ОБЪЕДИНЕННЫЙ
ИНСТИТУТ
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

Дубна

Р - 1958

В.И. Мороз

СВЕДЕНИЕ МИНИМИЗАЦИИ КВАДРАТИЧНОГО ФУНКЦИОНАЛА С УСЛОВИЯМИ СВЯЗИ К МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА С ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ КВАДРАТИЧНЫМ ЧЛЕНОМ

ЛАБОРАТОРИЯ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

1965

Р - 1958

В.И. Мороз

СВЕДЕНИЕ МИНИМИЗАЦИИ КВАДРАТИЧНОГО ФУНКЦИОНАЛА С УСЛОВИЯМИ СВЯЗИ К МИНИМИЗАЦИИ ФУНКЦИОНАЛА С ДОПОЛНИТЕЛЬНЫМ КВАДРАТИЧНЫМ ЧЛЕНОМ

Постановка задачи

Пусть в результате измерений изучаемого процесса будет получен набор экспериментальных величин и их ошибок (гауссовых).

$$P_{iэ}\ ;\ \Delta P_i \qquad i = 1,\dots,n\ . \tag{1}$$

Считаем, что изучаемый процесс характеризуется K уравнениями, наложенными на величины P_i

$$\{f_k(\dots,P_i,\dots) = 0 \qquad \begin{array}{l} k = 1,\dots,K \\ n > K\ . \end{array} \tag{2}$$

Эти уравнения определяют в пространстве n переменных P_i геометрическое место точек (ГМТ) всех возможных наборов величин P_i ; каждому из наборов сопоставляется величина

$$\chi^2 = \sum_i \frac{(P_{эi} - P_i)^2}{(\Delta P_i)^2}\ . \tag{3}$$

Пометим значком "$*$" тот набор величин P_i, взятый из ГМТ, который обращает в минимум величину χ^2

$$\chi^2_{min} = \sum_i \frac{(P_{эi} - P_i^*)^2}{(\Delta P_i)^2}\ . \tag{4}$$

Очевидно, что для любого χ^2 выполнено условие

$$\chi^2_{min} \leq \chi^2\ . \tag{5}$$

Величина χ^2_{min} может служить мерой согласия результатов измерений с высказанной гипотезой о процессе, выраженной набором уравнений $f_k(n+1, P_i, \dots) = 0$.

Таким образом требуется указать способ вычисления величины χ^2_{min} для заданного набора экспериментальных величин P_i, ΔP_i и уравнений связи $f_k(\dots,P_i,\dots)$.

Известный метод решения задачи путем введения неопределенных множителей Лагранжа оказывается неудобным по двум причинам:

1. Во время минимизации отсутствует контроль за уменьшением χ^2 от итерации к итерации. Нужно напомнить, что $f_k = 0$ нелинейные функции, а начальная точка может быть достаточно далека от минимума.

2. Вторая причина организационная – на нашей электронно-вычислительной машине М-20 нет стандартной программы минимизации с использованием множителей Лагранжа.

Оценка величин χ^2_{min}

Для оценки величины χ^2_{min} рассмотрим функционал

$$A^2 = \sum \frac{(P_{эi} - P_i)^2}{(\Delta P_i)^2} + T \sum_k \frac{f_k^2}{(\Delta f_k)^2}, \tag{6}$$

где

$$(\Delta f_k)^2 = \sum_i \left(\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\right)^2_{P_{iэ}} (\Delta P_i)^2 \qquad T > 0, \tag{7}$$

который определен во всем пространстве n переменных $P_{iэ}$. Обозначим через $A^2_{(T)}$ минимальное значение функционала A^2, через $P_{i(T)}$ – тот набор переменных, который обращает A^2 в $A^2_{(T)}$.

Очевидно, что для любого A^2 выполнено

$$A^2_{(T)} \leq A^2. \tag{8}$$

Так как на ГМТ величины $f_k = 0$, то для наборов P_i, взятых с ГМТ,

$$A^2 = \chi^2. \qquad (P_i \subset \text{ГМТ}) \tag{9}$$

В связи с тем, что ГМТ целиком входит в область определения функционала A^2, получаем: x/

$$A^2_{(T)} \leqslant \chi^2_{min}. \tag{10}$$

В дальнейшем будет показано, что функционал A^2 может быть использован для оценки величины χ^2_{min}.

Нахождение минимума функционала A^2, определенного во всем пространстве, представляется более простым, чем определение χ^2_{min} на ГМТ, которое необходимо исследовать. Во всяком случае, для определения минимума A^2 имеется разработанная И.Н. Силиным программа /1/, которая может быть непосредственно использована.

