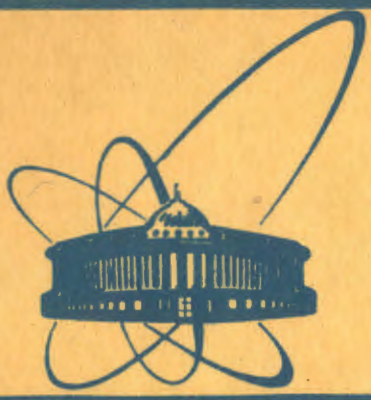


24/x-83



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
Дубна

5587/83

10-83-561

И.М.Иванченко, З.М.Иванченко

РАСШИРЕНИЕ МНОЖЕСТВА
ВНУТРИСИСТЕМНЫХ
АППРОКСИМИРУЮЩИХ ФУНКЦИЙ
В СИСТЕМЕ НВООК

1983

$x = (a+b-2z)/(a-b)$. Требуемые для каждого канала гистограммы значения $Q(x)$ и ее первых производных вычисляются с использованием рекуррентных формул

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

при фитировании полиномами Чебышева и

$$T_{n+1}(x) = [(2n+1)x T_n(x) - nT_{n-1}(x)] / (n+1)$$

при фитировании полиномами Лежандра.

По сравнению с альтернативным подходом – непосредственным вычислением требуемых полиномов по явной формуле реализованный алгоритм требует при выполнении меньше памяти и времени^{/2/}. Кроме этого, при альтернативном варианте оказывается большей погрешность вычислений.

вид разложения $Q(x)$ выбран с учетом совместимости со стандартными программами ESTRAN, CHSUM1, включенными в базовую библиотеку БИЯИ и SERNA. Эти программы могут использоваться после получения коэффициентов разложения по ортогональным полиномам.

В качестве оценки числа значащих цифр, теряемых в процессе определения искомых параметров, можно использовать факторы корреляции^{/3/}, равные произведению диагональных элементов прямой и обратной матрицы системы нормальных уравнений. В рассматриваемом случае линейной зависимости функционального аргумента от искомых параметров элемент матрицы для разложения по полиномам Чебышева/Лежандра/определяется соотношением

$$z_{ik} = \sum_j \omega_j T_i(x_j) T_k(x_j)$$

а для обычного полинома

$$z_{ik} = \sum_j \omega_j x_j^i x_j^k$$

здесь ω_j – весовые коэффициенты.

При заданной точности исходных данных и фиксированном разбиении области определения фитируемой функции изменение факторов корреляции связано с количеством искомых параметров (порядком полинома).

Исследование точности рассматриваемых методов производилось на ЭВМ CDC (60-разрядное слово) и на ЕС ЭВМ (32-разрядное слово).

Фитировалась, в частности, гистограмма, представляющая собой значение функции $\sum_{i=0}^n x^i$ на отрезке $[-1, +1]$. Такой вид функции не снижает общности исследований, так как элементы матрицы системы нормальных уравнений не зависят от искомых коэффициентов. Нарушение сходимости на ЭВМ семейства ЕС происходит при факторах корреляции 10^6-10^7 и достигается при сравнительно малых i , если использовать обычные полиномы. Ситуация существенно образом меняется при использовании ортогональных полиномов того же порядка. Корреляции для ис-

комых коэффициентов при ортогональных полиномах исчезают, и без дополнительных итераций находится правильное решение. Переход в полиномиальном фите от обычных полиномов к ортогональным позволил повысить более чем в два раза порядок аппроксимирующих полиномов.

При программной реализации новых возможностей НВООК особое внимание уделялось надежности, совместимости с предыдущими версиями, а также простоте использования и концептуальному единству системы.

Новые возможности реализованы в рамках имеющейся программы HFITRO. Управление режимом ее работы достигается за счет задания признака L в управляющем слове IC^{/1/}.

ПРИЛОЖЕНИЕ

Краткое описание (руководство пользователя) программ фитирования

Подпрограммы фитирования (HFIT, HFITEX, HFITGA, HFITRO) осуществляют нахождение методом наименьших квадратов параметров функции, аппроксимирующей статистические распределения, заданные в стандартном формате НВООК. Кроме этого, предусмотрено нахождение параметров функций от n переменных ($n \leq 9$). В этом случае фитируемые значения функций должны быть заданы в так называемом F-формате, формате FIMT.L^{/5/}. Вариант FIMT.L, молифицированный для работы в рамках НВООК, используется в качестве внутрисистемной подпрограммы. Значения искомых параметров вычисляются из условия минимума функции

$$\chi^2 = \sum_{I=1}^N \frac{(C(I) - F(X(I), A1, A2, \dots, AK))^2}{E(I)}, \quad \text{где}$$

N – количество каналов в гистограмме или диаграмме рассеяния (количество элементов вариационного ряда),

C(I) – содержимое I-го канала,

E(I) – оценка ошибки C(I),

X(I) – центр I-го канала,

F – аппроксимирующая функция, зависящая от искомых параметров $A1, A2, \dots, AK$.

