ИТЕРАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ НАХОЖДЕНИЯ ОБЛАСТИ ОПРЕДЕЛЕНИЯ РЕШЕНИЯ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ ЯДЕРНОГО ГАММА РЕЗОНАНСА

ПОРСЕВ В. Е., НЕМЦОВА О. М., КОНЬГИН Г. Н.

Удмуртский федеральный исследовательский центр Уральского отделения РАН,
426067, г. Ижевск, ул. Т. Барамзиной, 34

АННОТАЦИЯ. Предложен итерационный алгоритм, решающий проблему возникновения отрицательных элементов в регуляризованном Тихоновском решении. Алгоритм автоматически, без введения априорных ограничений, находит область определения решения. Итерационное решение в алгоритме находится при критически минимальном (пороговом) значении параметра регуляризации. Сформулированы условия определения порогового значения параметра регуляризации. Алгоритм существенно повышает качество обработки и, соответственно, увеличивает информативность мёссбауэровских спектров. Показано, что применение итерационного алгоритма принципиально расширяет возможности метода регуляризации Тихонова.

КЛЮЧЕВЫЕ СЛОВА: мёссбауэровский спектр, регуляризация Тихонова, итерационный алгоритм.

ВВЕДЕНИЕ

Известно, что многие задачи обработки экспериментальных данных являются некорректно поставленными задачами и для их решения нужно использовать специальные методы. Одним из успешно применяемых методов решения некорректных задач является метод регуляризации Тихонова. Метод регуляризации Тихонова заключается в замене точной некорректной задачи параметрическим семейством приближенных корректных задач. В результате ищется не точное решение задачи, а множество приближенных решений. Для того, чтобы выбрать из этого множества решений единственное правильное решение, необходимо максимально учитывать всю априорную информацию об искомом решении. Введение априорной информации в алгоритм математической обработки данных может быть реализовано разными способами. Иногда это требует усложнения самой математической модели, иногда достаточно организовать итерационный процесс, который обеспечит выполнение априорных ограничений.

Во многих спектроскопических задачах (Mossbauer Spectroscopy, Extended X-Ray Absorption Fine Structure, X-Ray Photoelectron Spectroscopy (РФЭС) и других) искомое решение является функцией плотности вероятности и тем самым решение обратной задачи не может быть отрицательным [1 – 4]. В некоторых задачах это априорное условие реализовано через проектирование на пространство положительных решений, или введение пробного неотрицательного решения [5, 6]. Однако в этих случаях в области определения искомого решения необходимо априори выделить и указать интервалы существования неотрицательного решения.

В данной работе предлагается итерационный алгоритм, позволяющий находить неотрицательное решение из множества регуляризованных решений обратной задачи, полученных методом Тихонова. Задача решается на всей области определения решения и не требует указания интервалов существования неотрицательного решения. Алгоритм основан на утверждении, что *для мёссбауэровских спектров с резонансной линией в виде функции Лоренца истинная плотность вероятности распределения существует только на интервалах с положительными значениями регуляризованного Тихоновского решения и не существует на интервалах отрицательного решения.*

ИТЕРАЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ

Мёссбауэровский спектр формируется в результате регистрации резонансного поглощения, испускания и рассеяния гамма-квантов ядрами атомов твердого тела и описывается суперпозицией функций Лоренца. Обратная задача состоит в нахождении функции распределения $P(H)$ по экспериментальному мёссбауэровскому спектру $Y(V)$ и математически выражается интегральным уравнением Фредгольма 1 рода:

$$\int_{H_{\min}}^{H_{\max}} A(H, V)P(H)dH = Y(V), \quad V \in [V_{\min}, V_{\max}], \quad (1)$$

где $Y(V)$ – интенсивность резонансного поглощения, как функция относительной скорости V движения мессбауэровского источника излучения; $A(H, V)$ – функция Лоренца; H – сверхтонкое магнитное поле на ядре; $P(H)$ – искомая функция плотности вероятности распределения параметра H ; $[H_{\min}, H_{\max}]$ – интервал существования непрерывного распределения. При расшифровке функции распределения основное внимание уделяется следующим параметрам: количество локальных максимумов, их положение и доля в общем распределении.