---

x/ Можно показать, что это неравенство, вообще говоря, строгое.

Разлагая A^2 в окрестности $P_{i(T)}$, получим:

$$A^2 = A^2_{(T)} + \sum_i \frac{\partial A^2}{\partial P_i}\delta P_i + \tfrac{1}{2}\Big[\sum_i \frac{\partial A^2}{\partial P_i^2}(\delta P_i)^2 + 2\sum_{\substack{i,j\\ i\neq j}} \frac{\partial^2 A^2}{\partial P_i\,\partial P_j}\delta P_i\,\delta P_j\Big], \tag{11}$$

где $\delta P_i = P_i - P_{i(T)}$,

$$\frac{\partial A^2}{\partial P_i} = -2\,\frac{P_{iэ} - P_{i(T)}}{(\Delta P_i)^2} + 2T\sum_k \frac{f_k}{(\Delta f_k)^2}\frac{\partial f_k}{\partial P_i}, \tag{12}$$

$$\frac{\partial A^2}{(\partial P_i)^2} = 2\,\frac{1}{(\Delta P_i)^2} + 2T\sum_k \frac{\left(\frac{\partial f_k}{\partial P}\right)^2}{(\Delta f_k)^2} + 2T\sum_k \frac{f_k}{(\Delta f_k)^2}\frac{\partial^2 f_k}{\partial P_i^2}, \tag{13}$$

$$\frac{\partial^2 A^2}{\partial P_i\,\partial P_j} = 2T\sum_k \frac{\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\cdot\frac{\partial f_k}{\partial P_j}}{(\Delta f_k)^2} + 2T\sum_k \frac{f_k}{(\Delta f_k)^2}\cdot\frac{\partial^2 f_k}{\partial P_i\cdot\partial P_j}. \tag{14}$$

Дальнейшее рассмотрение будем вести для случая, когда в окрестности $P_{i(T)}$ выполнено

$$\left(\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\right)^2 \gg \left| f_k\,\frac{\partial^2 f_k}{(\partial P_i)^2}\right|, \tag{15}$$

$$\left|\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\cdot\frac{\partial f}{\partial P_j}\right| \gg \left| f_k\,\frac{\partial^2 f_k}{\partial P_i\cdot\partial P_j}\right|. \tag{16}$$

Отсюда следует, что

$$\frac{\partial^2 A^2}{\partial P_i^2} = 2\,\frac{1}{(\Delta P_i)^2} + 2T\sum_k \frac{\left(\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\right)^2}{(\Delta f_k)^2} \tag{17}$$

$$\frac{\partial^2 A^2}{\partial P_i\,\partial P_j} = 2T\sum_k \frac{\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\cdot\frac{\partial f_k}{\partial P_j}}{(\Delta f_k)^2}. \tag{18}$$

Подставляя (12), (17), (18) в (11), получим:

$$A^2 = A^2_{(T)} + \tfrac{1}{2}\cdot 2\cdot\sum_i \left(\frac{\delta P_i}{\Delta P_i}\right)^2 + T\sum_i \left[\frac{\sum_k \left(\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\right)^2}{(\Delta f_k)^2}(\delta P_i) + 2\sum_{\substack{i,k\\ j\neq i}} \frac{\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\cdot\frac{\partial f_k}{\partial P_j}}{(\Delta f_k)^2}\cdot\delta P_i\,\delta P_j\right] \tag{19}$$

$$A^2 = A^2_{(T)} + \sum \left(\frac{\delta P_i}{\Delta P_i}\right)^2 + T\sum_k \frac{\left(\sum_i \frac{\partial f_k}{\partial P_i}\delta P_i\right)^2}{(\Delta f_k)^2} \,. \tag{20}$$

При этом использовано условие минимальности A^2 в точке $P_{i(T)}$

$$\frac{P_i - P_{i(T)}}{(\Delta P_i)^2} = T\sum_k \frac{f_{k(T)}}{(\Delta f_k)^2}\frac{\partial f_k}{\partial P_i} \tag{21}$$

(n уравнений с n неизвестными)

Третий член выражения (20) может быть записан как

$$T\sum_k \left(\sum_i \frac{1}{\Delta f_k}\frac{\partial f_k}{\partial P_i}\delta P_i\right)^2 = T\sum_k \frac{(f_k - f_{k(T)})^2}{(\Delta f_k)^2} \,. \tag{22}$$