Значения $E(i)$ могут быть заданы пользователем посредством программы HVARX или HPAKE. Если $E(i)$ задано равным нулю, соответствующий канал игнорируется в процессе фитирования.

По умолчанию $E(i)$ вычисляются программами фитирования на основании значений $C(i)$. Если по крайней мере одно $C(i) < 0$, – всем

приписывается одинаковая ошибка $E(i)=1$. В остальных случаях $E(i)$ выбирается равным $\sqrt{C(I)}$. Если содержимое k -го канала-малая положительная величина, точнее, $C(k)/\max(C(i)) \leq 10^{-10}$, то канал игнорируется.

Для программ HFITEX, HFITGA, HFITRO входной информацией служит одномерное статистическое распределение. Процедуры вычисления начальных значений параметров, значений функций и производных являются внутрисистемными.

Для программы HFIT пользователь должен представить кроме массива исходных данных внешнюю подпрограмму-функцию, а также начальные значения параметров. Пользователем могут быть представлены подпрограммы для вычисления производных. По умолчанию производные внешней функции определяются численно.

Обращение к программе HFIT

CALL HFIT (ID, FUN, NP, P, CHI2, IC, SIG, COV, ST, PMI, PMA)

осуществляет фитирование внешней функцией FUN, зависящей от параметров содержимого распределения ID. При выдаче результатов обеспечивает совмещенные графики исходной и аппроксимирующей функций для одномерных распределений.

Входные аргументы:

- ID - идентификатор распределения;
- FUN - имя аппроксимирующей подпрограммы функции (должно быть продекларировано как EXTERNAL);
- NP - число параметров;
- P - массив начальных значений параметров;
- IC - управляющее слово (см. ниже);
- ST - массив начальных допустимых значений приращений параметров, по умолчанию $ST=0,3 \cdot P$, для $P=0$ величина ST выбирается равной ширине канала;
- PMI } - массив нижних (верхних) границ параметров; по умолчанию
(PMA) } выбираются равными $-I$ (очень большому числу, зависящему от разрядности слова машины).

Выходные аргументы:

- P - вычисленные значения параметров;
- CHI2 - значения χ^2 -фитирования;
- SIG - массив значений ошибок параметров;
- COV - матрица ошибок параметров (верхняя ее половина, включающая диагональ).

Программа допускает обращение с переменным числом аргументов (фактических параметров). Аргументы, начиная с CHI2 включительно, могут быть опущены. Таким образом, в простейшем случае обращение включает четыре аргумента. Результаты могут быть выданы на печать посредством стандартного обращения к программе HPRINT.

Примечание. Для выбора различных режимов работы программы и вывода результатов используется управляющее слово, включающее до семи признаков.

IC=Lx1000000+Fx100000+Bx10000+Dx1000+Wx100+Px10+S.

S=2 - по умолчанию заносит значения аппроксимирующей функции для представления на АЦПУ или графических устройствах,

S=1 - значения не заносятся,

P=1 - печать результатов последней итерации,

P > 1 - печать результатов итераций с номером $N \times (P-1)$, $N=0,1,2,\dots$,

P=0 - по умолчанию печать результатов итераций блокируется,

W=1 - значения $E(i)$, определяющие веса точек, устанавливаются равными единице,

W=0 - по умолчанию используются заданные или вычисляются значения $E(i)$, см. выше,

D=0 - по умолчанию численное определение производных внешней функции,

D=1 - обращение к подпрограммам пользователя HBERI1, HBERI2 для вычисления производных,

V=0 - по умолчанию экономится память. Происходит выборка содержимого канала по мере необходимости,

V=1 - экономится время, содержимое распределения распаковывается и заносится в буферную память,

F=0 - по умолчанию стандартный формат исходных распределений.

F > 0 - представление исходных данных в FUMILI-формате:

C1,	E1,	X11,	X12,...	X1F	
C2,	E2,	X21,	X22,...	X2F	
⋮	⋮	⋮	⋮	⋮	
CN,	EN	XN1,	XN2,...	XNF	, где

F - количество переменных аппроксимирующей функции ($1 \leq F \leq 9$),

N - количество точек,

CI - значение экспериментальной функции в I -й точке,

EI - ошибка экспериментальной функции в I -й точке,

XI1, ..., XI F - координаты i -й точки в F -мерном пространстве.