Для решения уравнения (1) применяется метод регуляризации Тихонова, который заключается в поиске функции $P(H)$, обеспечивающей минимум функционала:

$$\min_{P(H)} \{ \|A(H, V)P(H) - Y(V)\|^2 + \alpha(\|P(H)\|^2 + \|P'(H)\|^2) \}, \quad (2)$$

где α – параметр регуляризации, регулирующий непрерывность решения $\|P(H)\|$ и его производной $\|P'(H)\|$ в пространстве интегрируемых с квадратом функций. Классическим решением регуляризованной задачи (2) является функция, обеспечивающая баланс минимума невязки уравнения и минимума нормы решения. Критерием минимума невязки уравнения является критерий восстановления экспериментальных данных хи-квадрат Пирсона [7]. Как правило, критерию хи-квадрат удовлетворяет не одно решение, а множество регуляризованных Тихоновских решений. Выбор единственного решения определяется выбором оптимального параметра регуляризации, например, по L -кривой Хансена [8]. В случаях, когда параметр регуляризации мал и искомое решение содержит протяженные интервалы с нулевыми значениями, регуляризованное Тихоновское решение может иметь отрицательные элементы. Поскольку отрицательные $P(H)$ являются ложными и в самом методе Тихонова нет ограничений на отрицательность регуляризованного решения, то необходимы дополнительные способы поиска неотрицательного решения.

В данной работе предлагается итерационный алгоритм, позволяющий получать неотрицательное регуляризованное решение. Известно, что задача минимизации функционала (2) сводится к решению системы линейных алгебраических уравнений:

$$(A^T A + \alpha B)P = A^T Y, \quad P_\alpha = (A^T A + \alpha B)^{-1} A^T Y, \quad (3)$$

где K, N – размерности системы; $A[K, N]$ – основная матрица, аппроксимирующая интеграл уравнения (1) подходящей квадратурной формулой; $A^T[N, K]$ – транспонированная матрица, $B[N, N]$ – трехдиагональная матрица, описывающая гладкость функции, $Y[K]$ – экспериментальный мёссбауэровский спектр, $P_\alpha[N]$ – регуляризованное решение. Алгоритм заключается в коррекции основной матрицы системы в соответствии с интервалами положительности и отрицательности регуляризованного решения, полученного на предыдущем шаге итерации. Т.е. по решению P_α уравнения (3) с исходной матрицей $A=A^0$ (нулевая итерация), определяются интервалы отрицательности решения, и соответствующие столбцы матрицы A заменяются нулевыми значениями:

$$a_{ij} = \begin{cases} 0, & \text{если } P_\alpha(H_j) < 0, \\ a_{ij}, & \text{если } P_\alpha(H_j) \geq 0, \end{cases} \quad j = 1, \dots, N; \quad i = 1, \dots, K \quad (4)$$

$$A^{it+1} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & 0 & a_{1N-1} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} & \ddots & 0 & a_{2N-1} & 0 \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} & 0 & a_{3N-1} & 0 \\ a_{41} & a_{42} & a_{43} & 0 & a_{4N-1} & 0 \\ a_{51} & a_{52} & a_{53} & \ddots & 0 & a_{5N-1} & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ a_{K1} & a_{K2} & a_{K3} & 0 & a_{KN-1} & 0 \end{pmatrix} \quad (5)$$

Затем снова решается система уравнений (3) с новой матрицей A^{it+1} . Итерационная процедура выражается следующим уравнением:

$$P_{\alpha}^{it+1} = \left((A^{it+1})^T (A^{it+1}) + \alpha B \right)^{-1} (A^{it+1})^T Y, \quad A^0 = A, \quad it = 1, \dots - \text{номер итерации}. \quad (6)$$

