Сравнение предлагаемого метода с другими методами улучшения сходимости рядов, используемых в теории плотных газов (метод аппроксимант Паде и др.) [7], а также вариантами термодинамической теории возмущений [8] показывает, что он дает большую точность совпадения теоретических и экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Базаров И. П., Николаев П. Н.//ДАН СССР. 1982. **267**, № 6. С. 1344. [2] Kihara T.//Rev. Mod. Phys. 1953. **25**, N 4. P. 831. [3] Rowlinson J. S.//Mol. Phys. 1963. **6**, N 4. P. 429. [4] Henderson D., Oden L.//Mol. Phys. 1966. **10**, N 5. P. 405. [5] Ree F. H., Keeler R. N., Carthy Mc. S. L.//J. Chem. Phys. 1966. **44**, N 9. P. 3407. [6] Andersen H. C., Weeks J. D., Chandler D.//Phys. Rev. 1971. **A4**, N 4. P. 1597. [7] Крокстон К. Физика жидкого состояния. М., 1978. [8] Зеленер Б. В., Норман Г. Э., Филинов В. С. Теория возмущений и псевдопотенциал в статистической термодинамике. М., 1981.

Поступила в редакцию
30.09.86
После переработки
01.02.88

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1988. Т. 29, № 4

УДК 539.17

ЭФФЕКТИВНЫЙ МЕТОД ОБРАБОТКИ СПЕКТРОМЕТРИЧЕСКОЙ ИНФОРМАЦИИ В РЕАЛЬНОМ МАСШТАБЕ ВРЕМЕНИ С ПОВЫШЕНИЕМ РАЗРЕШЕНИЯ ИЗМЕРИТЕЛЬНОГО ТРАКТА

С. И. Ашкиназе, В. А. Воронов, Ю. И. Нечаев

(НИИЯФ)

Рассматривается решение задачи редукции как средства повышения разрешения спектрометрического тракта при реализации ее модифицированным методом «цифра за цифрой» с применением специальной стратегии, существенно сокращающей время обработки.

1. **Введение.** Искажение сигналов в результате прохождения через спектрометрический тракт, обладающий конечной аппаратной функцией, является одной из причин возникновения трудноустранимых погрешностей измерения (наложение, размытие и др.) [1]. Создание тракта для обработки спектрометрической информации, обладающего минимальными искажениями, остается одной из самых актуальных проблем при разработке специализированных измерительно-вычислительных систем, применяемых на ускорителях заряженных частиц, при спектрометрических исследованиях в ядерной геофизике и геологии и других областях науки и техники.

Наряду с другими одним из эффективных методов, позволяющих преодолеть упомянутые трудности, является решение задачи редукции с применением метода Гаусса, который позволяет, не используя дорогостоящие детекторы и аппаратуру с более высокими параметрами, существенно увеличить разрешающую способность тракта в целом. Данная работа использует постановку задачи, изложенной в [2]. По разработанной методике уже создана программа, позволяющая обрабатывать спектры размером до 1024 каналов, причем время обработки на микро-ЭВМ составляет несколько минут [3].

Однако используемое программное обеспечение требует привлечения арифметики с плавающей запятой и существенного объема памяти, что в значительной мере сказывается на времени обработки и це-

лесообразности реализации такой задачи на микро-ЭВМ, которая не обладает соответствующими возможностями.

Настоящая работа является дальнейшим развитием методов реализации задачи редукции, позволяющим в значительной мере преодолеть указанные ограничения. Одним из перспективных методов решения системы линейных алгебраических уравнений, входящих в структуру задачи редукции, является метод «цифра за цифрой» [4, 5]. Он позволяет, используя наиболее быстро выполняемые вычислительные операции (сдвиг, пересылка, сложение) при высокоэффективной организации работы процессора микро-ЭВМ, существенно увеличить быстродействие программы, приблизиться к обработке в реальном масштабе времени.

