

УДК 519.64, 51.72

© *Т. М. Банникова, В. М. Немцов, Н. А. Баранова, Г. Н. Коньгин, О. М. Немцова*

МЕТОД ОЦЕНКИ СТАТИСТИЧЕСКОЙ ПОГРЕШНОСТИ РЕШЕНИЯ В ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ СПЕКТРОСКОПИИ

Предложен метод получения коридора статистической погрешности решения обратной задачи спектроскопии, для оценки статистической ошибки экспериментальных данных которой может быть применен нормальный закон распределения. С помощью математического моделирования статистической ошибки парциальных спектральных составляющих, полученных по численному устойчивому решению обратной задачи, стало возможным указать погрешность соответствующего решения. Проблема получения коридора погрешности решения обратных задач является актуальной, поскольку существующие способы оценки погрешности решения построены на анализе гладких функциональных зависимостей при наложении жестких ограничений на область допустимых решений (компактность, монотонность и т.п.). Их использование при компьютерной обработке реальных экспериментальных данных крайне затруднительно и поэтому, как правило, не применяется. В работе, на основе выделения парциальных спектральных составляющих и оценки их погрешности, предложен способ получения коридора статистической погрешности решения обратных задач спектроскопии. На примерах обработки мёссбауэровских спектров продемонстрирована необходимость и значимость нахождения коридора погрешности решения для обеспечения достоверных результатов.

Ключевые слова: коридор погрешности решения, обратная задача, нормальный закон распределения, мёссбауэровская спектроскопия, среднеквадратичная ошибка, парциальные составляющие.

DOI: 10.35634/2226-3594-2021-58-01

Введение

Очевидно, что при решении обратных некорректных задач вопрос погрешности получаемого решения является принципиально важным [1, 2]. Такое свойство некорректных задач, как неустойчивость к погрешностям входных данных является существенным препятствием к нахождению истинного решения задачи и его погрешности. На сегодняшний день разработано большое количество математических методов решения некорректных задач [3–7], которые обеспечивают получение устойчивого решения. Однако, их развитие и усовершенствование продолжается, и связано это с повышением требований к свойствам получаемых решений (гладкость высокого порядка, неотрицательность, разрешимость линий и т.п.) [8–10]. В них, как правило, предлагаются оценки ошибки решения по норме пространства, в котором решение ищется [11–14], что не всегда доступно в реальном эксперименте. Например, в обратных задачах спектроскопии [15] истинное решение далеко не всегда является нормальным, т.е. минимальным по норме, как предполагается в методе регуляризации [16]. Для получения физически значимого решения и корректной интерпретации результатов обработки данных в этих задачах необходимо привлекать априорную информацию об искомом решении [17, 18] и уметь находить коридор ошибки получаемого решения [19]. Иногда, для уменьшения влияния погрешности экспериментальных данных на устойчивость решения, применяют специальные фильтровочные функции [20], или выполняют предварительную обработку спектральных данных с помощью машин с экстремальным обучением [21]. Несмотря на сложность и трудоемкость решения обратных задач, актуальность развития методов их решения постоянно возрастает. Последние исследования при установлении диагноза и рассмотрении возможности раннего лечения пациентов,

переболевших COVID-19, показали необходимость своевременного проведения магнитно-резонансной томографии больных [22]. В проблеме снижения воздействия на окружающую среду при добыче нефти и газа путем преобразования метана и других газообразных углеводородов в CO_2 огромную роль имеет потенциальное использование спектрометров с преобразованием Фурье изображения [23]. Применение высокочувствительного экспериментального метода исследования локальной атомной структуры с разрешением $1\text{--}2 \text{ \AA}$ по глубине в многослойных малоcontrastных тонких пленках [2] также является актуальной задачей.

К сожалению, в большинстве научных публикаций, посвященных решению обратных задач предлагаются способы оценки погрешности решения, построенные на анализе модельных гладких функциональных зависимостей при наложении жестких ограничений на оператор задачи [3, 5, 14, 24] и/или область допустимых решений (компактность, монотонность и т. п.) [18]. Их применение при обработке экспериментальных данных со статистической ошибкой и неизвестной гладкостью решения чрезвычайно затруднительно. Существуют единичные работы с указанием коридора ошибки решения, полученного либо прямым моделированием ошибок входных параметров [25, 26], либо без описания способа его получения [27].

§ 1. Постановка задачи

В мёссбауэровском эксперименте исследуется зависимость интенсивности $N(V)$ прошедшего через образец излучения от относительной скорости источника излучения V . Как правило, для расшифровки мёссбауэровских спектров используется нормированный сигнал:

$$y(V) = \frac{N(\infty) - N(V)}{N(\infty)}, \quad (1)$$

где $N(V)$ — количество импульсов при значении скорости V , $N(\infty)$ — количество импульсов в отсутствие резонансного поглощения. Реальный спектр снимается в дискретном поканальном режиме, когда каждому каналу спектра i соответствует скорость V_i , поэтому реальный нормированный сигнал (1) является дискретным:

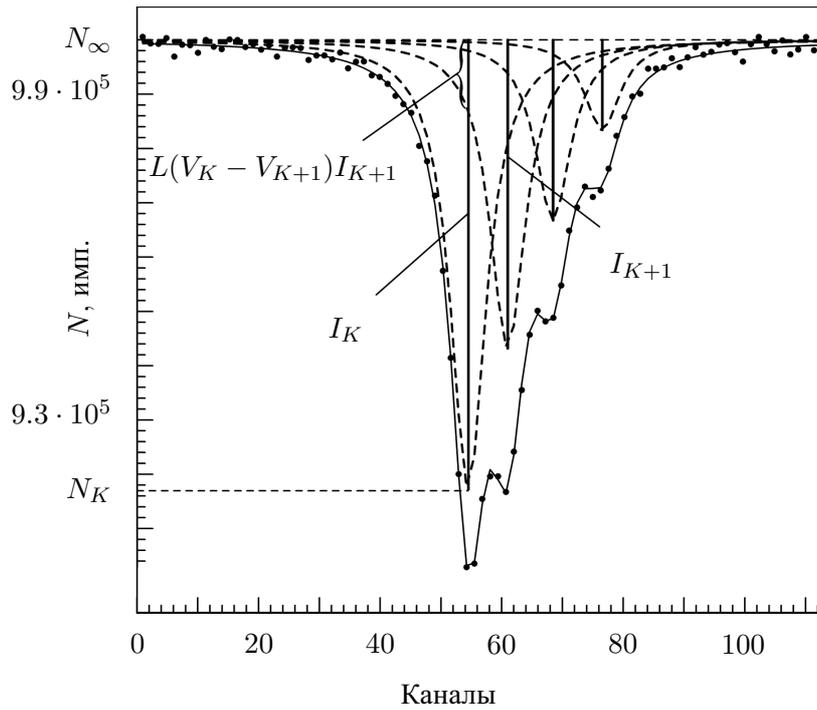
$$y_i(V) = \frac{N(\infty) - N_i(V)}{N(\infty)}, \quad (2)$$