Таким образом, на каждом шаге итерации из интервала интегрирования $[H_{\min}, H_{\max}]$ обратной задачи (1) исключаются интервалы с отрицательным регуляризованным решением, и уравнение решается только на интервалах положительного решения. Как правило, это приводит к возникновению новых интервалов отрицательности на выбранном интервале интегрирования. Поэтому поиск неотрицательного решения требует итерационной процедуры уточнения интервала интегрирования путем обнуления в матрице (4) новых столбцов, до полного исчезновения интервалов отрицательности. Таким образом, область определения искомого решения уточняется, и интервалы существования неотрицательного решения находятся автоматически. Одновременно с отрицательными осцилляциями исчезают и ложные положительные, а истинные локальные максимумы остаются. Очевидно, что итерационный процесс сходится к искомому неотрицательному решению задачи, если такое решение существует (свойство метода регуляризации Тихонова) [9].

МОДЕЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Работоспособность итерационного алгоритма продемонстрирована на модельном примере. Построена модельная функция распределения $P(H)$, состоящая из трех функций Гаусса одинаковой ширины $\Gamma = 0,2$ Тл, с центрами $H_3 = 20,7$ Тл; $H_2 = 21,6$ Тл; $H_1 = 31,0$ Тл и относительными амплитудами $A_3 = 1,0$; $A_2 = 3,0$; $A_1 = 2,0$ соответственно (рис. 1, а). Близкое расположение локальных максимумов 2 и 3 (расстояние между центрами $0,9$ Тл $= 0,14$ мм/с) и формирование мессбауэровских спектров секстетамы приводит к тому, что их спектральные составляющие перекрываются. Ширина элементарной линии Лоренца в мессбауэровском спектре $\Gamma = 0,28$ мм/с и, поэтому спектральные составляющие визуально не разделяются (рис. 1 H_2 и H_3 на штрих-диаграмме). Один из максимумов удален от других на расстояние $\approx 10,0$ Тл для создания в области определения решения протяженного интервала с нулевыми значениями $P(H)$, наличие которого позволяет наглядно продемонстрировать принципиальную невозможность получения регуляризованного Тихоновского решения близкого к модельному. В результате обработки точного модельного спектра методом регуляризации Тихонова без итерационной процедуры получается функция распределения, совпадающая с моделью (рис. 1, а). При наложении на спектр белого шума равного 2 % от величины максимальной относительной амплитуды спектра (экспериментальная относительная стат. ошибка при съемке мессбауэровских спектров может составлять несколько процентов [2]) Тихоновское решение получается осциллирующим с набором положительных и отрицательных значений (рис. 1, б). Очевидно, что появление ложных положительных и отрицательных решений вызвано наложением статистического шума в модельный спектр.

Известно, что проблема устойчивости решения к погрешности экспериментальных данных решается введением параметра регуляризации. На рис. 2 показано, как изменение значения параметра регуляризации α отражается на виде Тихоновского решения (штриховые линии).

Рис. 1. Сравнение модельной функции распределения (сплошная линия) и регуляризованного решения (штриховая линия), полученного при обработке смоделированного мёссбауэровского спектра (точки) без шума (а) и с шумом (б)

С уменьшением значения α в решении растет амплитуда как положительных, так и отрицательных осцилляций. Но, поскольку критерий хи-квадрат χ^2_{Tih} выполняется для всех значений параметра α (кроме $\alpha = 0,01$, рис. 2, а), все распределения $P(H)$, являющиеся Тихоновским решением, формально являются решениями задачи. Однако, явно видно, что они не соответствуют модельной функции распределения (рис. 2, штриховая линия). Применение итерационного алгоритма позволяет получать неотрицательные решения при всех значениях параметра регуляризации (рис. 2, сплошная линия). Количество итераций для этого достаточно от 3 до 7 и восстановление мёссбауэровского спектра происходит в рамках критерия χ^2_{it} . Из рисунка видно, что наилучшее совпадение с модельным распределением (точки) происходит при $\alpha = 0,000035$ (рис. 2, з).

