ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЙ ЦЕНТР

И.Н. Силин

1576

НОВЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ, СВЯЗАННЫХ С МИНИМИЗАЦИЕЙ

Автореферат диссертации, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
кандидат физико-математических наук
Е.П. Жидков

Дубна 1964

И.Н. Силин

НОВЫЕ МЕТОДЫ РЕШЕНИЯ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ, СВЯЗАННЫХ С МИНИМИЗАЦИЕЙ

Автореферат диссертации, представленной на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
кандидат физико-математических наук
Е.П. Жидков

Дубна 1964

Решение многих задач сводится к нахождению значений параметров, при которых достигается минимум некоторой функции от них. Поэтому задача эффективной минимизации функций многих переменных весьма важна. Давно разработаны общие методы решения этой задачи, например, метод скорейшего спуска /1/,/2/ и релаксационный метод /1/. Они весьма просты и поэтому удобны при ручных расчетах. Однако в связи с появлением электронных машин стали ставиться более сложные задачи и оказалось, что упомянутые методы слишком часто требуют чрезмерно большого числа итераций из-за плохой сходимости.

В связи с этим целесообразно построить некоторые частные методы минимизации, которые в широко встречающихся на практике случаях были бы эффективнее общих методов. Два таких метода излагаются в диссертации.

Первый из методов - метод линеаризации /3/ предназначен для минимизации функций определенного вида, а именно - функционала M, заданного на конечномерном пространстве функционального аргумента $y(\vec{a}, x)$ и зависящего от искомых параметров $\vec{a}$ только через свой функциональный аргумент, например,

$$M = \int f[x, y(\vec{a}, x)]\, dx .$$

Метод линеаризации оказался весьма эффективным при обработке экспериментальных данных методом наименьших квадратов. Автором была составлена для этого случая стандартная программа, рассчитанная на число параметров до ~ 50 и произвольное число экспериментальных данных, оставляющая свободу выбора формул функционального аргумента. Подавляющая часть обработки экспериментальных данных методом наименьших квадратов велась в ОИЯИ с ее помощью. В настоящее время стандартную программу начали использовать и в других организациях. Большое число работ с применением метода линеаризации выполнено при активном участии автора /4/-/13/. Результаты некоторых из них излагаются в диссертации. В работе /8/ дано также краткое изложение метода линеаризации в применении к методу наименьших квадратов.

Однако в методе линеаризации для каждого нового вида функциональной зависимости требуется значительная работа по ее учету. В некоторых случаях метод недостаточно эффективен. В случае минимизации произвольных гладких функций, которые не могут быть представлены в виде функционала рассматриваемого типа, метод не применим.

В связи с этим автора заинтересовала задача минимизации более широкого класса функций. В дальнейшем ему удалось построить метод сопряженных прямых [14], обладающий некоторыми свойствами метода линеаризации.

Оба метода основаны на выполнении прямолинейных шагов в сторону уменьшения минимизируемой функции (так же как и, например, метод скорейшего спуска). Но их основной идеей является выбор таких направлений, вдоль которых можно было бы сделать возможно больший шаг и тем самым достигнуть минимума за возможно меньшее число шагов. Естественно, что в случае очень сложного рельефа функции может все равно потребоваться много шагов. В этом смысле выгодно было бы выполнять криволинейные шаги. Однако задание криволинейных шагов заметной длины требует очень больших сведений относительно минимизируемой функции и в большинстве встречающихся на практике случаев не выгодно.

Предлагаемые методы фактически являются некоторыми обобщениями методов квадратичного программирования на случай неквадратичных функций. Вопрос о возможности привлечения методов квадратичного программирования к минимизации произвольных функций для ускорения сходимости затронут, например, в работе [15] в связи с задачами на условный минимум, в которых основную трудность составляет учет условий, а не рельеф функции.

Однако методы квадратичного программирования в их известной форме трудно обобщаются на случай неквадратичных функций, так как требуют знания матрицы коэффициентов квадратичной формы. Двойное же дифференцирование функций многих переменных весьма затруднительно. Кроме того вдали от минимума в большинстве случаев матрица вторых производных не всегда положительно определенная, что приводит к дополнительным трудностям. Наиболее близким к методу линеаризации является довольно широко известный метод уточнения решений в методе наименьших квадратов, описанный хотя бы в [16], [17], который, впрочем, далеко не всегда сходится. Метод же линеаризации приспособлен для нахождения минимумов довольно широкого класса функционалов и дает возможность вести поиск решения с далеких от него пусковых точек.

