解非线性最小二乘问题的连续极小化方法* 1)

李庆扬　谢金星
（清 华 大 学）

A CONTINUOUS MINIMIZATION METHOD FOR SOLVING NONLINEAR LEAST-SQUARES PROBLEMS

Li Qing-yang,　Xie Jin-xing
(Tsinghua University)

Abstract

This paper presents a kind of continuous minimization method for solving nonlinear least-squares problems. It transforms solving a nonlinear least-squares problem into solving an initial value problem of ordinary differential equations. Some existent algorithms for solving nonlinear least-squares problems are re-interpreted and some new algorithms are obtained by choosing some numerical integration formulas. Finally, some numerical examples and testing results are given.

§1. 引　言

设 $F: D\subset R^n \to R^m$，$F=(f_1,\cdots,f_m)^T$，则非线性最小二乘问题可归结为求

$$g(x)=\frac{1}{2}F(x)^TF(x)=\frac{1}{2}\sum_{i=1}^{m}f_i^2(x) \tag{1}$$

的极小点和极小值，即求 $x^*\in D$ 使

$$g(x^*)=\min_{x\in D}g(x). \tag{2}$$

本文应用解非线性方程组的连续极小化思想[1]，将求解非线性最小二乘问题转化为解常微分方程的初值问题。用常微数值解法为求最小二乘问题提供了一种新的途径，如用 Euler 法和后退 Euler 法解初值问题，实际上就得到解最小二乘问题的最速下降法与 Levenberg-Marquart 方法[2]。这说明新方法是传统方法的一种推广。本文 §2 将介绍方

* 1989 年 2 月 2 日收到.
1) 国家七五数学软件项目.

法的基本思想. §3 给出一种显式非线性 Runge-Kutta 型格式求解问题 (1)(2), 它比 L-M. 方法计算简单,不用求逆,数值试验表明效果较好. §4 给出了数值试验结果.

§2. 沿积分曲线下降的连续化方法

记 $\varphi(x)=\nabla g(x)=F'(x)^TF(x)$, $\varphi:D\subset R^n\to R^n$, 考虑常微分方程初值问题

$$\frac{dx}{dt}=-\varphi(x),\ x(0)=x \tag{3}$$

的积分曲线 $x=x(t)$, 可得以下结论:

定理 1. 设 $F:D\subset R^n\to R^m$ 在开域 D 上有连续的 G-导数, $g(x)$ 由(1)定义. 若存在 $x^0\in D$, 使 $g(x)$ 的水平集 $L=L(g(x^0))=\{x\in D\,|\,g(x)\leqslant g(x^0)\}$ 为有界闭集, 则 $g(x)$ 沿(3)的积分曲线 $x=x(t)$ 是下降的,且存在 $x^*\in L(g(x^0))$, 使

$$\lim_{t\to+\infty}x(t)=x^*,\ \varphi(x^*)=0,$$

且

$$g(x^*)=\inf_{t\geqslant0}\{g(x(t))\}.$$

证明. 由

$$\frac{dg}{dt}=g'(x)x'(t)=\varphi^T(x)(-\varphi(x))\leqslant 0 \tag{4}$$

知 $g(x)$ 沿(3)的积分曲线 $x=x(t)$ $(0\leqslant t<+\infty)$ 是下降的. 由 $L(g(x^0))$ 定义知 $\{x(t)|0\leqslant t<+\infty\}\subset L(g(x^0))$. 因 $L(g(x^0))$ 有界闭,故 $\{x(t)|0\leqslant t<+\infty\}$ 有极限点 x^*, 即 $\exists t_n\to+\infty$ 使

$$\lim_{n\to\infty}x(t_n)=x^*.$$

对 $\forall t\geqslant 0,\exists N$. 当 $n\geqslant N$ 时有 $t_n>t$, 故 $g(x(t))>g(x(t_n))$, 于是

$$g(x(t))\geqslant\lim_{n\to\infty}g(x(t_n))=g(\lim_{n\to\infty}x(t_n))=g(x^*).$$

$g(x^*)$ 是 $\{g(x(t))\}$ 的下确界,即

$$g(x^*)=\inf_{t\geqslant0}\{g(x(t))\}.$$

由(4)式可知,当且仅当 $\varphi(x^*)=0$ 时(4)取等号,否则 $g(x)$ 严格下降. 因此, x^* 是梯度系统 $\frac{dx}{dt}=-\nabla g(x)$ 的平衡点. 证毕.

