Результаты. Программная реализация аппроксимационного метода и метода Ангера была создана в трех версиях: первая версия использует только центральный процессор, вторая – процессор видеокарты без использования локальной памяти, а третья – процессор видеокарты с использованием локальной памяти для хранения промежуточных данных. Реализация методов для центрального процессора была создана с использованием стандартных средств языка С++ и не использует SIMD расширений архитектуры x86.

Для сравнения производительности реализаций измерялось время обработки набора данных, содержащего информацию о 2500000 сцинтилляциях. Обработка проводилась на компьютере с процессором Intel Core 2 Duo частотой 3 ГГц и видеокартой NVidia 8800 GT со стандартными частотными характеристиками. Результаты измерений приведены ниже в таблице.

Результаты тестирования метода

Реализация метода	Метод Ангера		Аппроксимационный метод	
	Время (сек.)	Скорость (сцинт./сек.)	Время (сек.)	Скорость (сцинт./сек.)
Процессор	0,9	2831110	382	6670
Видеокарта, общая память	1,2	2083330	23	110780
Видеокарта, локальная память	--	--	15	169870

Как видно из приведенной таблицы, при реализации аппроксимационного метода на базе технологии CUDA скорость вычислений увеличилась в 25 раз и приблизилась к требуемой скорости счета детектора гамма-камер. Использование локальной памяти увеличило скорость вычислений в 1.53 раз. Для алгоритма Ангера из-за простоты самого алгоритма существенными оказываются затраты на обмен данными между памятью видеокарты и процессора, поэтому его реализация на ЦП оказалась более эффективной.

Таким образом, апроксимационный метод при помощи технологии CUDA может быть эффективно реализован на базе процессоров видеокарт NVidia. Что позволяет повысить пространственную разрешающую способность детекторов гамма-камер с минимальными затратами.

Авторы благодарят фонд CRDF за частичное финансирование.

Список литературы: ***1.*** NVidia CUDA Programming Guide. – NVidia Corp, 2008. – Режим доступа:http://developer.download.nvidia.com/compute/cuda/2_0/docs/NVIDIA_CUDA_Programming_Guide_2.0.pdf. ***2.*** *Anger H.O.*, Scintillation camera. // Rev. Sci. Instrum. – 1958. – vol.29. – P.27-33. ***3.*** Демин А.*В., Гаврилюк В.П., Колбасин В.А.* Исследование неангеровских алгоритмов восстановления координат сцинтилляционной вспышки для детекторов гамма-камер // Тезисы международной конференции «Инженерия сцинтилляционных материалов и радиационные технологии – 2008». – С. 29. ***4.*** *Немнюгин С., Стесик О.* Параллельное программирование для многопроцессорных вычислительных систем. – СПб.:БХВ-Петербург. – 400 с. – 2002. ***5.*** *Сухарев А.Г., Тимохов А.В., Федоров В.В.* Курс методов оптимизации. – М.:ФИЗМАТЛИТ. – 368 с. – 2005.

Поступила в редколлегию 23.12.08

УДК 519.24

А. А. ПАВЛОВ, д-р техн. наук, проф. каф. АСОИУ НТУУ «КПИ»,
А. С. ШТАНЬКЕВИЧ, студент каф. АСОИУ НТУУ «КПИ»

ВОССТАНОВЛЕНИЕ ЗАКОНОМЕРНОСТИ ПО РЕЗУЛЬТАТАМ ПАССИВНОГО ЭКСПЕРИМЕНТА С ОГРАНИЧЕННЫМ НАБОРОМ ДАННЫХ

У статті розв'язується задача відновлення закономірності за невеликим числом експериментальних даних за припущення виконання певних умов. Показано, що розв'язання цієї задачі може бути зведено до задачі лінійного цілочисельного програмування (ЛЦП). Обґрунтовано метод розв'язання сформульованої задачі ЛЦП. Викладені та обґрунтовані наближені методи розв'язання цієї задачі.