Из (22) следует, что для получения $f_k = 0$, достаточно наложить K линейных уравнений на n переменных δP_i. Подставляя (22) в (20), получим:

$$A^2 = \sum\left(\frac{P_i - P_{i(T)}}{\Delta P_i}\right)^2 + T\sum\frac{f^2_{k(T)}}{(\Delta f_k)^2} + \sum\left(\frac{\delta P_i}{\Delta P_i}\right)^2 + T\sum_k\left(\frac{f_k - f_{k(T)}}{\Delta f_k}\right)^2 \tag{23}$$

Если все $\delta P_i = 0$, то $A^2 = A^2_{(T)}$ и $f_k = f_{k(T)}$. (24)

Если δP_i таково, что $f_k = 0$ (для всех K), (25)

то

$$\chi^2 = A^2_{(T)} + \sum\left(\frac{\delta P_i}{\Delta P_i}\right)^2 + T\sum_k \frac{f^2_{k(T)}}{(\Delta f_k)^2} \,. \tag{26}$$

Рассмотрим следующий пример:

$$P_{1э} = 0;\quad P_{2э} = 1;\quad \Delta P_1 = 1;\quad \Delta P_2 = 1;\quad i = 1,2 \tag{27}$$

$$f_1 = P_1 + P_2 \qquad K = 1\,.$$

При этом:

$$\chi^2_{min} = \tfrac{1}{2};\quad P'_1 = -\tfrac{1}{2};\quad P'_2 = \tfrac{1}{2}\,.$$

Условия (21) или (36) дают систему:

$$-P_1 = T(P_1 + P_2)\cdot\tfrac{1}{2}$$

$$1 - P_2 = T(P_1 + P_2)\cdot\tfrac{1}{2}\,.$$

Отсюда:

$$P_1 = -\frac{T}{2+2T} \qquad \delta P'_1 = -\frac{1}{2+2T}$$

$$P_2 = \frac{2+T}{2+2T} \qquad \delta P'_2 = -\frac{1}{2+2T} \tag{28}$$

$$A^2_{(T)} = \frac{2T^2}{(2+2T)^2} + T\,\frac{2}{(2+2T)^2}\,. \tag{29}$$

Положим в (29)

$$T = 10$$

$$A^2_{(T)} = \frac{200}{484} + \frac{20}{484} = \frac{220}{484}\,;\quad A^2_{(T)} + T\sum\frac{f_k^2}{(\Delta f_k)^2} = \frac{240}{484} < \chi^2_{min} \tag{30}$$

$$T = 100 \quad A^2_{(T)} = \frac{20000}{40804} + \frac{200}{40804} = \frac{20200}{40804}\,;\quad A^2_{(T)} + T\sum\frac{f_k^2}{(\Delta f_k)^2} = \frac{20400}{40804} < \chi^2_{min} \tag{31}$$

Из указанного примера видно, что

$$P_{i(T)} \xrightarrow[T\to\infty]{} P'_i \tag{32}$$

P'_i – точное значение P_i в точке, где χ^2 обращается в минимум

$$T\sum\frac{f_k^2(T)}{(\Delta f_k)^2} \to 0 \quad \text{, как } \frac{1}{T} \quad \text{при } T\to\infty \tag{33}$$

$$\delta P'_i \to 0 \quad \text{как } \frac{1}{T} \tag{34}$$

$$(\delta P'_i = P'_i - P_{i(T)}) \quad \text{при } T\to\infty$$

Из выражения (26) следует:

$$\chi^2_{min} - \left[A^2_{i(T)} + T\sum\frac{f_k^2}{(\Delta f_k)^2}\right] = \sum_i\left(\frac{\delta P'_i}{\Delta P_i}\right)^2 > 0\,, \tag{35}$$

где $\chi^2_{min} - \left[A^2_{(T)} + T\sum\frac{f_k^2}{(\Delta f_k)^2}\right] \to 0$ как $\frac{1}{T^2}$

при $T\to\infty$.

Докажем пункты (32), (33), (34), (35) в общем виде. Из выражения 21 следует

$$\frac{P_i - P_i}{(\Delta P_i)^2} = T\Sigma[\phi_k - \sum_j \frac{\partial \phi_k}{\partial P_j}(P_j - P_j)]\frac{\partial \phi_k}{\partial P_i} \qquad (36)$$

$$i = 1, \ldots, n$$

(эта система из n линейных уравнений, решение ее $P_i = P_{i(T)}$). Здесь обозначено $\frac{f_k}{\Delta f_k} = \phi_k$, и разложение записано для точки $P_{i(T)}$, которую мы можем считать близкой к минимуму (если она не близка, то разложение нужно взять в любой близкой точке — степень близости в выполнении неравенства (15) и (16)). Запишем (36) в виде

$$\frac{X_i}{(\Delta P_i)^2} = T\sum_k[\phi_k - \Sigma \frac{\partial \phi_k}{\partial P_j} X_j]\frac{\partial \phi_k}{\partial P_i}$$

