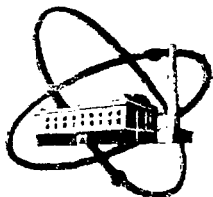


SI18804630



ФЭИ-1868

ФИЗИКО-ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ

Н. Н. ТИТАРЕНКО

**Применение численных методов  
оптимизации в расчетах  
двухчастичных ядерных реакций**

Обнинск — 1987

УДК 539.171

**Н. Н. Титаренко.**

Применение численных методов оптимизации в расчетах двухчастичных ядерных реакций.

ФЭИ-1868. Обнинск: ФЭИ. 1987. — 14 с.

Дано описание оптимизационного пакета прикладных программ РЕАК ОРТ, предназначенного для решения задач безусловной минимизации функций многих переменных в расчетах сечений бинарных ядерных реакций. Приведены основные алгоритмы численного решения на ЭВМ систем нелинейных уравнений метода наименьших квадратов. Изложены принципы построения и функционирования оптимизационного математического обеспечения, а также результаты его практического использования в прикладных работах.



Одним из направлений качественного роста техники расчетов ядерных реакций в настоящее время является задача их автоматизации. Необходимо быстро и эффективно анализировать всё возрастающий объем экспериментальной информации, проводить автоматический поиск феноменологических параметров моделей по экспериментальным данным в широком кинематическом диапазоне. Актуальной задачей является создание высококачественного, эффективного и надежного пакета разнообразных программ оптимизации, обладающего расширенными возможностями в вопросах численных оценок механизма бинарных ядерных реакций.

Цель работы – обсудить проблему постановки оптимизационной задачи в расчетах двухчастичных ядерных реакций, описать основные алгоритмы безусловной минимизации, рассмотреть области их применимости, дать практические рекомендации для решения конкретных задач.

1. Задача о наименьших квадратах в расчетах ядерных реакций.

При настройке теоретических моделей на реальные данные по методу наименьших квадратов (МНК) требуется минимизировать целую функцию вида

$$\chi^2(\vec{x}) = \sum_{k=1}^m F_k^2(\vec{x}) = \sum_{k=1}^m [(\sigma(t_k, \vec{x}) - \sigma^{\text{exp}}(t_k)) / \Delta\sigma^{\text{exp}}(t_k)]^2. \quad (1)$$

Здесь  $\sigma^{\text{exp}} \pm \Delta\sigma^{\text{exp}}$  – экспериментальные значения (и ошибки), под которые подгоняются теоретические функции  $\sigma(t, \vec{x})$ ,  $t_k$  – координаты экспериментальных точек,  $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  – искомые подгоночные параметры модели. В общем случае векторная нелинейная функция  $\chi^2(\vec{x})$  с  $m$  компонентами может иметь много локальных минимумов. В данной работе обсуждаются алгоритмы безусловной минимизации функционала (1) с целью найти какой-нибудь локальный минимум.

Проблема минимизации в МНК встречается во многих областях ядерной физики: при описании процессов рассеяния нуклонов или ионов на ядрах, при фазовом анализе нуклон-нуклонного рассеяния, в расчетах структуры ядер и т.д. В данной работе эта задача рассматривается применительно к описанию механизма бинарной ядерной реакции типа  $A(\alpha, b)B$  [1]. В дальнейшем под теоретической функцией  $\sigma(t, \vec{x})$  будем понимать рассчитанные на ЭВМ по определенным моделям механизма рассеяния либо интегральные характеристики реакции  $A(\alpha, b)B$  в зависимости от энергии  $E_\alpha$  падающей частицы  $\alpha$  ( $t = E_\alpha$ ), либо её распределения от угла  $\Theta_b$  вылета частицы  $b$  ( $t = \Theta_b$ ).

Обсудим особенности построения модельной функции для бинарных ядерных реакций.

Оптическая модель (ОМ) упругого рассеяния в своей основе не рассматривает сложную структуру сталкивающихся фрагментов, а описывает движение одного тела во внешнем поле комплексного оптического потенциала. Для того, чтобы вычислить в рамках ОМ сечение упругого рассеяния частицы  $a$  на ядре  $A$  необходимо для каждого набора квантовых чисел  $l$  и  $j$  решить радиальное уравнение Шредингера с комплексным потенциалом  $V_{lj}(r)$  [2]:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 - \frac{2\tilde{M}}{\hbar^2} V_{lj}(r) \right\} U_{lj}(r) = 0. \quad (2)$$

После сшивки решения уравнения (2) с его асимптотическим значением можно найти амплитуды  $S_{lj}$  или  $C_{lj} = (S_{lj} - 1)/(2i)$ , а также коэффициенты проницаемости  $T_{lj} = 1 - |S_{lj}|^2$ , которые необходимы для вычисления наблюдаемых характеристик рассеяния. В расчетах по ОМ обычно используется сферический комплексный потенциал вида

$$V_{lj}(r) = V_c(r) - V_R \cdot f_R(r) + 2\gamma V_{so} \cdot \frac{1}{r} \frac{d}{dr} f_{so}(r) - i[V_v \cdot f_v(r) - 4a_d W_d \cdot \frac{d}{dr} f_d(r)], \quad f_i(r) = [1 + \exp((r - R_i)/a_i)]^{-1} \quad (3)$$