Весьма близким по замыслу к методу сопряженных прямых является метод, недавно опубликованной в работе [18], которая стала известна автору после опубликования [14]. Автору удалось дальше, чем в [18], продвинуться в области построения экономичных алгоритмов и исследовать возможности метода.

Диссертация состоит из трех глав. В первой главе излагается метод линеаризации. Метод основан на аппроксимации в точке очередного приближения $\vec{a}$ функционала $M\{y\}$ квадратичным по отношению к функциональному аргументу $y(\vec{a},x)$, а

функционального аргумента $y(\vec{a},x)$ – линейным относительно искомых параметров $\vec{a}$. В результате для шага $\Delta\vec{a}$ в методе линеаризации получается выражение

$$\Delta a_l = -\lambda \sum_{k=1}^{m} G^{-1}_{lk} \frac{\partial M}{\partial a_k},$$

где

$$G_{lk} = \int \frac{\partial y(z)}{\partial a_l} \frac{\delta^2 M}{\delta y(z)\, \delta y(x)} \frac{\partial y(x)}{\partial a_k}\, dz\, dx \quad , \quad 0<\lambda<1 .$$

λ выбирается из условия оптимальной сходимости. Даются рекомендации по экономному автоматическому выбору λ. Шаг $\vec{\Delta} a$ обязательно указывает в сторону уменьшения M, если только приближение $\vec{a}$ находится в функциональной окрестности минимума, т.е.

$$\int f(z) \frac{\delta^2 M}{\delta y(\vec{a},z)\, \delta y(\vec{a},x)} f(x)\, dz\, dx > 0$$

для произвольной ненулевой функции f.

Переменная x, на которой задан функциональный аргумент $y(\vec{a},x)$ может быть одномерной и многомерной, непрерывной и дискретной. В последнем случае интегрирование заменяется суммированием, а вариационные производные – частными. Например,

$$G_{lk} = \sum_{j,j'} \frac{\partial y(x_j)}{\partial a_l} \frac{\partial^2 M}{\partial y(x_j) \partial y(x_{j'})} \frac{\partial y(x_{j'})}{\partial a_k}$$

при этом число точек x_j должно быть не менее числа параметров a_k. В окрестности минимума наблюдается быстрая приближенно-ньютоновская сходимость процесса при $\lambda=1$, если норма матрицы

$$\| G^{-1} Q \| \ll 1,$$

где

$$Q_{lk} = \int \frac{\delta M}{\partial y(x)} \frac{\partial^2 y(x)}{\partial a_l\, \partial a_k}\, dx .$$

Исследуется устройчивость минимума по отношению к внешним, не входящим в функциональный аргумент, параметрам. В качестве меры устойчивости предлагаются безразмерные величины – факторы корреляции K_k, которые характеризуют устойчивость по каждому параметру a_k по отдельности. Факторы корреляции имеют простой геометрический смысл и позволяют хорошо контролировать потери точности при численном осуществлении метода.

Рассматриваются причины возникновения неустойчивости, а также приемы борьбы с ней. Обращается внимание на существование вырожденных минимумов, которые являются в некотором смысле сверхустойчивыми по отношению к внешним параметрам и могут представлять собой ложные решения задачи. Вырожденные минимумы возникают при неудачной параметризации функционального аргумента. В частности, простой заменой параметров можно создать вырожденный минимум в произвольной точке $\vec{a}$. При пользовании методом линеаризации следует избегать вырожденных минимумов, так как в их окрестности сходимость метода нарушается.

Метод линеаризации оказывается наиболее эффективным, если применяемые в нем аппроксимации справедливы на участках, не слишком малых по сравнению с расстоянием до искомого минимума. В этом случае для достижения минимума требуется сравнительно небольшое число итераций. Одним из достоинств метода линеаризации является то обстоятельство, что скорость сходимости часто не уменьшается с увеличением числа искомых параметров a_k, если при этом не имеет места резкий рост неустойчивости. Метод линеаризации, примененный к статистической обработке экспериментальных данных методом наименьших квадратов, позволяет без дополнительных вычислений получать оценку матрицы ошибок найденных оптимальных значений параметров a_k.