и рассмотрим поведение $X_{i(T)} = P_i - P_{i(T)}$ и $\phi_{k(T)}$ при $T \to \infty$. Из выражения (10) следует, что X_i и $\phi_{k(T)}$ являются ограниченными величинами при $T \to \infty$. Если мы предположим, что все $X_i \to 0$, то тогда $\phi_{k(T)} \to \phi_k$, где ϕ_k вообще не равна 0, следовательно, выражение (10) не может быть выполнено для любого T. Поэтому предположение, что все $X_i \underset{T\to\infty}{\to} 0$ неверно, и существует по крайней мере одно X_{i*}, удовлетворяющее условию $X_{i*} \underset{T\to\infty}{\to} d_{i*} \neq 0$.

Из выражения (36), записанного в виде:

$$\frac{X_i}{T(\Delta P_i)^2} = \Sigma\, \phi_{k(T)} \frac{\partial \phi_k}{\partial P_i}, \qquad (37)$$

следует, что можно взять K уравнений (37) для значений $i = i', i'', \ldots, i^*$, образующих систему линейных уравнений (относительно ϕ_k) с правой частью; детерминант этой системы отличен от 0, т.к. ϕ_k независимы друг от друга. Отсюда следует, что $\phi_{k(T)} \to 0$ как $\frac{1}{T}$ при $T \to \infty$. Так как

$$\phi_k = \phi_{k(T)} + \sum_\nu \frac{\partial \phi_k}{\partial P_\nu}\delta P_\nu \qquad (38)$$

$\nu = i', i'', i''', \ldots, i^*$ (K значений),

то условие обращения ϕ_k в 0 дает, согласно (38), систему K линейных уравнений с правой частью и отличным от 0 детерминантом для определения неизвестных величин δP_ν

$$-\phi_{k(T)} = \sum_\nu \frac{\partial \phi_k}{\partial P_\nu}\delta P_\nu \qquad (39)$$

(K –строк)

Из системы (39) следует, что

$$\delta P_\nu \approx \phi_{k(T)} \infty \frac{1}{T} \quad \text{при} \quad T \to \infty. \qquad (40)$$

Из выражений (26) и (5) получим

$$\chi^2_{min} \le A^2_{(T)} + \Sigma \frac{f^2_{k(T)}}{(\Delta f_k)^2} + \sum_\nu (\frac{\delta P_\nu}{\Delta P_\nu})^2 \qquad (41)$$

$$(\delta P_i = 0, \text{ для } i \neq \nu),$$

где δP_ν определяются согласно (39). Если в выражении (26) мы возьмем набор $\delta P'_i$ такой, что он переводит точку $P_{i(T)}$ в точку P'_i (см. (4)), то получим:

$$\chi^2_{min} = A^2_{(T)} + T\sum_k \frac{f^2_{k(T)}}{(\Delta f_k)^2} + \Sigma(\frac{\delta P'_i}{\Delta P_i})^2. \qquad (42)$$

Учитывая, что $\sum_i (\frac{\delta P'_i}{\Delta P_i})^2 \ge 0$, получим:

$$A^2_{(T)} + T\Sigma \frac{f^2_{k(T)}}{(\Delta f_k)^2} < \chi^2_{min}. \qquad (43)$$

Таким образом, выражения (41) и (43) представляют собой верхнюю и нижнюю оценки величины χ^2_{min}. Разность между этими оценками:

$$\sum_\nu (\frac{\delta P_\nu}{\Delta P_\nu})^2 \underset{T\to\infty}{\to} 0 \quad , \text{ как } \frac{1}{T^2}.$$

Следовательно, из (42) получим:

$$\chi^2_{min} - [A^2_{(T)} + T\Sigma \frac{f^2_k(T)}{(\Delta f_k)^2}] = \sum_i (\frac{\delta P'_i}{\Delta P_i})^2 \underset{T\to\infty}{\to} 0, \quad \text{как } \frac{1}{T^2},$$

где $\delta P'_i = P_{i(T)} - P'_i$.

Сумма положительных величин может стремиться к 0, если только каждый член суммы стремится к 0, поэтому $\delta P'_i \to 0$, не слабее чем $\frac{1}{T}$ при $T \to \infty$.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность за полезные обсуждения А.Ф. Лукьянцеву, И.Н. Силину и Ю.А. Трояну.

Литература

1. С.Н. Соколов, И.Н. Силин. Нахождение минимумов функционалов методом линеаризации. Препринт ОИЯИ, Д-810, 1961 г.

Рукопись поступила в издательский отдел
18 января 1965 г.