В общем случае произвольного спина  $S$  и заряда падающей частицы сечение упругого рассеяния в рамках ОМ можно записать как

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}(\theta) = \frac{1}{k^2 \sin^4(\theta/2)} \left[ f_c(\theta) S_{\text{max}} + \sum_{l, j, m} \beta_{l, j, m}^{l, s, j} C_{lj} P_l^m(\theta/k) \right]^2 \quad (4)$$

Здесь только  $\hat{C}$ -матрица ядерного рассеяния зависит от выбора параметров оптического потенциала (3). Число учитываемых парциальных волн  $U_{lj}$  в расчетах по ОМ определяется энергией и спином падающей частицы и в случае рассеяния тяжелых ионов может достигать до нескольких сот значений. При настройке ОМ на данные опыта обычно варьируют до 10 параметров потенциала (3).

Основой для проведения практических расчетов по модели составного ядра является соотношение Хаузера-Фешбаха, согласно которому сечение реакции  $A(a, b)B$  можно записать в виде [3]:

$$\frac{d\sigma}{d\Omega}^{ab}(\theta) = \sum_{\lambda, j_1} \sum_{l_1, j_2, l_2, j_3} g_{\lambda} V_{\lambda}(a \rightarrow j_1) \cdot V_{\lambda}(j_1 \rightarrow b) P_{\lambda}(\theta) T_{\lambda, j_2}(E_a) \cdot T_{\lambda, j_3}(E_b) / \left[ \sum_{\lambda} (T_{\lambda, j_2}(E_a) + \sum_{E_c} \int_{E_c}^{E_c^{max}} T_{\lambda, j_2}(E) \rho(E_c^{max} - E, j_2) dE) \right]. \quad (5)$$

Здесь  $T_{i,j}(\epsilon_i)$  - коэффициенты проницаемости, вычисленные по СМ при энергии частицы  $E_i$  для входного ( $i = a$ ), выходного ( $i = b$ ) и любого ( $i = c$ ) учитываемого в задании канала. Кроме параметров оптического потенциала существенное влияние на расчеты по статистической модели оказывает выбор феноменологических параметров для плотности уровней ядра  $\rho(U, J)$ .

Для описания прямого механизма бинарной ядерной реакции используется метод искаженных волн (МИВ) и приближение сильной связи каналов. В первом порядке борновского приближения МИВ сечение реакции  $A(a,b)B$  определяется формулой [4]:

$$\frac{d\sigma(\theta)}{d\Omega} = \sum_{j_m k_a k_b} \left| \sum_{L l_a j_a l_b j_b} \Gamma_{l_a j_a l_b j_b}^{L S j_m k_a k_b} P_L^m(\theta) \int_0^{\infty} U_{l_a j_a}(k_a r) Q_{L S j}(r) U_{l_b j_b}(k_b r) dr \right|^2 \quad (6)$$

Здесь  $U_{l_a j_a}$ ,  $U_{l_b j_b}$  - радиальные волновые функции частиц во входном и выходном каналах, полученные на основе соотношений (2), (3) оптической модели. При описании коллективных возбуждений ядра формфактор взаимодействия  $Q_{L S j}$  в (6) пропорционален производной от оптического потенциала (3):  $Q_{L S j} \approx \rho_L dV_{L S j}/dr$ . Амплитуды коллективного движения ядра  $\rho_L$  являются феноменологическими параметрами и определяются подгонкой теоретических сечений (6) под экспериментальные данные.

Метод сильной связи каналов является тонким инструментом исследования процессов рассеяния и структуры ядра. Однако при своей практической реализации он требует больших вычислительных усилий - сечение процесса описывается суммой очень большого числа нерасщепляющихся произведений структурных и кинематических факторов. Кроме того, для нахождения элементов  $\hat{C}$  - матрицы многоканального рассеяния необходимо численно решить систему связанных дифференциальных уравнений вида [5]:

$$\left\{ \frac{d^2}{dr^2} - \frac{V_a(l_a r)}{r^2} - \frac{2F}{\hbar^2} V_{l_a j_a}(r) + \frac{2F}{\hbar^2} (E_a - E_r) \right\} R_{\alpha}(r) = \sum_{\beta=1}^{N_c} U_{\beta \alpha}(r) R_{\beta}(r), \quad (7)$$

$\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N_c.$

В практических расчетах число связанных парциальных каналов в (7) бывает очень большим  $N_c \approx 20 + 50$ .

