

MINPACK-1  
(G. Fiorio e R. Mugellesi)



1. NOME DELLA LIBRERIA: MINPACK-1

F82-21

2. PRODUTTORI: Argonne National Laboratory  
Applied Mathematics Division

3. ARGOMENTI TRATTATI

(Tra parentesi la classificazione MODIFIED SHARE adottata dall'ACM)

La libreria fornisce algoritmi per la risoluzione di sistemi di equazioni non lineari (C5) e di problemi non lineari ai minimi quadrati senza vincoli (E4).

Per entrambe queste applicazioni sono previste le due possibilita' che l'utente fornisca o no una subroutine per il calcolo della matrice Jacobiana; per il primo caso la libreria fornisce inoltre una subroutine, di nome CHKDER, che verifica la consistenza del calcolo della matrice Jacobiana con le funzioni del problema.

4. STRUTTURA DELLA LIBRERIA

La libreria e' costituita da sottoprogrammi FORTRAN nelle versioni in precisione semplice e doppia; le due versioni vanno considerate completamente separate in quanto i corrispondenti sottoprogrammi hanno lo stesso nome (ad eccezione di SPMPAR e DPMPAR). Entrambe queste versioni utilizzano costanti dipendenti dalla macchina le quali, al fine della portabilita' della libreria, sono ottenute tramite la chiamata ad un apposito sottoprogramma (la function SPMPAR per la versione in precisione semplice e la function DPMPAR per la versione in doppia precisione).

I sottoprogrammi di MINPACK (oltre a SPMPAR, DPMPAR e CHKDER) si possono suddividere in tre gruppi a seconda del livello di utilizzazione:

1) il primo gruppo e' costituito da sottoprogrammi guida ("driver") di uso facilitato (individuabili dalla presenza del carattere 1 in fondo al loro nome) per i quali e' richiesta la specificazione da parte dell'utente di pochi parametri. Questi sottoprogrammi sono costituiti dalla definizione dei rimanenti parametri e dalla chiamata alla corrispondente subroutine del secondo gruppo.

2) il secondo gruppo e' costituito da sottoprogrammi che realizzano gli algoritmi veri e propri e permettono all'utente la massima flessibilita' e la specificazione di

tutti i parametri (ci riferiremo ad ognuna di queste subroutines con il nome di "core subroutine");

3) infine il terzo gruppo e' costituito da sottoprogrammi interni che sono utilizzati dalle subroutines di MINPACK (algoritmi di algebra lineare e per il calcolo della matrice Jacobiana con il metodo alle differenze finite).

## 5. BIBLIOGRAFIA E DOCUMENTAZIONE

### 5.1 Documentazione su carta

[1] GARBOW B. S., HILLSTROM K. E., MORE' J. J., Implementation Guide for MINPACK-1, Argonne National Laboratory, Report ANL-80-68, 1980.

[2] GARBOW B. S., HILLSTROM K. E., MORE' J. J., User Guide for MINPACK-1, Argonne National Laboratory, Report ANL-80-74, 1980.

[3] HIBBERT K. L., An Evaluation of Mathematical Software that Solves Nonlinear Least Squares Problems, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 7, No. 1, March 1981, pp. 1-16.

[4] MORE' J. J., The Levenberg-Marquardt Algorithm: Implementation and Theory, in Numerical Analysis, G. A. Watson, ed., Lecture Notes in Mathematics 630, Springer-Verlag, 1977.

[5] MORE' J. J., GARBOW B. S., HILLSTROM K. E., Testing Unconstrained Optimization Software, ACM Transactions on Mathematical Software, Vol. 7, No. 1, March 1981, pp. 17-41.

[6] POWELL M. J. D., A Hybrid Method for Nonlinear Equations, in Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations, P. Rabinowitz, ed., Gordon and Breach, 1970.

Il manuale [2], contenente anche la documentazione automatica (vedi 5.2), viene fornito in forma di report insieme alla libreria e, secondo una comunicazione privata del direttore dell'AMD di Argonne, non verra' pubblicato se non quando sara' pronta la seconda versione MINPACK-2 (vedi 8.1).

### 5.2 Documentazione automatica

La libreria MINPACK risponde ai requisiti di documentazione interna stabiliti dall'ACM, e cioe' i programmi sorgente contengono, sotto forma di commento, la descrizione precisa della funzione svolta dalla subroutine, il significato e l'uso degli argomenti, le eventuali

subroutines chiamate.

Per i sottoprogrammi dei primi due gruppi e per la subroutine CHKDER, la libreria fornisce inoltre una documentazione automatica di alcune pagine (da 6 a 9), contenente anche un esempio di applicazione e relativo output.

## 6. ELENCO DELLE SUBROUTINES

Presentiamo le core subroutines e i drivers:

risoluzione di sistemi di equazioni algebriche non lineari di  $n$  funzioni in  $n$  variabili [6]:

HYBRD : l'utente deve fornire una subroutine per calcolare le funzioni del problema (la matrice Jacobiana e' calcolata internamente da MINPACK).

HYBRD1: costituisce il driver per la core subroutine HYBRD.