Для использования этого режима фитирования необходимо заказать ID, как одномерное распределение с количеством каналов $NCHN.GE.N \times (2+F)$. При заказе нужно зарезервировать одно слово на канал.

Исходные данные засылаются пользователем в ID посредством программ NFILL или NPAK.

L=0 - по умолчанию общий случай,

L=1 - линейная зависимость функции от искоемых параметров.

Максимальное число итераций и требуемая точность по отношению к оценкам статистических ошибок параметров (подробнее см. D520 /48/) по умолчанию равны

NITMAX=113,

PREC=0,1

и могут быть изменены в общем блоке NCFIT1:

COMMON/NCFIT1/NPNFIT,NITMAX,PREC.

Это возможно сделать в рамках внешней программы FUN.

Результирующая величина NPNFIT - количество точек, участвующих в фитировании, может быть использована для вычисления количества степеней свободы.

Аппроксимирующая функция (имя которой задается пользователем при обращении к программе NFIT) является функцией от одной или двух переменных для одномерных и двумерных распределений соответственно. Если выбран F-режим и $F \geq 3$, входной аргумент функции соответствует массиву координат в F-мерном пространстве. Значения параметров для внешней функции должны передаваться через общий блок.

Пример 1. Фитирование обычных распределений и данных, заданных в F-формате.

```

SUBROUTINE EXAMPLE
COMMON/PAR1/PAR1(2)
COMMON/PAR2/PAR2(2)
COMMON/PARF/PARF(2)
EXTERNAL FUN1,FUN2,FUNF
.....
CALL NFIT(10,FUN1,2,PAR1,CHI2,12)
.....
CALL NFIT(20,FUN2,2,PAR2,CHI2,10)
.....
CALL NFIT(30,FUNF,2,PARF,CHI2,300010)
.....
RETURN
END

```

Одномерное распределение:

```

FUNCTION FUN1(X)
COMMON/PAR1/PAR1(2)
FUN1=EXP(PAR1(1)-PAR(2)*X)
RETURN
END

```

Двумерное распределение:

```

FUNCTION FUN2(X,Y)
COMMON/PAR2/PAR2(2)
FUN2=EXP(PAR2(1)-PAR2(2)*X+PAR2(1)*Y)
RETURN
END

```

F - режим, функция от F=3 переменных (в общем случае $F \leq 9$):

```

FUNCTION FUNF(X)
DIMENSION X(3)
COMMON/PARF/PARF(2)
FUNF=EXP(PARF(1)-PARF(2)*X(1)+PARF(1)*X(2)+X(3))
RETURN
END

```

Если F равно 1 или 2, функция должна иметь вид FUNCTION FUNF(X) или FUNCTION FUNF(X,Y) соответственно.

Пользователь может заменить стандартную процедуру вычисления производных. Для этого необходимо установить D=1 и представить подпрограмму, которая вычисляет значения частных производных первого порядка функции FUN по параметрам. Имена подпрограмм должны быть HDERI1, HDERI2 для функций от одной и двух переменных соответственно. При фитировании данных, заданных в F-формате, имя подпрограммы - HDERI1 для $F \geq 3$.

SUBROUTINE HDERI1(ID,X,PAR,DER)

Входные аргументы:

- ID - идентификатор,
- X - значение координаты центра канала для одномерного распределения (массив значений координат точки при использовании F-формата, $F \geq 3$),
- PAR - массив текущих значений параметров.

Выходной аргумент

DER - массив значений частных производных.

SUBROUTINE HDERI2(ID,X,Y,PAR,DER)

Входные аргументы

ID - идентификатор двумерного распределения ,
X, Y - значения координат центра ячейки ,
PAR - массив текущих значений параметров.

Выходной аргумент

DER - массив значений частных производных.