Из проведенного анализа следует, что расчет функции  $\sigma(t, \vec{x})$ , описывающей различные по своей природе механизмы бинарной ядерной реакции является сложной математической задачей. Функция  $\sigma(t, \vec{x})$  характеризуется значительными размерностями, является многокомпонентной, задается не в аналитическом виде, а определяется как результат сложной цепи расчетов. Минимизируемый функционал (I) как правило имеет много локальных минимумов.

Другой особенностью целевой функции (I) для рассматриваемого класса задач является её преобладающая зависимость от параметров оптического потенциала  $V_{ij}(r)$  в учитываемых каналах реакции. К счастью, имеется возможность, исходя из теории возмущений, рассчитать производные от  $\hat{C}$ -матрицы рассеяния по параметрам оптического потенциала с помощью соотношения

$$\frac{\partial C_{ij}}{\partial x_i} = C_m \int_0^\infty \frac{\partial V_{ij}}{\partial x_i} [U_{ij}(r)]^2 dr. \quad (8)$$

Отсюда нетрудно вычислить и производные для модельной функции по оптическим параметрам.

В дальнейшем предполагается, что ценой приемлемых затрат можно получить надежную информацию о градиентах целевой функции — для оптических параметров используется соотношение (8), а недостающие значения остальных компонент градиента заменяются их конечно-разностными приближениями.

2. Практические алгоритмы решения задачи на минимум суммы квадратов.

С учетом перечисленных выше особенностей целевой функции (I) и опыта практической работы для решения рассматриваемого класса оптимизационных задач из универсальных методов минимизации были выбраны квазиньютоновские подходы с вычислением градиентов. Квазиньютоновские методы [6+8] обладают глобальной сходимостью, в окрестности решения скорость сходимости часто сверхлинейная, они требуют лишь одного вычисления градиента на каждом шаге, в них не нужно обращать матрицу или решать систему линейных уравнений. При численной проверке этих методов наилучший результат дает алгоритм Гольдфарба [8].

Алгоритм QUANEW — квазиньютоновский метод поиска минимума целевой функции  $F(\vec{x})$ . В этом алгоритме безусловной минимизации направление спуска к минимуму на  $k$ -ой итерации задается соотношением

$$\vec{p}^k = -\hat{H}^k \vec{g}(\vec{x}^k)$$

Длина шага  $d_k$  итерации определяется поиском локального минимума функции  $F(\vec{x})$  по этому направлению спуска:

$$d_k = \min_{\alpha > 0} F(\vec{x}^k + \alpha \vec{p}^k). \quad (9)$$

Здесь и далее стрелками помечены векторы с компонентами  $\vec{x} = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  и евклидовой нормой  $\|\vec{x}\| = (\sum_{i=1}^n x_i^2)^{1/2}$ ;  $\vec{g}(\vec{x}) = \vec{\nabla} F(\vec{x})$  — вектор-градиент скалярной функции  $F(\vec{x})$ . Матрицы обозначаются заглавными латинскими буквами  $\hat{A}, \hat{B}$  и т.д.,  $\hat{I}_n$  — единичная матрица ранга  $n$ ,  $\hat{A}^{-1}$  — обратная матрица.

После того как вычислено направление  $\vec{p}^k$  и шаг  $d_k$  следующее значение варьируемого вектора равно  $\vec{x}^{k+1} = \vec{x}^k + d_k \vec{p}^k$ . Пересчет матрицы  $\hat{H}^{k+1}$  в алгоритме QUANEW проводится по формуле:

$$\hat{H}^{k+1} = \hat{H}^k + \frac{1}{(\vec{y}^k)^T \vec{p}^k} \left( \rho_k \vec{p}^k (\vec{p}^k)^T - \vec{p}^k (\vec{y}^k)^T \hat{H}^k - \hat{H}^k \vec{y}^k (\vec{p}^k)^T \right), \quad (10)$$

где

$$\vec{y}^k = \vec{g}(\vec{x}^{k+1}) - \vec{g}(\vec{x}^k), \quad (11)$$

$$\rho_k = d_k + (\vec{y}^k)^T \hat{H}^k \vec{y}^k / (\vec{y}^k)^T \vec{p}^k, \quad (12)$$

причем в процедуре предусмотрено обновление матрицы  $\hat{H}^0 = \hat{H}^1 = \hat{H}^2 = \dots = \hat{I}_n$ .

В алгоритме QUANEW определение длины шага  $d_k$  в направлении спуска достигается решением задачи (9) минимизации функции  $F(\vec{x} + \lambda \vec{z})$  зависящей от переменной  $\lambda$ . От того насколько оптимально организован такой одномерный поиск существенно зависит эффективность всего алгоритма оптимизации.