根据此定理, 可将求解最小二乘问题 (1)(2) 转化为求初值问题(3), 原则上任何一种求解常微初值问题的数值方法都可看作求解 (1) (2) 的一种迭代方法. 例如用 Euler 法求解(3),则得

$$x^{k+1}=x^k-h_k\varphi(x^k),\ k=0,1,\cdots, \tag{5}$$

其中 $h_k>0$ 为步长. 因 $-\varphi(x^k)$ 是 $g(x)$ 在点 x^k 处的负梯度方向, 故总可选 $h_k>0$ 使 $g(x^k-h_k\varphi(x^k))$取最小值,这就是最速下降法[2]. 计算时若取 h_k 使 $g(x^{k+1})<g(x^k)$ 就是下降方法.

若用后退 Euler 法解(3)，则得到隐式公式

$$x^{k+1} = x^k - h_k\varphi(x^{k+1}),\ k = 0,1,\cdots. \tag{6}$$

为了求 x^{k+1}，对 $\varphi(x^{k+1})$ 用 Taylor 展开，并忽略高阶项，得

$$\begin{aligned}\varphi(x^{k+1}) &= \varphi(x^k) + \varphi'(x^k)(x^{k+1} - x^k) + O((x^{k+1}-x^k)^2)\\ &\doteq \varphi(x^k) + \nabla^2 g(x^k)(x^{k+1} - x^k),\end{aligned}$$

这里 $\nabla^2 g(x^k) = F'(x^k)^T F'(x^k) + \sum_{i=1}^m f_i(x^k)H_i(x^k)$，$H_i(x)$ 是 $f_i(i = 1,\cdots,m)$ 的 Hession 矩阵. 为了简化计算，令

$$\begin{aligned}&\nabla^2 g(x^k) \doteq F'(x^k)^T F'(x^k) = J(x^k)^T J(x^k),\\ &\varphi(x^{k+1}) \doteq \varphi(x^k) + J(x^k)^T J(x^k)(x^{k+1} - x^k).\end{aligned} \tag{7}$$

将(7)代入(6)则得

$$(I + h_k J(x^k)^T J(x^k))(x^{k+1} - x^k) = -h_k\varphi(x^k),\ k = 0,1,\cdots.$$

由于矩阵 $(I + h_k J(x^k)^T J(x^k))$ 是正定对称矩阵，故可逆. 上式可改写为

$$x^{k+1} = x^k - \left(J(x^k)^T J(x^k) + \frac{1}{h_k}I\right)^{-1}\varphi(x^k),\ k = 0,1,\cdots. \tag{8}$$

这即是 Levenberg-Marquart 方法(记 L-M 方法)，它是一种不用迭代的近似后退 Euler 法，这里 $\frac{1}{h_k}$ 相当 LM 方法的阻尼因子[3]. 显然，总可找到 $h_k > 0$，使迭代满足 $g(x^{k+1}) < g(x^k)$，从而保证迭代收敛.

若用 2 阶精度的 A-稳定梯形公式解(3)，可得

$$x^{k+1} = x^k - \frac{h_k}{2}[\varphi(x^k) + \varphi(x^{k+1})],\ k = 0,1,\cdots. \tag{9}$$

仍用(7)代入(9)则得

$$x^{k+1} = x^k - h_k\left[I + \frac{h_k}{2}J(x^k)^T J(x^k)\right]^{-1}\varphi(x^k),\ k = 0,1,\cdots, \tag{10}$$

称为近似梯形公式. 它本质上与 LM 方法相似，计算时只要适当选择步长 h_k 可以收敛很快，比 LM 方法选阻尼因子容易. 若(10)中记 $A_k = \left[I + \frac{h_k}{2}J_k^T J_k\right]$ 并将 $g(x^{k+1})$ 在 x^k 处 Taylor 展开得

$$\begin{aligned}g(x^{k+1}) &= g(x^k - h_k A_k^{-1}\varphi(x^k))\\ &= g(x^k) - h_k\nabla g(x^k)A_k^{-1}\varphi(x^k) + O(h_k^2)\\ &= g(x^k) - h_k\varphi(x^k)^T A_k^{-1}\varphi(x^k) + O(h_k^2).\end{aligned}$$