Для определения оптимального значения параметра регуляризации использовался принцип L -кривой Hansen [8]. В качестве L -оператора для построения кривой (рис. 3, кружки) использовалась норма разности итерационного решения и модельного распределения $\|P_{it} - P_{mod}\|$ в зависимости от нормы невязки $\|AP - Y\|$ при изменении параметра $10^{-15} < \alpha < 1,0$ с шагом $\Delta\alpha = 0,5$. В этом случае существует пороговое оптимальное значение параметра регуляризации $\alpha_{opt} = 0,000035$, при котором кривая имеет минимум (круг на рис. 3):

$$\alpha_{opt} = \min_{\alpha} \{\log\|AP - Y\|, \log\|P_{it} - P_{mod}\|\}. \quad (7)$$

Для реальных спектров с неизвестным распределением для построения L -кривой можно использовать норму разности итерационного и регуляризованного Тихоновского решений $\|P_{it} - P_{Tih}\|$ (рис. 3, квадраты). Действительно, из рис. 3 видно, что в этом случае оптимальное значение α_{opt} (рис. 3, большой квадрат) располагается в области резкого увеличения нормы отклонения итерационного решения от регуляризованного Тихоновского решения при незначительном отклонении нормы невязки. Тем самым при обработке реальных спектров параметр регуляризации нужно выбирать в окрестности перегиба L -кривой, построенной с использованием $\|P_{it} - P_{Tih}\|$. Однако, этот выбор является сложной проблемой. Из рис. 2 видно, что при $\alpha > \alpha_{opt}$ итерационное решение недоописывает

модельное распределение (рис. 2, в). При $\alpha < \alpha_{opt}$ в интервале неотрицательного ненулевого итерационного решения 20,0 – 22,0 Тл (близкорасположенные локальные максимумы 0,9 Тл = 0,14 мм/с = $\Gamma/2$) появились отрицательные значения в регуляризованном Тихоновском решении, что привело к существенному несовпадению итерационного решения с модельным распределением (рис. 2, д).

Рис. 2. Восстановление модельного распределения $P(H)$ (точки) при разных значениях параметра регуляризации α : регуляризованное Тихоновское решение (штриховая линия) и неотрицательное решение после применения итерационной процедуры (сплошная линия)

Следовательно, необходимыми и достаточными условиями для нахождения критически минимального порогового значения параметра регуляризации являются: 1) восстановление экспериментальных данных в рамках критерия хи-квадрат; 2) соответствие значения параметра регуляризации области перегиба L-кривой Hansen; 3) отсутствие на найденных интервалах существования искомого неотрицательного решения отрицательных элементов в регуляризованном Тихоновском решении. Таким образом, на примере обработки модельного спектра продемонстрирована эффективность итерационного алгоритма нахождения неотрицательного решения методом регуляризации Тихонова с пороговым значением параметра регуляризации.

Рис. 3. L-кривая определения оптимального значения параметра регуляризации при восстановлении модельного распределения ($10^{-15} < \alpha < 1,0$)