Во второй главе в качестве практического приложения приводится постановка задачи и некоторые результаты фазового анализа нуклон-нуклонного рассеяния. Фазовый анализ /8/-/13/ был выполнен с использованием метода линеаризации и некоторых дополнительных приемов, обусловленных свойствами метода.

Фазовый анализ проводился в предположении зарядовой инвариантности нуклон-нуклонного рассеяния и возможности описания рассеяния с орбитальным моментом $\ell > \ell_{max}$ одномезонной диаграммой Фейнмана. ℓ_{max} оценивалось из экспериментальных данных по поляризации /19/ и уточнялось в процессе анализа.

В процессе решения минимизировался функционал

$$M = \sum_j \left[\frac{F_j - f_j(\vec{a})}{\sigma_j} \right]^2,$$

где F_j – экспериментально измеренные величины на некоторых углах рассеяния, σ_j – их экспериментальные погрешности, $f_j(\vec{a})$ – теоретические выражения измеренных величин через искомые фазовые сдвиги $\delta_{\ell j}$, параметры смешивания ϵ_j и константу π-мезон-нуклонного взаимодействия f^2.

Анализ был выполнен на энергиях 40, 95, 147, 210 и 310 Мэв. На энергии 147 Мэв допустимое по χ^2-критерию решение оказалось единственным при $\ell_{max}=3$, на энергии 210 Мэв при помощи дополнительного статистического анализа также удалось отбросить все решения, кроме решения 1, что было подтверждено последующими экспериментами. В результате удалось проследить зависимость фазовых сдвигов в указанном выше интервале энергий. Была также предпринята попытка фазового анализа на энергии 660 Мэв, где в связи с интенсивным мезонообразованием фазовые сдвиги комплексны. В дальнейшем фазовый анализ на этой энергии проводился в разных предположениях другими авторами /20/-/23/, в результате чего картина сильно прояснилась. В указанных работах анализ велся также методом линеаризации.

По найденным в результате фазового анализа /8/, /9/ фазовым сдвигам были рассчитаны кривые экспериментально измеримых величин /24/. Новые измерения /24/-/31/ хорошо согласуются с ними.

Результаты фазового анализа использовались в работах /32/-/33/.

Число независимых искомых параметров при проведении фазового анализа достигало 27.

В третьей главе излагается второй из предлагаемых методов – метод сопряженных прямых. Вначале строится алгоритм минимизации за конечное число шагов квадратичных функций. При осуществлении алгоритма образуется геометрическое построение, вершина которого указывает положение минимума квадратичной функции. Доказывается ряд утверждений относительно свойств алгоритма. В частности, алгоритм позволяет находить минимум квадратичной функции с минимальными затратами и получающиеся в процессе минимизации векторы $\vec{r}_k$, специальным способом нормированные, вместе с координатой точки минимума полностью определяют квадратичную функцию и несут в себе просто извлекаемую полезную информацию.

При минимизации неквадратичных функций образуется такое же построение, которое затем последовательно смещается в сторону убывания функции добавлением к нему новых элементов и отбрасыванием части старых. При этом геометрическая структура построения, обеспечивающая нахождение минимума квадратичной функции, сохраняется. Если построение втягивается в квазиквадратичную окрестность минимума функции, в которой слабо сказывается влияние неквадратичных членов разложения функции в ряд Тейлора, процесс последовательных приближений быстро сходится.

В конце главы проводится сравнение полученных результатов с результатами работы /18/ и приводится пример, когда минимизация по методу сопряженных прямых оказывается эффективнее минимизации по методу работы /18/.

Метод сопряженных прямых не использует структурных особенностей строения минимизируемой функции и поэтому метод линеаризации, там где он применим, часто оказывается эффективнее.

Литература

1. И.С. Березин, Н.П. Жидков. Методы вычислений гл. У1, У11. Физматгиз, Москва, 1959.
2. Л.В. Канторович, Г.П. Акилов. Функциональный анализ в нормированных пространствах. Физматгиз, Москва, 1959.
3. С.Н. Соколов, И.Н. Силин. Препринт ОИЯИ Д-810, Дубна, 1961.
4. Н.П. Клепиков, В.А. Мещеряков, С.Н. Соколов. Препринт ОИЯИ Д-584, Дубна, 1960.

