сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

P11-80-669

Купенова Т.Н.

ПРОГРАММЫ ГЛАДКОЙ АППРОКСИМАЦИИ ДАННЫХ

1980

Во многих экспериментах измеряемые величины являются гладкими функциями некоторой переменной. Ясно, что измерения проводятся в конечном числе точек некоторого отрезка $[a,b]$, причем с известной погрешностью. Чтобы найти значения функции на всем отрезке, необходимо решать задачу ее интерполяции и сглаживания. При этом функция восстанавливается лишь приближенно.

В настоящей работе предложены три программы для аппроксимации данных. В них использован метод, предложенный в /1/. Этот метод решает задачу интерполяции и сглаживания данных на основе выбора самой гладкой аналитической кривой, аппроксимирующей экспериментальные данные. Он дает хорошую аппроксимацию не только функции, но и ее производных первого и более высокого порядка.

Программы написаны на языке фортран-IV. Имеются модификации этих программ, которые можно непосредственно применять на ЭВМ CDC-6500 /обычная точность/, и на ЭВМ серии ЕС и IBM /двойная точность/.

Программа SMAP дает возможность производить интерполяцию и сглаживание действительной физики, заданной на отрезке, и приближенно находить ее производные.

Программа SMAPC делает то же самое для комплексной функции, заданной на отрезке действительной оси.

Программа SPLIN производит сплайн-аппроксимацию порядка $2k-1$ /2/, и является частным случаем предлагаемого в /1/ метода.

А. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ МЕТОДА

1. Интерполяция

Задачу интерполяции можно сформулировать следующим образом: Известны значения функции $F(x)$ в N точках $x_1, x_2, \ldots, x_N$ на отрезке $[a,b]$. Требуется найти значения функции в точках $x \neq x_j$; $j = 1, \ldots, N$. В более общем случае требуется найти и значения производных $F^{(n)}(x)$. Предложенный метод состоит в том, что аппроксимирующая функция выбирается как самая гладкая, проходящая через все заданные точки. Чтобы это сделать, вводят критерий гладкости следующим образом: пусть аналитическая функция $F(x)$ определена на отрезке $[a,b]$, так что $|F(x)|<\infty$; $|F^{(n)}(x)|<\infty$, $x\in[a,b]$. Можно сконструировать меру $I(F)$, в которую включены все производные $F^{(n)}(x)$

$$I(F) = \sum_{n=0}^{\infty} |B_n| \int_a^b |F^{(n)}(x)|^2 dx \qquad /1/$$

и требовать, чтобы $I(F) = \min$. /2/

В частном случае, когда $B_k = 1$; $B_j = 0$, $j \neq k$, получается сплайн порядка $2k-1$. Коэффициенты B_n выбирают таким образом, чтобы ряд /1/ был сходящимся.

Тогда задачу интерполяции можно сформулировать так:

а/ построить ряд $Z(x) = \sum_{k=1}^{\infty} A_k\phi_k(x)$, такой, что

б/ $Z(x_i) = F(x_i)$,

в/ $I(z) = \min$,

где $\phi_k(x)$ – полная система линейно-независимых функций. Удобно выбирать $\phi_k(x)$ ортогональными в следующем смысле:

$$I(\phi_k, \phi_\ell) = \delta_{k\ell}\, I(\phi_k), \qquad /3/$$

где

$$I(f,h) = \sum_{n=0}^{\infty} |B_n| \int_a^b f^{(n)*}(x)\, h^{(n)}(x)\, dx,$$

$$I(f,f) = I(f). \qquad /4/$$

Можно доказать, что эта задача имеет одно и только одно решение:

$$Z(x) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j R(x, x_j), \qquad /5/$$

где $R(x,y) = \sum_{k=1}^{\infty} \phi_k(x)\phi_k^*(y)/I(\phi_k)$, /6/

а константы λ_j определяются как решения линейной системы уравнения

$$Z(x_i) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j R(x_i, x_j) = F(x_i). \qquad /7/$$