В статье решается задача восстановления закономерности по небольшому числу экспериментальных данных в предположении выполнения определенных условий. Показано, что решение этой задачи может быть сведено к задаче линейного целочисленного программирования (ЛЦП). Обоснован метод решения сформулированной задачи ЛЦП. Изложены и обоснованы приближенные методы решения этой задачи.

In the article the recovery problem of an unknown law by small quantity of experimental data assuming certain conditions is solved. It is shown that solution of this problem can be reduced to the linear integral problem (LIP). The method of solving the stated LIP problem is grounded. The approximate methods of solving this problem are stated and grounded.

Постановка задачи. Рассматривается задача восстановления числовой скалярной функции действительных аргументов, однозначно задающей некоторую закономерность, по анализу наблюдаемых данных (вход–выход) ограниченного объема. Иными словами, некоторая закономерность однозначно задается функцией $f\left(\bar{x}\right)$, не известной наблюдателю. Имеются результаты пассивного эксперимента $f\left(\bar{x}^i\right) = y_i$, $i = \overline{1,P}$, P – небольшое число. По результатам пассивного эксперимента необходимо найти закономерность, то есть найти истинную функцию $f\left(\bar{x}\right)$, а не её аппроксимацию.

В таком виде задача является некорректной. Будем решать её в следующей частной постановке.

Рассмотрим класс функций

$$\sum_{i=1}^{L} a_i \psi_i(\bar{x}), \tag{1}$$

где $\psi_i(\bar{x})$ – известные базовые функции, a_i – неизвестные коэффициенты, $\bar{x} \in R_n$ – n–мерный вектор. Множество $I = \left\{\psi_i(\bar{x}), i = \overline{1, L}\right\}$ является избыточным. $f\left(\bar{x}\right)$ – неизвестная функция, является взвешенной суммой на подмножестве $I_1 \subset I$. $f\left(\bar{x}\right)$ необходимо восстановить по результатам точных экспериментов $\bar{x}^i$, $f\left(\bar{x}^i\right)$, $i = \overline{1, P}$, $P < L$. Предполагается также, что $P > K$, где K – это число базовых функций в множестве I_1, то есть искомая закономерность представляется в виде

$$f\left(\bar{x}\right) = \sum_{j=1}^{K} a_{i_j} \psi_{i_j}(\bar{x}), \quad K < P < L, \tag{2}$$

где $\psi_{i_j}(\bar{x}) \in I_1$ и заранее не известны.

Такая постановка задачи имеет место, когда исследователь выдвигает различные предположения о возможном аналитическом представлении неизвестной закономерности. Предложенные алгоритмы решения задачи предполагают, что представление (2) существует; $K < P$, $P < L$; $I_1 \subset I$, I задано исследователем.

Критерии определения истинной закономерности. Исходя из постановки задачи, такими критериями могут быть:

- множеством $I_1 = \left\{\Psi_{i_1}\left(\bar{x}\right), \cdots, \Psi_{i_K}\left(\bar{x}\right)\right\}$, для которого выполняется (2), может быть любое подмножество множества I, для которого при условии $K < P$ существуют коэффициенты a_{i_j} такие, что

$$\sum_{l=1}^{P}\left[f\left(\bar{x}^l\right) - \sum_{j=1}^{K} a_{i_j} \Psi_{i_j}\left(\bar{x}^l\right)\right] = 0; \tag{3}$$

- множеством I_1 является подмножество множества I, удовлетворяющее условиям (3) и содержащее минимальное количество базовых функций; предполагается, что это представление является единственным;
- в предположении, что в реальных задачах подмножеств множества I, удовлетворяющих условиям (3), с вероятностью близкой к единице может быть не более одного, алгоритм ищет первое подмножество множества I, удовлетворяющее условиям (3).

Метод 1. По первому критерию точным решением поставленной задачи является следующая задача частично–целочисленного линейного программирования:

$$\min \sum_{i=1}^{L} z_i, \tag{4}$$

$$-\alpha \le f\left(\bar{x}^l\right) - \sum_{i=1}^{L} a_i \psi_i\left(\bar{x}^l\right) \le \alpha, \quad l = \overline{1, P}, \tag{5}$$

$$-N \cdot z_i \le a_i \le N \cdot z_i, \quad i = \overline{1, L}, \tag{6}$$

$$z_i \in \{0, 1\}, \quad i = \overline{1, L}, \tag{7}$$

где a_i – действительные переменные, z_i – булевы переменные, $N > 0$ – константа, выбираемая исследователем, α – машинный ноль.

