индекс 3624

ԵՐԵՎԱՆԻ ՖԻԶԻԿԱՅԻ ԻՆՍՏԻՏՈՒՏ
ЕРЕВАНСКИЙ ФИЗИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

ЕФИ-639(29)-83

Н.З.АКОПОВ, В.С.ПОГОСЯН

УНИВЕРСАЛЬНАЯ ПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ МИНИМУМА ФУНКЦИИ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ И МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА ВИДА χ^2 МЕТОДОМ ОВРАГОВ

ԵՐԵՎԱՆ 1983 ЕРЕВАН

К одному из актуальных вопросов обработки экспериментальных данных и сравнения этих данных с различными теоретическими моделями относится проблема создания эффективного алгоритма минимизации достаточно широкого класса нелинейных функционалов, зависящих от многих параметров. При большом количестве обрабатываемых экспериментальных данных и значительном числе подгоняемых параметров подгонка (фитирование) неизвестных параметров требует ощутимых времен ЭВМ и, зачастую, делает задачу определения таких параметров практически невыполнимой.

Одной из наиболее удачных программных реализаций подгонки по критерию χ^2 является программа FUMILI [I], включенная в стандартное математическое обеспечение ЭВМ БЭСМ-6. Эта программа приобрела большую популярность среди пользователей ЭВМ БЭСМ-6 вследствие эффективности алгоритма подгонки для широкого класса подгоняемых теоретических функций, в частности, при решении задач физики высоких энергий.

Однако, метод линеаризации, на котором основан и алгоритм упомянутой выше программы FUMILI, как и вообще локальные методы минимизации нелинейных функционалов, становится малоэффективным при малых значениях градиента минимизируемого функционала. В случае локальной минимизации рабочая точка движется по пространству неизвестных параметров непрерывно, при переходе от одной точки к другой используется лишь значение функции в предыдущей точке. Если линия уровня гиперповерхности целевой функции имеет изломы, то при определении направления градиента появляется неточность, и поиск может замедлиться и идти поперек линии излома.

Метод оврагов, предложенный Гельфандом [2], дает возможность преодолеть вышеуказанные трудности. В этом случае рабочая точка движется в пространстве по кривой, которая не является непрерывной.

В работе [3] описана программа поиска минимума, в которой используются идеи метода оврагов и так называемого многоуровневого поиска, который происходит то по градиенту, то по хордам-оврагам. При составлении настоящей программы VSPI мы использовали идеи поисковой программы [3], но спуск по градиенту заменили сопряженным градиентом Флетчера-Ривса [4,5], достоинством которого является возможность использовать преимущества градиентных методов при минимизации функций с разрывными производными, что в конечном итоге делает алгоритм поиска минимума более эффективным.

Описание блок-схемы программы.

Блок-схема поиска представлена на рис.I

Здесь $\Delta F = F(x_1) - F(x_2)$, где $F(x_1)$ и $F(x_2)$ значение целевой функции соответственно до начала спуска по градиенту и после спуска.

Сопряженный градиентный поиск осуществляется следующим образом: вычисляется направление градиента в исходной точке

$$v_i^{(k)} = \frac{-\left(\frac{\partial F}{\partial x_i}\right)^{(k)}}{\left[\sum_{j=1}^{N}\left(\frac{\partial F}{\partial x_j}\right)^2\right]^{1/2}} \qquad i = 1, 2, \dots, N$$

Производится одномерный поиск по направлению наискорейшего спуска

$$x_{i\,нов} = x_{i\,ст} + S\, v_i^{(k)} \qquad i = 1, 2, \dots, N$$

Находится минимум $F(x)$ в этом направлении, в точке минимума $F(x)$ определяется новое направление, которое отличается от направления градиента, оно выражается следующим образом:

$$v_i^{(k+1)} = \frac{-\left(\frac{\partial F}{\partial x_i}\right)^{(k+1)} + \beta^{(k)} v_i^{(k)}}{\left\{\sum_{j=1}^{N}\left[-\left(\frac{\partial F}{\partial x_j}\right)^{(k+1)} + \beta^{(k)} v_j^{(k)}\right]^2\right\}^{1/2}},$$

где

$$\beta^{(k)} = \sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\partial F}{\partial x_i}\right)^{(k+1)}\right]^2 \Big/ \sum_{i=1}^{N}\left[\left(\frac{\partial F}{\partial x_i}\right)^{(k)}\right]^2$$

После выполнения N циклов начинается спуск по хордам-оврагам, затем процесс заново повторяется.

После нахождения точки минимума происходит вычисление статистических ошибок найденных параметров.

Подробная инструкция к программе VSP1 приведена в приложении.