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ

Эффективность итерационного алгоритма показана на примерах обработки реальных мёссбауэровских спектров, полученных для упорядоченных твердых растворов состава $\text{Fe}_{75}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{25}$ ($x = 0,0 - 1,0$). Все мёссбауэровские спектры регистрировались на спектрометре ЯГРС-4М с источником ^{57}Co в матрице Cr при температуре 77 К (256 каналов, максимальное число импульсов в канале $N = 350000$, что соответствует погрешности экспериментальных данных $1/\sqrt{N} = 0,17\%$). На примере обработки мёссбауэровского спектра квазибинарного сплава $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{10}\text{Ge}_{15}$ поэтапно опишем работу итерационного алгоритма для получения неотрицательной функции распределения сверхтонкого магнитного поля (рис. 4). Сначала находится регуляризованное Тихоновское решение, обеспечивающее выполнение необходимого условия восстановления экспериментальных данных – критерия хи-квадрат: при $\alpha = 0,001$ значение хи-квадрат становится меньше единицы (рис. 4, а). Поскольку решение имеет интервалы отрицательности, то выполняется итерационная процедура получения неотрицательного решения. После трех итераций решение становится неотрицательным и критерий хи-квадрат также выполняется. На рисунке видно, что решение имеет два интенсивных локальных максимума и один максимум малой интенсивности при 27,0 Тл. При этом ширина линии максимума, расположенного при 21,0 Тл заметно больше ширины линии в области 34,0 Тл (для сравнения на рис. 4, а вторая линия наложена на первую – штрихпунктирная линия). Это свидетельствует о том, что широкий максимум состоит из нескольких локальных максимумов (ситуация аналогичная модельному примеру, рис. 2). Действительно, при уменьшении значения параметра регуляризации до $\alpha = 0,0001$ происходит выделение плеча (рис. 4, б), а при $\alpha = 0,00003$ явно выделяются два локальных максимума (рис. 4, в). При этом локальные максимумы при 34,0 Тл и 27,0 Тл сохраняются. При выборе параметра регуляризации по L-кривой затруднительно указать одно значение, т.к. области перегиба L-кривой соответствует множество значений параметра $0,00002 < \alpha < 0,0001$ (рис. 5).

Рис. 4. Функция распределения сверхтонкого магнитного поля $P(H)$, полученная при обработке мёссбауэровского спектра квазибинарного сплава $\text{Fe}_{75}\text{Si}_{10}\text{Ge}_{15}$ при разных значениях параметра регуляризации (регуляризованное Тихоновское решение – штриховая линия, итерационное решение – сплошная линия)

Решения, полученные при разных значениях параметра регуляризации из этой области, отличаются: чем меньше значение параметра, тем чётче разделяются два близко расположенных локальных максимума в интервале 21,0 – 22,0 Тл (рис. 4, б и в). Однако уменьшение значения параметра регуляризации за область перегиба L -кривой приводит к возникновению на интервалах ненулевого итерационного решения (21,0 – 22,0 Тл и 27,0 – 28,0 Тл) отрицательных элементов/значений в регуляризованном Тихоновском решении (рис. 4, г), аналогично модельному примеру (рис. 2, д). Следовательно, пороговым значением параметра регуляризации является значение равное 0,00003 и соответствующее ему решение следует считать удовлетворительным (рис. 4, в). Итерационное решение, полученное при меньших значениях параметра регуляризации, следует считать искаженным и неверным (рис. 4, г). Очевидно, что полученная в результате функция распределения имеет совершенно иную интерпретацию, чем первоначальное регуляризованное Тихоновское решение (рис. 4, а). В функции распределения $P(H)$ обнаружили четыре локальных максимума со следующими положениями и долевыми вкладами: $H_0 = 34,2$ Тл, 34 %, $H_3 = 27,0$ Тл, 4 %, $H_{4_{12}} = 21,7$ Тл, 42 %, $H_{4_{11}} = 21,1$ Тл, 20 %. Этот результат совпадает с результатами, описанными в работе [5]: $H_0 = 34,2$ Тл, 34 %, $H_3 = 27,1$ Тл, 4 %, $H_{4_{12}} = 21,7$ Тл, 43 %, $H_{4_{11}} = 21,2$ Тл, 19 %. Следовательно, в спектре существует не три, а четыре составляющих. Составляющая H_0 соответствует атомной конфигурации с чисто железным ближайшим (в первой координационной сфере) атомным окружением. Дополнительная составляющая слабой интенсивности H_3 характеризует атомы железа с тремя атомами примеси (Si, Ge) в ближайшем окружении, что свидетельствует об отклонении от стехиометрического состава в сторону меньшей концентрации примеси. Обнаруженное

расщепление линии H_4 позволяет объяснить вероятностную причину возникновения двух конфигураций H_{4_11} и H_{4_12} с различным числом атомов примеси в четвертой координационной сфере [10].

