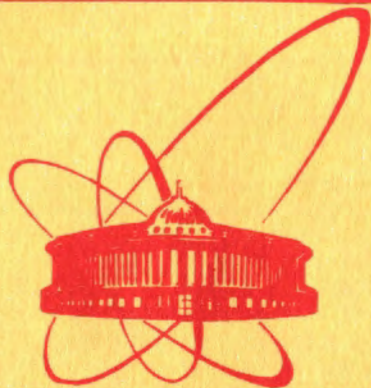


80-107

9/01-80



ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА

2475/2-80

P10-80-107

А.А.Бялко, Н.Г.Волков, В.М.Цупко-Ситников,
А.К.Чураков

СИСТЕМА ОБРАБОТКИ СПЕКТРОВ

γ - γ - СОВПАДЕНИЙ СО СЖАТИЕМ ДАННЫХ

*Направлено на XXX Совещание
по ядерной спектроскопии и структуре атомного ядра
Ленинград, март 1980 г.*

1980

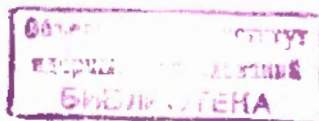
§1. ВВЕДЕНИЕ

Исследование спектров гамма-гамма-совпадений позволяет решать ряд задач, связанных с построением схем распада ядер, изучением времен жизни возбужденных состояний и угловых корреляций излучения, сопровождающего ядерный распад. Существует ряд методов регистрации спектров гамма-гамма-совпадений ¹⁻⁴. Наиболее универсальным методом, позволяющим регистрировать всю информацию во всем диапазоне возможных значений параметров, является метод, при котором спектр совпадений получается в записи на долговременный носитель без предварительной сортировки ⁴.

Альтернативой может служить только запись по мере набора рассортированного спектра на внешний носитель, однако в данном случае быстроедействие, а следовательно, и эффективность регистрации намного ниже из-за необходимости частого обращения к внешним устройствам.

В результате применения метода накопления двумерных спектров с прямой записью кодов процесс сортировки должен выполняться программами обработки информации. Поясним это на примере программы автоматической обработки спектров гамма-гамма-совпадений ⁵. Автоматизация обработки требует для нормальной работы программы анализа целого ряда поверхностей, областей и сечений спектра. В работе ⁵ показано, что, как минимум, необходимы три последовательные сортировки. Это относится и к программам полуавтоматической обработки ^{4,6}. Хотя время сортировки можно значительно сократить, используя специальные методы ^{5,7}, но и в этом случае она является длительным процессом, особенно когда данные об эксперименте записаны на нескольких магнитных лентах. Потребность в большом количестве магнитных лент усложняет и проведение эксперимента, и обработку результатов.

Устранение этих недостатков возможно при переходе к сжатию данных и хранению их в компактном виде /вместо обычного способа хранения/. Широкое применение таких методов тормозилось отсутствием универсального, быстрого, не требующего вмешательства человека алгоритма, который, кроме всего прочего, не вносил бы существенных искажений в исходные данные.



Этим жестким требованиям во многом отвечает разложение по сингулярным значениям - метод SVD (Singular Value Decomposition)⁸⁻¹⁰. Реализация этого метода с учетом специфики измерений совпаденней позволяет получать для обработки фрагменты любых конфигураций, избавляет от многократных сортировок, дает возможность компактного хранения спектра /требуемый объем магнитной ленты сокращается в десятки раз/.

§2. ЧИСЛЕННАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ МЕТОДА SVD ДЛЯ ДВУМЕРНЫХ ИЗМЕРЕНИЙ

Суть метода SVD можно свести к следующему: любая действительная матрица A представима в виде^{11/}

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^R \sigma_k U_{ik} V_{jk}, \quad /1/$$

где R - ранг матрицы A, σ_k - ее сингулярные значения, U и V - матрицы, составленные из собственных ортонормированных векторов матриц AA^T и A^TA соответственно. Как видно из /1/, если для запоминания левой части формулы /1/ необходимо N×N ячеек, то для запоминания правой - 2NR + R. То, что определяющим параметром возможности сокращения памяти является ранг матрицы, объясняет смысл подобного представления: из рассмотрения исключаются линейные зависимости между столбцами или строками матрицы. Такие зависимости в двумерных спектрах обусловлены по крайней мере конечным разрешением применяемых полупроводниковых детекторов /ППД/. Количество зависящих соседних строк спектра тем больше, чем хуже разрешение, поэтому существуют характерные для конкретных условий эксперимента возможности сжатия спектра таким методом.