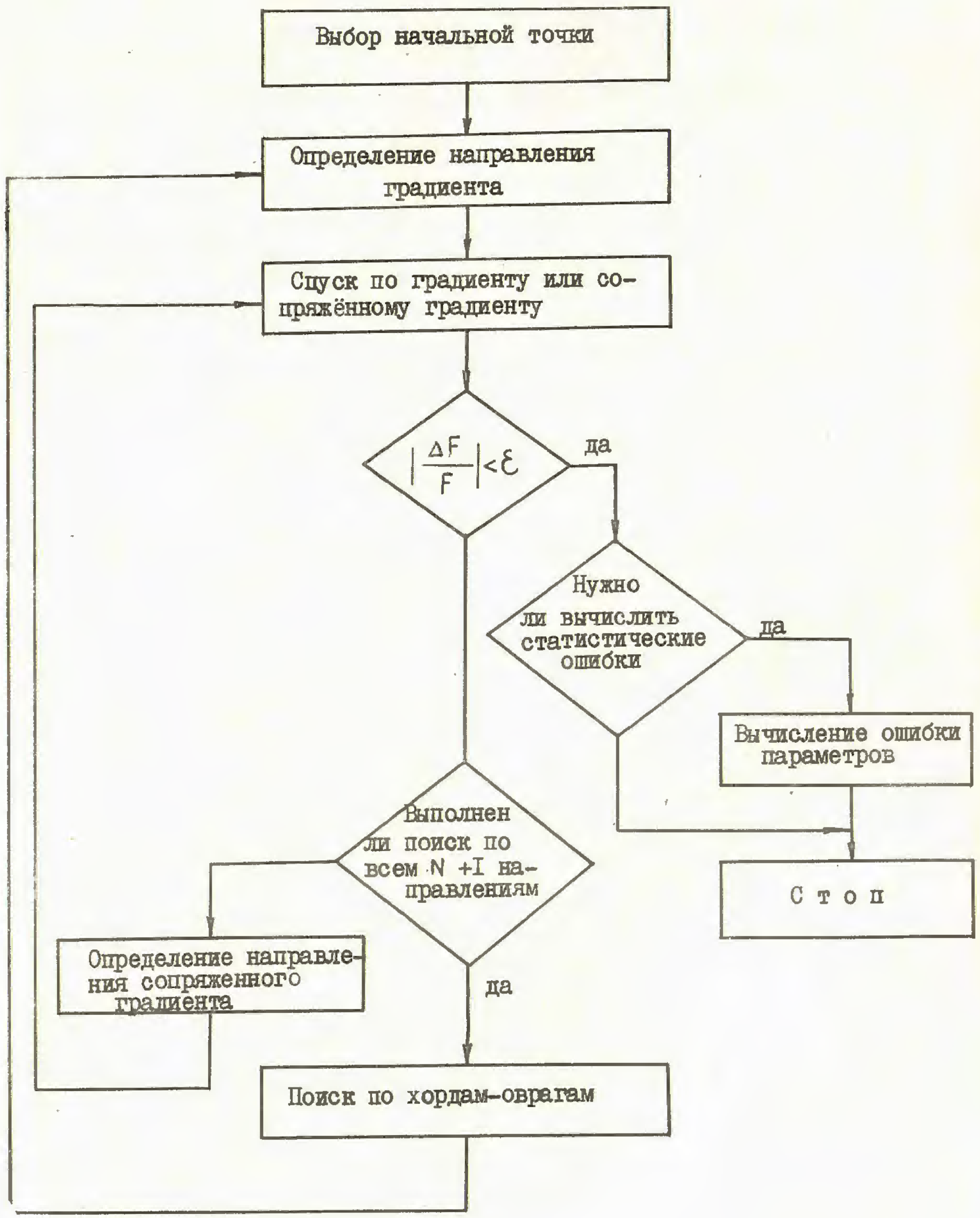

Рис.I

Приложение

Минимизация функции многих действительных переменных общего вида и квадратичного функционала методом оврагов.

Подробная инструкция к пользованию программой VSP1.

НАЗНАЧЕНИЕ:

Программа предназначена для нахождения глобального минимума функции многих действительных переменных методом оврагов с вычислением ошибок параметров в точке минимума.

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ:

CALL VSP1(N, NET, EPS, Y, IJ, FUNCT, LL, LK),

где N – число неизвестных параметров $I \leq N \leq 50$

NET – порядок оврага $I \leq NET \leq 7$

EPS – относительная точность вычисления минимума. Если при движении по направлению градиента или сопряженного градиента относительное изменение функции меньше чем EPS, то считается, что достигнута точка минимума и VSPI прекращает свою работу и происходит вычисление ошибок;

Y – значение минимизируемой функции в точке минимума

IJ – управляющий параметр. Если IJ = I, то минимизируемая функция представляет собой квадратичный функционал χ^2, но при вычислении ошибок первые производные вычисляются численно;

IJ = 2 – минимизируемая функция – опять χ^2, но первые производные вычисляются аналитически, т.е. оформляются пользователем в подпрограмме FUNCT;

IJ = 3 - минимизируется функция общего вида, но первые и вторые производные, необходимые для вычисления ошибок, вычисляются численно;

IJ = 4 - функция общего вида, но первые и вторые производные вычисляются аналитически и оформляются пользователем в программе FUNCT ;

IJ = 5 - функция общего вида, но первые производные вычисляются аналитически, а вторые - численно;

FUNCT - наименование подпрограммы функции, составляемой пользователем для вычисления значения функций, а также, при необходимости значений первых и вторых производных функции.