Эта задача является труднорешаемой задачей комбинаторной оптимизации. Для обоснования эффективного метода её решения сведём задачу (4)-(7) к следующей задаче линейного целочисленного программирования:

$$\min \sum_{i=1}^{L} z_i, \tag{8}$$

$$-\alpha \cdot 10^a \le 10^a f\left(\bar{x}^l\right) - \sum_{i=1}^{L} b_i \psi_i\left(\bar{x}^l\right) \le \alpha \cdot 10^a, \quad l = \overline{1, P}, \tag{9}$$

$$-N \cdot z_i \cdot 10^a \le b_i \le N \cdot z_i \cdot 10^a, \quad i = \overline{1, L}, \tag{10}$$

$$z_i \in \{0, 1\}, \quad i = \overline{1, L}, \tag{11}$$

где $b_i = a_i \cdot 10^a$ – целочисленные переменные, z_i – булевы переменные, $N > 0$ – константа, выбираемая исследователем, α – машинный ноль, a – натуральное число, задаваемое исследователем.

Формально задача ЛЦП (8)-(11) сложнее, чем задача (4)-(7), так как в задаче (4)-(7) – L целочисленных переменных, а в задаче (8)-(11) – $2L$ целочисленных переменных. Тем не менее структура задачи ЛЦП (8)-(11) позволяет применить метод решения задачи ЛЦП, который статистически значимо не использует перебор вариантов с отсечениями.

Действительно в [1] разработан и теоретически обоснован новый метод для задачи линейного целочисленного программирования с произвольной ограниченной областью допустимых решений. Предложена оригинальная схема приведения исходной задачи к задаче с одним ограничением и неотрицательными переменными со специфическими теоретическими свойствами. Принципиальная новизна метода состоит в том, что предложенный точный алгоритм поиска целочисленного решения разработан для исходной задачи с использованием теоретических свойств приведенной задачи (определены постоянные приоритеты каждой переменной исходной задачи, то есть приоритеты переменных не зависят от каких-либо промежуточных значений переменных, что позволяет получить первое допустимое целочисленное решение, которое статистически значимо является оптимальным).

Принципиальным недостатком метода является невозможность определения без перебора с отсечениями всех допустимых решений, является ли первое допустимое целочисленное решение оптимальным. Однако в силу специфики задачи ЛЦП (8)-(11) первому допустимому целочисленному решению задачи ЛЦП (8)-(11), полученного универсальным методом направленного перебора [1], соответствует решение задачи восстановления закономерности по критерию 2, если число ненулевых переменных b_i, $i=\overline{1,L}$ окажется меньше P – числа экспериментов.

Метод 2 (вероятностный). Пусть P – число экспериментов – не на много меньше L – числа базовых функций в множестве I. Тогда в предположении, что K (число базовых функций в множестве I_1) существенно меньше P, с большой вероятностью (легко определяемой как функция от K) следующий метод даёт точное решение по второму критерию.

Этап 1. Случайным образом конструируется последовательность базовых функций

$$\psi_{i_1}\left(\bar{x}\right),\psi_{i_2}\left(\bar{x}\right),...,\psi_{i_L}\left(\bar{x}\right). \qquad (12)$$

Функции $\psi_{i_{p+1}}\left(\bar{x}\right),...,\psi_{i_L}\left(\bar{x}\right)$ исключаются из последовательности (12), получаем последовательность

$$\psi_{i_1}\left(\bar{x}\right),...,\psi_{i_P}\left(\bar{x}\right). \qquad (13)$$

В предположении, что базовые функции из множества I_1 находятся в последовательности (13), переходим к этапу 2.