где $i = 1, \dots, n$ — количество каналов регистрации, N_i — количество зарегистрированных импульсов в i -ом канале. Известно, что вероятность наблюдения γ -квантов за время измерения в мёссбауэровском эксперименте определяется закономерностями распада и задается распределением Пуассона:

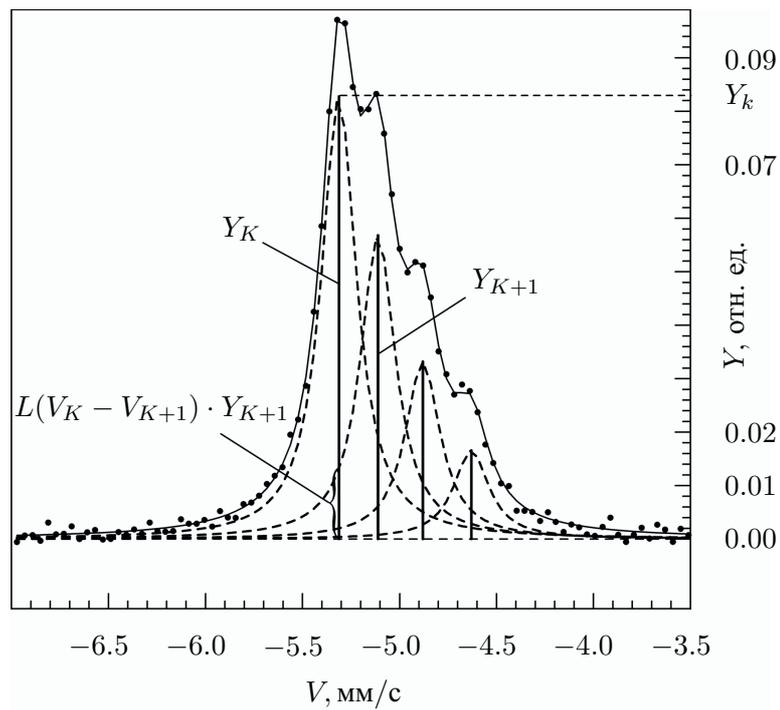
$$p(N) = \frac{N_0^N}{N!} \exp(-N_0),$$

которое при $N \rightarrow \infty$ стремится к нормальному распределению с математическим ожиданием $M(N) = N_0$ и дисперсией $\sigma^2 = N_0$:

$$p(N) = \frac{1}{\sqrt{2\pi N_0}} \exp\left(-\frac{(N - N_0)^2}{2N_0}\right).$$



а)



б)

Рис. 1. Модель экспериментального спектра (точки) с четырьмя парциальными составляющими (штриховые линии): а) исходный спектр с интенсивностями парциальных составляющих I_k лоренцовской формы; б) нормированный спектр

В мёссбауэровском эксперименте обычно количество импульсов в каждом канале $N_i > 10^5$, поэтому для оценки статистической погрешности эксперимента можно использовать нормальный закон распределения. Тем самым погрешность или среднеквадратичное отклонение экспериментального сигнала в каждой точке равно $\sigma_i^2 = N_i$.

Резонансная линия поглощения мёссбауэровского спектра является функцией Лоренца, и выделенный из эксперимента нормированный сигнал описывается суперпозицией элементарных функций Лоренца вида:

$$L_i(V) = \frac{1}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}(V_i - V)^2},$$

где Γ — ширина элементарной линии Лоренца. В формировании мёссбауэровских спектров принимают участие поглощающие ядра атомов, в общем случае не являющиеся химически и кристаллографически эквивалентными. Каждой неэквивалентной позиции (локальной конфигурации) резонансных ядер соответствует отдельная элементарная функция Лоренца в мёссбауэровском спектре. Таким образом, математическая модель мёссбауэровского спектра представляет собой сумму парциальных Лоренцевских линий (рис. 1), интенсивности которых пропорциональны вероятностям отдельных позиций p_k :

$$Y_i = \sum_k \frac{p_k}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}(V_i - V_k)^2}. \quad (3)$$

При наличии большого числа неэквивалентных позиций k для описания мёссбауэровских спектров используют непрерывное представление линейной суперпозиции (3):

$$Y_i = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{p_H dV_H}{1 + \frac{4}{\Gamma^2}(V_i - V_H)^2}, \quad i = 1, \dots, n, \quad (4)$$

где p_H — функция плотности вероятности распределения локальных конфигураций. Интегральное уравнение Фредгольма первого рода (4) описывает обратную задачу мёссбауэровской спектроскопии по определению функции $p_H \in L_2[H_{\min}, H_{\max}]$, соответствующей вектору экспериментальных данных Y_i , $i = 1, \dots, n$. В данной работе, на примере мёссбауэровской спектроскопии, предлагается оригинальная методика получения коридора статистической ошибки решения обратных задач, для оценки статистической погрешности экспериментальных данных которых применим нормальный закон распределения.

§ 2. Методика оценки погрешности решения

Каждая точка нормированного мёссбауэровского спектра y_i описывается суммой парциальных лоренцевских линий, заданных на всем интервале съемки экспериментального спектра. В точке i в интенсивность y_i дает вклад каждая парциальная линия лоренцевской зависимости. Таким образом, можно записать

$$y_i = Y_k + \sum_{j \neq i} p_j L(V_i - V_j), \quad \text{где } Y_k = p_k L(V_i - V_{k=i}). \quad (5)$$

При $k = i$ вклад Y_k равен вероятности p_k , так как $L(V_i - V_{k=i}) = 1$. При $j \neq i$ вклады от остальных составляющих учитываются в сумме (5), например при $j = k+1$ вклад равен выражению $L(V_k - V_{k+1})Y_{k+1}$ (рис. 1, б). Поскольку при $k = i$ вклад Y_k равен вероятности p_k , то, используя Y_k вместо y_k , в формуле (2) всегда можно найти N_k , соответствующее парциальному вкладу в реальный ненормированный экспериментальный спектр, и вычислить погрешность $\Delta N_k = \sqrt{N_k}$, пользуясь формулой (2),

$$\Delta N_k = \sqrt{N_\infty(1 - Y_k)}, \quad (6)$$

и величину погрешности парциальной линии

$$\Delta Y_k = \frac{\Delta N_k}{N_\infty} = \frac{\sqrt{(1 - Y_k)}}{\sqrt{N_\infty}}.$$

Тогда в точке $i = k$ погрешность решения определяется как $\Delta p_k = \Delta Y_k$.

