме двухмерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода является то, что в ней впервые учитывается физическая двухмерность процесса спектрометрии. Говоря другими словами, обработка полученной на выходе регистрирующего устройства информации ведется с учетом того, что в ее составе имеется не только информация об электронах и ионах вещества исследуемой пространственно-временной точки объекта изучения, но и информация об электронах и ионах вещества из некоторой $\varepsilon$-окрестности данной точки. Важной особенностью рассматриваемой задачи является ее существенная некорректность, возникающая по причине сильной неустойчивости приближенного решения на фоне неточно известного ядра интегрального оператора и обязательно присутствующей аддитивной помехи в показаниях регистрирующей системы, которые, собственно говоря, и являются исходными данными при решении этой задачи.

Как показал проведенный в главе 1 диссертации анализ, большинство численных алгоритмов, созданных на основе известных методов, ориентировано на решение одномерных задач. Мало того, все они, без исключений, применимы лишь для конкретных узко специализированных ситуаций, для которых характерно наличие тех или иных ярко выраженных особенностей в ядре интегрального оператора.

<u>Цель работы и основные этапы исследований</u>. Целью настоящей диссертационной работы является создание программно-алгоритмического обеспечения автоматизированной системы обработки спектрометрической информации на базе современных математических методов и ПЭВМ, с учетом физической двухмерности исходной прикладной задачи. Такая система должна быть ориентирована на широкий класс возможных аппаратных функций, а математические методы, используемые в ней, должны находить устойчивое приближенное решение соответствующего интегрального уравнения при неточно известной исходной информации и приближенно известной аппаратной функции.

Перечислим основные этапы процесса решения поставленной задачи:

1. В результате аналитического обзора существующих методов и алгоритмов решения обратных некорректных задач были выделены те методы и подходы, которые могут быть использованы для решения поставленной задачи.

2. На базе некоторых известных одномерных методов разработаны численные алгоритмы решения двухмерной обратной задачи, доведенные до конкретной программной реализации.

3. В процессе модификации одномерного метода разложения искомого решения в частичную сумму функционального ряда по системе собственных функций оператора был разработан пакет программ для решения возникающей при этом спектральной задачи - задачи нахождения с требуемой точностью заданного числа собственных значений и функций интегрального оператора.

4. С целью экономии временных и аппаратных затрат был разработан алгоритм поиска решения в виде частичной суммы функционального ряда, не требующий предварительного решения спектральной задачи.

5. Получены теоретические оценки верхней и нижней границ погрешности аппроксимации при представлении функции в виде частичной суммы функционального ряда.

6. На основании идеи д-ра.техн.наук, проф. Чуракова Е. П. был разработан новый, более точный метод численного решения обратных двухмерных некорректных задач - метод обобщенной ортогонализации.

7. Были проведены исследование и сопоставление свойств различных методов регуляризации, в результате чего для решения плохо обусловленных систем линейных уравнений большой размерности был применен рекуррентный метод наименьших квадратов ( РМНК ), регуляризирующие свойства которого обоснованы и исследованы в данной работе.

8. При разработке численного алгоритма метода обобщенной ортогонализации была успешно решена задача выбора системы

базисных функций, обладающих свойством " инвариантной ортогональности " по отношению к операции интегрирования.

9. В результате применения алгоритма параметрической идентификации была решена задача существенного понижения размерности систем линейных уравнений в алгоритмах нахождения нормального псевдорешения с использованием РМНК.

10. На основе модифицированных и разработанного методов решения обратных двухмерных некорректных задач были разработаны пакеты программ для обработки спектрометрической информации, которые были внедрены в пакеты программно-математического обеспечения при создании автоматизированной системы обработки спектрометрической информации в рамках НИР, проводимой совместно с Научно-исследовательским технологическим институтом г. Рязани.

11. Было проведено тщательное тестирование полученных алгоритмов путем численного моделирования различных возможных ситуаций.

12. Был проведен анализ результатов обработки экспериментальных данных, полученных в процессе проведения физического эксперимента различными алгоритмами, и получены количественные оценки точности обработки спектрометрической информации.

Методы исследования. В предлагаемой диссертационной работе широко использовались различные известные теоретические методы решения обратных некорректных задач. Корректное применение современного математического аппарата на языке функциональных пространств позволило найти новые подходы к решению поставленной задачи. Применение методов дискретной математики и современного численного анализа было необходимым при создании вычислительных алгоритмов.