Этап 2. Из последовательности (13) исключается базовая функция $\psi_{i_P}\left(\bar{x}\right)$ и для оставшихся базовых функций решается задача линейного программирования (ЛП)

$$\min\sum_{l=1}^{P} y_l\ , \qquad (14)$$

$$-y_l \le f\left(\bar{x}^l\right)-\sum_{j=1}^{P-1} a_{i_j}\psi_{i_j}\left(\bar{x}^l\right)\le y_l\,, \qquad (15)$$

$$y_l \ge 0,\quad l=\overline{1,P}\,.$$

Переменными задачи (14)-(15) являются a_{i_j}, $j=\overline{1,P-1}$ и y_l, $l=\overline{1,P}$.

Если значение показателя качества (14) задачи ЛП (14)-(15) равно 0, то базовая функция $\psi_{i_P}\left(\bar{x}\right)$ окончательно исключается из последовательности (13), в противном случае $\psi_{i_P}\left(\bar{x}\right)\in I_1$. При этом предполагается, что гипотеза, которая легла в основу критерия 2 выполняется.

Описанная процедура повторяется для функции $\psi_{i_{P-1}}\left(\bar{x}\right)$ и так далее до функции $\psi_{i_1}\left(\bar{x}\right)$ включительно. Все базовые функции, попавшие в множество I_1 на предыдущих итерациях, участвуют в построении соответствующей текущей итерации задачи ЛП (аналог задачи ЛП (14)-(15)). Искомая закономерность восстанавливается по решению последней задачи ЛП с нулевым показателем качества.

Метод 3 (вероятностный). Вероятность решения исходной задачи с помощью метода 2 определяется как вероятность построения такой последовательности (13), в которую входят все истинные компоненты неизвестной закономерности (обозначим как событие A), то есть:

$$P(A)=\frac{C_{L-K}^{P-K}}{C_L^P}\,. \qquad (16)$$

Если задать верхнюю оценку для числа истинных базовых функций (K), то можно посчитать количество повторов применения метода 2 (количество построений последовательности (12), необходимых для того, чтоб с заданной вероятностью восстановить неизвестную закономерность. А в случае, когда верхняя граница числа истинных базовых функций восстанавливаемой закономерности равняется $(P-1)$ (так как в (2) по исходному предположению должно выполняться $P>K$), то нижняя оценка вероятности попадания неизвестных истинных компонент в последовательность (13) определяется:

$$\underline{P}(A)=\left.\frac{C_{L-K}^{P-K}}{C_L^P}\right|_{K=P-1}=\frac{L-P+1}{C_L^P}\,. \qquad (17)$$

Таким образом, метод 3 сводится к применению метода 2 необходимое количество раз. Для гарантированного получения точного решения исходной задачи строятся все возможные варианты последовательности (12), то есть метод 2 применяется C_L^P раз.

Заключение. Приведенные в статье методы могут также применяться в случае, когда оценки неизвестной закономерности, полученные в результате проведенных экспериментов, имеют некоторую ошибку ε (случайная величина). При этом во всех методах условия выполнения равенств заменяются на условия выполнения неравенств, по модулю не превышающих ∂_1, а в этапе 2 метода 2 базовая функция принадлежит множеству I_1, если значение показателя качества не меньше, чем ∂_2 (учет влияния ε).

Статистическими исследованиями необходимо определить связь между ∂_1, ∂_2 и дисперсией ε, а также верхнюю границу дисперсии ε, при которой изложенные методы остаются эффективными.

Пример. Приведем пример использования метода 2 для восстановления неизвестной закономерности.

Пусть существует закономерность $f(x_1,x_2,x_3,x_4)$, неизвестная исследователю. Её истинное выражение имеет вид (состоит из 5 компонент, $K=5$):

$$f(x_1,x_2,x_3,x_4) = -5.2\cdot\frac{1}{x_1^3} - 0.27\cdot\frac{x_4^2}{x_1x_2^2} - 16.8\cdot\frac{x_3x_4}{x_2} + 14.5\cdot\frac{x_4}{x_3} - 14.6\cdot\frac{x_2x_3^2}{x_1^3}. \quad (18)$$

Пусть также проведено 35 экспериментов, в результате которых получены точные оценки неизвестной закономерности ($P=35$).