Среди методов одномерной минимизации наиболее эффективными являются алгоритмы, использующие квадратичную или кубическую аппроксимацию. Первые требуют только расчета функций, а вторым (более надежным) кроме того нужны градиенты. В связи с трудоемкостью расчетов целевой функции (1) в рассматриваемом классе задач, в пакете PEAK-OP реализована квадратичная схема.

Алгоритм MINONE - одномерная минимизация функции  $F(\vec{x} + d\vec{z})$  на основе её параболической аппроксимации  $F(\vec{x} + d\vec{z}) \approx a d^2 + b d + c$  и процедуры золотого сечения. Зададим начальное значение  $d_1$  по правилу:

$$d_1 = \begin{cases} 1,0, & \text{если } \bar{x} < 0,1, \\ 0,5, & \text{если } 0,1 \leq \bar{x} < 0,3, \\ 0,2, & \text{если } 0,3 \leq \bar{x} < 0,5, \\ 0,1, & \text{если } 0,5 \leq \bar{x} < 1,0, \\ 0,05/\bar{x}, & \text{если } 1,0 \leq \bar{x}. \end{cases} \quad \bar{x} = \max \{ \rho_i / x_i \}. \quad (13)$$

Обозначим  $F^a = F(\vec{x})$  и вычислим  $F^b = F(\vec{x} + d_1 \vec{z})$ . Если  $F^a < F^b$ , то рассчитать  $F^c = F(\vec{x} - d_1 \vec{z})$ . Если  $F^a > F^b$ , то вычислить  $F^c = F(\vec{x} + 2d_1 \vec{z})$ . Далее по трем значениям функции определим координаты параболы, минимум которой находится в точке  $d_m = -b / (2a) =$

$$d_m = \frac{1}{2} \frac{(b^2 - c^2)F^a + (c^2 - a^2)F^b + (a^2 - b^2)F^c}{(b-c)F^a + (c-a)F^b + (a-b)F^c}. \quad (14)$$

Для определения следующей центральной точки введем "приближение" шага золотого сечения

$$\bar{d} = \begin{cases} \beta (\bar{a} - \bar{x}), & \text{если } \bar{x} \geq (\bar{a} + \bar{b}) / 2, \\ \beta (\bar{b} - \bar{x}), & \text{если } \bar{x} < (\bar{a} + \bar{b}) / 2. \end{cases} \quad (15)$$

где  $\beta = (\sqrt{5}-1)/2$ . Тогда, если  $d_m > \bar{x}$ , то в качестве очередной оценки  $x$  возьмем точку  $d_1 = \bar{x}$ , иначе  $d_1 = d_m$ . Здесь каждая последующая итерация будет требовать лишь одно вычисление функции.

Для минимизации целевой функции вида (I) можно обратиться к специальным алгоритмам, разработанным именно для задач о наименьших квадратах, которые достаточно специфичны. В частности имеется в виду особая структура градиента функции (I) и её матрицы вторых производных:

$$\nabla \chi^2(\bar{x}) = 2 \hat{J}^T \bar{F} \equiv 2 \sum_{k=1}^m \frac{\partial F_k}{\partial x_i} F_k(\bar{x}), \quad (I6)$$

$$\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial x_i \partial x_j} = 2 \hat{J}^T \hat{J} + \hat{Q} \equiv 2 \sum_{k=1}^m \frac{\partial F_k}{\partial x_i} \frac{\partial F_k}{\partial x_j} + 2 \sum_{k=1}^m F_k \frac{\partial^2 F_k}{\partial x_i \partial x_j}, \quad (I7)$$

Из последних соотношений видно, что в МНК производные  $\partial F_k / \partial x_i$ ;  $\partial^2 F_k / \partial x_i \partial x_j$  не зависят от экспериментальных данных, в то время как  $F_k(\bar{x})$  зависят от ошибок опыта и вблизи минимума могут иметь любой знак. Знаки  $F_k$  не коррелированы со знаками  $\partial^2 F_k / \partial x_i \partial x_j$ , поэтому вкладом неоднородного члена  $\hat{Q}$  в матрицу (I7) можно пренебречь. По этим причинам считается оправданным в достаточно широкой окрестности минимума целевой функции для матрицы вторых производных записать

$$\frac{\partial^2 \chi^2}{\partial x_i \partial x_j} \approx 2 \hat{J}^T \hat{J} \equiv 2 \sum_{k=1}^m \frac{\partial F_k}{\partial x_i} \frac{\partial F_k}{\partial x_j}. \quad (I8)$$

Алгоритм GAUNEX -линеаризация задачи МНК. Использование билинейной аппроксимации (I8) в методе Ньютона приводит к алгоритму Гаусса - Ньютона [8], в котором направление спуска к минимуму определяется формулой

$$\bar{p}_{n+1}^k = \bar{x}^{k+1} - \bar{x}^k = - (\hat{J}^T \hat{J})^{-1} \hat{J}^T \bar{F}. \quad (I9)$$

В реальных задачах МНК число обусловленности произведения матриц  $(\hat{J}^T \hat{J})$  может оказаться очень большим даже при неплохо обусловленной матрице  $\hat{J}$ . Для того, чтобы избежать угрозы неоправданной потери точности при прямом обращении матриц в соотношении (I9), вектор  $\bar{p}_{n+1}$  в оптимизационном пакете PEAK-OPT ищется как решение линейной задачи МНК вида

$$\text{найти } \min \| \hat{J} \bar{p}_{n+1} + \bar{F} \|^2. \quad (20)$$

Если матрица  $\hat{J}$  имеет полный столбцовый ранг, то вектор  $\bar{p}_{n+1}$  определяется однозначно с помощью процедуры LMLSQ.