当 $\varphi(x^k) \neq 0$ 时，因 A_k^{-1} 正定，故 $\varphi(x^k)^T A_k^{-1}\varphi(x^k) > 0$. 总存在 $h_k > 0$，使 $g(x^{k+1}) < g(x^k)$，并且可以下降较快. 由此有如下结论：

定理 2. 设 $F \in C^2$，$\varphi(x^k) \neq 0$，$L(g(x^0))$ 为有界闭集，则以 x^0 为初始近似总存在 $h_k > 0$，使迭代序列(10)满足 $g(x^{k+1}) < g(x^k)$ 且 $\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$ 是 $g(x)$ 的极小点.

具体计算时可采用变步长的方法由程序自动选取步长(见下节算法步骤).

§3. 连续极小化的非线性方法

将最小二乘问题(1)(2)转化为初值问题(3)求解，计算方法很多，上面给出的近似梯形公式(10)就是较有效的一种. 但每步要求 A_k 的逆，计算较复杂，若用不求逆的显式格式，则格式不是 A-稳定的，对步长限制较大. 这里我们采用一种显式 A-稳定的非线性方法计算(3)的解. 设初值问题为

$$\begin{cases} y' = f(t, y), \\ y(0) = y^0. \end{cases} \tag{11}$$

它的非线性 Runge-Kutta 型求解公式是[4]

$$y_{k+1} = y_k + hf\left(t_k + \frac{1}{2}h,\ y_k + \frac{1}{2}\frac{hy_kf_k}{y_k - \frac{1}{2}hf_k}\right),\ k = 0,1,\cdots, \tag{12}$$

其中 $f_k = f(t_k, y_k)$，$|y(t)| + |y'(t)| \neq 0$. 若 $y_k \neq 0$，则方法至少是 2 阶的. 当 $y_k = 0$ 方法是 1 阶的. 这方法是 A-稳定的. 将公式(12)推广到方程组，并用于方程(3)则得解最小二乘问题的非线性方法

$$x^{k+1} = x^k - h_k\varphi\left(x^k - h_k\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^k\varphi_i(x^k)}{2x_i^k + h_k\varphi_i(x^k)}e_i\right),\ k = 0,1,\cdots, \tag{13}$$

这里 e_i 是第 i 个分量为 1 的坐标向量. 对此公式有:

定理 3. 设 $F: D\subset R^n \to R^m$ 在 D 上二阶连续可微，$x^0 \in D$，$L(g(x^0))$ 为有界闭集. 若 $\varphi(x^k) \neq 0$，则(13)中适当选取 $h_k > 0$，可使

$$g(x^{k+1}) < g(x^k)\quad k = 0,1,\cdots,$$

且 $\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$ 是 $g(x)$ 的极小点.

证明. 由(13)当 $x^k \neq 0$ 时，对 $g(x^{k+1})$ 按 Taylor 展开，

$$\begin{aligned} g(x^{k+1}) &= g(x^k) - h_k\varphi\left(x^k - h_k\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^k\varphi_i(x^k)}{2x_i + h_k\varphi_i(x^k)}e_i\right)^T\nabla g(x^k) + O(h_k^2) \\ &= g(x^k) - h_k\varphi(x^k)^T\varphi(x^k) + O(h_k^2). \end{aligned}$$

因 $\varphi(x^k) \neq 0$，且 $\varphi(x^k)^T\varphi(x^k) > 0$，故总有 $h_k > 0$，使 $g(x^{k+1}) < g(x^k)$. 因 $L(g(x^0))$ 有界闭，故 $\lim\limits_{k\to\infty} x^k = x^*$ 且 $g(x^*)$ 为 g 的极小值. 证毕.

这方法只计算 $\varphi(x^k) = \nabla g(x^k)$ 的值，不求逆，每步计算量较省，它是求解最小二乘问题的一种新算法. 其计算步骤如下:

算法 (连续极小化非线性 RK 方法)

步 0 任给初始近似 x^0，初始步长 h，最大迭代步数 ITM，控制精度参量 $Eps1$，$Eps2$，$Eps3$，$Eps4 = 10^{-4}$.