Согласно этапу 1 метода 2, не зная истинных компонент и соответствующих коэффициентов функции $f(x_1,x_2,x_3,x_4)$, исследователь сформировал множество из 50 компонент ($L=50$), возможных составляющих искомой закономерности, которое включает также и компоненты из (18), и упорядочил случайным образом, как показано в табл. 1.

Таблица 1

№	Комп.	№	Комп.	№	Комп.	№	Комп.	№	Комп.
1	$\frac{x_2x_3^2}{x_1^3}$	11	$\frac{x_1x_3x_4}{x_2}$	21	$\frac{1}{x_1^3}$	31	$\frac{x_1^3x_3^2}{x_2^3x_4}$	41	$\frac{x_1}{x_3^2x_4}$
2	$x_1^2x_4$	12	$\frac{x_2x_4^2}{x_1^3}$	22	$\frac{x_2x_3}{x_4}$	32	$\frac{x_2^3}{x_3^2}$	42	$\frac{1}{x_3x_4^2}$

Продолжение табл. 1

№	Комп.	№	Комп.	№	Комп.	№	Комп.	№	Комп.
3	$\frac{x_1x_3x_4^2}{x_2^2}$	13	$\frac{x_2}{x_1}$	23	$\frac{x_3x_4}{x_2}$	33	$\frac{x_1x_4^2}{x_3^3}$	43	$\frac{x_3x_4}{x_1^2}$
4	$\frac{x_2^2x_4^3}{x_1}$	14	$\frac{x_4^2}{x_1^2x_2^2x_3^2}$	24	x_4	34	$x_1x_2^2x_3$	44	$x_1^2x_2x_3^4$
5	$\frac{1}{x_1x_2}$	15	$\frac{x_1x_4}{x_2^2x_3}$	25	$\frac{x_2^2}{x_1^2x_3^3}$	35	$\frac{x_4}{x_3}$	45	$\frac{x_2}{x_4}$
6	$\frac{x_2}{x_1^2x_3^2x_4^3}$	16	$\frac{x_2^3x_3}{x_1^2x_4}$	26	$\frac{1}{x_1x_3^2x_4^2}$	36	$\frac{x_1x_2}{x_3x_4}$	46	x_3
7	$x_2x_3x_4^2$	17	$\frac{x_4^2}{x_1x_2^2}$	27	$\frac{x_2x_4}{x_1^2x_3}$	37	$\frac{x_2x_4^2}{x_1^2x_3}$	47	$\frac{x_1}{x_4^2}$
8	$\frac{x_2x_3^2}{x_1x_4^4}$	18	$\frac{x_1x_3}{x_2x_4}$	28	$\frac{x_3^3x_4}{x_2^2}$	38	$\frac{x_1}{x_2x_4}$	48	$\frac{x_2^3}{x_4}$
9	$\frac{x_3^2x_4}{x_2^2}$	19	$\frac{x_2^2x_3}{x_1x_4}$	29	x_2x_3	39	$\frac{1}{x_3^3}$	49	$\frac{x_2}{x_1^2x_4^2}$
10	x_2	20	$\frac{1}{x_1^2x_2^2}$	30	$\frac{x_3}{x_1x_2x_4^2}$	40	$\frac{x_1^2x_3}{x_2}$	50	$\frac{x_4}{x_1x_3}$

Таким образом, исследователь построил последовательность (12). Далее он получает последовательность (13), оставив первые 35 компонент из таблицы 1. Так как в этом случае P не намного меньше L и намного больше K, истинные компоненты неизвестной функции также попали (поскольку велика вероятность этого события) в последовательность (13).

Согласно этапу 2, из (13) последовательно выбрасываются компоненты с номерами от P (P=35) до 1 и решается задача ЛП (14)-(15). При этом, если значение показателя качества (14) равно 0 (в приведенном машинном расчете равенство нулю имеет место в случае, если полученное значение по модулю меньше 10^{-6}), то соответствующая компонента окончательно удаляется из (13), в противном случае компонента возвращается. В табл. 2 приведены полученные значения показателя качества (14) при последовательной проверке компонент из (13).

