ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3. ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ, 1985, Т. 26, № 6

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ФИЗИКА

УДК 519.612.4:539.17

НОВЫЕ ЧИСЛЕННЫЕ АЛГОРИТМЫ РЕШЕНИЯ ЗАДАЧ ОБРАБОТКИ ФОТОЯДЕРНЫХ ДАННЫХ

В. Н. Бобышев, Д. В. Юдин

(кафедра математики)

1. **Введение.** В настоящее время в ряде областей экспериментальной физики при обработке результатов измерений широкое распространение получил метод редукции [1]. Основная идея метода заключается в использовании вычислительной техники для синтеза измерительно-вычислительного комплекса (ИВК) «ЭВМ+прибор», результаты на выходе которого можно интерпретировать как полученные на приборе более высокого качества, чем исходный, например на идеальном неискажающем приборе. В процессе синтеза удается оценить возможности конкретного прибора как части ИВК. Оказывается, что «хорошему» с точки зрения непосредственного измерения прибору может соответствовать «плохой» ИВК и наоборот.

Именно такая ситуация имеет место при обработке различных фотоядерных (ФЯ) экспериментальных данных. В работе [2] подробно изучена математическая модель ФЯ эксперимента, приведен ряд результатов восстановления сечений ФЯ реакций.

В процессе решения задачи редукции возникает необходимость решения линейных систем с заполненными плохо обусловленными матрицами большой размерности. При обращении таких матриц возникают специфические трудности: во-первых, из-за ограниченности оперативной памяти ЭВМ часто нельзя работать с матрицами больших размерностей, хотя решение реальных задач требует именно этого; во-вторых, из-за большого счетного времени отсутствует возможность применения диалогового режима работы, что особенно важно на этапе анализа и интерпретации результатов обработки; в-третьих, вследствие плохой обусловленности матрицы исходной системы велики ошибки обращения и, как следствие, результата обработки.

В связи с этим в работе рассматриваются алгоритмы, позволяющие решать задачи редукции нужных размерностей, причем гораздо быстрее и точнее, чем это можно сделать традиционными методами. В заключение приведены результаты восстановления сечения ФЯ реакции ^{12}C (γ, n), полученные с помощью предлагаемых алгоритмов.

2. **Задача редукции.** Рассмотрим линейную схему измерений

$$\xi=Af+\nu, \tag{1}$$

где ξ — результат измерения сигнала f, полученный на приборе A с шумом ν. Будем говорить, что задана модель $[A, \Sigma]$ схемы измерений (1), если заданы математические модели прибора и погрешности, т. е. операторы A и Σ, где $\Sigma x=E\nu(x, \nu)$. В конечномерном случае ξ, f, ν — векторы, а A и Σ — матрицы соответствующих размерностей. Для ФЯ эксперимента ξ — выход реакции, полученный с использованием γ-спектра, заданного матрицей A для различных верхних границ энергий, f — сечение реакции, т. е. желаемая информация о структуре изучаемого ядра. Рассмотрим теперь линейное преобразование равенства (1):

$$R\xi = Uf + (RA - U)f + R\nu,$$

где R — решение задачи

$$E\|R\xi - Uf\|^2 = \inf\{E\|R'\xi - Uf\|^2 | ER'\xi = Uf\} \tag{2}$$

для любого f. Тогда $\widehat{Uf} = R\xi$ есть редукция сигнала ξ к виду, какой он имел бы на выходе заданного прибора U. Однако R является неустойчивым к малым изменениям параметров модели $[A, \Sigma]$, а шум $R\nu$, как правило, велик. Поэтому на практике для модели $[A, \Sigma]$ обычно решается задача

$$\|RA - U\|_2 = \inf\{\|R'A - U\|_2 | E\|R'\nu\|^2 \leqslant \varepsilon\}, \tag{3}$$

где $\|B\|_2^2 = \mathrm{Tr}\, BB^*$. Более подробную постановку и решение задач редукции для различных моделей можно найти в [1].

3. **Алгоритмы решения задачи редукции.** В [3] показано, что если $U \in D(A) = \{U : U(I - A^- A) = 0\}$, где A^- — псевдообратный оператор, то решение задачи (2) имеет вид

$$R = UA^-(I - \Sigma^{1/2}(T^{1/2})^-), \quad T = I - AA^-,$$

оценка $\widehat{Uf} = R\xi = UA^-(I - \Sigma^{1/2}(T\Sigma^{1/2})^-)\xi$. При $\Sigma = \Sigma^* \geqslant 0$ и $AA^* + \Sigma > 0$

$$\lim_{\omega \to 0} A^*(AA^* + \omega\Sigma)^{-1} = A^-(I - \Sigma^{1/2}(T\Sigma^{1/2})^-).$$