Для $I(z)$ получается

$$I(z) = \sum_{i,j=1}^{N} \lambda_i \lambda_j^* R(x_j, x_i). \qquad /8/$$

Можно показать, что ошибка $|t(x)|^2 = |Z(x) - F(x)|^2$ ограничена сверху. Эта граница убывает с ростом N и является произведением двух множителей. Один из них $I(F)$, а другой, η, зависит только от значений x_i и ограничен сверху величиной, убывающей экспоненциально с ростом N. Такая граница существует и для производных:

$$|t(x)|^2 \leq I(F)\,\eta(x) \qquad /9/$$

$$|t^{(n)}(x)|^2 = |Z^{(n)}(x) - F^{(n)}(x)| \leq I(F)\,\eta_n(x). \qquad /10/$$

В случае, когда $B_n = \dfrac{D^{2n}}{(\alpha n)!}$ и функция задана в N равноудаленных точках,

$$\eta \approx \sin^2(Nx_0)\, O(1) \exp(-(ND/2)^{2/\alpha}) \qquad /11/$$

$$\eta_n = (N/2+1)^{2n}\, O(1) \exp(-(ND/2)^{2/\alpha}). \qquad /12/$$

2. СГЛАЖИВАНИЕ

Значения $F(x_i)$, $i = 1,\dots, N$ измеряются с некоторой погрешностью. Пусть функция, описывающая изучаемый процесс, является гладкой. В этом случае естественно сделать попытку сгладить экспериментальные данные и тем самым снизить уровень шумов и извлечь больше информации. При этом надо позаботиться о том, чтобы функция была гладкой на всем отрезке и не имела резких осцилляций в промежутках между соседними измерениями.

Задача сглаживания состоит в нахождении такой функции $Z(x)$, которая должна проходить вблизи каждой заданной точки и в то же время должна быть как можно более гладкой. Эти условия противоположны. Их можно объединить в одно:

$$\sum_{j=1}^{N} |Z(x_j) - F(x_j)|^2 w_j + w_0 I(z) = \min, \qquad /13/$$

где $F(x_j)$, $j = 1,\dots, N$ – экспериментальные данные, а $Z(x)$ есть искомая функция.

Решение этой проблемы:

$$Z(x) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j R(x, x_j), \qquad /14/$$

где константы λ_j определяются из условий

$$\sum_{j=1}^{N} \lambda_j \left[R(x_i, x_j) + w_0 / w_j \, \delta_j^i \right] = F(x_i). \qquad /15/$$

Существует некоторый произвол в выборе w_0 и w_j, $j = 1,\dots,N$. Обычно выбирают $w_j = |\Delta Z_j|^{-2}$, w_0 - параметр сглаживания. Если w_0 очень мало, то в $Z(x)$ могут появится осцилляции из-за экспериментального шума в $F(x_i)$, а если w_0 слишком велико, получается очень гладкая кривая, но $Z(x_i)$ удаляются от $F(x_i)$.

Б. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА

В программах SMAP, SMAPC, SPLIN реализован алгоритм гладкой аппроксимации для случая, когда $|F(\infty)| = 0$, $|F^{(n)}(\infty)| = 0$. Полный набор функций $\phi_k(x)$ задается как

$$\phi_k(x) = e^{ikx} \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \qquad /16/$$

Этот набор ортогонален по отношению к $I(g, h)$.

В зависимости от выбора коэффициентов B_n реализованы три модификации алгоритма.

1. Программа SMAP

Программа SMAP позволяет делать интерполяцию и сглаживание действительной функции, заданной на отрезке, а также находить приближенно ее производные. В этом случае

$$B_n = \frac{D^{2n}}{(2n)!}, \qquad /17/$$

$$R(x, y) = 1/2D \, \mathrm{ch}(\pi(x-y)/2D), \qquad /18/$$

$$Z(x) = \sum_{k=1}^{N} \lambda_k R(x, x_k), \qquad /19/$$

λ_j определяются из условия

$$\sum_{j=1}^{N} \lambda_j \left[R(x_i, x_j) + w_0 \, |\Delta z_j|^2 \, \delta_j^i \right] = F(x_i). \qquad /20/$$

Программа SMAP работает в комплексе с другими подпрограммами. Блок-схема этого комплекса показана на р и с. 1