Алгоритм LINLSQ - решение линейной задачи по методу наименьших квадратов. Пусть задана действительная  $(m \times n)$ -матрица  $\hat{A}$  ранга  $n$  ( $m \geq n$ ) и вектор  $\hat{b}$  размером  $m$ . Требуется определить такой вектор  $\hat{x}$ , чтобы выполнялось условие  $\|\hat{A}\hat{x} - \hat{b}\| = \min$ . В случае  $n = m$  решение линейной задачи МНК означает одновременное решение системы уравнений  $\hat{A}\hat{x} = \hat{b}$ .

Алгоритм LINLSQ основан на рекурсивной  $n$ -шаговой процедуре Хаусхолдера [8, 10], в результате которой формируется матрица  $\hat{Q}$  ортогонального преобразования, переводящая  $(m \times n)$ -матрицу  $\hat{A}$  в верхнюю треугольную  $(n \times n)$ -матрицу  $\hat{R}$ :

$$\hat{Q}\hat{A} = \begin{pmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (\hat{Q}^T \hat{Q} = \hat{I}). \quad (21)$$

При таком преобразовании справедливы соотношения

$$\|\hat{b} - \hat{A}\hat{x}\| = \|\hat{c} - \hat{Q}\hat{A}\hat{x}\|, \quad \hat{c} = \hat{Q}\hat{b}, \quad \hat{x} = \hat{R}^{-1}\hat{c}. \quad (22)$$

Здесь вектор  $\hat{c}$  включает лишь первые  $n$  компонент вектора  $\hat{c}$ .

Алгоритм LINLSQ можно использовать для решения линейной задачи МНК, систем линейных уравнений с квадратной матрицей и для обращения матриц. В этих случаях справедливы формулы [10]:

$$\hat{A}^T \hat{A} = \hat{R}^T \hat{R}, \quad (\hat{A}^T \hat{A})^{-1} = \hat{R}^{-1} \hat{R}^{-T}, \quad \det(\hat{A}^T \hat{A}) = (\det(\hat{R}))^2. \quad (23)$$

В практике эксплуатации оптимизационного пакета PEAK-OPT нередко возникали ситуации, когда алгоритм LINLSQ не давал результата, т.е. на каком-либо этапе последовательных преобразований Хаусхолдера с заданной точностью не мог быть образован ненулевой элемент на главной диагонали. Это означает, что столбцы матрицы  $\hat{A}$  не являются линейно независимыми и ранг матрицы  $\hat{A}$  меньше  $n$ . В этом случае выдается сообщение об ошибке и осуществляется возврат из LINLSQ в вызывающую программу.

Подобные сбои возникают тогда, когда в группе варьируемых параметров есть такие, относительно которых минимизируемый функционал малоинформативен. Если  $\hat{A}$  имеет дефект ранга, то у задачи (20) будет бесконечное множество решений. Чтобы преодолеть указанные трудности, необходимо воспользоваться обобщением понятия обратного преобразования, которое формируется на языке задачи минимизации суммы квадратов невязок. (В стандартных процедурах всегда предполагается, что ранг  $r$  факторизуемой матрицы известен заранее и её первые  $r$  столбцов линейно независимы). С помощью введенной псевдообратной матрицы из множества решений задачи минимизации в качестве искомого берется вектор  $\hat{x}$ , обладающий наименьшей нормой  $\|\hat{x}\|$ . Такой вектор всегда единственный.

В оптимизационном пакете прикладных программ РЕАК-ОРТ для надежной оценки ранга матрицы используется её разложение по сингулярным числам. Известно [9], что любую  $(m \times n)$ -матрицу  $\hat{A}$  можно записать как

$$\hat{A} = \hat{U} \hat{\Sigma} \hat{V}^T, \quad \hat{\Sigma} = \text{diag}(\hat{\sigma}_1, \hat{\sigma}_2, \dots, \hat{\sigma}_n), \quad (24)$$

где  $\hat{U}$  - ортонормальная  $(m \times m)$ -матрица,  $\hat{V}$  - ортонормальная  $(n \times n)$ -матрица ( $\hat{U}^T \hat{U} = \hat{V}^T \hat{V} = \hat{V} \hat{V}^T = \hat{U} \hat{U}^T = \hat{I}$ ). В (24)  $\hat{\sigma}_i > 0$  - сингулярные числа матрицы  $\hat{A}$ . Если ранг матрицы  $\hat{A}$  равен  $r$  и  $r < n$ , то  $\hat{\sigma}_{r+1} = \hat{\sigma}_{r+2} = \dots = \hat{\sigma}_n = 0$ , т.е. у неё будет ровно  $r$  ненулевых сингулярных чисел.