В случае непрерывного представления линейной суперпозиции (4) погрешность парциальной линии связана с погрешностью решения следующим уравнением:

$$\Delta Y_H = \Delta p_{H=k} \int_{V_H=k}^{V_H=k+1} L(V_i - V_H) dV_H, \quad (7)$$

где p_H — функция плотности вероятности распределения локальных конфигураций, которая определена на интервале $[H_{\min}, H_{\max}]$, и существует взаимно однозначное соответствие $[V_{\min}, V_{\max}] \leftrightarrow [H_{\min}, H_{\max}]$.

Таким образом, чтобы найти погрешность решения достаточно смоделировать интенсивности парциальных лоренцовских линий Y_k , дающих вклад в каждую точку нормированного мёссбауэровского спектра y_i . Поскольку интенсивности Y_k пропорциональны вероятностям отдельных позиций p_k , то на первом шаге следует найти решение обратной задачи (3) (или, для непрерывного случая, задачи (4)).

Для определения решения обратной задачи следует использовать методы, обеспечивающие восстановление экспериментальных данных и гарантирующие пропорциональность погрешности решения статистической ошибке измерений. Критерием достоверности решения и восстановления экспериментальных данных является критерий $\chi^2 \approx 1$ Пирсона [28]:

$$\chi^2 = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - Y_i)^2}{n \cdot \sigma_{y_i}^2}.$$

Здесь относительная среднеквадратичная ошибка экспериментальных данных в точке i определяется аналогично выражению (6) заменой k на i , то есть $N_i = N_\infty(1 - y_i)$:

$$\sigma_{y_i}^2 = \frac{1 - y_i}{N_\infty}.$$

Для оценки погрешности решения p_H используется восстановленное значение среднеквадратичной ошибки парциальной интенсивности $\sigma_H^2 = \frac{1 - Y_H}{N_\infty}$ в точке H и критерий χ^2 [29].

Покажем на примере классического и самого успешного метода решения обратных задач — метода регуляризации Тихонова, развитию которого посвящено в последнее время много работ [30–33], методику определения функции распределения p_H из обратной задачи мёссбауэровской спектроскопии. Уравнение, связывающее экспериментальный сигнал $y(V)$ с функцией плотности вероятности распределения параметра H (сверхтонкое магнитное поле), имеет вид:

$$Ap \equiv \int_{H_{\min}}^{H_{\max}} L(H, V) p(H) dH = y(V), \quad V \in [V_{\min}, V_{\max}], \quad (8)$$

где $y(V)$ — мёссбауэровский спектр; $p(H)$ — искомая функция распределения параметра; $L(H, V)$ — функции Лоренца, задающие форму элементарных или парциальных составляющих; $[H_{\min}, H_{\max}]$ — интервал существования непрерывного распределения $p(H)$.

Уравнение (8) представляет собой интегральное уравнение Фредгольма первого рода с вполне непрерывным оператором $A: L_2[H_{\min}, H_{\max}] \rightarrow L_2[V_{\min}, V_{\max}]$, где $L(H, V)$ — действительная функция непрерывная в прямоугольнике $\{H_{\min} \leq H \leq H_{\max}, V_{\min} \leq V \leq V_{\max}\}$. Вместо точной правой части уравнения $y^0(V)$ известно приближенное значение $y(V)$: $\|y - y^0\|_{L_2} \leq \delta$. На искомую функцию накладываются дополнительные ограничения:

(1) $p(H)$ — непрерывно дифференцируемая функция, $p(H) \in W_2^1[H_{\min}, H_{\max}]$ и

$$\|p(H)\|_{W_2^1} = \left(\int_{H_{\min}}^{H_{\max}} p^2(H) dH + \int_{H_{\min}}^{H_{\max}} \left(\frac{dp}{dH} \right)^2 dH \right)^{1/2};$$

(2) $p(H_{\min}) = 0$ или $p'(H_{\min}) = 0$, $p(H_{\max}) = 0$ или $p'(H_{\max}) = 0$, — граничные условия;

(3) $p(H) \geq 0$ на $[H_{\min}, H_{\max}]$ — условие неотрицательности.

Введем в рассмотрение функционал $Q[p(H)]$:

$$Q[p(H)] = \left\{ \|Ap - y\|_{L_2}^2 + \alpha \|p\|_{W_2^1}^2 \right\}, \text{ или} \quad (9)$$

$$Q[p(H)] = \left\{ \int_{V_{\min}}^{V_{\max}} \left[\int_{H_{\min}}^{H_{\max}} L(H, V)p(H) dH - y(V) \right]^2 dV + \alpha \int_{H_{\min}}^{H_{\max}} \left(p^2(H) + \left[\frac{dp}{dH} \right]^2 \right) dH \right\},$$

где α — параметр регуляризации, контролирующий гладкость решения.

Для построения конечно-разностной аппроксимации функционала (9) на отрезках $[H_{\min}, H_{\max}]$ и $[V_{\min}, V_{\max}]$ выбираются сетки $\{H_j\}_{j=1}^k$ и $\{V_i\}_{i=1}^n$ с шагами ΔH и ΔV соответственно. Выполняется дискретная аппроксимация функций $p(H)$, $y(V)$ векторами p_j , $j = 1, \dots, k$, y_i , $i = 1, \dots, n$, а интегрального оператора — матрицей $A = \{a_{ij}\}$ с помощью метода коллокаций [34]:

$$a_{ij} = \int_{H_j}^{H_{j+1}} L(H, V_i) dH$$

В результате аппроксимации непрерывного пространства L_2 дискретным пространством l_2 на равномерных сетках, а производной d/dH разностным отношением, имеем дискретную аппроксимацию функционала (9):

$$Q[p_k] = \left\{ \sum_{i=1}^n \Delta V \left(\sum_{j=1}^k a_{ij} p_j - y_i \right)^2 + \alpha \sum_{j=1}^k \left(p_j^2 + \left(\frac{p_{j+1} - p_j}{\Delta H} \right)^2 \right) \Delta H \right\},$$