Это позволяет обосновать устойчивый метод решения задачи (1). В качестве устойчивого приближения берется оценка

$$\widehat{Uf} = R_\omega\xi = UA^*(AA^* + \omega\Sigma)^{-1}\xi. \tag{4}$$

Для определения качества оценки вычисляется уровень шума

$$h(\omega) = E\|R_\omega\nu\|^2 = \mathrm{Tr}\, R_\omega\Sigma R_\omega^* \tag{5}$$

и невязка $g(\omega) = \|R_\omega A - U\|_2^2$. (6)

Шум и невязка определяют оперативную характеристику $g(h)$, которая может служить «паспортом» ИВК. Чем ниже лежит график $g(h)$, тем лучше ИВК.

Решение задачи (3) имеет вид [1]

$$\widehat{Uf} = R_\omega\xi = \begin{cases} UA^*S_\omega^{-1}\xi, \ \omega = \omega_\varepsilon, \ 0 < \varepsilon < \varepsilon_0, \\ U(S_1^{-1/2}A)^- S_1^{-1/2}\xi, \ \varepsilon \geqslant \varepsilon_0, \\ UA^*S_1^{-1/2}(I - (S_1^{-1/2}\Sigma S_1^{-1/2})^- S_1^{-1/2}\Sigma S_1^{-1/2})\xi, \ \varepsilon = 0, \end{cases} \tag{7}$$

где $S_1 = AA^* + \Sigma$, $S_\omega = AA^* + \omega\Sigma$, $\varepsilon_0 = \|U\hat{\Sigma}^{1/2}\|_2^2$, $\hat{\Sigma} = (A^*\Sigma^{-1}A)^-$, ω_ε — единственный корень уравнения

$$h(\omega) = \|UA^*S_\omega^{-1}\Sigma^{1/2}\|_2^2 = \varepsilon. \tag{8}$$

Как уже отмечалось выше, использование в (4)—(8) обратной к $AA^* + \omega\Sigma$ матрицы требует большого объема оперативной памяти, большого числа арифметических действий, что, как следствие, не дает возможности просмотреть большой диапазон значений параметра ω для построения оперативной характеристики ИВК и организации работы в диалоговом режиме. В [4] приведены алгоритмы, позволяющие во многом избавиться от этих недостатков. Дадим описание этих алгоритмов при $U=I$, $\Sigma=\sigma^2 I$.

Любую матрицу $A=(m\times n)$ можно представить в виде

$$A=WSV^* \tag{9}$$

либо

$$A=PBQ^*, \tag{10}$$

где $W(m\times m)$, $P(m\times m)$, $V(n\times n)$, $Q(n\times n)$ — ортогональные матрицы, $s_{ij}=0$, $i\neq j$, $s_{11}\geqslant \ldots \geqslant s_{rr}>0$, $r=\operatorname{rg} A\leqslant\min(m, n)$, $b_{ij}=0$, $i\neq j$, $j-1$, $1\leqslant i\leqslant \leqslant m$, $1\leqslant j\leqslant n$. Числа s_{ii}, $1\leqslant i\leqslant r$ (в дальнейшем s_i), называются сингулярными числами, разложение (9) — сингулярным (SVD-) разложением матрицы A.

При использовании SVD-разложения формулы (4) — (6) решения задачи (2) приобретают вид

$$\hat{f}=VS^*(SS^*+\omega\sigma^2 I)^{-1}W^*\xi, \tag{11}$$

$$h(\omega)=\sum_{i=1}^{r}\frac{\sigma^2 s_i^2}{(s_i^2+\omega\sigma^2)^2}, \tag{12}$$

$$g(\omega)=\sum_{i=1}^{r}\frac{\omega^2\sigma^4}{(s_i^2+\omega\sigma^2)^2}+n-r. \tag{13}$$

При использовании разложения (10) получаем

$$\hat{f}=QB^*(BB^*+\omega\sigma^2 I)^{-1}P^*\xi=Q(B^*B+\omega\sigma^2 I)^{-1}B^*P^*\xi, \tag{14}$$

$$h(\omega)=\sigma^2\operatorname{Tr}(B^*(BB^*+\omega\sigma^2 I)^{-2}B)=$$
$$=\sigma^2\operatorname{Tr}((B^*B+\omega\sigma^2 I)^{-1}B^*B(B^*B+\omega\sigma^2 I)^{-1}), \tag{15}$$

$$g(\omega)=\omega^2\sigma^4\operatorname{Tr}(BB^*+\omega\sigma^2 I)^{-2}=\omega^2\sigma^4\operatorname{Tr}(B^*B+\omega\sigma^2 I)^{-2}. \tag{16}$$

Матрицы $BB^*+\omega\sigma^2 I$ и $B^*B+\omega\sigma^2 I$ в (14) — (16) являются трехдиагональными. Для решения операторных уравнений с такими матрицами можно использовать экономичные методы прогонки и циклической редукции [5]. Разложение (10) с последующим применением метода прогонки использовано в работе [6].

