объединенный
институт
ядерных
исследований
дубна

Р10-91-482

А.Ж.Кетикян*, Е.В.Комиссаров, В.С.Курбатов,
И.Н.Силин

НОВЫЙ АЛГОРИТМ МИНИМИЗАЦИИ χ^2-ФУНКЦИОНАЛОВ ПРИ НАЛИЧИИ СВЯЗЕЙ

Направлено в журнал "Nuclear Instruments
and Methods"

*Ереванский физический институт

1991

DF - прямоугольная матрица, у которой nc строк и np столбцов.

Запишем эти матрицы следующим образом:

$$DC = \left(\begin{array}{cccc|ccc} \frac{\partial c_1}{\partial x_1} & \frac{\partial c_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_1}{\partial x_{np-nc}} & \frac{\partial c_1}{\partial x_{np-nc+1}} & \dots & \frac{\partial c_1}{\partial x_{np}} \\ \frac{\partial c_2}{\partial x_1} & \frac{\partial c_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_2}{\partial x_{np-nc}} & \frac{\partial c_2}{\partial x_{np-nc+1}} & \dots & \frac{\partial c_2}{\partial x_{np}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial c_{nf}}{\partial x_1} & \frac{\partial c_{nf}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial c_{nf}}{\partial x_{np-nc}} & \frac{\partial c_{nf}}{\partial x_{np-nc+1}} & \dots & \frac{\partial c_{nf}}{\partial x_{np}} \end{array}\right) =$$

$$= \left(\begin{array}{c|c} DC1 & DC2 \end{array}\right);$$ DC1 - прямоугольная матрица nf $\times$ (np-nc), DC2 - прямоугольная матрица nf $\times$ nc.

Аналогично

$$DF = \left(\begin{array}{cccc|ccc} \frac{\partial f_1}{\partial x_1} & \frac{\partial f_1}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{np-nc}} & \frac{\partial f_1}{\partial x_{np-nc+1}} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial x_{np}} \\ \frac{\partial f_2}{\partial x_1} & \frac{\partial f_2}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_{np-nc}} & \frac{\partial f_2}{\partial x_{np-nc+1}} & \dots & \frac{\partial f_2}{\partial x_{np}} \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial f_{nc}}{\partial x_1} & \frac{\partial f_{nc}}{\partial x_2} & \dots & \frac{\partial f_{nc}}{\partial x_{np-nc}} & \frac{\partial f_{nc}}{\partial x_{np-nc+1}} & \dots & \frac{\partial f_{nc}}{\partial x_{np}} \end{array}\right) =$$

$$= \left(\begin{array}{c|c} DF1 & DF2 \end{array}\right);$$ DF1 - прямоугольная матрица nc $\times$ (np-nc), DF2 - квадратная матрица nc $\times$ nc.

Тогда система (2) может быть записана в виде

$$\vec{F}^{o} + DF1 \cdot \vec{X1} + DF2 \cdot \vec{X2} = 0 \,, \qquad (5)$$

где

$$\vec{X} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{np-nc} \\ x_{np-nc+1} \\ \vdots \\ x_{np} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \vec{X1} \\ \vec{X2} \end{pmatrix} ;$$

и

$$\vec{X1} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_{np-nc} \end{pmatrix}, \quad \vec{X2} = \begin{pmatrix} x_{np-nc+1} \\ \vdots \\ x_{np} \end{pmatrix}.$$

Выразим $\vec{X2}$ через $\vec{X1}$, используя уравнение (5):

$$\vec{X2} = -DF2^{-1}\cdot\vec{F}^0 - DF2^{-1}\cdot DF1\cdot\vec{X1} . \tag{6}$$

Используя запись (3) и (6), получим выражение для вектора $\vec{C}$:

$$\vec{C}(\vec{X}) = \vec{C}^0 + DC1\cdot\vec{X1} + DC2\cdot\vec{X2} =$$

$$= \vec{C}^0 + DC1\cdot\vec{X1} - DC2\cdot DF2^{-1}\cdot\vec{F}^0 - DC2\cdot DF2^{-1}\cdot DF1\cdot\vec{X1} =$$

$$= (\vec{C}^0 - DC2\cdot DF2^{-1}\cdot\vec{F}^0) + (DC1 - DC2\cdot DF2^{-1}\cdot DF1)\cdot\vec{X1}. \tag{7}$$