Для реального спектра это означает, что величина ранга является основной его характеристикой. Минимальная величина ранга может быть достигнута лишь при бесконечно большой статистике. Статистический характер информации ведет к увеличению значения ранга, то есть возникновению дополнительных сингулярных значений. Их величина отражает величину искажений спектра по сравнению с идеальной, то есть не размытой статистическими искажениями, формой.

Замена этих значений нулями, то есть восстановление истинного ранга, не ведет к дополнительным искажениям, напротив, приближает спектр к идеальному^{12/}.

С точки зрения линейной алгебры задача нахождения параметров SVD сводится к задаче вычисления собственных векторов и собственных значений матриц A^TA и AA^T. Сингулярные значения

являются квадратными корнями собственных значений матриц A^TA и AA^T/они совпадают/^{11/}. В полном объеме эта задача достаточно сложна, но для нужд накопления данных возможно построение упрощенного алгоритма. Специфика накопления данных такова, что основная работа сводится к вычислению новых данных с учетом уже имеющихся.

Решение такого типа может быть найдено на базе метода, который в теории интегральных уравнений носит имя Келлога^{12/}, - это метод вычисления наибольшего сингулярного значения и соответствующих векторов \vec{U} и \vec{V} . Положим везде $\sigma_1 > \sigma_2 > \dots > \sigma_R$.

Пусть

$$\vec{y}_0 = A \vec{x}_0 / \|A \vec{x}_0\|, \quad /2/$$

$$\vec{x}_{n+1} = A^T \vec{y}_n / \|A^T \vec{y}_n\|, \quad /3/$$

$$\vec{y}_{n+1} = A \vec{x}_{n+1} / \|A \vec{x}_{n+1}\|, \quad /4/$$

где \vec{x}_0 - произвольный вектор. Тогда существуют пределы:

$$\lim_{n \rightarrow \infty} \vec{x}_n = \vec{V}_1, \quad \lim_{n \rightarrow \infty} \vec{y}_n = \vec{U}_1, \\ \sigma_1 = \lim_{n \rightarrow \infty} \|A^T \vec{y}_n\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|A \vec{x}_n\|,$$

если только \vec{x}_0 не ортогонален \vec{V}_1 /изложение ведется согласно /8/ /. Здесь и далее \vec{U}_k и \vec{V}_k означают k-ый столбец соответствующих матриц U и V, n - число итераций, означающее число умножений матрицы на вектор.

Рассмотрим метод, позволяющий находить большие сингулярные значения и соответствующие вектора.

Найдем систему векторов, сходящуюся к искомым векторам, которую можно получить из произвольной системы. В частности, для сжатия данных в процессе накопления эта задача облегчается использованием уже накопленной информации /т.е. имеющихся векторов \vec{U}_k и \vec{V}_k /:

$$\vec{x}_k^{(n+1)} = (A + E)^T \vec{y}_k^{(n)}, \quad /5/$$

$$\vec{y}_k^{(n+1)} = (A + E) \vec{x}_k^{(n)}, \quad /6/$$

$$\vec{x}_k^{(0)} = \vec{V}_k, \quad /7/$$

$$\vec{y}_k^{(0)} = \vec{U}_k.$$

Здесь верхний индекс означает номер итерации, нижний - номер вектора, как и в формуле /1/. Матрица A - матрица уже накопленной информации, восстановленная после сжатия. Матрица E - матрица поступившей информации, причем это может быть как отдельное событие, так и группа событий. Обозначим U^* и V^* матрицы, полученные в результате поступления этой партии событий и всей предыдущей информации. σ_k^* - новые сингулярные значения. Представим вектор $\vec{x}_k^{(0)}$ в виде разложения по системе искомым векторов \vec{V}_k^* . Это разложение, так как $\vec{x}_k^{(0)} = \vec{V}_k^*$, для всех k отражает изменение новой системы относительно старой:

$$\vec{x}_k^{(0)} = \sum_{\ell=1}^N a_{\ell,k} V_{\ell}^*, \quad /8/$$

где $a_{\ell,k}$ - проекция старого \vec{V}_k на новое \vec{V}_{ℓ}^* . Подробно эти вопросы рассматриваются в книге /13/. В случае малого изменения матрица a стремится к единичной. Из свойства ортонормированности U^* , V^* и формулы /1/ следует что:

$$(A + E)^T \vec{U}_k^* = \sigma_k^* \vec{V}_k^*, \quad /9/$$

$$(A + E)V_k^* = \sigma_k^* U_k^*. \quad /10/$$

Использование формул /8/, /9/, /10/ дает

$$\vec{x}_k^{(n+1)} = \sum_{\ell=1}^R a_{\ell,k} (\sigma_{\ell}^*)^{n+1} \vec{V}_{\ell}^*, \quad /11/$$

$$\vec{y}_k^{(n+1)} = \sum_{\ell=1}^R a_{\ell,k} (\sigma_{\ell}^*)^{n+1} \vec{U}_{\ell}^*. \quad /12/$$