Случаи $\Sigma=\operatorname{diag}(\sigma_1^2, \ldots, \sigma_m^2)$ и $\Sigma=\Sigma^*>0$ сводятся к описанному, если использовать разложения соответственно матриц $\Sigma^{-1/2}A$ и $L^{-1}A$, где $\Sigma=LL^*$. Решение задачи редукции (3) дается формулами (11), (13), (14), (16), где ω определяется из (8).

4. **Результаты расчетов, выводы.** Остановимся подробнее на тех трудностях, с которыми приходится сталкиваться при численном решении задач редукции. Основная проблема, как уже подчеркивалось, здесь заключается в обращении матрицы $AA^*+\omega\Sigma$. Вычислительная погрешность, пропорциональная числу обусловленности, оказывается неприемлемо большой. Добавка $\omega\Sigma$ позволяет уменьшить число обусловленности. Однако при малых ω из-за представления чисел в ЭВМ происходит исчезновение этой добавки и фактически ЭВМ работает с матрицей AA^*. Стандартные программы обращения или решения систем с такой матрицей дают бессмысленные результаты.

Именно такая ситуация складывается при обработке ФЯ экспериментов, где результат измерения $\xi(x)$ связан с сечением f уравнением вида $\xi(x)=\int_a^b K(x, s)f(s)\,ds+\nu(x)$. Применение программ обращения к

Время расчета (в секундах) для 20 значений ω

$m \times n$	Сингулярное разложение	Разложение (10) и прогонка	Разложение (10) и циклическая редукция	Обращение
45×45	66	109	149	1 120
60×45	83	113	153	Авост
60×60	142	189	231	2 560
120×120	899	759	832	20 220

разностному аналогу данного уравнения дает неудовлетворительные результаты: зависимость $g(\omega)$ разрывна, интерпретация $\hat{f}$ при $\omega \to 0$ бессмысленна. Использование в таких условиях описанных выше алгоритмов, особенно основанного на формулах (11)—(13), позволяет получить хорошие результаты.

Алгоритмы сравнивались [4] на следующей тестовой задаче: брался входной δ-образный сигнал f, с помощью соответствующей аппаратной функции A строился сигнал Af, на который накладывался гауссовский шум ν. По полученному таким образом выходному сигналу ξ строилась оценка $\hat{f}$. Рассматривались различные комбинации m, $n=45$, 60, 90, 120. Для построения оперативных характеристик ИВК в каждой комбинации m, n перебиралось 20 значений параметра $\omega=\omega_k=10^{-k}$, $1 \leqslant k \leqslant 20$. При каждом ω_k вычислялись оценка $\hat{f}$, уровень шума h, невязка g и $\|f-\hat{f}\|_2$. Сравнивались 4 алгоритма: описанные выше и основанный на обращении матрицы методом квадратных корней алгоритм, применяемый ранее в расчетах. Вычисления были проведены на ЕС-1030. В таблице приведены некоторые временные характеристики алгоритмов.

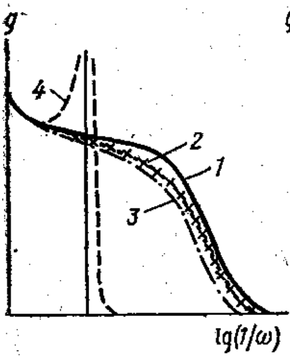

Рис. 1. Невязка g, рассчитанная различными алгоритмами: *SVD* (*1*), прогонкой (*2*), циклической редукцией (*3*), обращением матрицы (невязка разрывна) (*4*)

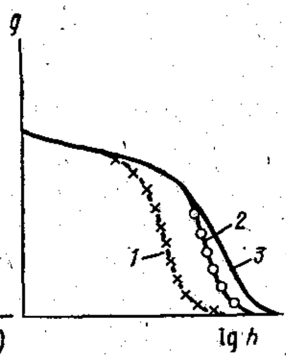

Рис. 2. Оперативная характеристика, рассчитанная с использованием *SVD* (*1*) и *SVD* с двойной точностью (*2*) и теоретическая (*3*)

На рис. 1, 2 приведены графики невязки g и оперативной характеристики для различных алгоритмов.

ИВК, основанный на *SVD*-разложении, дает $\|f-\hat{f}\|_2$ в 1,5—2 раза меньшую, чем ИВК с применением метода прогонки, и в 2—4 раза меньшую, чем ИВК, основанный на обращении и методе циклической редукции. Наиболее точные результаты дает ИВК-*SVD*. При больших (более 110×110) размерностях быстрее работает ИВК, основанный на разложении (10) с использованием метода прогонки.