Подставим (7) в (1):

$$\chi^2 = \sum_{i,j} (\vec{D}^0 - A\cdot\vec{X1})_i \cdot G_{ij} \cdot (\vec{D}^0 - A\cdot\vec{X1})_j . \tag{8}$$

Здесь

$$D_i^0 = (\vec{C}^0 - DC2\cdot DF2^{-1}\cdot\vec{F}^0)_i - \vec{C}_i^m ,$$

$$A = -DC1 + DC2\cdot DF2^{-1}\cdot DF1 . \tag{9}$$

Выражение (8) можно переписать в виде

$$\chi^2 = T^0 - 2\cdot\vec{T}\cdot\vec{X1} + \vec{X1}^T\cdot H\cdot\vec{X1} , \tag{10}$$

где

$$T^0 = \sum_{i,j} D_i^0\cdot G_{ij}\cdot D_j^0 ,$$

$$T_k = \sum_{i,j} D_i^0\cdot G_{ij}\cdot A_{jk} ,$$

$$H_{kl} = (A^T\cdot G\cdot A)_{kl} .$$

Из условия минимума функционала (10)

$$\frac{\partial \chi^2}{\partial (X1)_m} = -2\cdot T_m + 2\cdot (H\cdot\vec{X1})_m = 0 \tag{11}$$

найдём искомые оценки параметров:

$$\begin{cases} \vec{X1}^e = H^{-1}\cdot\vec{T} , \\ \vec{X2}^e = -DF2^{-1}\cdot\vec{F}^0 - DF2^{-1}\cdot DF1\cdot\vec{X1}^e . \end{cases} \tag{12}$$

Для получения дальнейших формул будет полезно следующее представление:

$$\vec{D}^0 = A\cdot\vec{X1}^t + E(\vec{C}^m) - \vec{C}^m ,$$

$$\vec{T} = H\cdot\vec{X1}^t + A^T\cdot G\cdot[E(\vec{C}^m) - \vec{C}^m] ,$$

$$A = -DC1 + DC2\cdot DF2^{-1}\cdot DF1 , \tag{13}$$

$$\vec{X1}^e = \vec{X1}^t + H^{-1}\cdot A^T\cdot G\cdot[E(\vec{C}^m) - \vec{C}^m] ,$$

$$\vec{X2}^e = \vec{X2}^t - DF2^{-1}\cdot DF1\cdot H^{-1}\cdot A^T\cdot G\cdot[E(\vec{C}^m) - \vec{C}^m] .$$

При получении формул (13) использовалось естественное предположение:

$$E(\vec{C}^{m}) = \vec{C}^{o} + DC\cdot\vec{X}^{t} = \vec{C}^{o} + DC1\cdot\vec{X1}^{t} + DC2\cdot\vec{X2}^{t}.$$

Здесь: $\vec{X}^{t}$, $\vec{X1}^{t}$, $\vec{X2}^{t}$ - истинные значения параметров $\vec{X}$.

Используя представления (13), получим

$$E(\vec{X1}^{e}) = \vec{X1}^{t}, \qquad E(\vec{X2}^{e}) = \vec{X2}^{t}. \tag{14}$$

Т.е. оценки параметров $\vec{X1}^{e}$, $\vec{X2}^{e}$ - несмещённые.

Выражения для матриц ошибок:

$$\begin{aligned}
&E[(\vec{X1}^{e}-\vec{X1}^{t})_i(\vec{X1}^{e}-\vec{X1}^{t})_j] = H^{-1}_{ij},\\
&E[(\vec{X1}^{e}-\vec{X1}^{t})_i(\vec{X2}^{e}-\vec{X2}^{t})_j] = -[H^{-1}\cdot(DF2^{-1}\cdot DF1)^{T}]_{ij},\\
&E[(\vec{X2}^{e}-\vec{X2}^{t})_i(\vec{X2}^{e}-\vec{X2}^{t})_j] = [(DF2^{-1}\cdot DF1)\cdot H^{-1}\cdot(DF2^{-1}\cdot DF1)^{T}]_{ij}.
\end{aligned} \tag{15}$$