Научная новизна работы. Автором получены следующие новые результаты, которые выносятся на защиту :

1. Впервые предложено учитывать физическую двухмерность задачи обработки спектрометрической информации.

2. Используя идеи Е.Л.Жуковского и Р.Ш.Липцера, удалось показать, что рекуррентный метод наименьших квадратов является регуляризирующим алгоритмом. Предложен алгоритм выбора оптимального значения параметра регуляризации.

3. В результате самостоятельного подхода разработан новый метод решения двухмерных обратных некорректных задач, применимый для произвольных аппаратных функций.

4. Предложен и теоретически обоснован метод последовательного поиска решения по системе непересекающихся подобластей области поиска решения.

Практическая ценность выполненных исследований заключается в разработке методов, алгоритмов, а также програмного обеспечения решения обратной некорректной задачи обработки спектрометрической информации. Учет физической двухмерности процесса спектрометрии, математическая модель которого описывается двухмерным интегральным уравнением Фредгольма первого рода, позволил повысить точность измерения количества напыленного на подложку чистого вещества на 10 - 17 % по сравнению с алгоритмами, не учитывающими эту особенность процесса спектрометрии. Кроме того, разработанные в диссертационной работе методы и алгоритмы не содержат ограничений на аппаратную функцию системы регистрации и учитывают как погрешность регистрируемых данных, так и погрешность самой аппаратной функции.

Реализация результатов работы. На основании теоретических и практических результатов диссертационной работы, отраженных в отчетах по 2 госбюджетным и 3 хоздоговорным НИР, осуществлено внедрение в Научно-исследовательском технологическом институте Министерства электронной промышленности г.Рязани программно-алгоритмического продукта обработки спектрометрической информации, разработанного на основе исследованных в диссертации методов и алгоритмов решения двухмерных обратных некорректных задач с произвольным ядром интегрального оператора и приближенно известных регистрируемых данных и аппаратной функции системы регистрации. Отдельные результаты диссертационной работы внедрены в учебный процесс РГРТА в рамках читаемых автором дисциплин «Численные методы», «Вычислительная математика» и «Уравнения математической физики».

Апробация работы. Основные положения и результаты диссертационной работы обсуждались на пяти международных и всесоюзных конференциях и семинарах :

" Методы представления и обработки случайных сигналов и полей ", Харьков, 1991;

" Технологии и системы сбора, обработки и представления информации ", Рязань, 1993;

" Повышение эффективности средств обработки информации на базе математического и машинного моделирования ", Тамбов, 1995;

" Новые информационные технологии в научных исследованиях радиоэлектроники ", Рязань, 1996;

" Проблемы передачи и обработки информации в информационно-вычислительных сетях ", Рязань, 1997.

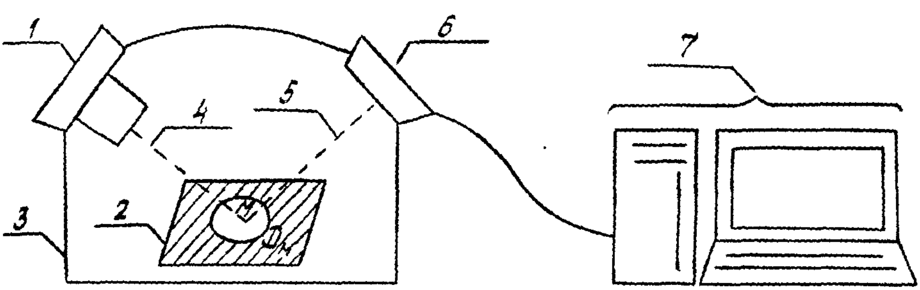
Отдельные результаты работы докладывались на межвузовских и межкафедральных НТК, неоднократно обсуждались на заседаниях научного семинара кафедры автоматики и математического моделирования РГРТА ( РРТИ ).

Публикации. Основные результаты диссертации отражены в 12 печатных работах.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения и четырех глав, изложенных на 228 страницах машинописного текста, иллюстрированного 118 рисунками и 16 таблицами. Имеется список литературы, содержащий 74 наименования. Каждая глава заканчивается обзором основных результатов, полученных в данной главе.

## ОСНОВНОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

Во введении приводится структура диссертации и дается постановка основной решаемой задачи - задачи обработки спектрометрической информации, математической моделью которой является двухмерное интегральное уравнение Фредгольма первого рода. Суть инженерной постановки задачи такова. Имеется некоторый объект ( например, химическое вещество, напыленное на подложку ), который необходимо исследовать спектрометрическими методами. Пусть электронная пушка 1 измерительной спектрометрической системы ( см. рисунок ) нацелена в некоторую точку М поверхности объекта исследований 2 , расположенного в вакуумной камере 3 , и осуществляет ее " бомбардировку " частицами 4 с энергетическим уровнем $t$ . Результатом этого обстрела будет поток вторичных частиц и оже-электронов 5 с энергией $t' \in (t-T, t+T)$, где значение константы $T$ определяется совокупными свойствами объекта исследований и измерительной аппаратуры.




Принципиальная схема процесса спектрометрии.

1 - электронная пушка, 2 - объект исследования, 3 - вакуумная камера, 4 - поток первичных электронов, 5 - поток регистрируемых частиц, 6 - устройство регистрации, 7 - система обработки спектрометрической информации на базе ПЭВМ

Как показали проведенные исследования, регистрируемые датчиком системы 6 частицы вылетают не только из самой точки М, но также и из некоторой ее круговой окрестности $D_M$ малого радиуса . Если $Z(t', \bar{r}')$ есть функция, описывающая интенсивность вторичных и оже-электронов в точке объекта $(x', y') = \bar{r}' \in D_M$ , а $K(t', \bar{r}' \mid t, \bar{r})$ - аппаратная функция спектрометрического измерителя 6 , физически характеризующая полноту регистрации частиц, генерируемых в точке с радиус-вектором $\bar{r}' \in D_M$ и обладающих энергией $t' \in (t - T, t + T)$ , то на выходе системы регистрации будет сигнал, описываемый выражением вида

$$V(t, \bar{r}) = \iint\limits_{D_M} \int_{t-T}^{t+T} Z(t', \bar{r}') K(t', \bar{r}' \mid t, \bar{r})\, dt' d\bar{r}' + P(t, \bar{r}), \qquad (1)$$

где $P(t, \bar{r})$ интерпретируется как шум, обусловленный несовершенством измерительной системы и принципов ее работы. Для подавляющего большинства спектрометрических измерительных систем допустимо следующее представление аппаратной функции $K(t', \bar{r}' \mid t, \bar{r}) = \tilde{\gamma}(\bar{r}' \mid \bar{r}) \cdot \mu(t' \mid t)$ . Если измерения во всех точках объекта проводятся на одном и том же энергетическом уровне $t$ , то от ( 1 ) придем к выражению вида

$$V(\bar{r}) = \iint\limits_{D(\bar{r})} Z(\bar{r}') \cdot \tilde{\gamma}(\bar{r}' \mid \bar{r})\, d\bar{r}' + P(\bar{r}), \qquad (2)$$

которое и является пространственной моделью спектрометрических измерений.

Таким образом, имеем следующую формулировку двухмерной задачи спектрометрии. Пусть для некоторой точки $\bar{r} = (x, y)$ объекта исследований проведено спектрометрическое измерение, результатом которого является величина $V(\bar{r})$ , представимая моделью ( 2 ), в которой аппаратная функция ( ядро интегрального оператора ) известна приближенно ( в том смысле, что $\left\| \gamma_T(\bar{r}' \mid \bar{r}) - \tilde{\gamma}(\bar{r}' \mid \bar{r}) \right\| \le \xi$, где величина $\xi$ известна ). Аддитивная помеха $P(\bar{r})$ представляется в виде случайной величины с известным ( обычно равным нулю ) математическим ожиданием и заданной дисперсией. Требуется найти устойчивое приближенное решение $\hat{Z}(r)$ уравнения ( 2 ), наилучшим, в смысле некоторого критерия, образом соответствующего полученному измерению $V(\bar{r})$. В данной работе в качестве такого критерия выбрано следующее условие :

$$\left\| V(\bar{r}) - \iint\limits_{D(\bar{r})} Z(\bar{r}') \cdot \tilde{\gamma}(\bar{r}' \mid \bar{r})\, d\bar{r}' \right\|^2 \to \min_{Z(\bar{r})}, \bar{r} \in \pi . \qquad (3)$$

Первая глава посвящена аналитическому обзору известных методов и алгоритмов решения обратных некорректных задач. Основное внимание в ней уделяется вопросам построения регуляризирующих алгоритмов и границам применимости конкретных методов, возможности их модификации для решения основной поставленной задачи. Исследуются вопросы существования и единственности соответствующего задаче ( 2 ) операторного уравнения Kz=u. Приводится собственное доказательство существования и единственности решения в рамках построенной математической модели. Обосновывается целесообразность применения на промежуточных этапах решения интерполяционных и сглаживающих сплайнов, анализируются известные подходы к численному решению двухмерных некорректных задач.