В случае, когда минимизируемая функция есть χ^2, в настоящей программе для удобства сохранены названия общих "CФMMON" блоков, принятые в широко используемой программе "FUMILI ".

LL - частота выдачи на печать значений неизвестных параметров и функции при движении по направлению градиента.

LL =0 - печатается значение параметров и функции нулевой и последней итерации со статистическими ошибками параметров и функции.

LL > 0 - выдаются на печать 0, LL, 2·LL,... итераций без статистических ошибок, а при достижении точки минимума выдаются на печать ошибки параметров и функции.

LK - если LK ≥ 0 , то после нахождения точки минимума вычисляются и выдаются на печать ошибки параметров и функции.

LK < 0 - ошибки параметров и функции не вычисляются.

В вызывающей программе пользователь должен описать

CФMMФN блоки CФMMФN /PL/PL(50)/XH/XH(50)/XL/XL(50)/XR/XR(50)/X/X(50)/EXDA/EXDA(1500)/XX/XX(10), N, N1, K

В подпрограмме функции FUNCT

CФMMФN/X/X(50)/XX/XX(10), N2,N3, K1/G/G(50)/Z/Z(1275)

Наименование функции FUNCT должно стоять в вызывалке под оператором EXTERNAL .

Перед обращением к VSPI необходимо задать:

1. N, N1, K - где N - количество параметров
N1 - количество экспериментальных точек;
K - количество аргументов, описывающих одну экспериментальную точку.

2. XH(I), XL(I), XR(I), PL(I) I = 1, 2..., N
XH - начальные значения неизвестных параметров.
XL,XR - соответственно левые и правые ограничения неизвестных параметров
PL - начальные значения шагов неизвестных параметров.

Если минимизируемая функция представляет собой χ^2 , то, кроме вышеуказанного, нужно задать:

3. EXDA(I) I = 1, 2, ..., N1 ·(K+2)

В следующем порядке:

EXDA(1) = Y1
EXDA(2) = ΔY1
EXDA(3) = XX(1)
EXDA(K+2) = XX(K)
EXDA(K+3) = Y2 и т.д.

Подпрограмма - функция FUNCT составляется следующим образом:

```
 FUNCTIØN  FUNCT(N,I)
 CØMMØN/X/X(50)/XX/XX(10),N2,N3,K1/Z/Z(1275)
  /G/G(50)
  IF(I.NE.0) GØTØ 1
```

вычисление нужных констант,

если это необходимо

```
   RETURN
I. IF(I.NE.1) GØTØ 2
```

$$\begin{matrix}\text{FUMCT}\\ \text{RETURN}\end{matrix} = \begin{cases} f(X(1),\dots,X(N)), & \text{при } IJ = 3,4,5 \\ y(X(1),\dots,X(N),XX(1),\dots XX(K)), & \text{при } IJ = 1,2 \end{cases}$$

```
2. IF(I.NE.2) GØTØ 3
```

$$G(J) = \frac{\partial f}{\partial x_j} \quad \text{или} \quad \frac{\partial y}{\partial x_j} \qquad j = 1, 2, \dots, N$$

```
   RETURN
```

3. $$Z(J) = \frac{\partial^2 f}{\partial x(I)\, \partial X(K)} \qquad I = 1,2,\dots,N; \quad K = 1,\dots,N; \quad J = 1,2,\dots,\frac{N(N-1)}{2} + N$$

```
   RETURN
   END
```

Ячейки $Z(J)$ заполняются следующим образом:

$$\begin{pmatrix} Z(1) & Z(2) & Z(4) \\ & Z(3) & Z(5) \\ & & Z(6) \\ & & & \text{и т.д.} \end{pmatrix} \sim \begin{pmatrix} \frac{\partial^2 f}{\partial x_1^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_1 \partial x_3} \\ & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2^2} & \frac{\partial^2 f}{\partial x_2 \partial x_3} \\ & & \frac{\partial^2 f}{\partial x_3^2} \quad \text{и т.д.} \end{pmatrix}$$

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Соколов С.Н., Силин И.Н. Нахождения минимумов функционалов методом линеаризации. Дубна 1961, препринт Д-810.
2. Гельфанд И.М., Цетлин М.Л. Принцип нелокального поиска в системах автоматической оптимизации. Доклады АН СССР 1961, т.137, № 2.
3. Гришин А.П. Программа "ПОИСК" для ЭВМ Раздан-3, Москва,1971, препринт ИТЭФ № 855.
4. Шуп Т. Решение инженерных задач на ЭВМ. М.: Мир ,1982.
5. Поляк Б.Т. Метод сопряженных градиентов, Труды второй зимней школы по математическому программированию. Москва,1969, с.152-201.

Рукопись поступила 14 февраля 1983 г.

Редактор Л.П.Мукаян

Тех.редактор А.С.Абрамян

Заказ 215 ВФ-04405 Тираж 270

Препринт ЕФИ Формат издания 60х84/16

Подписано к печати 25/УП-83г. 0,5 уч.-изд.л. Ц. 8 к.

Издано Отделом научно-технической информации

Ереванского физического института, Ереван-36, Маркаряна 2