Кроме того, специально разработанная стратегия позволяет ослабить ограничение на матрицу системы уравнений, а именно: возрастание элементов строки матрицы к главной диагонали может быть незначительным. Это расширяет область применения метода при сохранении получаемого решения и увеличения скорости обработки еще в несколько раз.

2. **Используемый формализм.** В работе [5] приводится алгоритм быстрого численного решения системы линейных алгебраических уравнений

$$\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{X}=\mathbf{Y}, \tag{1}$$

где $\widehat{\mathbf{A}}$ — матрица размерности $N\times N$, $\mathbf{X}$ и $\mathbf{Y}$ — N-мерные векторы. Суть его заключается в следующем. Определяется последовательность векторов $\mathbf{X}_n$ вида $\mathbf{X}_n=\sum_{i=1}^{n}\mathbf{d}_i r^{-i}$, где r — основание системы счисления, а $\mathbf{d}_i$ — векторы с целочисленными компонентами, которые определяются следующей рекуррентной процедурой:

$$\begin{gathered}\mathbf{W}_0=\mathbf{Y},\ \mathbf{d}_0=0,\\ \mathbf{W}_n=r(\mathbf{W}_{n-1}-\widehat{\mathbf{A}}d_{n-1}),\ \mathbf{d}_n=f(\mathbf{W}_n)=[\mathbf{W}_n].\end{gathered} \tag{2}$$

Здесь $[\cdot]$ — покомпонентная целая часть. Утверждается, что при достаточно малой норме $\|\widehat{\mathbf{A}}-\widehat{\mathbf{E}}\|$ ($1/r$ по порядку величины) последовательность $\mathbf{X}_n$ сходится к решению $\mathbf{X}$ системы (1). При этом используются следующие нормы:

$$\|\widehat{\mathbf{A}}\|=\max_i\left(\sum_{j=1}^{N}|a_{ij}|\right),\quad \|\mathbf{X}\|=\max_i|\mathbf{X}_i|.$$

Используя конкретный вид матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$ и немного усложняя функцию f в рекуррентной процедуре (2), можно значительно ослабить ограничение на $\|\widehat{\mathbf{A}}-\widehat{\mathbf{E}}\|$. Именно: пусть матрица $\widehat{\mathbf{A}}$ — ленточная, элементы каждой диагонали равны между собой и элементы в каждом столбце положительны и возрастают к главной диагонали. Предположим, кроме того, что матрица нормирована, т. е. что сумма элементов в каждом столбце равна единице. Такое условие, налагаемое на матрицу $\widehat{\mathbf{A}}$, позволяет применить алгоритм быстрого дискретного преобразования Фурье, который также существенно эффективнее метода Гаусса. Однако применение метода БПФ требует применения арифметики с плавающей запятой. При использовании описываемого метода такой необходимости нет.

Задача выбора функции f заключается в том, чтобы на каждом шаге процедуры (2) выполнялось условие

$$\|\mathbf{W}_n\| \leqslant r. \tag{3}$$

Это обеспечивает сходимость $\mathbf{X}_n$ к $\mathbf{X}$ при условии $\|\widehat{\mathbf{A}}-\widehat{\mathbf{E}}\|=\alpha<1$. Действительно, легко показать, что

$$\mathbf{W}_{n+1}=r^{n+1}\mathbf{Y}-\widehat{\mathbf{A}}\left(\sum_{i=1}^{n}\mathbf{d}_i r^{n+1-i}\right)=r^{n+1}\left(\mathbf{Y}-\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{X}_n\right)$$

или

$$\frac{W_{n+1}}{r^{n+1}}=\mathbf{Y}-\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{X}_n.$$

Используя условие (3), получим

$$\|\mathbf{Y}-\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{X}_n\|=\|\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{X}-\mathbf{X}_n)\|\leqslant 1/r^n.$$

Далее, имеем

$$\|\mathbf{X}-\mathbf{X}_n\|=\|\widehat{\mathbf{A}}(\mathbf{X}-\mathbf{X}_n)+(\widehat{\mathbf{E}}-\widehat{\mathbf{A}})(\mathbf{X}-\mathbf{X}_n)\|\leqslant 1/r^n+\alpha\|\mathbf{X}-\mathbf{X}_n\|,$$

откуда выводим искомую оценку:

$$\|\mathbf{X}-\mathbf{X}_n\|\leqslant r^{-n}\frac{1}{1-\alpha}.$$

Следовательно, при достаточно больших n норма разности $\|\mathbf{X}-\mathbf{X}_n\|$ может быть сделана сколь угодно малой.