Результаты проведенного в первой главе анализа позволяют сделать вывод о том, что в настоящее время отсутствуют устойчивые численные методы и соответственно алгоритмы решения двухмерных некорректных задач, ориентированные на обработку экспериментальных данных в автоматизированных спектрометрических системах с произвольной аппаратной функцией.

Вторая глава посвящена построению численных алгоритмов решения поставленной задачи на основе модифицированного метода сдвига по параметру и метода разложения искомого решения в частичную сумму функционального ряда по собственным функциям интегрального оператора. Решается задача оптимального выбора фиксированного числа собственных функций в соответствии с критерием

$$\left\| \tilde{V} - \tilde{K}\left(\sum_{j=1}^{N} C_j \phi_j^k\right) \right\|^2 \to \min_{k \in J}, \qquad (4)$$

где $\left\{\phi_i^k\right\}_{i=1}^N - k -$я система собственных функций оператора $\tilde{K}$, а $J -$ некоторое индексное множество. Проводится анализ возможной ситуации, когда в результате погрешностей вычислений собственные функции интегрального оператора не будут обладать свойством ортогональности. Доказывается, что и в этом случае приближенное решение может быть найдено, приводится алгоритм его поиска.

Так как частичная спектральная задача сама по себе является трудоемкой и вносит дополнительные погрешности в решение основной задачи, то далее в главе 2 разрабатывается новый численный метод решения, основанный на разложении искомого решения в частичную сумму функционального ряда по произвольной ортонормированной системе базисных векторов $\left\{\overline{\phi}_i\right\}_{i=1}^N$. Решение в этом случае имеет вид :

$$\hat{Z} = \sum_{i=1}^{N} \frac{\left(\tilde{K}^T \tilde{V}, \overline{\phi_i}\right)}{\left\|\overline{\phi_i}\right\|^2} \cdot \left(\tilde{K}^T \tilde{K} + \alpha \cdot E\right)^{-1} \overline{\phi_i}. \qquad (5)$$

<u>В третьей главе</u> рассматривается новый метод решения двухмерной задачи обработки спектрометрической информации - метод обобщенной ортогонализации. Суть метода состоит в следующем. Пусть требуется найти приближенное решение интегрального уравнения

$$\int_D Z(\overline{r}')\tilde{\gamma}(\overline{r}' \mid \overline{r})d\overline{r}' = \tilde{V}(\overline{r}), D \subset R^{\kappa}, \kappa = 1,2, \qquad (6)$$

описывающего одномерный $(\kappa=1)$ или двухмерный $(\kappa=2)$ процесс спектрометрии. Зададимся некоторой системой линейно независимых функций специального вида $\{\phi_{i,j}(\bar r)\}_{i,j=1}^{n-1}, \bar r \in R^{\kappa}, \kappa = 1,2.$ Приближенное решение будем искать в виде частичной суммы функционального ряда

$$\hat Z(\bar r) = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} s_{i,j}\phi_{i,j}(\bar r). \qquad (7)$$

Далее, введем обобщенное скалярное произведение функций $\xi(\bar r)$ и $\eta(\bar r)$ по правилу $[\xi(\bar r), \eta(\bar r)] = \int_D h(\bar r)\xi(\bar r)\eta(\bar r)d\bar r$, где $h(\bar r)$ - неизвестная пока весовая функция. Неопределенные коэффициенты $s_{i,j}$ разложения ( 7 ) найдем как решение следующей экстремальной задачи :

$$\left\| \tilde V(\bar r) - \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} s_{i,j}\cdot\int_D \phi_{i,j}(\bar r')\cdot\tilde\gamma(\bar r'|\bar r)d\bar r' \right\|^2 \to \min_{s_{i,j}}, \qquad (8)$$

где взята норма $\|\cdot\| = \sqrt{[\cdot,\cdot]}$.