步 1 令 $k = 0$，计算 $g(x^0) \to g_0$，$x^0 \to xk$，若 $g_0 \leqslant Eps1$，转步 6，否则做步 2.

步 2 计算 $\varphi(xk)$ 及 $\|\varphi(xk)\|_\infty \to \varphi_0$，若 $\varphi_0 \leqslant Eps2$ 转步 6，否则 $k + 1 \to k$，若 $k \geqslant ITM$ 转步 6，否则计算

$$\bar{x}^k = x^k - h\sum_{i=1}^{n}\frac{x_i^k\varphi_i(x^k)e_i}{2x_i^k + h\varphi_i(x^k)} \to x \text{ 及 } \varphi(x) \to y.$$

步 3　$xk - hy \to xk1$，计算 $g(xk1) \to g_1$，若 $g_1 \leqslant Eps1$，则转步 6，否则若 $g_0 \leqslant g_1$，则 $\frac{h}{2} \to h$，若 $h \leqslant Eps4$（失败）转步 6，否则转步 3．若 $g_1 < g_0$，做步 4．

步 4　若 $\|xk1 - xk\| \leqslant Eps3$ 转步 6，若 $Eps3 < \|xk1 - xk\| \leqslant Eps4 * \|xk1\|$ 或 $\|g_1 - g_0\| \leqslant Eps4 * g_1$，则 $2h \to h$ 转步 5，否则做步 5（h 不变）．

步 5　$xk1 \to xk$，$g_1 \to g_0$ 转步 2．

步 6　计算结束，返回主程序，输出有关信息（如成功或失败返回码，极小点，极小值，梯度，迭代次数等）．

注 1．此算法有一般性，若解常微初值问题用其他算法，只改变步 2 即可．自动变步长很重要，其中 $Eps4$ 为控制步长用的常数可由使用者给定．一般应使 $Eps3 \ll Eps4 * \|xk1\|$，而 $Eps1$，$Eps2$ 及 $Eps3$ 为控制精度常数，由用户给定．初始步长根据试验可取 0.1 或 1．

§4. 数 值 试 验

为了检验连续极小化方法的计算效果，首先用两个简单例题（例 1 与例 2）采用不同步长 h 计算，比较近似梯形法(10)与非线性 RK 方法(13)的计算效果．

例 1. $f_1(x) = x_1^2 + 3x_2^2 + 7x_1x_2 + 0.5$,

$f_2(x) = x_1^2 + x_2^2 - 2x_1x_2 - 1$,

$f_3(x) = x_1 + x_2 + 1$.

例 2. $f_1(x) = x_1^2 + x_2^2 + x_1x_2$,

$f_2(x) = \sin x_1$,

$f_3(x) = \cos x_2$.

这两题都是 $h = 2$，$m = 3$，初始近似都取 $x^0 = (3.0, 1.0)^T$，初始步长取 $h = 0.1$ 及 1，或 0.01 或 $h = 10$．计算结果见表 1．

表 1　用方法(10)及(13)计算结果比较

	步长 h	近似梯形公式(10)			非线性 RK(13)	
		迭代次数	极小点	极小值	迭代次数	极小值
例 1	0.01	20	(.3789,—.6926)	0.2766485	121	0.2766498
	0.1	16		0.2766485	33	0.2766485
	1.0	20		0.2766485	43	0.2766488
例 2	0.1	9	(.1555,—.6945)	0.3865995	59	0.3866010
	1.0	11		0.3865996	36	0.3865997
	10	18		0.3365997	40	0.3865997

这里非线性方法步数较多，但它不用求逆，因此也是一个较有效的方法．而近似梯形

公式(10)虽然本质上与 LM 方法相似,但它用自动变步长实现比 LM 方法计算方便.为了对非线性 RK 方法(13)做进一步检验,我们从[5]中选择 10 个问题进行数值试验. 这 10 个问题分别是:

(1) 线性函数-满秩, $m \geqslant n$,

$$f_i(x) = x_i - \frac{2}{m}\left(\sum_{j=1}^{n} x_j\right) - 1,\ 1 \leqslant i \leqslant n,$$

$$f_i(x) = -\frac{2}{m}\left(\sum_{j=1}^{n} x_j\right) - 1,\ n < i \leqslant m,$$

$$x^0 = (1,\cdots,1)^T,\ x^* = (-1,\cdots,-1)^T.$$

(2) 线性函数-秩 1, $m \geqslant n$,

$$f_i(x) = i\left(\sum_{j=1}^{n} jx_j\right) - 1, 1 \leqslant i \leqslant m, x^0 = (1,\cdots,1)^T.$$