Известно, что достаточным условием минимума функционала является обращение в ноль его первой вариации (уравнение Эйлера), которая определяется соотношением

$$Q[p_k + \Delta p] - Q[p_k] = \Delta Q[p_k, \Delta p] \Delta p + o(\Delta p),$$

где Δp — малое приращение вектора p_k . Таким образом, задача сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений:

$$(A^*A + B)p_k = A^*y_n, \quad (10)$$

где A^* — сопряженная матрица, B — матрица вида:

$$B = \begin{pmatrix} \alpha + \frac{2\alpha}{\Delta H^2} & -\frac{\alpha}{\Delta H^2} & 0 & \dots & 0 \\ -\frac{\alpha}{\Delta H^2} & \alpha + \frac{2\alpha}{\Delta H^2} & -\frac{\alpha}{\Delta H^2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & -\frac{\alpha}{\Delta H^2} & \alpha + \frac{2\alpha}{\Delta H^2} \end{pmatrix}. \quad (11)$$

В результате вместо некорректного уравнения первого рода (8) решается система линейных уравнений (10) с параметром регуляризации α . При построении матрицы B учитывается тип граничных условий, например, при $p(H_{\min}) = 0$ и $p'(H_{\max}) = 0$ матрица B имеет вид (11). Параметр α выбирается из условия минимума невязки $\|Ap - y\| \leq \delta$ и априорных ограничений на искомое решение — условие (1). Матрица A^*A является симметричной и положительно определенной, и, следовательно, матрица $(A^*A + B)$ не вырождена.

В методе регуляризации Тихонова показано, что система линейных алгебраических уравнений (10) разрешима при $\alpha > 0$ и ее решение сходится к решению непрерывной задачи по норме соболевского пространства W_2^1 . Полученное решение p_α является приближенным, но оно принадлежит к тому классу решений, элементом которого является точное решение p^0 уравнения (8). Если уровень погрешности исходных данных стремится к нулю ($\delta \rightarrow 0$), то можно найти такое $\alpha(\delta)$, при котором приближенное решение сходится к точному решению $\|p_\alpha - p^0\|_{W_2^1} \rightarrow 0$ при $\delta \rightarrow 0$.

Следующий этап регуляризованного алгоритма заключается в удовлетворении требованию неотрицательности решения на всей области определения параметра H . Для этого применяется итерационный алгоритм сужения области определения решения [35]:

$$p_a^{it+1} = ((A^{it+1})^*(A^{it+1}) + B)^{-1}(A^{it+1})^*y,$$

в котором на первом шаге $it = 1$ в качестве начального интервала задается вся область определения решения $[H_{\min}, H_{\max}]$, а следующий интервал определяется правилом обнуления элементов основной матрицы системы:

$$a_{ij} = \begin{cases} a_{ij}, & p(H_j) \geq 0, \\ 0, & p(H_j) < 0, \end{cases} \quad j = 1, \dots, k, \quad i = 1, \dots, n.$$

Таким образом, область поиска решения уточняется на каждом шаге итерации. Одновременно с отрицательными осцилляциями исчезают и ложные положительные, а истинные локальные максимумы остаются. Как правило, после нескольких итераций получается полностью неотрицательное решение.

Следовательно, для определения коридора статистической погрешности решения обратной задачи спектроскопии выполняется последовательность действий:

- (1) нахождение решения обратной задачи p_k , обеспечивающее восстановление экспериментального спектра в рамках критерия χ^2 ;
- (2) построение парциальных спектральных составляющих Y_k , соответствующих p_k ;
- (3) моделирование экспериментальной интенсивности N_k парциальной составляющей спектра;

- (4) вычисление статистической погрешности ΔN_k парциальной составляющей;
- (5) вычисление статистической погрешности нормированной ΔY_k парциальной составляющей и, соответственно, $\Delta p_k = \Delta Y_k$.

Таким образом, решается проблема построения коридора погрешности решения обратной задачи спектроскопии методом выделения парциальных спектральных составляющих. Достоинство метода заключается в том, что он использует принцип разложения спектрального сигнала на парциальные составляющие, который является основой спектроскопических исследований и успешно реализован в многочисленных методах обработки спектров [15, 23, 25].

§3. Демонстрационные примеры

Эффективность предложенной методики проиллюстрирована на примерах обработки двух мёссбауэровских спектров: использованный в работе [36] модельный спектр с хорошо разрешенными парциальными спектральными линиями (рис. 2, *а*), и полученный на спектрометре ЯГРС-4М спектр разупорядоченного сплава $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$ (рис. 2, *б*). Статистический набор составлял соответственно $N_\infty = 10^6$ и $N_\infty = 8 \cdot 10^5$ импульсов. Для обработки спектров была записана обратная задача мёссбауэровской спектроскопии в виде уравнения (8), из которого определялась функция распределения плотности вероятности p_H методами регуляризации [36, 37] и погрешность решения по формуле (7). Для спектра с хорошо разрешенными парциальными спектральными линиями восстановление экспериментальных данных произошло с выполнением критерия $\chi^2 < 1$. Из рис. 2, *а* видно, что величина ошибки решения существенно меньше значений вероятностей в точках локальных максимумов на кривой распределения p_H . Тем самым, полученное решение можно считать достоверным. В спектре разупорядоченного сплава $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$, в отличие от смоделированного спектра, указать количество парциальных составляющих и их интенсивности без качественной математической обработки невозможно. В этой ситуации для оценки достоверности результатов обработки огромное значение имеет коридор погрешности решения. На рис. 2, *б* видно, что в области $H > 170$ кЭ количество локальных максимумов на кривой распределения p_H с учетом полученного коридора погрешности определяется однозначно. А в области $H < 170$ кЭ без указания коридора погрешности решения полученные на распределении p_H два локальных максимума могли быть отнесены к ошибке метода обработки. Несмотря на то, что коридор ошибки был построен с учетом полученного при восстановлении экспериментальных данных значения $\chi^2 = 1.6$, два локальных максимума в области $H < 170$ кЭ оказались статистически достоверны [29].

Полученные результаты показывают, что когда количество парциальных составляющих k относительно невелико и их относительные интенсивности Y_k значительно превышают величину ΔY (спектр на рис. 2, *а*), для экономии трудовых затрат и энергетических ресурсов можно уменьшить величину статистического набора эксперимента с 10^6 до 10^5 . Если ΔY сравнима с относительной интенсивностью парциальных составляющих (рис. 2, *б*), то для уменьшения относительной погрешности и увеличения точности количественных оценок необходимо увеличение статистического набора спектра.