Наконец, после несложных, но громоздких преобразований:

$$E(\chi^{2}(\vec{X}^{e})) = nf - np + nc .$$

3. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ

В общем случае функции $\vec{C}$ и $\vec{f}$ нелинейны, и поиск минимума производится в результате итерационного процесса. Пусть $\vec{X1}^{\nu}$ и $\vec{X2}^{\nu}$ - значения параметров на ν-й итерации. В малой окрестности вектора $\vec{X}^{\nu} = (\vec{X1}^{\nu},\vec{X2}^{\nu})$ функции $\vec{C}$ и $\vec{f}$ можно считать линейными, и мы можем применить все предыдущие формулы. При этом

$$\vec{C}(\vec{X}) = \vec{C}(\vec{X}^{\nu}) + DC^{\nu}\cdot(\vec{X}-\vec{X}^{\nu}) = \vec{C}^{o} + DC^{\nu}\cdot\vec{X},$$

$$\vec{f}(\vec{X}) = \vec{f}(\vec{X}^{\nu}) + DF^{\nu}\cdot(\vec{X}-\vec{X}^{\nu}) = \vec{F}^{o} + DF^{\nu}\cdot\vec{X}.$$

Т.е.

$$\vec{C}^{o} = \vec{C}^{\nu} - DC^{\nu}\cdot\vec{X}^{\nu},$$

$$\vec{F}^{o} = \vec{f}^{\nu} - DF^{\nu}\cdot\vec{X}^{\nu}.$$

Здесь

$$\vec{C}^{\nu} = \vec{C}(\vec{X}^{\nu}), \quad \vec{f}^{\nu} = \vec{f}(\vec{X}^{\nu}),$$

$$DC^{\nu} = DC(\vec{X}^{\nu}), \quad DF^{\nu} = DF(\vec{X}^{\nu}).$$

Значения вектора $\vec{X}^{\nu+1}$ (следующая итерация) рассчитывают-ся по формулам (I2) и (6).

Естественно, возникает несколько вопросов. Как контролировать применимость линейного приближения, которое мы используем? А также: как производить разбиение вектора $\vec{X}$ на два подвектора: $\vec{X1}$ и $\vec{X2}$? Наконец, последний момент: решение задачи можно искать и в рамках метода множителей Лагранжа. Решения должны быть одинаковы, шаги, вычисленные обоими способами, должны совпадать, т.к. это решения одной и той же линейной задачи, или одного и того же линейного приближения нелинейной задачи, полученные двумя разными правильными способами. Контролировать сходимость следует точно так же, как и в работе[1], т.е. требовать, чтобы на каждой итерации уменьшались либо χ^2 по экспериментальным точкам, либо сумма квадратов взвешенных невязок уравнений связи. Быстрое уменьшение вычисляемых шагов говорит о приближении к решению и малом влиянии пренебрежённых членов со вторыми производными (соответственно - удовлетворительной оценке матрицы ошибок).

Что касается разбиения параметров на векторы $\vec{X1}$ и $\vec{X2}$, нам требуется выбрать такое подмножество параметров $\vec{X2}$, чтобы решение (6) было неособенным и не слишком плохо обусловленным. Дорогой способ - полный перебор вариантов и выбор наиболее обусловленного из них.

В действительности нужно найти первый удовлетворительно обусловленный вариант. Например, нормируем все уравнения связи, проверяем 1-й параметр: если есть ненулевая производная по нему хотя бы у одного уравнения связи, включаем его в $\vec{X2}$. Далее ищем 2-й параметр, у которого есть ненулевая производная у одного из оставшихся уравнений связи. Проверяем обусловленность системы выбранных уравнений связи по отношению к выбранным параметрам. Если обусловленность неудовлетворительна, проверяем другие уравнения связи на предмет обусловленности и, если все плохие, то такой параметр бракуем и переходим к следующему.

После выбора третьего параметра проверяем обусловленность уже трёх уравнений и т.д. При добавлении каждого последующего параметра требование на обусловленность надо резко ослаблять.

С чисто математической точки зрения любой неособенный вариант эквивалентен, но плохо обусловленный вариант может вызвать большие потери точности при вычислениях.