Проведем теперь ортогонализацию системы векторов \vec{x} и \vec{y} по схеме Грамма-Шмидта:

$$\begin{aligned} \vec{\phi}_1 &= \vec{x}_1 / \|\vec{x}_1\|, \\ \vec{\phi}_2^* &= \vec{x}_2 - (\vec{x}_2 \vec{\phi}_1) \vec{\phi}_1, \\ \vec{\phi}_2 &= \vec{\phi}_2^* / \|\vec{\phi}_2^*\| \end{aligned} \quad /13/$$

/звездочкой обозначены ортогонализированные, но не нормированные вектора/.

Пользуясь /11/, получим

$$\vec{\phi}_2^* = \sum_{\ell=1}^R a_{\ell,2} (\sigma_{\ell}^*)^{n+1} \vec{V}_{\ell}^* - \frac{\sum_{\ell=1}^R a_{\ell,1} a_{\ell,2} (\sigma_{\ell}^*)^{2(n+1)}}{\sum_{\ell=1}^R a_{\ell,1}^2 (\sigma_{\ell}^*)^{2(n+1)}} \sum_{\ell=1}^R a_{\ell,1} (\sigma_{\ell}^*)^{n+1} \vec{V}_{\ell}^*.$$

Если $\sigma_1^* > \sigma_2^* > \dots$, то

$$\frac{\sum_{\ell=1}^R a_{\ell,1} a_{\ell,2} (\sigma_{\ell}^*)^{2(n+1)}}{\sum_{\ell=1}^R a_{\ell,1}^2 (\sigma_{\ell}^*)^{2(n+1)}} \rightarrow \frac{a_{1,2}}{a_{1,1}} \quad \text{при } n \rightarrow \infty,$$

т.е.

$$\vec{\phi}_2^* \rightarrow \sum_{\ell=2}^R a_{\ell,2} (\sigma_{\ell}^*)^{n+1} \vec{V}_{\ell}^*.$$

Учитывая, что в сумме при $n \rightarrow \infty$ доминирует первый член, имеем

$$\vec{\phi}_2^* \rightarrow a_{2,2} (\sigma_2^*)^{n+1} \vec{V}_2^*.$$

Продолжая эти громоздкие, но простые по существу выкладки, получим:

$$\vec{\phi}_k^* \rightarrow \sum_{\ell=k}^R a_{\ell,k} (\sigma_{\ell}^*)^{n+1} \vec{V}_{\ell}^*, \quad k = 1, \dots, R.$$

Что дает $\lim_{n \rightarrow \infty} \vec{\phi}_k^* = \vec{V}_k^*$. Это является решением поставленной задачи - вычислением нового SVD по уже известному. Аналогичным является решение для системы \vec{y} , из которой можно приближенно найти \vec{U}^* . Алгоритм может быть использован и для получения разложения произвольной матрицы, но в случае применения его к сжатию данных улучшается сходимость из-за того, что по мере накопления данных матрица a стремится к единичной.

Как показали численные эксперименты, сама структура реальных спектров приводит к монотонному изменению сингулярных значений от больших к малым. Были проделаны численные эксперименты по определению параметров работы алгоритма. Среднеквадратичное отклонение исходного спектра от восстановленного после сжатия с использованием данного алгоритма практически не менялось для числа итерации $n = 4$ и $n = 5$. Это позволило выбрать число итераций равным 5. Сокращение памяти по данному методу определяется отношением N^2 /обычный вид/ к $2NR + R$. Изучение различных участков спектра показало, что оптимальное с точки зрения среднеквадратичной ошибки $N/2R$ отношение составляло 6-8. Весь приведенный алгоритм предназначен для "пересчета" уже имеющегося SVD с учетом поступившей информации. Это требует задания стартового приближения в начале эксперимента. Анализ различных алгоритмов получения начальных значений векторов показал, что важнейшее условие их успешной работы - отсутствие у начальных векторов нулевых компонент. Это обусловлено структурой основного алгоритма: нулевые компоненты вектора при умножении его на матрицу исключают информацию о целой строке /или столбце/ матрицы.

Поэтому был предложен следующий вариант алгоритма начальных приближений: накапливается малая /-10 случаев/ группа событий, получается ее SVD, нулевые компоненты векторов заполняются величинами, вклад которых в матрицу по формуле /1/ будет значительно меньше единицы. После ортонормирования эти значения принимаются за начальные.