Пример 2. Программы вычисления производных для функций примера 1. При вызове NFIT значение D в управляющем слове должно быть равным 1.

```
SUBROUTINE HDERI1 (ID,X,PAR,DER)
DIMENSION X(9),PAR(2),DER(2)
IF (ID.NE.10) GO TO 20
TFUN=EXP (PAR(1)-PAR(2) * X(1))
DER(1)=TFUN
DER(2)=-TFUN * X(1)
RETURN
20 TFUN=EXP (PAR(1)-PAR(2)*X(1)+PAR(1)*X(2)+X(3))
DER(1)=TFUN * (1+X(2)+X(3))
DER(2)=-TFUN * X(1)
RETURN
END
SUBROUTINE HDERI2 (ID,X,Y,PAR,DER)
DIMENSION PAR(2),DER(2)
TFUN=EXP (PAR(1)-PAR(2)*X+PAR(1)*Y)
DER(1)=TFUN * (1+Y)
DER(2)=-TFUN * X
RETURN
END
```

Для часто используемых классов одномерных распределений введены специальные подпрограммы фитирования, существенно упрощающие действия пользователя при создании программ статистической обработки данных.

Обращения к специализированным программам фитирования

CALL NFITEX (ID,A,B,CHI2,IC,SIG)

Осуществляет фитирование экспоненциальной функцией

$$E(x) = \exp(A+B * x)$$

содержимого одномерного распределения ID. При выдаче результатов обеспечивает наложение аппроксимирующей функции на гистограмму.

Входные аргументы

ID - идентификатор ,
IC - управляющее слово (см. NFIT).

Выходные аргументы

A,B - коэффициенты экспоненциального распределения,
CHI2 - χ^2 -фитирования,
SIG - массив ошибок коэффициентов A,B.

При обращении к подпрограмме фактические параметры, начиная с A, могут быть опущены, таким образом, простейшее обращение имеет вид CALL NFITEX (ID).

Примечание - см. примечание к NFIT.

Значения D, F и L выбираются равными 1, 0, 0 соответственно.

CALL NFITGA (ID,C,AV,SD,CHI2,IC,SIG)

Осуществляет фитирование функцией Гаусса

$$G(x) = C * \exp(-0.5 * ((x-AV)/SD)**2)$$

содержимого одномерного распределения ID. При выдаче результатов обеспечивает наложение аппроксимирующей функции на гистограмму.

Входные аргументы

ID - идентификатор ,
IC - управляющее слово (см. NFIT).

Выходные аргументы

C - масштабный коэффициент ,
AV - среднее ,
SD - стандартное отклонение ,
CHI2 - χ^2 -фитирования
SIG - массив ошибок C,AV,SD .

При обращении к программе фактические параметры, начиная со второго, могут быть опущены.

Примечание - см. примечание к NFIT.

Значения D, F, L выбираются равными 1, 0, 0 соответственно.

CALL NFITPO (ID,NP,A,CHI2,IC,SIG)

Осуществляет фитирование содержимого одномерного распределения

ID полиномом

$$P(x) = A(1) + A(2) * x + \dots + A(NP) * x^{(NP-1)}$$

или $Q(x) = 0.5 * A(1) + A(2) * T_1(x) + \dots + A(NP) * T_{NP-1}(x)$,

где $T_1(x)$ - ортогональные полиномы.

При выдаче результатов обеспечивает наложение аппроксимирующей функции на гистограмму.

Входные аргументы

ID - идентификатор,
NR - количество коэффициентов (порядок полинома +1),
IC - управляющее слово (см. NFIT).

Выходные аргументы

A - массив коэффициентов полиномиальной функции,
SNI2 - χ^2 -фитирования,
SIG - массив ошибок параметров.

При обращении к программе фактические параметры, начиная с A, могут быть опущены. Таким образом, количество фактических параметров варьируется от 2 до 6.

Примечание. См. примечание к NFIT. Значения D и F выбираются равными 1, 0 соответственно.

L=0,1 - по умолчанию фитирование функцией $P(x)$,
L=2 - фитирование функцией $Q(x)$ с использованием полиномов Чебышева первого рода,
L=3 - фитирование функцией $Q(x)$ с использованием полиномов Лежандра.

При фитировании ортогональными полиномами исходное распределение величины z , заданное на отрезке $[z_{\min}, z_{\max}]$, необходимо преобразовать, используя соотношение $x = (z_{\min} + z_{\max} - 2z) / (z_{\min} - z_{\max})$.

Литература

- а) Brun R., Ivanchenko I., Palazzi P.
В кн.: " Программирование и математические методы решения физических задач". ОИИИ, Дубна, 1978, с.79.
б) Brun R., Ivanchenko I., Palazzi P.
HBOOK. CERN, DD/77/9, GENEVA, 1979.
- Бахвалов Н.С. Численные методы. "Наука", М., 1978.
- Силин И.Н. ОИИИ, II-3302, Дубна, 1987.
- а) Галактионов В.В. и др. ОИИИ, Б2-11-9877, Дубна, 1977.
б) ELLIOTT D.T. CERN, Program Library, E400, 1975.
- SILIN I. CERN Program Library, D510, 1971.