Особое внимание хотелось бы уделить возможностям алгоритмов по построению оперативных характеристик. Приведенные на рис. 2 графики показывают, что оперативные характеристики, полученные при расчетах на ЭВМ, отличаются от теоретической при малых ω (или большом h). Это связано с неизбежными ошибками округления. Доверять оперативной характеристике при больших h нельзя. Проведение расчета с двойной точностью существенно расширяет область доверия.

Конкретно ИВК (SVD) был применен для восстановления сечения f ФЯ реакции ^{12}C (γ, n) из реальных экспериментальных данных ξ, искаженных в процессе измерения гауссовской аппаратной функцией экспериментальной установки A (в данном случае искажение проявляется как заглаживание структурных особенностей сечения). На рис. 3 при-

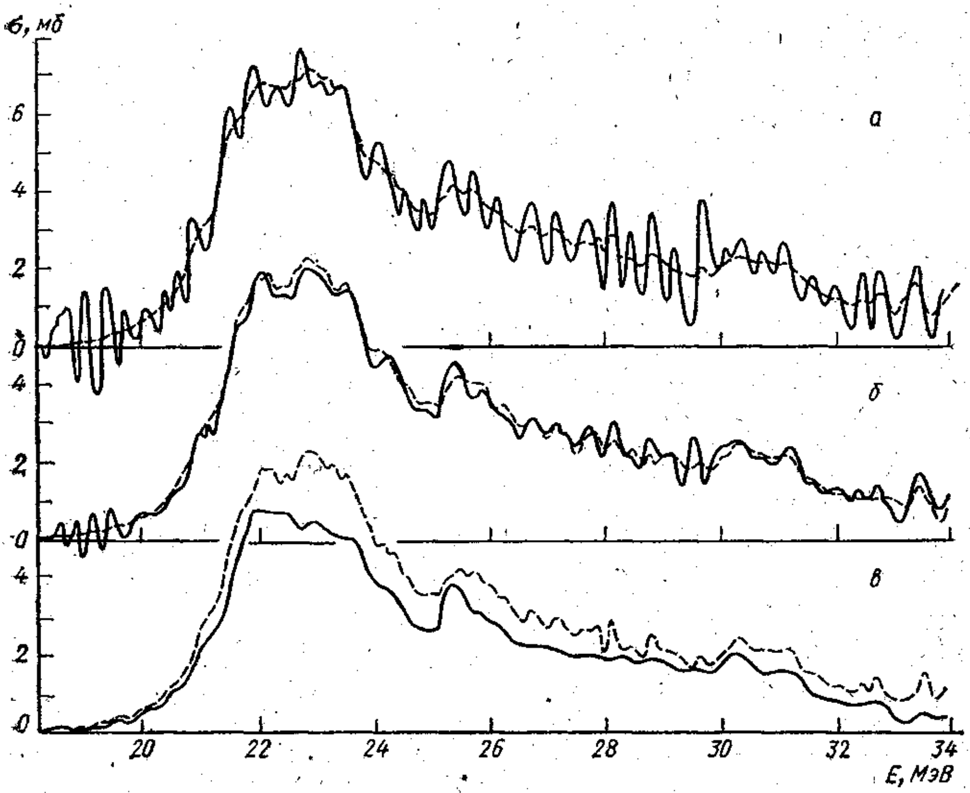

Рис. 3. Восстановление сечения $^{12}C(\gamma, n)$. Пунктир — исходные данные, сплошная кривая — результат редукции при различных ω: $\omega=0{,}125$ (*а*), 1 (*б*) и 8 (*в*)

ведены результаты редукции, содержащие 162 точки для трех различных параметров ω. Последнее существенно облегчает интерпретацию структуры сечения. Надо отметить, что ранее [2] нами был получен лишь начальный участок этого сечения, содержащий около 90 точек.

Авторы благодарят проф. Ю. П. Пытьева и проф. Б. С. Ишханова за плодотворные обсуждения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Пытьев Ю. П. Матем. сб., 1983, 120, № 2, с. 240. [2] Варламов В. В. и др. Вестн. Моск. ун-та, 1984, 25, № 4, с. 53. [3] Пытьев Ю. П. Матем. сб., 1982, 118, № 1, с. 19. [4] Бобышев В. Н. В кн.: Численные алгоритмы линейной алгебры. М.: Изд-во МГУ, 1984, с. 3. [5] Самарский А. А. Введение в численные методы. М.: Наука, 1982. [6] Воеводин В. В. ЖМФ и МФ, 1969, 9, с. 671.

Поступила в редакцию
21.11.84