HYBRJ : l'utente deve fornire una subroutine per calcolare le funzioni del problema e la relativa matrice Jacobiana.

HYBRJ1: costituisce il driver per la core subroutine HYBRJ.

risoluzione di problemi ai minimi quadrati non lineari di  $m$  funzioni ( $m \geq n$ ) in  $n$  variabili [4]:

LMDIF : l'utente deve fornire una subroutine che calcoli le funzioni del problema (la matrice Jacobiana e' calcolata internamente da MINPACK).

LMDIF1: costituisce il driver per la core subroutine LMDIF.

LMDER : l'utente deve fornire una subroutine che calcoli le funzioni e la matrice Jacobiana.

LMDER1: costituisce il driver per la core subroutine LMDER.

LMSTR : l'utente deve fornire una subroutine che calcoli le funzioni e le righe della matrice Jacobiana (una riga per chiamata); questa subroutine consente un risparmio di memoria rispetto a LMDER quando  $n < m$ .

LMSTR1: costituisce il driver per la core subroutine LMSTR.

verifica della matrice Jacobiana:

CHKDER: serve per verificare che la matrice Jacobiana calcolata dall'utente sia consistente con le funzioni del problema.

Presentiamo le subroutines interne di MINPACK, per una loro descrizione dettagliata rimandiamo a [2]:

- DOGLEG: questa subroutine determina la combinazione convessa della direzione di Gauss-Newton e della direzione del gradiente scalato che risolve il problema  $\min(\|Ax-b\|; \|Dx\| \leq d)$  data la fattorizzazione QR di una matrice  $m \times n$  ( $m \geq n$ ) A, una matrice diagonale non singolare D, un  $m$ -vettore b e un numero positivo d;
- ENORM : calcola la norma euclidea di un vettore x;
- FDJAC1: calcola una approssimazione alle differenze finite della matrice Jacobiana associata con n funzioni in n variabili;
- FDJAC2: calcola una approssimazione alle differenze finite della matrice Jacobiana associata con m funzioni in n variabili;
- LMPAR : data la fattorizzazione QR di una matrice  $m \times n$  A e una matrice  $n \times n$  nonsingolare D, un  $m$ -vettore b, un numero positivo d, questa subroutine risolve il problema  $\min(\|Ax-b\|; \|Dx\| \leq d)$ ;
- QFORM : accumula la matrice ortogonale Q dalla sua forma fattorizzata;
- QRFAC : calcola la decomposizione QR di una matrice rettangolare qualunque utilizzando trasformazioni di Householder con possibilita' di pivoting;
- QRSOLV: data la fattorizzazione QR di una matrice  $m \times n$  A, una matrice diagonale D, un  $m$ -vettore b, questa subroutine risolve il problema ai minimi quadrati lineare  $\min(\|Ax-b\|^2 + \|Dx\|^2)$ ;
- RWUPDT: e'usata per aggiornare la parte triangolare superiore della decomposizione QR di una matrice A dopo che una riga e' stata aggiunta ad A;
- R1MPYQ: moltiplica una matrice per una matrice ortogonale data come prodotto di rotazioni di Givens;
- R1UPDT: aggiorna la parte triangolare inferiore della decomposizione LQ di una matrice A dopo che una matrice di rango 1 e' stata aggiunta ad A.

## 7. PROGRAMMI DI PROVA

MINPACK fornisce anche una raccolta di programmi che

permettono di valutare la correttezza dell'installazione della libreria. Tutte le routines di MINPACK vengono sottoposte ai test dei programmi di prova, comprese quelle di 'ambiente' SPMPAR e DPMPAR. [1]

E' doveroso notare che i programmi di prova degli algoritmi di minimizzazione propriamente detti generano tutta una raccolta di problemi test, che gli autori hanno curato come lavoro parallelo alla produzione di MINPACK [5]. Tali programmi sono stati prodotti in modo da poter essere utilizzati piu' in generale per valutare algoritmi di minimizzazione di qualsiasi origine (vedi [3] e par. 8.2).

## 8. OSSERVAZIONI GENERALI

### 8.1

Gli algoritmi implementati in MINPACK-1 sono quello di Powell [6] per i sistemi di equazioni non lineari, e quello di Levenberg-Marquardt [4] per il problema ai minimi quadrati non lineare. Sulla validita' di questa scelta, vedi 8.2.

La portabilita' della libreria e' ottenuta tramite l'uso di tre costanti dipendenti dalla macchina che devono essere attivate prima dell'uso delle 'core subroutines', ed i valori di tali costanti per la maggior parte delle macchine sono codificati negli statements DATA delle funzioni SPMPAR e DPMPAR. Non e' difficile stabilire questi valori per una macchina diversa da quelle previste, tanto piu' che i programmi di prova permettono la verifica della correttezza.

Al momento non esistono in MINPACK algoritmi che formalmente ammettono vincoli, pero' ci risulta che sia in preparazione una seconda versione (MINPACK-2) anche per i problemi vincolati.