Рукопись поступила в издательский отдел
1 августа 1983 года.

НЕТ ЛИ ПРОБЕЛОВ В ВАШЕЙ БИБЛИОТЕКЕ?

Вы можете получить по почте перечисленные ниже книги,
если они не были заказаны ранее.

D3-11787	Труды III Международной школы по нейтронной физике. Алушта, 1978.	3 р. 00 к.
D13-11807	Труды III Международного совещания по пропорциональным и дрейфовым камерам. Дубна, 1978.	6 р. 00 к.
D1,2-12036	Труды VI Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц. Дубна, 1978 /2 тома/	7 р. 40 к.
D1,2-12450	Труды V Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1978	5 р. 00 к.
D1,2-12450	Труды XII Международной школы молодых ученых по физике высоких энергий. Приморско, НРБ, 1978.	3 р. 00 к.
D11-80-13	Труды VII Всесоюзного совещания по ускорителям заряженных частиц, Дубна, 1980 /2 тома/	8 р. 00 к.
D11-80-13	Труды рабочего совещания по системам и методам аналитических вычислений на ЭВМ и их применению в теоретической физике, Дубна, 1979	3 р. 50 к.
D4-80-271	Труды Международной конференции по проблемам нескольких тел в ядерной физике. Дубна, 1979.	3 р. 00 к.
D4-80-385	Труды Международной школы по структуре ядра. Алушта, 1980.	5 р. 00 к.
D2-81-543	Труды VI Международного совещания по проблемам квантовой теории поля. Алушта, 1981	2 р. 50 к.
D10,11-81-622	Труды Международного совещания по проблемам математического моделирования в ядерно-физических исследованиях. Дубна, 1980	2 р. 50 к.
D1,2-81-728	Труды VI Международного семинара по проблемам физики высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 60 к.
D17-81-758	Труды II Международного симпозиума по избранным проблемам статистической механики. Дубна, 1981.	5 р. 40 к.
D1,2-82-27	Труды Международного симпозиума по поляризационным явлениям в физике высоких энергий. Дубна, 1981.	3 р. 20 к.
P18-82-117	Труды IV совещания по использованию новых ядерно-физических методов для решения научно-технических и народнохозяйственных задач. Дубна, 1981.	3 р. 80 к.
D2-82-568	Труды совещания по исследованиям в области релятивистской ядерной физики. Дубна, 1982.	1 р. 75 к.
D9-82-664	Труды совещания по коллективным методам ускорения. Дубна, 1982.	3 р. 30 к.
D3,4-82-704	Труды IV Международной школы по нейтронной физике. Дубна, 1982.	5 р. 00 к.

Заказы на упомянутые книги могут быть направлены по адресу:
101000 Москва, Главпочтамт, п/я 79
Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований

**ТЕМАТИЧЕСКИЕ КАТЕГОРИИ ПУБЛИКАЦИЙ
ОБЪЕДИНЕННОГО ИНСТИТУТА ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ**

Индекс	Тематика
1.	Экспериментальная физика высоких энергий
2.	Теоретическая физика высоких энергий
3.	Экспериментальная нейтронная физика
4.	Теоретическая физика низких энергий
5.	Математика
6.	Ядерная спектроскопия и радиохимия
7.	Физика тяжелых ионов
8.	Криогеника
9.	Ускорители
10.	Автоматизация обработки экспериментальных данных
11.	Вычислительная математика и техника
12.	Химия
13.	Техника физического эксперимента
14.	Исследования твердых тел и жидкостей ядерными методами
15.	Экспериментальная физика ядерных реакций при низких энергиях
16.	Дозиметрия и физика защиты
17.	Теория конденсированного состояния
18.	Использование результатов и методов фундаментальных физических исследований в смежных областях науки и техники
19.	Биофизика

Иванченко И.М., Иванченко З.М.

10-83-561

Расширение множества внутрисистемных аппроксимирующих функций в системе HBOOK

В работе рассматриваются новые возможности для аппроксимации статистических распределений ортогональными полиномами в системе HBOOK. Приводится описание подсистемных аппроксимирующих программ HFIT, HFITEX, HFITGA, HFITPO.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1983

Ivanchenko I.M., Ivanchenko Z.M.

10-83-561

Extension of the Intersystem Fitted Functions Set
in HBOOK Package

New fitting facilities by orthogonal polynomials in HBOOK package is described. User's guide for HFIT, HFITEX, HFITGA, HFITPO fitting programs is presented.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1983

Перевод О.С.Виноградовой