Рис. 5. L-кривая для выбора оптимального значения параметра регуляризации в задаче обработки мёссбауэровского спектра упорядоченного сплава $Fe_{75}Si_{10}Ge_{15}$

Результаты применения предложенной итерационной процедуры к обработке мёссбауэровских спектров, полученных для упорядоченных твердых растворов состава $Fe_{75}(Si_{1-x}Ge_x)_{25}$, $x = 0,0 - 1,0$: а) $x = 0,0$; б) $x = 0,2$; в) $x = 0,4$; г) $x = 0,6$; д) $x = 0,8$; е) $x = 1,0$ представлены на рис. 6. Восстановление экспериментальных данных в рамках критерия χ^2 происходит во всех случаях: $\chi^2 \approx 1$, разностные спектры расположены в пределах статистического разброса $\sigma = \pm \sqrt{N} \approx 0,20\%$ с вероятностью 68 %. Параметр регуляризации выбран по L-кривой с пороговым значением $\alpha = 0,00003$. Количество итераций для получения неотрицательной функции распределения составило от 4 до 10. Из рисунка видно, что локальный максимум на функции распределения $P(H)$ в области компоненты H_4 меняется при изменении относительного содержания кремния и германия. В работе [10] показано, что расщепление линии H_4 происходит из-за возникновения конфигураций с различным числом атомов sp-элементов (Si и Ge) в четвертой координационной сфере. Интенсивность этих линий зависит от величины отклонения концентрации от стехиометрического состава.

Таким образом, на примерах обработки экспериментальных спектров продемонстрирована работоспособность итерационного алгоритма нахождения неотрицательного решения методом регуляризации Тихонова. Показано, что его применение при пороговом значении параметра регуляризации существенно повышает качество обработки мёссбауэровских спектров.

Рис. 6. Мёссбауэровские спектры упорядоченных твердых растворов состава $Fe_{75}(Si_{1-x}Ge_x)_{25}$: а) $x=0,0$; б) $x=0,2$; в) $x=0,4$; г) $x=0,6$; д) $x=0,8$; е) $x=1,0$ и соответствующие им функции распределения, полученные методом регуляризации Тихонова, без итераций (штриховая линия) и после итерационной процедуры (сплошная линия)

ВЫВОДЫ

Предложен итерационный алгоритм, решающий проблему возникновения отрицательных и ложных положительных элементов в регуляризованном Тихоновском решении, при обработке экспериментальных спектров. Работоспособность и эффективность итерационного алгоритма продемонстрирована на примерах обработки модельных и экспериментальных мёссбауэровских спектров. Алгоритм автоматически, без введения априорных ограничений, корректирует область определения итерационного решения. Итерационное решение находится при пороговом значении параметра регуляризации, что позволяет математически обоснованно выделять слаботоразрешенные близкорасположенные спектральные составляющие. Сформулированы необходимые и достаточные условия выбора порогового значения параметра регуляризации. Показано, что предложенный алгоритм принципиально повышает качество обработки спектров и увеличивает информативность метода мёссбауэровской спектроскопии.

Алгоритм априори не требует точного введения интервалов существования искомого неотрицательного решения, а только указания минимальной и максимальной границы предполагаемой области определения. Таким образом, предложенный итерационный алгоритм принципиально расширяет возможности метода регуляризации Тихонова и повышает его разрешающую способность.