Алгоритм GENLSQ - решение задачи обобщенного метода наименьших квадратов. Пусть задана действительная  $(m \times n)$ -матрица  $\hat{A}$  с рангом  $r$  меньше  $n$  ( $m \geq n$ ) и  $m$ -мерный вектор  $\vec{b}$ . Необходимо определить вектор  $\vec{x}$ , удовлетворяющий условию  $\|\vec{b} - \hat{A}\vec{x}\| = \min$ . Единственным решением этой задачи будет вектор  $\vec{x}$ , обладающий минимальной евклидовой нормой  $\|\vec{x}\| = \min$ . Это решение получается из соотношения

$$\vec{x} = \hat{A}^* \vec{b} = \hat{V} \hat{\Sigma}^* \hat{U}^T \vec{b} \equiv \hat{V} \hat{\Sigma}^* \vec{c}, \quad (25)$$

где  $\hat{A}^*$  - матрица псевдообратная к  $\hat{A}$ . Для неё справедливо разложение по сингулярным числам

$$\hat{A}^* = \hat{V} \hat{\Sigma}^* \hat{U}^T, \quad \hat{\Sigma}^* = \text{diag}(\hat{\sigma}_i^*), \quad (26)$$

$$\hat{\sigma}_i^* = \begin{cases} 1/\hat{\sigma}_i, & \text{если } \hat{\sigma}_i > 0, (i=1, 2, \dots, r) \\ 0, & \text{если } \hat{\sigma}_i = 0, (i=r+1, r+2, \dots, n) \end{cases} \quad (27)$$

В подпрограмме GENLSQ сначала матрица  $\hat{A}$  с помощью преобразования Хаусхолдера приводится к двухдиагональной форме, а затем вычисляются сингулярные числа полученной матрицы. Разложение (26) по сингулярным числам является самым надежным методом определения ранга матрицы, элементы которой подвержены ошибкам.

### 3. Принципы построения и функционирования оптимизационного пакета.

В процессе создания оптимизационного пакета прикладных программ РЕАК-ОРТ были найдены следующие принципы его построения и функционирования.

Система РЕАК-ОРТ содержит управляющую программу, библиотеку программ безусловной минимизации и рвисные модули. Базовые программы реализованы на языке Фортран-IV, имеют общее по з, унифицированную структуру, снабжены комментариями. Модульный принцип построения пакета позволяет при необходимости его расширять и модернизировать, оперативно менять алгоритмы численн : расчетов. Комплекс РЕАК-ОРТ

предоставляет пользователю определенные удобства: широко применяется система комментариев и сообщений об ошибках при составлении задания, о динамике прохождения задачи и причинах отказа программ, результаты вычислений представляются в удобном и, при необходимости, достаточно подробном виде.

Оптимизационный пакет РЕАК-ОРТ реализован в двух вариантах программного обеспечения: он может работать с системой программ РЕАК-АВ [1] и в автономном режиме. В первом случае предполагается решение типовых задач из теории ядерных реакций многими пользователями, не являющимися специалистами в вопросах методов оптимизации. Здесь в максимальной степени использована общая специфика расчетов бинарных ядерных реакций, автоматизирован процесс принятия решений за счет введения ряда цепочек расчета, позволяющих в зависимости от заданных пользователем критериев и целей поиска оптимально организовать процесс прохождения задачи.

При автономном функционировании оптимизационного пакета имеется возможность решать близкие по духу задачи ядерной физики, отрабатывать новые алгоритмы оптимизации и разнообразные схемы расчетов. В этом режиме расширен набор алгоритмов минимизации, предоставлена возможность пользователю проводить расчеты в диалоговом режиме: оперативно вмешиваться в процесс оптимизации, переходить по ходу решения от одного метода к другому. Это существенно расширяет возможности пользователя, ускоряет процесс оптимизации, снижает непроизводительные затраты времени работы ЭВМ.

Кроме алгоритмов безусловной минимизации в пакет прикладных программ РЕАК-ОРТ входит набор сервисных модулей для запуска задачи и поиска начальных приближений, построения оптимального набора конечно-разностных интервалов для аппроксимации компонент градиентов функций, выработки критериев прерывания счета и перестройки алгоритма оптимизации. Кратко остановимся на особенностях функционирования двух важных сервисных модулей.