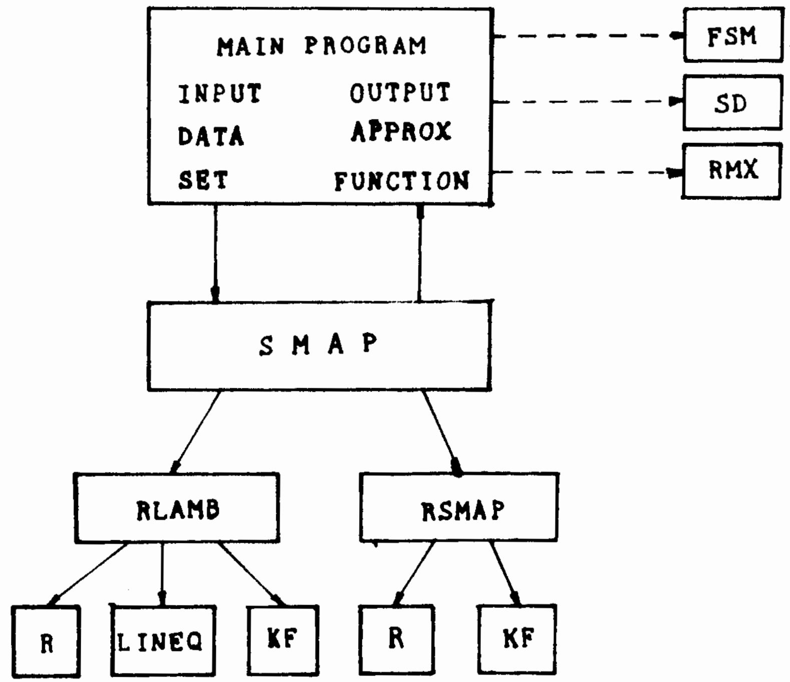

Рис. 1

RLAMB	- осуществляет вычисление коэффициентов λ_j, $j = 1, 2, \dots, N$.
RSMAP	- вычисляет значения аппроксимирующей функции и ее производных.
R	- вычисляет значения функции $R(x,y)$.
KF	- находит коэффициенты, необходимые при вычислении производных аппроксимирующей функции.
LINEQ1	- стандартная программа для решения линейной системы уравнения.
FSM	- вычисляет норму $I(Z)$.
SD	- вычисляет среднеквадратичное отклонение двух функций.

RMX - вычисляет максимальное отклонение между двумя функциями.

Последние три модуля можно подключать при желании пользователя.

Обращение:

CALL SMAP (F,OM,X,N,SMF,SDER,Z,NZ,ND,OMO,SLAM,D2,A,NDIM).

Значения параметров:

- X - массив значений аргумента заданной функции |REAL| с размерностью N.
- F - массив значений заданной функции |REAL| с размерностью N.
- OM - массив значений квадратов модуля экспериментальной ошибки |REAL| с размерностью N.
- N - число точек, в которых задана функция |INTEGER|.
- SMF - массив значений аппроксимирующей функции |REAL| с размерностью NZ.
- SDER - массив значений производных аппроксимирующей функции |REAL| с размерностью NDIM×NZ. В SDER(K,J) записывается k-тая производная в точке Z(J).
- Z - массив значений аргумента аппроксимирующей функции |REAL| с размерностью NZ.
- NZ - число точек, в которых вычисляется аппроксимирующая функция |INTEGER|.
- ND - число производных, которые вычисляются в программе |INTEGER|:
  - ND < 0 - вычисляются только λ_j, $j = 1, \ldots, N$.
  - ND = 0 - вычисляется SMF.
  - ND = k > 0 - вычисляется SMF и производные от 1 до k-того порядка.
- OMO - параметр сглаживания |REAL|
- SLAM - массив значений коэффициентов λ_j |REAL| с размерностью N.
- D2 - D2 = 1/2D |REAL|.
- A - рабочий массив |REAL| с размерностью M1×M2, где M1 ≥ N, M2 ≥ N+1.
- NDIM - первая размерность массива SDER, задаваемая в вызывающей программе.