(3) 线性函数-秩 1,且有零的行和列, $m \geqslant n$,

$$f_1(x) = -1,\ f_m(x) = -1,$$

$$f_i(x) = (i-1)\left(\sum_{j=2}^{n-1} jx_j\right) - 1,\ 2 \leqslant i \leqslant m-1,$$

$$x^0 = (1,\cdots,1)^T.$$

(4) Rosenbrock 函数, $n = m = 2$,

$$f_1(x) = 10(x_1 - x_2^2),$$

$$f_2(x) = 1 - x_1,\ x^0 = (-1.2, 1)^T,\ x^* = (1,1)^T.$$

(5) Helical Valley 函数, $n = m = 3$,

$$f_1(x) = 10[x_3 - 10\theta(x_1, x_2)],$$

$$f_2(x) = 10[(x_1^2 + x_2^2)^{1/2} - 1],$$

$$f_3(x) = x_3,$$

其中

$$\theta(x_1,x_2) = \begin{cases} \dfrac{1}{2\pi}\arctan\left(\dfrac{x_2}{x_1}\right), & \text{当 } x_1 > 0, \\ \dfrac{1}{2\pi}\arctan\left(\dfrac{x_2}{x_1}\right) + 0.5, & \text{当 } x_1 < 0, \end{cases}$$

$$x^0 = (-1,0,0)^T,\ x^*(1,0,0)^T.$$

(6) Wood 函数, $n = 4$, $m = 6$,

$$f_1(x) = 10(x_2 - x_1^2),$$

$$f_2(x) = 1 - x_1,$$

$$f_3(x) = \sqrt{90}(x_4 - x_3^2),$$

$$f_4(x) = \sqrt{10}(x_2 + x_4 - 2),$$

$$f_5(x) = 1 - x_3,$$

$$f_6(x) = \frac{1}{\sqrt{10}}(x_2 - x_4),$$

$$x^0 = (-3, -1, -3, -1)^T, \quad x^* = (1, 1, 1, 1)^T.$$

(7) Kowalik and Osborne 函数，$n = 4$，$m = 11$，

$$f_i(x) = y_i - \frac{x_1(u_i^2 + u_i x_2)}{(u_i^2 + u_i x_3 + x_4)},$$

其中

i	y_i	u_i	i	y_i	u_i
1	0.1957	4.0000	7	0.0456	0.1250
2	0.1947	2.0000	8	0.0342	0.1000
3	0.1735	1.0000	9	0.0323	0.0833
4	0.1600	0.5000	10	0.0235	0.0714
5	0.0844	0.2500	11	0.0246	0.0625
6	0.0627	0.1670			

$x^0 = (0.25, 0.39, 0.415, 0.39)^T$.

(8) Broun and Dennis 函数，$n = 4$，$m \geqslant n$，

$$f_i(x) = (x_1 + t_i x_2 - \exp[t_i])^2 + (x_3 + x_4 \sin t_i - \cos t_i)^2,$$

其中 $t_i = i/5$，$x^0 = (25, 5, -5, 1)^T$.

(9) Penalty 函数，$m = 2n$，

$$f_1(x) = x_1 - 0.2,$$

$$f_i(x) = a^{1/2}\left(\exp\left[\frac{x_i}{10}\right] + \exp\left[\frac{x_{i-1}}{10}\right] - y_i\right), \quad 2 \leqslant i \leqslant n,$$

$$f_i(x) = a^{1/2}\left(\exp\left[\frac{x_{i-n+1}}{10}\right] - \exp\left[\frac{-1}{10}\right]\right), \quad n < i < m = 2n,$$

$$f_{2n}(x) = \sum_{j=1}^{n}(n - j + 1)x_j^2 - 1,$$

其中

$$a = 10^{-5}, \quad y_i = \exp\left[\frac{i}{10}\right] + \exp\left[\frac{i-1}{10}\right],$$

$$x^0 = \left(\frac{1}{2}, \cdots, \frac{1}{2}\right)^T.$$

(10) 离散边值函数，$n = m$，

$$f_i(x) = 2x_i - x_{i-1} - x_{i+1} + \frac{h^2}{2}(x_i + t_i + 1)^3$$

其中

$$h = \frac{1}{n+1}, \quad t_i = ih, \quad x_0 = x_{n+1} = 0, \quad x^0 = (\xi_j),$$