Успех применения описанных выше методов минимизации целевой функции (1) сильно зависит от точности конечно-разностной аппроксимации градиентов, а точнее, от выбора оптимального набора конечно-разностных интервалов  $\bar{h}_i$ .

В таблице представлены формулы для конечно-разностной аппроксимации производных, которые чаще всего используются в практике расчетов.

Аппроксимация производной	Ошибка отбрасывания	Ошибка округления	Оптимальное значение $\bar{h}_i$
$f'_n = [f(x+h) - f(x)]/h$	$h  f''(\xi) /2$	$2 \varepsilon_A / h$	$\bar{h}_n = 2 \sqrt{\varepsilon_A /  f''(\xi) }$
$f'_c = [f(x+h) - f(x-h)]/2h$	$h^2  f'''(\eta) /6$	$\varepsilon_A / h$	$\bar{h}_c = \sqrt[3]{3\varepsilon_A /  f'''(\eta) }$
$f''_o = [f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)]/h^2$	$h^2  f^{(iv)}(\eta) /24$	$4 \varepsilon_A / h$	$\bar{h}_o = \sqrt[3]{3\varepsilon_A /  f^{(iv)}(\eta) }$

Численная аппроксимация значений производных по формулам из приведенной таблицы связана с ошибками отбрасывания остаточного члена тейлоровского разложения и ошибкой округления, связанной с точностью расчета функции на ЭВМ. Величиной  $\varepsilon_A$  в таблице обозначена верхняя граница погрешностей вычисления функции  $f$  в точках  $x, x+h, x-h$ . Оптимальный конечно-разностный интервал  $\bar{h}_i$  выбирается из соображений минимизации суммарной вычисленной ошибки. В предположении, что производные высших порядков не равны нулю, искомый минимум достигается при  $\bar{h}_i$ , указанных в последней колонке таблицы.

В оптимизационном пакете FEAK-OPF набор оптимальных конечно-разностных интервалов  $\{\bar{h}_i\}$  формируется блоком OPTINT один раз в задании по данным, относящимся к начальной точке  $\bar{x}$ , варьируемого набора параметров  $\bar{x}$ . В начале расчетов для каждой конечно-разностной компоненты градиента вычисляется целевая функция (I) в нескольких равноотстоящих узлах  $(x^0_i \pm nh^0_i)$ , после чего, с использованием многоточечной аппроксимации для второй и третьей производной, определяется оптимальное значение  $\bar{h}_i$ , указанное в последней колонке таблицы. Как показывает практика расчетов найденные таким способом значения оптимальных интервалов  $\{\bar{h}_i\}$  вполне приемлемы до конца поиска, если в процессе минимизации масштабные характеристики задачи изменяются не слишком сильно.

Слабым ходовым средством оценивания первых производных является правая конечно-разностная формула (верхняя строка таблицы), так как она требует вычисления лишь одного дополнительного значения функции на одну компоненту вектора градиента и там, где норма  $\| \bar{g}(\bar{x}) \|$  достаточно велика обычно обеспечивает приемлемое качество оценок. Однако по мере приближения к искомой точке безусловного минимума величина  $\| \bar{g}(\bar{x}) \|$  стремится к нулю и правая аппроксимация теряет надежность. Поэтому в пакете FEAK-OPF предусмотрена возможность смены

формул аппроксимации с переходом на центральную в области минимума функции тала.

В процессе решения задачи оптимизации часто возникает необходимость прервать итерационный процесс. Причин для этого может быть несколько: 1) достигнута требуемая точность решения; 2) хорошее приближение ещё не найдено, но скорость приближения к нему сильно упала и не имеет смысла считать дальше; 3) метод начал расходиться или зациклился.

Для осуществления прерывания итерационного процесса в системе РЕАК-ОРТ пользователь должен задать число **MIT** максимально допустимых итераций (по умолчанию **MIT** =20) и выбрать один из критериев останова. Итерационный процесс может быть закончен на *k*-ой итерации ( $k < \text{MIT}$ ), если будут выполнены требования для указанного критерия останова:

- 1) Для всех компонент вектора  $\vec{x}$  достигнуто условие точности:

$$\frac{|\vec{x}_i^k - x_i^{k-1}|}{|x_i^k|} \leq \varepsilon_x. \quad (28)$$

- 2) Изменение целевой функции на двух итерациях является незначительным:

$$\left| \frac{X^2(k) - X^2(k-2)}{X^2(k)} \right| \leq \varepsilon_n. \quad (29)$$

- 3) Последовательность  $\vec{x}^k$  близка к своему пределу:

$$\|\vec{x}^k - \vec{x}^{k-1}\| \leq \varepsilon_{nx}. \quad (30)$$

- 4) Выполняется признак оптимальности:

$$\|\vec{q}(\vec{x}^k)\| \leq \varepsilon_{ng}. \quad (31)$$

Основные результаты и выводы.