Для выполнения условия (3) можно поступить следующим образом. Если на очередном шаге итерационной процедуры (2) мы получим $\|\mathbf{W}_n\|>r$, то корректируем вектор $\mathbf{d}_{n-1}$. Пусть $|\mathbf{W}_n{}^i|=\|\mathbf{W}_n\|$, тогда полагаем

$$\mathbf{d}'_{n-1}=\mathbf{d}_{n-1}+\lambda\,\mathrm{sign}(\mathbf{W}^i{}_n)\,\mathbf{e}_i,$$

где $\mathbf{e}_i$ — вектор, i-я компонента которого равна единице, а остальные — нулю; λ — целый положительный коэффициент. Используя d_{n-1}, получим

$$\mathbf{W}'_n=r(\mathbf{W}_{n-1}-\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{d}'_{n-1})=r(\mathbf{W}_{n-1}-\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{d}_{n-1}-\lambda\,\mathrm{sign}(\mathbf{W}^i{}_n)\,\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{e}_i)=$$

$$=\mathbf{W}_n-r\lambda\,\mathrm{sign}(\mathbf{W}^i{}_n)\,\widehat{\mathbf{A}}\mathbf{e}_i.$$

Таким образом, из $\mathbf{W}_n$ вычитается вектор, пропорциональный i-му столбцу матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$. Так как максимальный элемент столбца находится на главной диагонали, то i-я компонента вектора $\mathbf{W}_n$ максимально уменьшается по модулю, остальные же компоненты $\mathbf{W}_n$ меняются меньше — тем меньше, чем резче выражен максимум в столбце матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$, т. е. чем меньше $\|\widehat{\mathbf{A}}-\widehat{\mathbf{E}}\|$.

Коэффициент λ выбирается эмпирически и также зависит от вида матрицы $\widehat{\mathbf{A}}$. В общем случае i-ю компоненту вектора $\mathbf{d}_{n-1}$ можно менять на единицу ($\lambda=1$). Если же величина $\|\widehat{\mathbf{A}}-\widehat{\mathbf{E}}\|$ мала, то коррекция может быть больше, так как изменения вектора $\mathbf{W}_n$ при этом локализованы возле i-й компоненты. Повторяя такую коррекцию достаточное количество раз, можно добиться выполнения условия $\|\mathbf{W}_n\|\leqslant r$. При этом на каждом шаге коррекции вектора $\mathbf{d}_{n-1}$ можно менять сразу не-

сколько его компонент (при оптимальном расстоянии $S_{опт}$ между ними) для того, чтобы влияние этих изменений на вектор $\mathbf{W}_n$ было в достаточной степени независимым. Эти соображения в большой степени определяют черты оптимальной стратегии достижения быстрой сходимости итерационного процесса.

3. **Стратегия минимизации невязок.** Задача минимизации невязки на каждой итерации заключается в обнулении соответствующего k-го разряда невязки, т. е. уменьшении ее нормы до величины, не превы-