Работа выполнена в рамках государственного задания Министерства образования и науки РФ (тема №АААА-А17-117022250038-7) и при частичной поддержке проекта Уральского отделения РАН 18-10-2-21.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Wertheim G. K. *Mössbauer Effect: Principles and Applications*. Eds. Academic Press, New York. 2013. 124 p.
2. Goldanskii V. I., Herber R. H. *Chemical Applications of Mössbauer Spectroscopy*. New York: Academic Press, 1968. 701 p.
3. Teo B.-K. *EXAFS: Basic Principles and Data Analysis*. Berlin; New York: Springer, 1986. 349 p.
4. Moulder J. F. *Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy: A Reference Book of Standard Spectra for Identification and Interpretation of XPS Data*. Perkin-Elmer Corporation, 1992. 261 p.
5. Babanov Yu. A., Nemtsova O. M., Kamensky I. Yu., Mikhailova S. S. The determination of the true profile of XPS line by regularization method: I. Mathematical algorithm and numerical simulations // *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 2010, vol. 182, no. 3, pp. 90-96.
6. Sizikov V. S., Stepanov A. V. Method of training examples in solving inverse ill-posed problems of spectroscopy // *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2015, vol. 15, no. 6, pp. 1147-1154.
7. Pearson K. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is 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, iss. 302, pp. 157-175.
8. Hansen P. C. and O'Leary D. P. The Use of the L-Curve in the Regularization of Discrete ill-Posed Problems // *Journal of Scientific Computing*, 1993, vol. 14, no. 6, pp. 1487-1503.
9. Tikhonov A. N., Arsenin V. Y. *Solution of ill-posed Problems*. Washington: Winston & Sons. 1977. 258 p.
10. Аржников А. К., Добышева Л. В., Кобылин Г. Н., Елсуков Е. П. Магнитные моменты и сверхтонкие магнитные поля в упорядоченных и разупорядоченных квазибинарных сплавах $\text{Fe}_{75}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{25}$ // *Физика твердого тела*. 2005. Т. 47, № 11. С. 1981-1989.
11. Rusakov V. S., Kadyrzhanov K. K. Mossbauer spectroscopy of locally inhomogeneous systems // *Hyperfine Interact.*, 2005, vol. 164, iss. 1-4, pp. 87-97.

ITERATIVE ALGORITHM FOR FINDING THE DOMAIN OF DEFINITION OF THE INVERSE NUCLEAR GAMMA RESONANCE PROBLEM SOLUTION

Porsev V. E., Nemtsova O. M., Konygin G. N.

Udmurt Federal Research Center, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Izhevsk, Russia

SUMMARY An iterative algorithm for determining a non-negative solution from the set of regularized solutions of the inverse problem, obtained by Tikhonov's method, has been proposed. The algorithm allows one to automatically find domains and subdomains of a non-negative regularized Tikhonov solution, eliminating both positive and negative false elements of the solution. To increase the resolution of the Tikhonov method, the solution in the algorithm is searched at the critical minimum (threshold) value of the regularization parameter. The necessary and sufficient conditions for the selection of the threshold value of the regularization parameter are formulated: 1) experimental data recovery in the framework of the chi-squared test; 2) conformity of the regularization parameter to the Hansen L-curve criterion; 3) if the regularization parameter values are less than the threshold, negative elements appear inside the non-negative solution domain/subdomain in the regularized Tikhonov solution. Using the Mössbauer spectra processing example, the efficiency of an iterative algorithm is demonstrated. The proposed algorithm significantly improves the quality of the spectra processing and increases the informative value of the Mössbauer spectroscopy method. It is shown that the utilization of an iterative algorithm fundamentally increases the resolution of the Tikhonov regularization method. In Section 2 we describe the iterative algorithm that solves the problem of the negative elements appearance in the regularized Tikhonov's solution. For that purpose, we discuss the inverse problem for processing Mössbauer spectra that is mathematically expressed by Fredholm integral equation of the first kind. In Section 3, results of the numerical implementation are demonstrated on a model example. The necessary and sufficient conditions for determining the regularization parameter are also formulated there. In Section 4 the efficiency of the iterative algorithm is demonstrated using Mössbauer spectra processing of the ordered $\text{Fe}_{75}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)_{25}$ ($x=0.0-1.0$) solid-state solutions.