Обозначив через $Q_{i,j}(\bar r) = \int_D \phi_{i,j}(\bar r')\tilde\gamma(\bar r'|\bar r)d\bar r'$, перепишем ( 8 ) в виде

$$\left\| \tilde V(\bar r) - \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} s_{ij}Q_{ij}(\bar r) \right\|^2 \to \min_{s_{ij}}. \qquad (9)$$

Из необходимого условия экстремума следует, что

$$\left[\tilde V(\bar r), Q_{lm}(\bar r)\right] = \sum_{i=0}^{n-1}\sum_{j=0}^{n-1} s_{ij}\cdot\left[Q_{ij}(\bar r), Q_{lm}(\bar r)\right].$$

Поставим задачу подобрать весовую функцию $h(\bar r)$ таким образом, чтобы

$$\left[Q_{ij}(\bar r), Q_{lm}(\bar r)\right] = \delta_{ij}^{lm} = \begin{cases} 1, (i=l)\wedge(j=m), \\ 0, (i\neq l)\vee(j\neq m). \end{cases}$$

Для этого заменим $Q_{ij}(\bar r)$ аппроксимирующими их функциями :

$Q_{ij}(\bar r) \approx \sum_{p=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1} q_{pk}^{ij} \cdot \phi_{pk}(\bar r)$ , где $q_{pk}^{ij} = \frac{1}{\lambda_{pk}} \cdot \int_D \phi_{pk}(\bar r) Q_{ij}(\bar r) d\bar r$ , а $\lambda_{pk} = \int_D \phi_{pk}^2(\bar r) dr$ . Затем введем на области $D$ $\varepsilon$-сеть , содержащую n узлов. Пусть система базисных функций такова, что для любой функции $\eta(\bar r)$ из рассматриваемого класса функций выполняется $\eta(\bar r_q) = \eta(\bar r_q) \cdot \phi_{p(\bar r_q)k(\bar r_q)}(\bar r_q)$ для единственных для данного $\bar r_q$ индексов p и k. Заметим, что в качестве такой системы можно взять систему функций Лагранжа. Если теперь обозначить $\left[ \phi_{pk}(\bar r), \phi_{\mu\nu}(\bar r) \right] = \int_D h(\bar r) \phi_{pk}(\bar r) \phi_{\mu\nu}(\bar r) d\bar r$ через $b_{pk}^{\mu\nu}$, то задача выбора весовой функции $h(\bar r)$ сведется к решению системы линейных алгебраических уравнений

$$\sum_{p=0}^{n-1}\sum_{k=0}^{n-1}\sum_{\mu=0}^{n-1}\sum_{\nu=0}^{n-1} q_{pk}^{ij} \cdot q_{\mu\nu}^{lm} \cdot b_{pk}^{\mu\nu} = \delta_{ij}^{lm} \quad . \qquad (10)$$

Решение системы ( 10 ) $A\bar x = \bar y$, которая содержит $n^4$ уравнений с $(n^4+n^2)/2$ неизвестными, удобнее всего искать с помощью РМНК, так как в общем случае матрица $A^*A$ может быть плохо обусловленной или даже вырожденной. Если обозначить через $a_i$ $i$-ю строку матрицы A системы, а через $D_k^\delta = (\delta^2 \cdot E + \sum_{i=1}^{k} \bar a_i^T \cdot \bar a_i)^{-1}$, то на k - м шаге ( по k первым уравнениям системы ) приближенное решение ( 10 ) будет иметь вид :

$x_k^\delta = (\delta^2 \cdot E + \sum_{i=1}^{k} \bar a_i^T \cdot \bar a_i)^{-1} \cdot \sum_{i=1}^{k} \bar a_i^T \cdot \bar y_i$ . Применив известную лемму об обращении матрицы, получим алгоритм, определяющий РМНК :

$$\bar x_k^\delta = \bar x_{k-1}^\delta + D_k^\delta \cdot \bar a_k^T \cdot ( y_k - \bar a_k \cdot \bar x_{k-1}^\delta ),\ k = \overline{1,m},$$

$$D_k^\delta = D_{k-1}^\delta - q_{k-1}^\delta \cdot D_{k-1}^\delta, \quad q_{k-1}^\delta = \frac{D_{k-1}^\delta \cdot \overline{a}_k^T \cdot \overline{a}_k}{1 + \overline{a}_k \cdot D_{k-1}^\delta \cdot \overline{a}_k^T}, D_0^\delta = \frac{1}{\delta^2} \cdot E,$$

где $\delta^2$ играет роль параметра регуляризации.