Данная схема алгоритма приводит к необходимости $L \times R \times N^2$ /обозначения, принятые выше/ операций умножения. Эта величина практически не зависит от размера партии пришедших новых событий /время добавления матрицы E пренебрежимо мало по сравнению с временем остальных вычислений/. Сильная зависимость от размера матрицы E привела нас к необходимости фрагментации спектра.

§3. СТРУКТУРА ПРОГРАММЫ

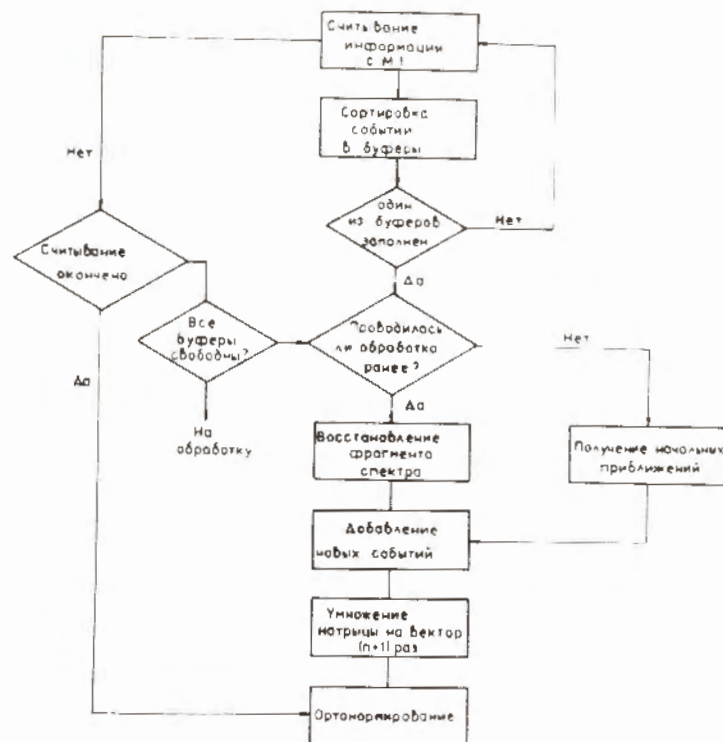
Программа состоит из двух частей: подпрограмм сжатия данных и обработки спектра с использованием сжатых данных.

Ниже описывается часть программы, которая проводит сжатие данных, записанных на магнитную ленту по событиям /блок-схема показана на рис.1/. Сначала с использованием библиотечной программы проводится считывание с магнитной ленты партии записанных событий. Эта информация могла быть получена с различных ЭВМ, поэтому программа предусматривает перекодировку, если известен тип записи.

Все двумерное поле спектра разбивается на квадратные фрагменты, для каждого из которых выполняется полный цикл сжатия по описанной в §2 методике. Для этого каждому фрагменту выделяется свой буфер для хранения событий. При заполнении какого-либо буфера вызывается программа сжатия данных. Она проверяет, проводилась ли раньше работа с таким фрагментом, и если нет, то вызывает программу начальных приближения. Если сжатые данные есть, по ним фрагмент восстанавливается в виде матрицы, к нему добавляются новые данные и производится сжатие по описанной выше методике. Если считывание с МЛ не закончено, происходит новое считывание и сортировка по фрагментам.

Если на МЛ кончилась запись - проводится сжатие всех буферов с событиями, запись на МЛ спектра в сжатом виде и вызов программы обработки.

По запросу программы обработки восстанавливаются спектры совпадений, отвечающие окнам ΔB , сначала по одной оси, затем по другой для всего двумерного поля совпадений. Далее программа вычисляет границы областей двумерных пиков. Найденные области пиков аппроксимируются двумерными поверхностями при помощи критерия χ^2 .



Блок-схема части программы по сжатию данных.

Экспериментальные значения χ^2 показали, что, действительно, имеет место эффект фильтрации помех для сжатых данных.

Весь комплекс программ написан на ФОРТРАНе и реализован на ЭВМ ЕС-1040. При следующих параметрах работы: фрагменты - 64×64 , ранг матрицы - 5, объем буфера фрагмента - 2000 событий, получена скорость сжатия 400 событий в секунду, сокращение объема памяти в 6,4 раза по сравнению с записью в виде полной двумерной матрицы.

Система опробовалась на обработке со сжатием спектра совпадений для низкоэнергетической области переходов, большая часть из которых соответствует распаду ^{164}Lu , ^{184}Yb .