KEYWORDS: Mössbauer spectrum, Tikhonov regularization, iterative algorithm.

REFERENCES

1. Wertheim G. K. *Mössbauer Effect: Principles and Applications*. Eds. Academic Press, New York. 2013. 124 p.
2. Goldanskii V. I., Herber R. H. *Chemical Applications of Mössbauer Spectroscopy*. New York: Academic Press, 1968. 701 p. <https://doi.org/10.1126/science.164.3882.939>
3. Teo B.-K. *EXAFS: Basic Principles and Data Analysis*. Berlin; New York: Springer, 1986. 349 p. <https://doi.org/10.1007/978-3-642-50031-2>
4. Moulder J. F. *Handbook of X-ray Photoelectron Spectroscopy: A Reference Book of Standard Spectra for Identification and Interpretation of XPS Data*. Perkin-Elmer Corporation, 1992. 261 p.
5. Babanov Yu. A., Nemtsova O. M., Kamensky I. Yu., Mikhailova S. S. The determination of the true profile of XPS line by regularization method: I. Mathematical algorithm and numerical simulations. *Journal of Electron Spectroscopy and Related Phenomena*, 2010, vol. 182, no. 3, pp. 90-96. <https://doi.org/10.1016/j.elspec.2010.07.008>

6. Sizikov V. S., Stepanov A. V. Method of training examples in solving inverse ill-posed problems of spectroscopy. *Scientific and Technical Journal of Information Technologies, Mechanics and Optics*, 2015, vol. 15, no. 6, pp. 1147–1154. <https://doi.org/10.17586/2226-1494-2015-15-6-1147-1154>
7. Pearson K. On the criterion that a given system of deviations from the probable in the case of a correlated system of variables is 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, iss. 302, pp. 157-175. <https://doi.org/10.1080/14786440009463897>
8. Hansen P. C. and O'Leary D. P. The Use of the L-Curve in the Regularization of Discrete ill-Posed Problems. *Journal of Scientific Computing*, 1993, vol. 14, no. 6, pp. 1487-1503. <https://doi.org/10.1137/0914086>
9. Tikhonov A. N., Arsenin V. Y. *Solution of ill-posed Problems*. Washington: Winston & Sons. 1977. 258 p.
10. Arzhnikov A. K., Dobysheva L. V., Konygin G. N., Elsukov E. P. Magnetic moments and hyperfine magnetic fields in ordered and disordered quasi-binary $\text{Fe}_{75}(\text{Si}_{1-x}\text{Ge}_x)$ alloys. *Physics of the Solid State*, 2005, vol. 47, no. 11, pp. 2063-2071. <https://doi.org/10.1134/1.2131146>
11. Rusakov V. S., Kadyrzhanov K. K. Mossbauer spectroscopy of locally inhomogeneous systems. *Hyperfine Interact*, 2005, vol. 164, iss. 1-4, pp. 87-97. <https://doi.org/10.1007/s10751-006-9236-2>
-

Порсев Виталий Евгеньевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник,
Физико-технический институт УдмФИЦ УрО РАН, тел. 8(950)8374636, e-mail: porsev@udman.ru

Немцова Ольга Михайловна, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник,
Физико-технический институт УдмФИЦ УрО РАН, тел. 8(912)4479582, e-mail: olganemtsova@udman.ru

Коньгин Григорий Николаевич, кандидат физико-математических наук, старший научный сотрудник,
Физико-технический институт УдмФИЦ УрО РАН, тел. 8(909)7151848, e-mail: gnkon@mail.ru