Здесь же доказывается утверждение о том, что РМНК является регуляризирующим алгоритмом, и строится алгоритм оптимального выбора параметра регуляризации по критерию минимума нормы невязки с учетом согласования с погрешностью входных данных. Исследуется вопрос о возможности проведения обработки спектрометрической информации не сразу по всей исследуемой области $D$, а последовательно, по отдельным непересекающимся подобластям $D_k$ $(D = \bigcup_{k=1}^{\Omega} D_k, D_i \cap D_j = \varnothing, i \neq j)$. Доказывается теорема, что при применении такой последовательной обработки точность решения не ухудшается.

Следствием исходной двухмерности рассматриваемой задачи является большая размерность матриц систем линейных уравнений. Поэтому в главе 3 решается вопрос о предварительном понижении размерности системы перед применением РМНК. Эта цель достигается представлением вектора решений $\overline{x}$ системы $A \cdot \overline{x} = \overline{y}$ $(A \in R^{m \times n}, \overline{x} \in R^n, \overline{y} \in R^m)$ в виде дискретной функции, зависящей от (k+1) << n аргументов :

$\overline{x} = \phi(C_0, C_1, ..., C_k, t) = C_0 + C_1 \cdot t + ... + C_k \cdot t^k$, причем $x_i = \phi(t_i)$ $(i = \overline{1,n})$ для некоторой последовательности аргументов $t_1, ..., t_n$ При такой замене первоначальная система уравнений сводится к системе

$$\begin{cases} \sum\limits_{p=0}^{k} \left( \sum\limits_{j=1}^{n} a_{ij} \cdot t_j^p \right) \cdot C_p = y_1, \\ \qquad \qquad \dots \\ \sum\limits_{p=0}^{k} \left( \sum\limits_{j=1}^{n} a_{mj} \cdot t_j^p \right) \cdot C_p = y_m \end{cases} \qquad \widetilde{A} \cdot \overline{C} = \overline{y},$$

относительно неизвестных коэффициентов $C_0, C_1, \dots, C_k$ с матрицей размерности $\left[m\times(k+1)\right]$, причем $\widetilde{A}=A\cdot T$, где $T=\begin{bmatrix}1 & t_1 & \dots & t_1^k\\ 1 & t_2 & \dots & t_2^k\\ . & . & . & .\\ 1 & t_n & \dots & t_n^k\end{bmatrix}$.

Нетрудно показать, что при такой замене имеет место соотношение $cond^+(\widetilde{A})\le\dfrac{\left\|\widetilde{A}^+\right\|}{\left\|A^+\right\|}\cdot cond^+(A)$ , где $A^+$, $\widetilde{A}^+$ псевдообратные матрицы соответственно к $A$ и $\widetilde{A}$, а - $cond^+(A)=\|A\|\cdot\|A^+\|$ - число псевдообусловленности матрицы $A$.

<u>В четвертой главе</u> диссертации приведены результаты тестирования полученных алгоритмов. Приводятся результаты сравнительного анализа их точности по отношению к точности известных одномерных алгоритмов. Обсуждаются результаты обработки реальной спектрометрической информации как одномерными, так и разработанными двухмерными алгоритмами.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Таким образом, в диссертационной работе получены следующие основные результаты.

1. Теоретически и экспериментально доказано, что учет физической двухмерности задачи обработки спектрометрической информации позволяет улучшить точность измерений на 10-17 %, в зависимости от конкретной ситуации.

2. Решена задача восстановления двухмерного спектрометрического сигнала, относящаяся к классу двухмерных обратных некорректных задач.

3. Создано программно-алгоритмическое обеспечение автоматизированной системы обработки спектрометрической информации на основе модифицированных одномерных методов.

4. Разработан новый метод решения двухмерной некорректной задачи обработки спектрометрической информации - метод обобщенной ортогонализации. Метод прошел всестороннее тестирование и успешно апробирован на реальных задачах обработ-

ки экспериментальных данных.

4.С учетом результатов, полученных Е.Л.Жуковским и Р.Ш.Липцером, доказано, что РМНК является регуляризирующим алгоритмом. Предложен метод выбора оптимального параметра регуляризации.