### 8.2 Valutazione di MINPACK in confronto con altri algoritmi

Il problema di una valutazione del software che risolve problemi ai minimi quadrati non lineari e' stato affrontato in un articolo di Hiebert [3], in cui si utilizzano i problemi test proposti in [5].

Gli algoritmi valutati in [3] sono basati sui metodi di Levenberg-Marquardt, Gauss-Newton e Gauss-Newton modificato (con differenze finite oppure quasi-Newton).

Sulla base dei risultati ottenuti risulta che nessun metodo si puo' considerare superiore all'altro. Rispetto al problema delle variabili scalate, gli algoritmi di MINPACK risultano piu' robusti rispetto agli altri dal momento che essi hanno la capacita' della scalatura interna delle variabili.

## 9. DISPONIBILITA' PRESSO IL CNUCE

### 9.1 Nastro Originale

Collocazione P208, password MINPACK per il CMS, LABEL=NL per l'OS.

Nastro a 9 tracce, densita' 1600 bpi, EBCDIC.

Nei files contenenti i programmi sorgente non ci sono separatori (schede ./ADD NAME) tra i vari sottoprogrammi.

I primi 24 files (RECFM=FB, LRECL=80, BLKSIZE=1600) contengono programmi sorgente, programmi test e documentazione.

I files da 25 a 38 (RECFM=FB, LRECL=132, BLKSIZE=2640) contengono gli outputs dei programmi test.

Il contenuto dei singoli files e' definito nel primo file del nastro (124 records).

I files contenenti la documentazione (4 e 14) e quelli contenenti gli outputs (da 25 a 38) hanno il primo carattere di ogni record con funzione di controllo carrello.

### 9.2 Mass Storage

Sul minidisco di Mass Storage di nome simbolico ARGODOC ci sono quattro files MINPACKS, MINPACKD, MINDOCUS e MINDOCUD, tutti di tipo MACLIB, contenenti i programmi sorgente e la documentazione automatica, nella versione in precisione semplice (suffisso S) e doppia (suffisso D). I nomi dei membri dei programmi sorgente sono tutti quelli elencati al numero 6, oltre a SPMPAR nella versione S e DPMPAR nella versione D. I nomi dei membri della documentazione sono quelli elencati al numero 6 come core subroutines e drivers.

L'accesso al minidisco si ottiene in CMS con il comando

```
ACCEROD (DOC) MINPACK
che esegue una procedura descritta da Marco Sommani sul
Rapporto CNUCE 1981 n.5, pag.31.
```

Una volta ottenuto l'accesso al minidisco, si possono usare i comandi TYPE, PRINT oppure PUNCH per ottenere i singoli membri con l'opzione MEMBER. Questa opzione non e' pero' compatibile con l'opzione CC per il comando PRINT, quindi e' preferibile usare i comandi

```
FILEDEF INMOVE DISK MINDOCUS MACLIB * (MEMBER name
FILEDEF OUTMOVE DISK name LISTING
MOVEFILE
PRINT name LISTING
```

per avere la copia sul disco A e la stampa della documentazione automatica relativa alla subroutine di nome 'name' in precisione semplice. Analogamente, la copia sul disco A del programma sorgente di nome 'name' in precisione semplice si ottiene con

```
FILEDEF INMOVE DISK MINPACKS MACLIB * (MEMBER name
FILEDEF OUTMOVE DISK name FORTRAN
MOVEFILE
```

## 10. NOEME D'USO PRESSO IL CNUCE

## 10.1 Uso sotto CMS

Sono disponibili, sul minidisco di Mass Storage di nome simbolico ARGONNE, i due files MINPACKS e MINPACKD, entrambi di tipo TXTLIB, contenenti i moduli compilati di tutta la libreria MINPACK nelle due versioni, in semplice e doppia precisione, rispettivamente. Per eseguire un programma che chiama delle subroutines di MINPACK in precisione semplice basta che, prima del comando LOAD o RUN, vengano lanciati i comandi

```
ACCPROD MINPACK
```

```
GLOBAL TXTLIB FORTMOD2 MINPACKS
```

(ricordando che il comando GLOBAL annulla i precedenti e che in esso possono essere specificate fino ad otto librerie); gli stessi comandi vanno usati per caricare le subroutines di MINPACK in doppia precisione ma in questo caso bisogna specificare MINPACKD nel comando GLOBAL invece di MINPACKS.

## 10.2 Uso sotto CS

Con le procedure catalogate Fortran FORTG e FORTX che contengono lo step di loader (vedi il Rapporto CNUCE 1976 n.º pag.30), le subroutines di MINPACK in precisione semplice sono richiamabili purchè si inserisca la scheda  
 //GO.FIRSTLIB DD DSN=SYS1.MINPACKS,DISP=SHR  
 dopo i programmi Fortran.

Con le procedure FORTGCLG e FORTXCLG che contengono lo step di linkage editor, la scheda suddetta va codificata come segue

```
//LKED.FIRSTLIB DD DSN=SYS1.MINPACKS,DISP=SHR
```

Analoga scheda va codificata per chiamare subroutines in doppia precisione, specificando SYS1.MINPACKD anzichè SYS1.MINPACKS.