Заключение

Предложенный способ получения коридора статистической погрешности решения обратной задачи спектроскопии в условиях нормального закона распределения статистической ошибки экспериментальных данных основан на выделении парциальных спектральных составляющих и оценки их погрешности. С помощью математического моделирования статистической ошибки парциальных спектральных составляющих стало возможным

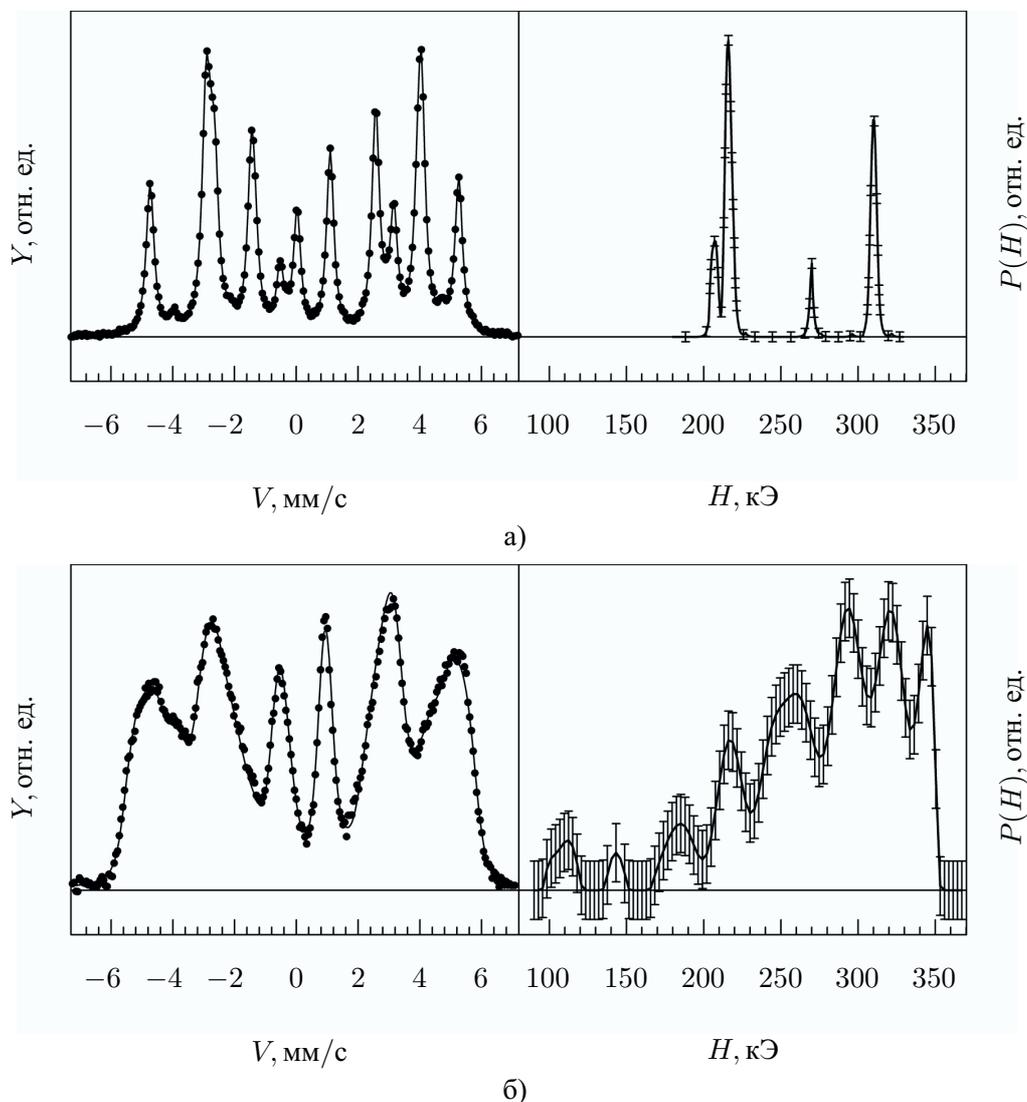


Рис. 2. Мёссбауэровские спектры (слева) и решения обратной задачи мёссбауэровской спектроскопии с указанием коридора погрешности (справа): а) модельный спектр с хорошо разрешенными парциальными спектральными линиями; б) спектр разупорядоченного сплава $\text{Fe}_{75}\text{Ge}_{25}$

указать погрешность численного решения. К достоинству метода следует отнести тот момент, что разложение спектрального сигнала на парциальные составляющие является основой спектроскопических исследований. Определение коридора погрешности позволяет корректно интерпретировать результаты экспериментальных исследований и обеспечивает достоверность результатов.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Огородников И. Н. Введение в обратные задачи физической диагностики. Екатеринбург: Изд-во Урал. ун-та, 2017. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=29050248>
2. Babanov Yu. A., Vasin V. V., Ponomarev D. A., Devyaterikov D. I., Romashev L. N., Ustinov V. V. A subnanometric resolution method for studying local atomic structure of interface and surface of multilayered nanoheterostructure thin films // *Thin Solid Films*. 2018. Vol. 656. P. 44–52. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.04.024>
3. Lee J. W., Prenter P. M. An analysis of the numerical solution of Fredholm integral equations of the first kind // *Numerische Mathematik*. 1978. Vol. 30. No. 1. P. 1–23. <https://doi.org/10.1007/BF01403903>

