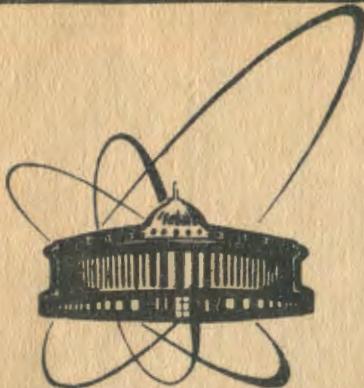


89-329



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

В 271

Р11-89-329

Г.В. Велев, В.М. Маниев*, Н.А. Русакович

ИНТЕРАКТИВНАЯ ПРОГРАММА МИНИМИЗАЦИИ
ЛИНЕЙНОГО ФУНКЦИОНАЛА
ДЛЯ ПЕРСОНАЛЬНЫХ КОМПЬЮТЕРОВ

*Институт физики АН АзССР, Баку

1989

При обработке экспериментальных данных часто бывает необходимо оценить степень их отклонения от принятой гипотезы. Для этого во многих случаях используется критерий χ^2 . Величина χ^2 рассчитывается по формуле:

$$\chi^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^n \left(\frac{f(x_j, A) - F_j(x)}{\sigma_j} \right)^2, \quad (1)$$

где $f(x_j, A)$ – функция с параметрами A (A – вектор параметров), подгоняемая под измерения $F_j \pm \sigma_j$ в точках x_j .

Нами разработана интерактивная программа FIT на языке BASIC для ПЭВМ типа IBM PC/AT/XT, которая минимизирует функционал (1). Эта программа основана на методе, описанном в работе¹, и совпадает по конечным результатам с фортранной версией программы FUMILI².

Программа FIT существует в двух версиях: для интерпретатора GWBASIC (версия I) и для компилятора BASIC (версия C). Основное отличие между ними состоит в следующем. В интерпретаторной версии необходимо заранее написать функцию $f(x_j, A)$ (см. приложение А) в стандарте языка BASIC и запустить программу в командном интерпретаторе GWBASIC. Эта версия занимает около 90к дисковой памяти. При использовании компиляторной версии пользователь ждет во время компиляции и работы редактора связей, но исполняемый модуль выполняется на порядок быстрее. Эта версия занимает 235к на диске и работает с дополнительными

дисководами или твердым диском, потому что компилятор и редактор связей во время выполнения создают временные файлы размером около 140к.

Работа с версией С

Эта версия включает в себя простой редактор, через который вводится функция фита $f(x_j, A)$ в выражении (1). Функция должна иметь следующий вид:

$$Y = f(X(J), A(I)), \quad (2)$$

где $X(J)$ - аргументы функции ($J = 1, 2, 3$), $A(I)$ - параметры ($I \leq 30$), определяемые из минимизации функционала (I), f - выражение на языках FORTRAN или BASIC*.

Для увеличения быстродействия программы и более эффективного поиска минимума можно описать производные $\frac{\partial Y}{\partial A(I)}$ по параметрам $A(I) < \frac{\partial Y}{\partial A(I)}$ в аналитическом виде. Они должны иметь следующий вид :

$$DFCI = \Phi(X(K), A(J)), \quad (3)$$

где Φ - также выражение на языках FORTRAN или BASIC (см. приложение А). Если аналитический вид некоторых или всех производных $\frac{\partial Y}{\partial A(I)}$ не задан пользователем, то производные вычисляются в программе численно.

Описание функции (2) и производных (3) не должно быть длиннее 23 строк.

Ниже дано короткое описание действия функциональных клавиш при работе редактора :

F1 - (Help) получить подсказку для описания функции и ее производных;

F2 - (Save) сохранить в файле набранный текст и изменить (если необходимо) начальное имя файла;

F3 - (Edit) сохранить в файле набранный текст и взять для редакции другой файл;

F4 - (Quit) выход из программы;

F5 - (Compil) вызов компилятора и редактора связей для создания исполняемого модуля . Для этого необходимо : 40 с для ПЭВМ типа IBM PC/AT и 250 с для ПЭВМ типа IBM PC/XT (Правец 16)**,

F6 - (*Set Up*) определение устройства или директории для временных файлов, которые создаются во время компиляции и работы редактора связей;

F9 - (*Del Ln*) уничтожает строку в набираемом тексте;

F10 - (*Ins Ln*) вставляет строку в набираемом тексте.

После работы компилятора и редактора связей (**F5**) создается исполняемый модуль программы минимизации и начинается его исполнение.

Сначала необходимо ввести входные данные. Для этого имеется два способа :

а) программа получает с клавиатуры количество точек (≤ 400), количество аргументов (≤ 3), тип погрешностей (статистические, вычисляемые как квадратный корень из значения, или задаваемые пользователем) и границы изображения на дисплее. Затем для каждой точки вводятся аппроксимируемые значения F_j и значения аргументов x_j ;

б) данные читаются из файла, имеющего формат, указанный в приложении Б.

После этого программа начинает минимизацию функционала (1). При этом на экране изображаются результат каждой итерации, значения параметров и оценка их погрешностей.