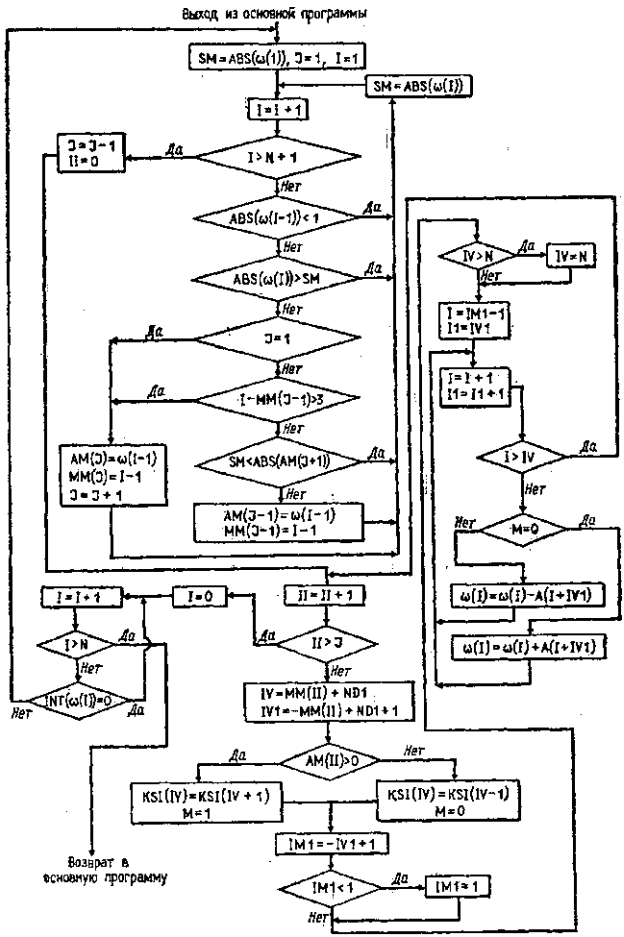

Рис. 1. Блок-схема реализации алгоритма

шающей r^{-k}. Так как число отклонений компонент невязки от указанного значения может оказаться достаточно большим, то здесь необходима определенная стратегия корректирования. С этой целью было опробовано несколько стратегий, включающих корректирование одной или многих компонент, с постоянной или переменной величиной λ коррекций. В результате авторами применена стратегия, включающая все перечисленные способы увеличения скорости сходимости итераций: нахождение максимумов отклонений компонент невязки, определение оптимального расстояния $S_{опт}$ между ними и определение величины кор-

рекции λ в зависимости от абсолютного значения отклонения каждого выбранного максимума.

Блок-схема, реализующая алгоритм стратегии, представлена на рис. 1.

4. **Параметры рабочей программы.** Разработанная программа реализации модифицированного метода «цифра за цифрой» с включением блока коррекций используется на микро-ЭВМ «Электроника-60». Одним из наиболее важных параметров работы программы является время ее выполнения в зависимости от объема N обрабатываемой спектрометрической информации. Результаты таких измерений при обработке спектров размером от 128 до 1024 каналов представлены на рис. 2. Здесь же для сравнения представлены времена обработки спек-

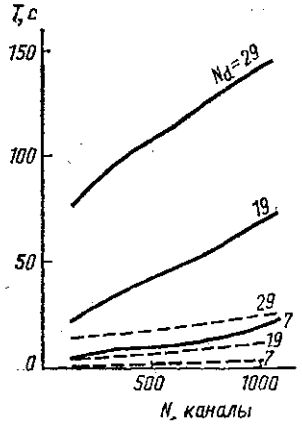

Рис. 2. Зависимость времени T обработки спектра от его размера N при использовании метода Гаусса (сплошная линия) и модифицированного метода «цифра за цифрой» (пунктир)

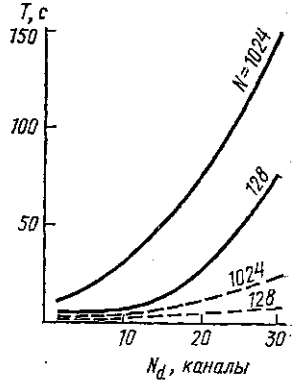

Рис. 3. Зависимость времени T обработки спектра от ширины аппаратной функции N_d. Обозначения те же, что на рис. 2

тров, полученные с помощью разработанной ранее программы [3], реализующей метод Гаусса. Сравнение показывает, что применение модифицированного метода «цифра за цифрой» существенно сокращает время и позволяет производить обработку в реальном масштабе времени.