Таблица 2

№	Комп.	Показ. качества	№	Комп.	Показ. качества
35	$\frac{x_4}{x_3}$	26.901487	25	$\frac{x_2^2}{x_1^2 x_3^3}$	-2.211564×10^{-13}
34	$x_1 x_2^2 x_3$	-2.664535×10^{-15}	24	x_4	-2.211564×10^{-13}
33	$\frac{x_1 x_4^2}{x_3^3}$	-1.398881×10^{-14}	23	$\frac{x_3 x_4}{x_2}$	5.938059×10^{2}
32	$\frac{x_2^3}{x_3^2}$	-1.132427×10^{-14}	22	$\frac{x_2 x_3}{x_4}$	-2.207123×10^{-13}
31	$\frac{x_1^3 x_3^2}{x_2^3 x_4}$	1.522393×10^{-14}	21	$\frac{1}{x_1^3}$	19.987640
30	$\frac{x_3}{x_1 x_2 x_4^2}$	1.433575×10^{-14}	20	$\frac{1}{x_1^2 x_2^2}$	-2.300382×10^{-13}
29	$x_2 x_3$	1.422473×10^{-14}	19	$\frac{x_2^2 x_3}{x_1 x_4}$	-2.264854×10^{-13}
28	$\frac{x_3^3 x_4}{x_2^2}$	-2.408073×10^{-13}	18	$\frac{x_1 x_3}{x_2 x_4}$	-2.295941×10^{-13}
27	$\frac{x_2 x_4}{x_1^2 x_3}$	-2.418065×10^{-13}	17	$\frac{x_4^2}{x_1 x_2^2}$	1.139683
26	$\frac{1}{x_1 x_3^2 x_4^2}$	-2.418065×10^{-13}	16	$\frac{x_2^3 x_3}{x_1^2 x_4}$	-2.176037×10^{-13}
15	$\frac{x_1 x_4}{x_2^2 x_3}$	-2.274014×10^{-13}	7	$x_2 x_3 x_4^2$	-2.273736×10^{-13}
14	$\frac{x_4^2}{x_1^2 x_2^2 x_3^2}$	-2.420286×10^{-13}	6	$\frac{x_2}{x_1^2 x_3^2 x_4^3}$	-2.269295×10^{-13}

Продолжение табл. 2

№	Комп.	Показ. качества	№	Комп.	Показ. качества
13	$\frac{x_2}{x_1}$	-2.247091×10^{-13}	5	$\frac{1}{x_1 x_2}$	-2.273736×10^{-13}
12	$\frac{x_2 x_4^2}{x_1^3}$	-2.278177×10^{-13}	4	$\frac{x_2^2 x_4^3}{x_1}$	-2.255973×10^{-13}
11	$\frac{x_1 x_3 x_4}{x_2}$	-2.271516×10^{-13}	3	$\frac{x_1 x_3 x_4^2}{x_2^2}$	3.085383×10^{-13}
10	x_2	-2.255973×10^{-13}	2	$x_1^2 x_4$	2.220446×10^{-13}
9	$\frac{x_3^2 x_4}{x_2^2}$	-2.264854×10^{-13}	1	$\frac{x_2 x_3^2}{x_1^3}$	1.182846×10^{5}
8	$\frac{x_2 x_3^2}{x_1 x_4^4}$	-2.273736×10^{-13}			

Таким образом, получили, что закономерность $f(x_1, x_2, x_3, x_4)$ состоит из компонент с номерами 1, 17, 21, 23, 35. При этом значения коэффициентов при этих компонентах получены в оптимальном решении задачи ЛП (14)-(15) при проверке компоненты 2 – последнем решении задачи ЛП с нулевым показателем качества (приведены в табл. 3).

Таблица 3

№ комп.	Коэффициент
1	-14.625321
17	-0.274560
21	-5.207243
23	-16.829562
35	14.518710

Закономерность $f(x_1, x_2, x_3, x_4)$ восстановлена.

Список литературы: ***1.*** *Павлов А. А.* Алгоритмическое обеспечение сложных систем управления.– К.: Техника, 1989.

Поступила в редколлегию 15.12.08