5. Решена задача последовательной обработки полученной спектрометрической информации, а также задача предварительного понижения размерности систем линейных уравнений.

6. Проведенный сравнительный анализ показал, что полученный метод обобщенной ортогонализации по сравнению с остальными методами дает на 10 - 15 % лучшую относительную точность решения.

7. Результаты диссертационной работы внедрены в НИТИ г.Рязани, а также в учебный процесс РГРТА.

Публикации по теме диссертации

1. Парнев И.В., Орлов Г.С. Применение метода перекрестного ( или скользящего ) анализа для сглаживания экспериментальных зависимостей // Математические методы в задачах управления и обработки данных: Межвуз.сб.научн. трудов. Рязань, 1990. С. 85 - 90.

2. Дубовиков А.В., Мурзов Н.В., Орлов Г.С. Эвристические алгоритмы по строчечной обработки плоских изображений // Методы представления и обработки случайных сигналов и полей: Тез.докл. II Всесоюзн. научно-техн. конф. Харьков, 1991. С. 34 - 36.

3. Орлов Г.С., Чураков Е.П. Метод собственных функций в задаче обработки двухмерных массивов экспериментальных данных // Технологии и системы сбора, обработки и представления информации : Тез. докл. Междун. научно-техн. конф. Рязань, 1993. С. 13 - 14.

4. Орлов Г.С. Приближенное решение двухмерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода методом разложения по

произвольному ортонормированному базису // Математические методы в научных исследованиях : Межвуз. сб. научн. трудов. - Рязань, 1994. С. 85 - 89.

5. Орлов Г.С. О двух подходах к численному решению задач обработки двухмерных массивов экспериментальных данных // Проблемы математического моделирования и обработки информации в задачах автоматического моделирования : Межвуз. сб. научн. трудов. Рязань, 1994. С. 74 - 78.

6. Орлов Г.С., Чураков Е.П. Об алгоритмическом обеспечении некорректных двухмерных задач обработки экспериментальных данных // Повышение эффективности средств обработки информации на базе математического и машинного моделирования. В сб. Материалы IV Всероссийской конференции. Тамбов, 1995. С. 75 - 77.

7. Орлов Г.С. Об одном методе решения обратных задач масс-спектрометрии // Новые информационные технологии в научных исследованиях радиоэлектроники : Тезисы докл. Всесоюзной научно-техн. конф. Рязань, 1996. С. 45 - 46.

8. Орлов Г.С., Чураков Е.П. Параметрическая идентификация технологических процессов при некорректных математических моделях // Элементы и системы оптимальной идентификации и управления технологическими процессами : Межвуз. сб. научн. трудов. ТулГТУ, 1994. С. 10 - 15.

9. Орлов Г.С., Чураков Е.П. О некоторых особенностях метода обобщенной ортогонализации при решении двухмерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода // Математические методы в научных исследованиях : Сб. научн. трудов. Рязань, 1996. С. 67 - 71.

10. Орлов Г. С. Алгоритм регуляризации на базе рекуррентного метода наименьших квадратов // Проблемы математического моделирования и обработки информации в задачах управления : Сб. научн. трудов. - Рязань, 1996. С. 52 - 59.

11. Орлов Г.С. Об оптимальном выборе конечного числа собственных функций при численном решении двухмерного уравнения Фредгольма первого рода // Проблемы математического моделирования и обработки информации в задачах управления : Сб. научн. трудов. Рязань, 1996. С. 59 - 64.

12. Миненкова Е.Е., Орлов Г.С. Об одном подходе к оценке устойчивости численных алгоритмов решения обратных некорректных задач восстановления изображений // Проблемы передачи и обработки информации в информационно-вычислительных сетях : Тезисы докл. Международн. научно-техн. семинара. Рязань, 1997. С. 43 - 45.

Орлов Геннадий Сергеевич

МЕТОДЫ И АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ
ДВУХМЕРНЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ
ОБРАБОТКИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ

Автореферат
диссертации на соискание ученой степени
кандидата технических наук

---

Подписано к печати
Формат бумаги 60x84 1/16
Усл.печ.л. 1.0. Уч.-изд.л. 1.0. Тираж 100 экз. Заказ N832
Бесплатно.
Рязанская радиотехническая академия. 391000, г.Рязань, ГСП, ул. Гагарина, 59/1.
Рязанский областной комитет Государственной статистики.