其中

$$\xi_j = t_j(t_j - 1).$$

试验是对给定的基本初值 x^0 及 $10x^0$, $100x^0$ 分别计算. 共计算 30 个题,计算时取 $Eps1 = Eps2 = 1.0E-6$, $Eps3 = 1.0E-8$, $ITM = 5000$. 计算结果见表 2.

表 2

问题号	n	m	初值	KEY	$INFO$	极小值 $\|F\|_2^2$
1	10	15	x^0	3	1	$0.50000000E+1$
			$10x^0$	2	1	$0.50000007E+1$
			$100x^0$	2	1	$0.50000002E+1$
2	10	15	x^0	2	1	$0.33870969E+1$
			$10x^0$	2	1	$0.33870970E+1$
			$100x^0$	3	1	$0.33871128E+1$
3	10	15	x^0	2	1	$0.48888890E+1$
			$10x^0$	3	1	$0.48888890E+1$
			$100x^0$	3	1	$0.48889019E+1$
4	2	2	x^0	1	1	$0.99882876E-6$
			$10x^0$	1	1	$0.99889318E-6$
			$100x^0$	1	1	$0.99793192E-6$
5	3	3	x^0	1	1	$0.99729002E-6$
			$10x^0$	1	1	$0.99541890E-6$
			$100x^0$	1	1	$0.99354498E-6$
6	4	6	x^0	1	1	$0.99793431E-6$
			$10x^0$	1	1	$0.99836789E-6$
			$100x^0$	2	0	$0.28755292E+1$
7	4	11	x^0	2	1	$0.94849960E-2$
			$10x^0$	2	1	$0.96563197E-2$
			$100x^0$	2	1	$0.96973544E-2$
8	4	20	x^0	2	1	$0.85822222E-2$
			$10x^0$	2	1	$0.85822232E-2$
			$100x^0$	-1	0	$0.11429407E+16$
9	4	8	x^0	2	1	$0.95001195E-5$
	10	20	$10x^0$	2	1	$0.29421498E-3$
	4	8	$100x^0$	2	1	$0.94972377E-5$
10	10	10	x^0	1	1	$0.99929511E-6$
			$10x^0$	1	1	$0.99988921E-6$
			$100x^0$	1	1	$0.99815143E-6$

注 2. 表 2 中 KEY 表示返回码,是计算结束时的标志, $KEY = -1$ 表示迭代次数超过 ITM, $KEY = 0$ 表示 $h \leqslant Eps4$, $KEY = 1$ 表示 $\|g(x)\| = \|F\|_2^2 \leqslant Eps1$, $KEY = 2$ 表示 $\|\nabla g\| = \|\varphi\| \leqslant Eps2$, $KEY = 3$ 表示 $\|x^{k+1} - x^k\| \leqslant Eps3$, INFO 表示结束时与正确结果是否一致, 1 表示成功, 0 表示失败.

数值试验结果表明非线性 RK 方法求解非线性最小二乘问题成功率较高,方法是有效的. 方法对初始近似 x^0 的选择无特别限制, 从试验中表明, 只有很少情况才失败,故对使用者计算时 x^0 可任意给出. 非线性 RK 方法缺点是计算步数比梯形法多些(一倍以上),当然如果步长控制得当可以减少计算步数.

参 考 文 献

[1] 侍乐媛，求解非线性方程组的连续极小化方法，计算数学，9：4(1987)，438—445.
[2] 王德人，非线性方程组解法与最优化方法，人民教育出版社，1979.
[3] 席少霖，赵风治，最优化计算方法，上海科技出版社，1983.
[4] J. D. Lambert, Nonlinear methods for stiff systems of ordinary differential equations, in conference on the numerical solution of differential equations, springer-Verlag, 1974, 75—88.
[5] J. J. More, R. S. Garbow, K. E. Hillstrom, Testing Unconstrained Optimization Software, ACM Trans. Math. Software, 7: 1(1981), 17—41.