Таблица 1

E1	E2	сжат.	обычн.
124	124	49+8	54+12
124	262	296+16	314+16
260	124	433+25	459+25
208	240	73+9	64+9
240	208	43+10	60+10

Таблица 1 отражает результаты работы описанной программы и программы обработки, но без использования сжатия. В табл. 2 представлены данные, демонстрирующие эффект устранения части помех. В ней приведены экспериментальные значения χ^2 для одних и тех же пиков, полученные со сжатием и без сжатия данных. Значения χ^2 /со сжатием/ отнесены к тому же числу степеней свободы для наглядности.

Таблица 2

χ^2 /со сжатием/	χ^2 /без сжатия/	Энергия пиков совпадения /кэВ/	
		E ₁	E ₂
0,23	0,57	124	124
0,25	0,57	124	261
0,22	0,39	206	240
0,11	0,36	240	206
0,15	0,47	262	124

Результаты обработки спектров, полученные с их сжатием, показали, что подвергнутые сжатию данные больше отвечают теоретическим предположениям о форме линии ППД и двумерной линии в спектре совпадений. Полная обработка спектра 512x512 каналов, записанного на одной МЛ, потребовала 17 минут процессорного времени /сжатие данных - 12 минут, обработка - 5 минут/. Около 20 минут программа требовала для обращения к МЛ, устройству печати и для ввода-вывода. Таким образом, время работы программы обработки с часов доведено до ~20 минут, появились новые возможности представления данных.

Перенесение операции сжатия данных на малые ЭВМ в процессе набора информации открывает возможность ее экспрессной обработки в ходе эксперимента.

§4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведенные оценки показали, что удалось получить на основе эффективного метода сжатия данных /разложения по сингулярным значениям/ вычислительный алгоритм и программно реализовать его для анализа спектров гамма-гамма-совпадений. Компактное хранение информации, помимо даваемых им удобств и экономии МЛ, позволило оптимизировать программу обработки спектров с точки зрения необходимого многократного обращения к МЛ при их сортировках.

Полученные результаты подтверждают теоретические выводы о том, что применение SVD способно "улучшить" данные за счет фильтрации искажений, вносимых статистическими отклонениями и случайными помехами, не внося при этом новых искажений в исходную информацию.

Характеристики работы программы показали возможность /такие работы ведутся в настоящее время/ перенесения сжатия на малые ЭВМ. В ряде случаев применение сжатия в режиме он-лайн может оказаться единственно возможным методом проведения экспериментов с регистрацией двумерных совпадений. Например, такому случаю отвечает использование ряда малых ЭВМ, не имеющих накопителей на магнитных лентах, но имеющих мини-диски. Это открывает возможность экспрессного анализа двумерных спектров совпадений. Структура хранимого в сжатом виде спектра такова, что в любой момент времени его можно переслать с работающей он-лайн ЭВМ на большую ЭВМ и в течение короткого времени получить обратно результаты обработки по настоящей программе. Это позволяет обеспечить быструю обратную связь в многомерном эксперименте, что ранее было невозможно. Появляется возможность контролировать ход многомерного эксперимента непосредственно в процессе его проведения по результатам полной обработки, на которую раньше тратились недели и месяцы работы.

В заключение авторы выражают благодарность сотрудникам измерительного центра Лаборатории ядерных проблем ОИЯИ за содействие в проведении настоящей работы.

ЛИТЕРАТУРА

1. Дуда Ф. и др. ОИЯИ, 10-4236, Дубна, 1968.
2. Громов К.Я. и др. ПТЭ, 1974, №4, с.64.
3. Орманджиев С.И. и др. ПТЭ, 1976, №1, с.61.
4. Гонусек М. и др. ОИЯИ, P13-12422, Дубна, 1979.
5. Волков Н.Г., Чураков А.К., Цупко-Ситников В.М. ОИЯИ, 10-12400, Дубна, 1979.
6. Кабина Л.П. и др. ЛИЯФ, Л., 1978, №456.

7. Гонусек М., Фромм В. ОИЯИ, 10-10007, Дубна, 1976.
8. Баглай Р.Д., Смирнов К.К. ЖВМ и МФ, 1975, №1, с.241.
9. Бялко А.А., Волков Н.Г. В кн.: Тезисы докладов 29 Совещания по ядерной спектроскопии и структуре ядра, Рига, 1979. "Наука", Л., 1979, с.479-480.
10. Andrew H., Patterson C. IEEE TR. C-25, No.7, pp.141-147.
11. Альберт А. Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание. "Наука", М., 1977.
12. Михлин С.Г. Интегральные уравнения. Гостехиздат, М.-Л., 1947.
13. Поттер Д. Вычислительные методы в физике. "Мир", М., 1974.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 февраля 1980 года.