В это время нажатием клавиши **F10** можно остановить программу и выйти из нее, а нажатие **F1** приостанавливает программу и высвечивает меню.

Короткое описание меню :

F1 - (*Scales*) изменение шкалы (линейная или логарифмическая) и границ изображения. Некоторые из точек $F_j(x_j)$ могут оказаться за пределами выбранного окна, однако во всех случаях они учитываются при минимизации,

F2 - (*Load/Sav*) считывание из файла или сохранение в файле параметров, их погрешностей и матрицы ошибок;

F3 - (*Params*) вызов редактора параметров. Возможно изменение значений параметров, их шагов и пределов изменения (если значение шага изменения параметра $\Delta A \leq 0$, этот параметр фиксируется);

F4 - (*CovMat*) вывод на экран матрицы ошибок ;

F5 - (*Data*) вызов редактора данных. Возможно изменение данных и их погрешностей. Если для значения номера точки N_j введено число $N_j \leq 0$ (см. приложение В), эта точка убирается из набора данных. Возможно добавление новых точек;

F6 - (*Save D*) сохранение данных в дисковом файле;

F7 - (*ErPgror*) включает и выключает изображение на экране коридора ошибок функции. Следует учесть, что включение изображения коридора ошибок увеличивает время итерации.

F8 - (*Funct*) вывод на экран функции пользователя.

Если необходимо изменить функцию, можно вновь вызвать редактора функции. После этого необходима повторная компиляция (см. описание функциональной клавиши **F5** в меню редактора);

F9 - (*CheckD*) вывод на экран производных по параметрам, вычисленных аналитически в функции пользователя и численно в программе;

F10 - (*SliceD*) в случае, когда функция зависит от нескольких аргументов, изменение показываемого среза.

Работа с версией I

В этой версии редактор функции отсутствует. Функция $f(x_j, a)$ должна быть создана заранее на языке **BASIC** и спасена на диск командой **SAVE "I имя функции 1", a**. Числа параметров, аргументов и экспериментальных точек могут быть любыми и ограничены лишь объемом памяти ЭВМ.

Текст функции $f(x_j, a)$ должен обязательно начинаться с номера строки 10000 (см. приложение А). Количество строк для описания функции и производных не ограничено.

Отличия от версии С в назначении функциональных клавиш:

F2 - (*Load P*) считывает значения параметров из файла;

F4 - (*Save P*) сохраняет в файле параметры и их погрешности;

F8 - (*FunctD*) выводит на экран текст используемой функции (но не дает возможности ее изменить).

*Основная часть программы написана на языке **BASIC** и поэтому для полной совместимости функций f и Φ с выражениями на

языке FORTRAN, нами был создан простой препроцессор, который перед трансляцией переводит арифметические выражения в стандарт языка BASIC (<напр. $\star\star \rightarrow ^$, $SQRT \rightarrow SQR$ и др.>)

**Существует версия программы FIT, которая работает только с твердым диском. В этой версии время, необходимое для создания исполняемого модуля после вызова компилятора и редактора связей, равно: 7 с для ПЭВМ типа IBM PC/AT и 15 с для ПЭВМ типа IBM PC/XT (<Правец 16>).

Приложение А

Пример описания функции минимизации (нормальное распределение):

а) для компиляторной версии

```
Z = (X(1)-AC3))  
Y = AC1)*exp(-0.5*(Z/AC2))^2  
DFC1) = Y/AC1)  
DFC3) = Y*Z/AC2)^2
```

б) для интерпретаторной версии

```
10000 Z = (X(1)-AC3))  
10010 Y = AC1)*exp(-0.5*(Z/AC2)^2)  
10020 DFC1) = Y/AC1)  
10030 DFC3) = Y*Z/AC2)^2  
10040 RETURN
```

Приложение Б

Формат файла с входными данными должен иметь следующий вид (пример):

```
50 2  
1. 1.  
0.42 0.73  
5. 2.236  
0.428 0.81  
..... и т.д.
```

Числа разделяются пробелами. Первая строка - число точек и число аргументов. Вторая строка - аппроксимируемые значения и их погрешности. Третья строка - значения аргументов функции (в примере их 2) и т.д.

Приложение В

#	Value	Error	Argument
1	0.100E+01	0.100E+01	0.420E+00
2	0.500E+01	0.224E+01	0.424E+00
3	0.300E+01	0.173E+01	0.428E+00
4	0.500E+01	0.224E+01	0.432E+00
5	0.600E+01	0.245E+01	0.436E+00

..... и т.д.

Первый столбец - это номер точки. Второй - значение аппроксимируемого измерения. Третий - погрешность, четвертый и т.д. - аргументы функции. Нужно иметь в виду, что после изменения данных они считаются с экрана дисплея и при этом сохраняются лишь три значащие цифры.

Аналогичное замечание относится и к случаю, когда пользователь работает с редактором параметров.

Литература

- Соколов С.Н., Силин И.Н. ОИЯИ, Д-810, Дубна, 1961 .
- Silin I.N. CERN, Program Library D510, 1988.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 мая 1989 года.