Предложенный метод был проверен на том же экспериментальном материале, что и в работе[1]. Выбор вектора $\vec{X2}$ проводился упрощённым способом, а именно, на первой итерации рассчитывалась приближённая матрица ошибок:

$$U = (DC^T \cdot G \cdot DC)^{-1} .$$

На следующих итерациях использовалась матрица ошибок, полученная на предыдущей итерации.

Затем бралось первое уравнение связи и отбирался такой параметр x_k, для которого произведение

$$\frac{\partial f_1}{\partial x_k} \cdot \sqrt{U_{kk}}$$

по модулю было максимально. Этот параметр считался 1-й компонентой вектора $\vec{X2}$. Затем бралось второе уравнение связи

и среди оставшихся параметров x_i ($i \neq k$) отбирался такой параметр j, для которого производная не равна нулю. Для этих параметров k и j строились два вектора:

$$\vec{v}_1 = \left\{ \frac{\partial f_1}{\partial x_k} , \frac{\partial f_1}{\partial x_j} \right\} ,$$

$$\vec{v}_2 = \left\{ \frac{\partial f_2}{\partial x_k} , \frac{\partial f_2}{\partial x_j} \right\}$$

Далее рассчитывалась матрица $V_{ij} = \vec{v}_i \cdot \vec{v}_j$ $(i,j = 1\div2)$ и факторы корреляции $r_i = V_{ii} \cdot V^{-1}_{ii}$. Большие коэффициенты r_i означают плохую обусловленность системы связей по параметрам, и поиск второго параметра продолжался. В случае, если матрица удовлетворительно обусловлена, мы переходим к выбору третьего параметра и т.д.

Контроль сходимости проводился так же, как и в работе[1]: на каждой итерации рассчитывалась невязка уравнений связи:

$$vrf0 = \sum_i \frac{f_i^2}{(\delta f_i)^2} .$$

Рассчитывались новые значения векторов $\vec{X1}^{\nu+1}$ и $\vec{X2}^{\nu+1}$ - формулы (6), (9), (10), (12). Рассчитывается невязка vrf1 при новых значениях $\vec{X1}^{\nu+1}$ и $\vec{X2}^{\nu+1}$. Если vrf1>vrf0, то шаг приращения уменьшается вдвое и т.д., пока vrf1<vrf0.Так же,как и в [1], на каждой итерации рассчитывался параметр

$$ak = \max_i \left\{ \frac{abs(\delta x_i)}{\sigma x_i} \right\} .$$

Процесс считался сходящимся, если $ak \to 0$. Так же, как и в работе[1], наблюдалась чёткая корреляция: при $ak \to 0$ $vrf0 \to 0$. Итерационный процесс прекращался при $ak < \varepsilon$, где ε - малая величина (в нашем случае $\varepsilon = 0{,}04$).

Было проведено сравнение двух итерационных процессов: метод, описанный в этой работе, и метод множителей Лагранжа (работа[1]) - на одном и том же экспериментальном материале.

результаты сравнения: при одних и тех же критериях сходимости решения совпадали, совпадали и матрицы ошибок. Иначе говоря, численное сравнение показало полную эквивалентность этих двух методов. С практической точки зрения этот метод, по нашему мнению, предпочтительнее, т.к. он требует меньше вычислительной работы, чем метод множителей Лагранжа и применим к более широкому классу задач.

В заключение заметим, что алгоритм легко обобщается и на случай связей типа неравенств

$$f_\lambda(\vec{X}) \geq 0 .$$

В этом случае в каждой итерации отбираются те неравенства, которые не выполняются, и они заменяются на равенства

$$f_\lambda(\vec{X}) = 0 .$$

Таким образом, задача свелась к уже решённой.

Есть тонкость: чтобы форсированно не сойтись к границе, следует исключать и те связи, для которых $f_\lambda(\vec{X}) \geq 0$ и скалярное произведение градиентов $\chi^2(\vec{X})$ и $f_\lambda(\vec{X})$ отрицательно, т.е. χ^2 убывает внутрь разрешённой области.

ЛИТЕРАТУРА

1. А.Ж. Кетикян, Е.В. Комиссаров, В.С. Курбатов, И.Н. Силин, "Кинематический фит: нетрадиционный подход к традиционной проблеме", ОИЯИ, Р10-91-483, Дубна, 1991.

Рукопись поступила в издательский отдел
6 ноября 1991 года.