4. Hansen P. C. The Backus–Gilbert method: SVD analysis and fast implementation // *Inverse Problems*. 1994. Vol. 10. No. 4. P. 895–904. <https://doi.org/10.1088/0266-5611/10/4/009>
5. Kabanikhin S. I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems // *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*. 2008. Vol. 16. No. 4. P. 317–357. <https://doi.org/10.1515/JIIP.2008.019>
6. Razavy M. *An introduction to inverse problems in physics*. Singapore: World Scientific, 2020. <https://doi.org/10.1142/11860>
7. Wells J. W., Birkinshaw K. A matrix approach to resolution enhancement of XPS spectra by a modified maximum entropy method // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*. 2006. Vol. 152. No. 1–2. P. 37–43. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2006.03.003>
8. Xu P. A new look at Akaike’s Bayesian information criterion for inverse ill-posed problems // *Journal of the Franklin Institute*. 2021. Vol. 358. No. 7. P. 4077–4102. <https://doi.org/10.1016/j.jfranklin.2021.03.003>
9. Zheng S., Ding C., Nie F. Regularized singular value decomposition and application to recommender system // *arXiv:1804.05090 [cs.LG]*. 2018. <https://arxiv.org/abs/1804.05090v1>
10. Xiong X., Xue X. A fractional Tikhonov regularization method for identifying a space-dependent source in the time-fractional diffusion equation // *Applied Mathematics and Computation*. 2019. Vol. 349. P. 292–303. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.12.063>
11. Mohammadian-Behbahani M.-R., Saramad S. Integral-equation based methods for parameter estimation in output pulses of radiation detectors: Application in nuclear medicine and spectroscopy // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*. 2018. Vol. 887. P. 7–12. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2017.12.073>
12. Vasin V. V. Irregular nonlinear operator equations: Tikhonov’s regularization and iterative approximation // *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*. 2013. Vol. 21. No. 1. P. 109–123. <https://doi.org/10.1515/jip-2012-0084>
13. Qiao B., Liu J., Liu J., Yang Z., Chen X. An enhanced sparse regularization method for impact force identification // *Mechanical Systems and Signal Processing*. 2019. Vol. 126. P. 341–367. <https://doi.org/10.1016/j.ymsp.2019.02.039>
14. Леонов А. С. Для каких обратных задач априорная оценка точности приближенного решения может иметь порядок ошибки данных // *Сибирский журнал вычислительной математики*. 2014. Т. 17. № 4. С. 339–348. <http://mi.mathnet.ru/sjvm554>
15. Верлань А. Ф., Сизиков В. С. *Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы*. Киев: Наукова думка, 1986.
16. Морозов В. А. О восстановлении зашумленных сигналов методом регуляризации // *Вычислительные методы и программирование*. 2012. Т. 13. Вып. 1. С. 247–252. <http://mi.mathnet.ru/vmp26>
17. Васин В. В., Агеев А. Л. *Некорректные задачи с априорной информацией*. Екатеринбург: УИФ «Наука», 1993.
18. Ягола А. Г. Некорректные задачи с априорной информацией // *Сибирские электронные математические известия*. 2010. Т. 7. С. 343–361. <http://mi.mathnet.ru/semr292>
19. Nemtsova O. M., Ageev A. L., Voronina E. V. The estimation of the error of the hyperfine interaction parameter distribution from Mössbauer spectra // *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*. 2002. Vol. 187. Issue 1. P. 132–136. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(01\)00830-8](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(01)00830-8)
20. Sussman M. S. Linear signal combination T_2 spectroscopy // *Magnetic Resonance Imaging*. 2020. Vol. 66. P. 257–266. <https://doi.org/10.1016/j.mri.2019.11.016>
21. Henríquez P. A., Ruz G. A. Noise reduction for near-infrared spectroscopy data using extreme learning machines // *Engineering Applications of Artificial Intelligence*. 2019. Vol. 79. P. 13–22. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2018.12.005>
22. Zelada-Ríos L., Pacheco-Barrios K., Galecio-Castillo M., Yamunaqué-Chunga C., Álvarez-Toledo K., Otiniano-Sifuentes R. Acute disseminated encephalomyelitis and COVID-19: A systematic synthesis of worldwide cases // *Journal of Neuroimmunology*. 2021. Vol. 359. 577674. <https://doi.org/10.1016/j.jneuroim.2021.577674>

23. Miguel R. B., Talebi-Moghaddam S., Zamani M., Turcotte C., Daun K. J. Assessing flare combustion efficiency using imaging Fourier transform spectroscopy // *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*. 2021. Vol. 273. 107835. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107835>
24. Calvetti D., Lewis B., Reichel L., Sgallari F. Tikhonov regularization with nonnegativity constraint // *Electronic Transactions on Numerical Analysis*. 2004. Vol. 18. No. 1. P. 153–173.
25. Lekhtmakher S., Shapiro M. On the paper “Inverse methods for analyzing aerosol spectrometer measurements: A critical review” // *Journal of Aerosol Science*. 2000. Vol. 31. No. 7. P. 867–873. [https://doi.org/10.1016/S0021-8502\(99\)00561-3](https://doi.org/10.1016/S0021-8502(99)00561-3)
26. Samaras S., Nicolae D., Böckmann Ch., Vasilescu J., Biniotoglou I., Labzovskii L., Toanca F., Papayannis A. Using Raman-lidar-based regularized microphysical retrievals and Aerosol Mass Spectrometer measurements for the characterization of biomass burning aerosols // *Journal of Computational Physics*. 2015. Vol. 299. P. 156–174. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.06.045>
27. Чуев М. А. Эффективный метод анализа сверхтонкой структуры гамма резонансных спектров с использованием профиля Фойта // *Доклады Академии наук*. 2011. Т. 438. № 6. С. 747–751. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=16525971>
28. Pearson K. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables in such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling // *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science*. Series 5. 1900. Vol. 50. No. 302. P. 157–175. <https://doi.org/10.1080/14786440009463897>
29. Тейлор Дж. Введение в теорию ошибок. М.: Мир, 1985.
30. Prakash J., Sanny D., Kalva S. K., Pramanik M., Yalavarthy P. K. Fractional regularization to improve photoacoustic tomographic image reconstruction // *IEEE Transactions on Medical Imaging*. 2019. Vol. 38. No. 8. P. 1935–1947. <https://doi.org/10.1109/TMI.2018.2889314>
31. Reddy G. D. A class of parameter choice rules for stationary iterated weighted Tikhonov regularization scheme // *Applied Mathematics and Computation*. 2019. Vol. 347. P. 464–476. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.11.015>
32. Mohammady S., Eslahchi M. R. Extension of Tikhonov regularization method using linear fractional programming // *Journal of Computational and Applied Mathematics*. 2020. Vol. 371. 112677. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.112677>
33. Gao Y., Xiao L., Wu B. TSVD and Tikhonov methods and influence factor analysis for NMR data in shale rock // *Journal of Petroleum Science and Engineering*. 2020. Vol. 194. 107508. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2020.107508>
34. Ким И. Г., Латыпова Н. В., Моторина О. Л. Численные методы: учеб.-метод. пособие. Ч. 2. Ижевск: Изд-во «Удмуртский университет», 2013.
35. Немцова О. М., Коньгин Г. Н. Повышение разрешающей способности метода регуляризации Тихонова при решении обратной задачи мёссбаэровской спектроскопии // *Журнал прикладной спектроскопии*. 2018. Т. 85. № 5. С. 830–835. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=36962286>
36. Немцова О. М., Коньгин Г. Н., Порсев В. Е. Разрешение перекрывающихся спектральных составляющих методом взвешенной регуляризации Тихонова // *Журнал прикладной спектроскопии*. 2021. Т. 88. № 2. С. 315–324. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=44889288>
37. Коньгин Г. Н., Немцова О. М., Порсев В. Е. Обработка мёссбаэровских спектров твердых растворов с применением функции Фойгта // *Журнал прикладной спектроскопии*. 2019. Т. 86. № 3. С. 374–381. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=37522491>

Поступила в редакцию 02.10.2021

Банникова Татьяна Михайловна, к. пед. н., доцент, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4211-8421>

E-mail: t.bannikova2011@yandex.ru

Немцов Виктор Михайлович, младший научный сотрудник, Физико-технический институт Удмуртского федерального исследовательского центра УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2551-7041>

E-mail: viktorn93@gmail.com

Баранова Наталья Анатольевна, к. пед. н., доцент, Удмуртский государственный университет, 426034, Россия, г. Ижевск, ул. Университетская, 1.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4410-3613>

E-mail: natik-231@yandex.ru

Коньгин Григорий Николаевич, к. ф.-м. н., старший научный сотрудник, Физико-технический институт Удмуртского федерального исследовательского центра УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6202-9509>

E-mail: gnkon@mail.ru

Немцова Ольга Михайловна, к. ф.-м. н., старший научный сотрудник, Физико-технический институт Удмуртского федерального исследовательского центра УрО РАН, 426067, Россия, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5676-9578>

E-mail: olganemtsova1968@gmail.com

Цитирование: Т. М. Банникова, В. М. Немцов, Н. А. Баранова, Г. Н. Коньгин, О. М. Немцова. Метод оценки статистической погрешности решения в обратной задаче спектроскопии // Известия Института математики и информатики Удмуртского государственного университета. 2021. Т. 58. С. 3–17.