5. Н.С. Амаглобели, Ю.М. Казаринов, С.Н. Соколов, И.Н. Силин. ЖЭТФ, 39, 948,1960.

6. Лю Юйань, Н.И.Пятов, В.Г. Соловьев, И.Н. Силин, В.И. Фурман. ЖЭТФ, 40, 1503, 1961.

7. До Ин Себ, Л.Ф. Кириллова, П.К. Марков, Л.Г. Попова, И.Н. Силин, Э.Н. Цыганов, М.Г. Шафранова, Б.А. Шахбазян, А.А. Юлдашев. ЖЭТФ, 41, 1748, 1961.

8. Ю.М. Казаринов, И.Н. Силин. ЖЭТФ, 43, 692, 1962.

9. Ю.М. Казаринов, И.Н. Силин, ЖЭТФ, 43, 1385, 1962.

10. Р.Я. Зулькарнеев, И.Н. Силин. ЖЭТФ, 44, 1106, 1963.

11. Ю.М. Казаринов, В.С. Киселев, И.Н. Силин. ЖЭТФ, 45, 637, 1963.

12. Р.Я. Зулькарнеев, И.Н. Силин. ЖЭТФ, 45, 664, 1963.

13. Ю.М. Казаринов, В.С. Киселев, И.Н. Силин. Препринт ОИЯИ, Р-1221, Дубна, 1963.

14. И.Н. Силин. Препринт ОИЯИ, Р-1228, Дубна, 1963.

15. Г. Зонтендейк. Методы возможных направлений. ИЛ, Москва, 1963.

16. А. Хальд. Математическая статистика с техническими приложениями гл.XX, § 14, ИЛ, Москва, 1956.

17. И.Н. Бронштейн и К.А. Семендяев. Справочник по математике для инженеров и учащихся втузов. Физматгиз, Москва, стр. 570, 1959.

18. И.Ш. Пинскер, Б.М. Цейтлин. Автоматика и телемеханика, 23, 1611, 1962.

19. Ю.М. Казаринов, В.С. Киселев, И.Н. Силин, С.Н. Соколов. ЖЭТФ, 41, 197,1961.

20. Л.С. Ажгирей, Н.П. Клепиков, Ю.П. Кумекин, М.Г. Мещеряков, С.Б. Нурушев, Г.Д. Столетов. ЖЭТФ, 45, 1175, 1963.

21. И. Быстрицкий, Р. Зулькарнеев. ЖЭТФ, 45, 1169, 1963.

22. Л.С. Ажгирей, Н.П. Клепиков, Ю.П. Кумекин, М.Г. Мещеряков, С.Б. Нурушев, Г.Д. Столетов. Препринт ОИЯИ, Р-1391, 1963.

23. Ю.М. Казаринов, В.С. Киселев. Препринт ОИЯИ, Р-1375, 1963.

24. Ю.М. Казаринов, И.Н. Силин. Препринт ОИЯИ, Р-1011, Дубна, 1962.

25. K.Gotow, F.Lobkowicz, E.Heer. Phys. Rev.. 127, 2206 (1962).

26. R.E.Werner, I.Tinlot. NYO 9451, Rochester, 1961.

27. S.Hee, R.Wilsono Prog. Report NR-026-012, Harvard, June, 1962.

28. O.N.Jarvis, B.Rose, I.P.Scanlot, E.Wood. Report AERE- R4159, Harwell, 1962.

29. I.K.Perring. Report AERE-R 4160, Harwell, 1962.

30. R.A.Hoffman, I.Lefrancois, E.H.Thorndike, R.Wilson. Phys. Rev., 125, 973 (1962).

31. G.N.Stafford, G.Whitehead. Proc. Phys. Soc., 79, 430 (1962).

32. Ю.М. Казаринов, Ф.Легар, И.Н. Силин. ЖЭТФ, 44, 311, 1963.

33. Л.С. Ажгирей, С.Б. Нурушев. Препринт ОИЯИ, Р-1188, Дубна, 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
26 февраля 1964 г.