Параметры F, X, OM, N, OMO, D2, ND, Z, NZ, NDIM задаются пользователем.

Пользователь может обратиться к следующим подпрограммам:

FUNCTION FSM (SLAM,X,N,D2),

FUNCTION SD (F,G,M),

FUNCTION RMX (F,G,M).

которые вычисляют соответственно I(Z), $\sqrt{\left(\sum_{i=1}^{M} |F_i - G_i|^2 / N\right)}$ $\max_{i=1,\ldots,M} |F_i - G_i|$.

- F, G - массивы значений двух функций |REAL| с размерностью M.
- M - число точек, в которых заданы эти функции.

2. Программа SMAPC

Эта программа является версией SMAP для комплексной функции. Блок-схема SMAPC показана на рис. 2. CLAMB, CSMAP, R, KF, CSM, CD, CMX имеют те же значения, что и RLAMB, RSMAP, R, KF, FSM, SD, RMX в программе SMAP. CMLIN решает систему уравнений с комплексными коэффициентами.

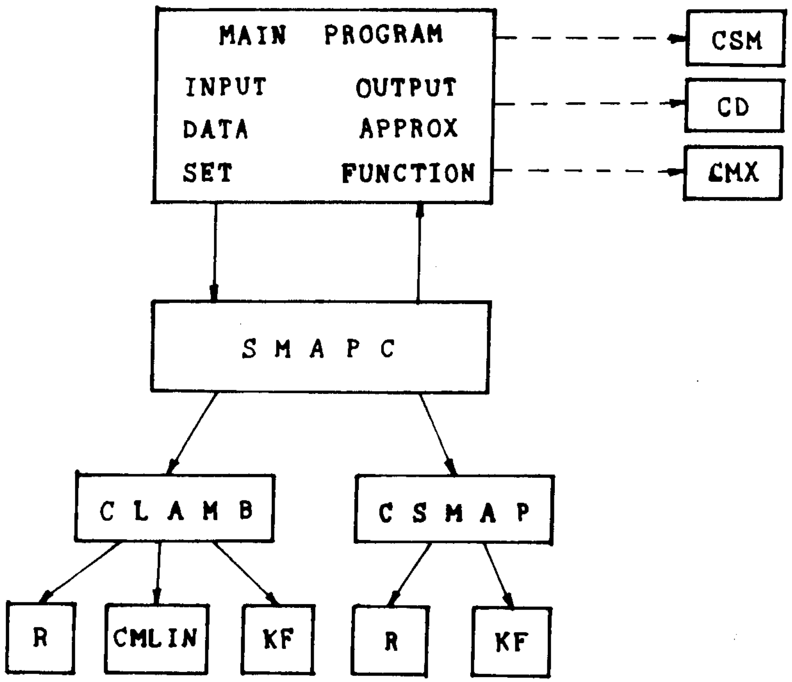

Рис. 2

Обращение:

CALL SMAPC(F,OM,X,N,SMF,SDER,Z,NZ,ND,OMO,SLAM,D2,A,NDIM).

Значения параметров те же самые, что и в SMAP, со следующими отличиями:

Массивы F, SMF, SDER, SLAM, A имеют тип COMPLEX. Пользователь может обратиться к подпрограммам

FUNCTION CSM (SLAM, X, N, D2),

FUNCTION CD(F,G,M),

FUNCTION CMX (F,G,M),

которые вычисляют соответственно $I(Z)$, $\sqrt{\frac{\sum_{i=1}^{M} |F_i - G_i|^2}{M}}$,

$$\max_{i=1,\dots,M} |F_i - G_i|.$$

3. Программа SPLIN

В этом случае коэффициенты B_n выбираются таким образом:

$B_k = 1$, $B_n = 0$, $n \neq k$

$$I(z) = \int_a^b |F^{(k)}(x)|^2 dx$$

$$R(x,y) = \frac{(-1)^k}{2(2k-1)!} |x-y|^{2k-1}.$$

Это сплайн порядка $2k-1$.