В работе описаны базовые алгоритмы комплекса программных средств РЕАК-ОРТ, предназначенного для решения на ЭВМ задач безусловной минимизации функций многих переменных и задач нелинейного программирования, возникающих при анализе двухчастичных ядерных реакций. При разработке первой очереди этого оптимизационного аппарата основной задачей являлось создание эффективно действующего специализированного пакета целевого назначения. Поэтому для достижения поставленной цели параллельно решались две подзадачи:

- создать из существующих алгоритмов поиска безусловного минимума функционала такую совокупность разнообразных методов, которая бы позволила при умеренных затратах машинного времени с наибольшей эффективностью решать задачу наименьших квадратов;
- использовать в полном объеме специфику расчетов двухчастичных ядерных реакций для ускорения оптимизационного процесса.

Практический опыт создания и эксплуатации оптимизационного математического обеспечения РЕАК-ОПТ в расчетах двухчастичных ядерных реакций дал следующие результаты.

Специфика задач метода наименьших квадратов позволяет строить для них алгоритмы расчетов, работающие эффективнее универсальных. Стандартные подходы к проблеме МНК предполагают использование метода Гаусса-Ньютона, в котором на оптимизацию рассматриваемого класса задач требуется примерно в два раза меньше затрат времени расчетов на ЭВМ по сравнению с квазиньютоновским алгоритмом минимизации. Приближение Гаусса-Ньютона обладает высокой скоростью сходимости вследствие того, что использует информацию о первых и вторых производных, которые определяют градиент и кривизну целевой функции. Этот метод в большинстве случаев оказался оправданным. Квазиньютоновский алгоритм использовался в практических расчетах только тогда, когда в окрестности минимума невязки целевой функции были велики.

В первой очереди специализированной системы РЕАК-ОПТ в достаточной степени эффективно использованы особенности расчетов двухчастичных ядерных реакций в направлении снижения полного времени оптимизации. Так, применение теории возмущений к уравнению Шредингера в упругом рассеянии для расчета производных по параметрам оптических потенциалов приводит к существенному сокращению времени вычислений (примерно в 5-6 раз по сравнению с подходами, использующими конечно-разностную аппроксимацию градиентов).

Реализованная в пакете РЕАК-ОПТ процедура разложения матрицы по сингулярным числам при её псевдообращении позволяет надежно ранжировать все варьируемые параметры по их значимости и отобрать из них основные для ускорения сходимости и устранения неустойчивости процесса поиска вблизи минимума целевой функции.

В целом, опыт работы показывает, что использование оптимизационного пакета РЕАК-ОПТ значительно увеличивает возможности ЭВМ при расчете ядерных реакций, существенно ускоряет и упрощает научно-исследовательский процесс.

Список литературы

1. Титаренко Н.Н. Комплекс программ расчета сечений двухчастичных реакций. Нейтронная физика. т. I. - М.: ЦНИИатоминформ, 1984, с. 116-120.
2. Титаренко Н.Н. Программа РОМ-78: Расчет сечений упругого рассеяния частиц на атомных ядрах в рамках оптической модели. Препринт ФЭИ-1230, Обнинск, 1981, -22с.
3. Титаренко Н.Н. Программа СМТ-80: Расчет сечений бинарных реакций в рамках статистической модели. Препринт ФЭИ-1260, Обнинск, 1982, -22с.
4. Титаренко Н.Н. Программа ВАР-82: Расчет сечений ядерных реакций в рамках метода искаженных волн. I. Общее описание. Коллективные модели. Препринт ФЭИ-1331, Обнинск, 1982, -24с.
5. Титаренко Н.Н. Программа ССА-84: Расчет сечений неупругого рассеяния частиц на атомных ядрах методом связанных каналов. Основные уравнения. Препринт ФЭИ-1779, Обнинск, 1986, -12с.
6. Базара М., Шетти К. Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. - М.: Мир, 1982, -583с.
7. Гилл Ф., Моррей У., Райт М. Практическая оптимизация. - М.: Мир, 1985, -509с.
8. Поляк Б.Т. Введение в оптимизацию. - М.: Наука, 1983, -334с.
9. Форсайт Дж., Молер К. Численное решение систем линейных алгебраических уравнений. - М.: Мир, 1969, -167с.
10. Уилкинсон Дж., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке Алгол. Линейная алгебра. - М.: Машиностроение, 1976, -390с.

Технический редактор Н.П.Герасимова

---

Подп. к печати 17.08.87 Т-17549 Бумага писчая № 1  
Формат 60x90 1/16 Усл.п.л. 0,9 Уч.-изд.л. 0,6 Тираж 75 экз.  
Цена 9 коп. Индекс 3624 ФЭ.-1868

---

249020 г.Обнинск Калужской обл., ФЭИ



9 коп.

Индекс 3624

**Применение численных методов оптимизации в расчетах  
двухчастичных ядерных реакций.  
ФЭИ-1868. 1987, 1-14.**