Keywords: solution error interval, inverse problem, normal distribution law, Mössbauer spectroscopy, mean squared error, partial components.

MSC2020: 65F22, 47A52

DOI: 10.35634/2226-3594-2021-58-01

A method for obtaining the interval of statistical error of the solution of the inverse spectroscopy problem, for the estimation of the statistical error of experimental data of which the normal distribution law can be applied, has been proposed. With the help of mathematical modeling of the statistical error of partial spectral components obtained from the numerically stable solution of the inverse problem, it has become possible to specify the error of the corresponding solution. The problem of getting the inverse solution error interval is actual because the existing methods of solution error evaluation are based on the analysis of smooth functional dependences under rigid restrictions on the region of acceptable solutions (compactness, monotonicity, etc.). Their use in computer processing of real experimental data is extremely difficult and therefore, as a rule, is not applied. Based on the extraction of partial spectral components and the estimation of their error, a method for obtaining an interval of statistical error for the solution of inverse spectroscopy problems has been proposed in this work. The necessity and importance of finding the solution error interval to provide reliable results is demonstrated using examples of processing Mössbauer spectra.

REFERENCES

1. Ogorodnikov I. N. *Vvedenie v obratnye zadachi fizicheskoi diagnostiki* (Introduction to inverse problems of physical diagnostics), Yekaterinburg: Ural Federal University, 2017. <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=29050248>
2. Babanov Yu. A., Vasin V. V., Ponomarev D. A., Devyaterikov D. I., Romashev L. N., Ustinov V. V. A subnanometric resolution method for studying local atomic structure of interface and surface of multilayered nanoheterostructure thin films, *Thin Solid Films*, 2018, vol. 656, pp. 44–52. <https://doi.org/10.1016/j.tsf.2018.04.024>
3. Lee J. W., Prenter P. M. An analysis of the numerical solution of Fredholm integral equations of the first kind, *Numerische Mathematik*, 1978, vol. 30, no. 1, pp. 1–23. <https://doi.org/10.1007/BF01403903>
4. Hansen P. C. The Backus–Gilbert method: SVD analysis and fast implementation, *Inverse Problems*, 1994, vol. 10, no. 4, pp. 895–904. <https://doi.org/10.1088/0266-5611/10/4/009>
5. Kabanikhin S. I. Definitions and examples of inverse and ill-posed problems, *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, 2008, vol. 16, no. 4, pp. 317–357. <https://doi.org/10.1515/JIIP.2008.019>
6. Razavy M. *An introduction to inverse problems in physics*, Singapore: World Scientific, 2020. <https://doi.org/10.1142/11860>
7. Wells J. W., Birkinshaw K. A matrix approach to resolution enhancement of XPS spectra by a modified maximum entropy method, *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 2006, vol. 152, no. 1–2, pp. 37–43. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2006.03.003>
8. Xu P. A new look at Akaike’s Bayesian information criterion for inverse ill-posed problems, *Journal of the Franklin Institute*, 2021, vol. 358, no. 7, pp. 4077–4102. <https://doi.org/10.1016/j.jfranklin.2021.03.003>
9. Zheng S., Ding C., Nie F. Regularized singular value decomposition and application to recommender system, *arXiv:1804.05090 [cs.LG]*, 2018. <https://arxiv.org/abs/1804.05090v1>
10. Xiong X., Xue X. A fractional Tikhonov regularization method for identifying a space-dependent source in the time-fractional diffusion equation, *Applied Mathematics and Computation*, 2019, vol. 349, pp. 292–303. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.12.063>