В варианте программы для работы со спектрометрическими трактами, обладающими ограниченной шириной аппаратной функции, другим существенным параметром является ширина ленточной матрицы N_d получаемой системы линейных алгебраических уравнений. Зависимость времени обработки от величины N_d представлена на рис. 3.

Еще одним важным параметром является выбранная разрядность P решения. Время решения пропорционально P. С одной стороны, для сокращения времени обработки желательно выбирать малые значения P, а с другой — P отвечает за точность ε получаемого решения. Простые соображения показывают, что эти величины связаны соотношением

$$P = \log_r \left(\frac{n_{\max}}{\varepsilon} \right), \quad n_{\max} = \max_{1 \leqslant i \leqslant N} \{n_i\},$$

где n_i — набор в i-м канале.

Отсюда ясно, что данный метод работает наиболее быстро со спектрами, в которых величина интересующего экспериментатора эффекта соизмерима с максимальным набором в каналах всего спектра.

5. **Обработка спектрометрической информации.** Из экспериментальной практики известно, что существенный вклад в искажения сигнала измерительным трактом вносит детектор. Для получения высокой разрешающей способности всего тракта в целом необходимо использование дорогостоящих детекторов, обладающих высокими параметрами. Описанный способ обработки спектрометрической информации позволяет избежать этого благодаря применению средств вычислительной техники.

Для иллюстрации эффективности рассматриваемого метода обработки спектрометрической информации на рис. 4 приведен фрагмент энергетического спектра геологической пробы полиметаллической руды с высоким содержанием свинца с линиями характеристического излучения 12,304 и 12,612 кэВ, полученного на энергодисперсионном рентгенофлюоресцентном анализаторе.

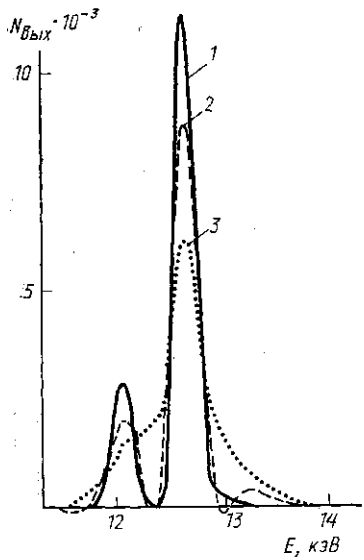

Рис. 4. Иллюстрация результата обработки спектра предлагаемым методом

При использовании детектора с высоким разрешением пики разделяются и на рис. 4 отчетливо просматривается присутствие обоих характеристических излучений (кривая *1*). В случае же использования в измерительном тракте детектора с более низкими параметрами разделения пиков не произошло (3), так как разрешающая способность всего измерительного тракта (включая детектор) оказалась недостаточной. При обработке спектра (3) на микро-ЭВМ по описанной методике экспериментатор, используя искажения монолинии при тех же параметрах тракта, добился разделения пиков, а полученный в результате обработки спектр (2) приблизился к случаю применения детектора с более высоким разрешением.

Таким образом, представленные результаты еще раз подтверждают, что комплекс «измерительный тракт плюс микро-ЭВМ» эквивалентен использованию тракта с более высоким разрешением, что отмечалось в [3], а использование модифицированного метода «цифра за цифрой» позволяет вести обработку спектрометрической информации в реальном масштабе времени.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

[1] Глушковский М. Е. Быстродействующие амплитудные анализаторы в современной ядерной физике и технике. М., 1986. [2] Пытьев Ю. П.//Матем. сб. 1983. **120(162)**, № 2. С. 240. [3] Воронов В. А., Нечаев Ю. И., Похил Г. П.// //Приб. и техн. эксперимента. 1987. № 1. С. 63. [4] Бойков В. Д., Смолов В. Б. Специализированные процессоры: итерационные алгоритмы и структуры. М., 1986. [5] Ercegovac M. D.//3-d Simp. on Comp. Arithmetic. Dallas, 1975. P. 147.

Поступила в редакцию
27.01.87