11. Mohammadian-Behbahani M.-R., Saramad S. Integral-equation based methods for parameter estimation in output pulses of radiation detectors: Application in nuclear medicine and spectroscopy, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section A: Accelerators, Spectrometers, Detectors and Associated Equipment*, 2018, vol. 887, pp. 7–12. <https://doi.org/10.1016/j.nima.2017.12.073>
12. Vasin V.V. Irregular nonlinear operator equations: Tikhonov's regularization and iterative approximation, *Journal of Inverse and Ill-posed Problems*, 2013, vol. 21, no. 1, pp. 109–123. <https://doi.org/10.1515/jip-2012-0084>
13. Qiao B., Liu J., Liu J., Yang Z., Chen X. An enhanced sparse regularization method for impact force identification, *Mechanical Systems and Signal Processing*, 2019, vol. 126, pp. 341–367. <https://doi.org/10.1016/j.ymsp.2019.02.039>
14. Leonov A. S. Which of inverse problems can have a priori approximate solution accuracy estimates comparable in order with the data accuracy, *Numerical Analysis and Applications*, 2014, vol. 7, no. 4, pp. 284–292. <https://doi.org/10.1134/S199542391404003X>
15. Verlan' A. F., Sizikov V. S. *Integral'nye uravneniya: metody, algoritmy, programmy* (Integral equations: methods, algorithms, programs), Kiev: Naukova Dumka, 1986.
16. Morozov V. A. On restoration of noisy signals by a regularization method, *Vychislitel'nye Metody i Programirovanie*, 2012, vol. 13, issue 1, pp. 247–252 (in Russian). <http://mi.mathnet.ru/eng/vmp26>
17. Vasin V. V., Ageev A. L. *Ill-posed problems with a priori information*, Berlin: De Gruyter, 2013. <https://doi.org/10.1515/9783110900118>
18. Yagola A. G. Ill-posed problems with apriori information, *Sibirskie Èlektronnye Matematicheskie Izvestiya*, 2010, vol. 7, pp. 343–361 (in Russian). <http://mi.mathnet.ru/eng/semr292>
19. Nemtsova O. M. Ageev A. L., Voronina E. V. The estimation of the error of the hyperfine interaction parameter distribution from Mössbauer spectra, *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research. Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, 2002, vol. 187, issue 1, pp. 132–136. [https://doi.org/10.1016/S0168-583X\(01\)00830-8](https://doi.org/10.1016/S0168-583X(01)00830-8)
20. Sussman M. S. Linear signal combination T_2 spectroscopy, *Magnetic Resonance Imaging*, 2020, vol. 66, pp. 257–266. <https://doi.org/10.1016/j.mri.2019.11.016>
21. Henríquez P. A., Ruz G. A. Noise reduction for near-infrared spectroscopy data using extreme learning machines, *Engineering Applications of Artificial Intelligence*, 2019, vol. 79, pp. 13–22. <https://doi.org/10.1016/j.engappai.2018.12.005>
22. Zelada-Ríos L., Pacheco-Barrios K., Galecio-Castillo M., Yamunaqué-Chunga C., Álvarez-Toledo K., Otiniano-Sifuentes R. Acute disseminated encephalomyelitis and COVID-19: A systematic synthesis of worldwide cases, *Journal of Neuroimmunology*, 2021, vol. 359, 577674. <https://doi.org/10.1016/j.jneuroim.2021.577674>
23. Miguel R. B., Talebi-Moghaddam S., Zamani M., Turcotte C., Daun K. J. Assessing flare combustion efficiency using imaging Fourier transform spectroscopy, *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 2021, vol. 273, 107835. <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2021.107835>
24. Calvetti D., Lewis B., Reichel L., Sgallari F. Tikhonov regularization with nonnegativity constraint, *Electronic Transactions on Numerical Analysis*, 2004, vol. 18, no. 1, pp. 153–173.
25. Lekhtmakher S., Shapiro M. On the paper “Inverse methods for analyzing aerosol spectrometer measurements: A critical review”, *Journal of Aerosol Science*, 2000, vol. 31, no. 7, pp. 867–873. [https://doi.org/10.1016/S0021-8502\(99\)00561-3](https://doi.org/10.1016/S0021-8502(99)00561-3)
26. Samaras S., Nicolae D., Böckmann Ch., Vasilescu J., Biniotoglou I., Labzovskii L., Toanca F., Papayannis A. Using Raman-lidar-based regularized microphysical retrievals and Aerosol Mass Spectrometer measurements for the characterization of biomass burning aerosols, *Journal of Computational Physics*, 2015, vol. 299, pp. 156–174. <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.06.045>
27. Chuev M. A. An effective method for analyzing the hyperfine structure of gamma resonance spectra using the Voith profile, *Doklady Akademii Nauk*, 2011, vol. 438, no. 6, pp. 747–751 (in Russian). <https://www.elibrary.ru/item.asp?id=16525971>
28. Pearson K. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables in such that it can be reasonably supposed to have arisen from random sampling, *The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science. Series 5*, 1900, vol. 50, no. 302, pp. 157–175. <https://doi.org/10.1080/14786440009463897>

29. Taylor J.R. *An introduction to error analysis: The study of uncertainties in physical measurements*, University Science Books, 1982.
30. Prakash J., Sanny D., Kalva S.K., Pramanik M., Yalavarthy P.K. Fractional regularization to improve photoacoustic tomographic image reconstruction, *IEEE Transactions on Medical Imaging*, 2019, vol. 38, no. 8, pp. 1935–1947. <https://doi.org/10.1109/TMI.2018.2889314>
31. Reddy G.D. A class of parameter choice rules for stationary iterated weighted Tikhonov regularization scheme, *Applied Mathematics and Computation*, 2019, vol. 347, pp. 464–476. <https://doi.org/10.1016/j.amc.2018.11.015>
32. Mohammady S., Eslahchi M.R. Extension of Tikhonov regularization method using linear fractional programming, *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 2020, vol. 371, 112677. <https://doi.org/10.1016/j.cam.2019.112677>
33. Gao Y., Xiao L., Wu B. TSVD and Tikhonov methods and influence factor analysis for NMR data in shale rock, *Journal of Petroleum Science and Engineering*, 2020, vol. 194, 107508. <https://doi.org/10.1016/j.petrol.2020.107508>
34. Kim I.G., Latypova N.V., Motorina O.L. *Chislennye metody: uchebno-metodicheskoe posobie. Chast' 2* (Numerical methods: study guide. Part 2), Izhevsk: Udmurt State University, 2013.
35. Nemtsova O.M., Konygin G.N. Improvement of the Tikhonov regularization method for solving the inverse problem of Mössbauer spectroscopy, *Journal of Applied Spectroscopy*, 2018, vol. 85, no. 5, pp. 931–935. <https://doi.org/10.1007/s10812-018-0741-2>
36. Nemtsova O.M., Konygin G.N., Porsev V.E. Separation of overlapping spectral lines using the Tikhonov regularization method, *Journal of Applied Spectroscopy*, 2021, vol. 88, no. 2, pp. 373–381. <https://doi.org/10.1007/s10812-021-01185-5>
37. Konygin G.N., Nemtsova O.M., Porsev V.E. Mössbauer spectra of solid solutions processed using the Voigt function, *Journal of Applied Spectroscopy*, 2019, vol. 86, no. 3, pp. 409–415. <https://doi.org/10.1007/s10812-019-00834-0>

Received 02.10.2021

Tat'yana Mikhailovna Bannikova, Candidate of Pedagogics, Associate Professor, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-4211-8421>

E-mail: t.bannikova2011@yandex.ru

Viktor Mikhailovich Nemtsov, Junior Researcher, Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0003-2551-7041>

E-mail: viktorn93@gmail.com

Natal'ya Anatol'evna Baranova, Candidate of Pedagogics, Associate Professor, Udmurt State University, ul. Universitetskaya, 1, Izhevsk, 426034, Russia.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-4410-3613>

E-mail: natik-231@yandex.ru

Grigorii Nikolaevich Konygin, Candidate of Physics and Mathematics, Senior Researcher, Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-6202-9509>

E-mail: gnkon@mail.ru

Ol'ga Mikhailovna Nemtsova, Candidate of Physics and Mathematics, Senior Researcher, Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, ul. T. Baramzinoi, 34, Izhevsk, 426067, Russia.

ORCID: <https://orcid.org/0000-0002-5676-9578>

E-mail: olganemtsova1968@gmail.com

Citation: T.M. Bannikova, V.M. Nemtsov, N.A. Baranova, G.N. Konygin, O.M. Nemtsova. A method for estimating the statistical error of the solution in the inverse spectroscopy problem, *Izvestiya Instituta Matematiki i Informatiki Udmurtskogo Gosudarstvennogo Universiteta*, 2021, vol. 58, pp. 3–17.