Обращение:

CALL SPLIN(F,X,OM,N,OMO,ND,FSM,SDER,Z,NZ,SLAM,A,NDIM)

Параметры имеют те же значения, что и в программе SMAP.
NM - значение NM должно быть NM=N+(NS+1)/2, где
NS - порядок сплайна. Для кубического сплайна, например, NS=3, NM=N+2.

4. Примеры применения и результаты численных расчетов

Действие программы SMAPC проиллюстрируем на примере интерполяции и нахождения производных однополюсной функции $F(x) = \frac{A}{x - iB}$, где $A=B=\frac{1}{4}$, заданной в N равноудаленных точках на отрезке $[-1, 1]$, а действие программ SMAP и SPLIN - на примере интерполяции и нахождения производных $G(x) = \mathrm{Im}\, F(x) = \frac{1}{1+16x^2}$. В программах SMAP и SMAPC выбираем $D = \frac{1}{2,2}$. Программу SPLIN применяем в случае кубического сплайна пятого порядка. Для

сравнения функцию $G(x)$ интерполируем при помощи другой программы кубического сплайна [3] и получаем те самые результаты. Интерполяцию вычисляем в $M=8.N$ точках. Максимальное отклонение функции, интерполирующей от заданной, показано в табл. 1 и 2. Видно, что с ростом N точность решения возрастает как для функции, так и для ее производных.

Таблица 1

Ошибка интерполяции $G(x) = \mathrm{Im}\, F(x) = \frac{1}{1+16x^2}$

	B_n \ N	11	21	31	41	51
$\max\|G-Z\|$	$\frac{D^{2n}}{(2n)!}$	$0{,}131.10^{-1}$	$0{,}281.10^{-3}$	$0{,}150.10^{-4}$	$0{,}580.10^{-6}$	$0{,}152.10^{-6}$
	1 n=3; 0 n≠3	$0{,}478.10^{-2}$	$0{,}165.10^{-2}$	$0{,}355.10^{-3}$	$0{,}111.10^{-3}$	$0{,}444.10^{-4}$
	1 n=5; 0 n≠5	$0{,}107.10^{-1}$	$0{,}326.10^{-3}$	$0{,}491.10^{-4}$	$0{,}576.10^{-5}$	$0{,}211.10^{-5}$
$\max\|G^{(1)}-Z^{(1)}\|$	$\frac{D^{2n}}{(2n)!}$	$0{,}229$	$0{,}907.10^{-2}$	$0{,}143.10^{-2}$	$0{,}728.10^{-4}$	$0{,}301.10^{-4}$
	1 n=3; 0 n≠3	$0{,}937.10^{-1}$	$0{,}532.10^{-1}$	$0{,}165.10^{-1}$	$0{,}661.10^{-2}$	$0{,}353.10^{-2}$
	1 n=5; 0 n≠5	$0{,}202$	$0{,}925.10^{-2}$	$0{,}228.10^{-2}$	$0{,}518.10^{-3}$	$0{,}327.10^{-3}$
$\max\|G^{(2)}-Z^{(2)}\|$	$\frac{D^{2n}}{(2n)!}$	$0{,}432.10^{1}$	$0{,}284$	$0{,}831.10^{-1}$	$0{,}534.10^{-2}$	$0{,}379.10^{-2}$
	1 n=3; 0 n≠3	$0{,}302.10^{1}$	$0{,}426.10^{1}$	$0{,}229.10^{1}$	$0{,}131.10^{1}$	$0{,}835$
	1 n=5; 0 n≠5	$0{,}402.10^{1}$	$0{,}359$	$0{,}123$	$0{,}384.10^{-1}$	$0{,}304.10^{-1}$
$\max\|G^{(3)}-Z^{(3)}\|$	$\frac{D^{2n}}{(2n)!}$	$0{,}106.10^{3}$	$0{,}985.10^{1}$	$0{,}204.10^{1}$	$0{,}162$	$0{,}265$
	1 n=5; 0 n≠5	$0{,}955.10^{2}$	$0{,}143.10^{2}$	$0{,}835.10^{1}$	$0{,}362.10^{1}$	$0{,}175.10^{1}$
$\max\|G^{(4)}-Z^{(4)}\|$	$\frac{D^{2n}}{(2n)!}$	$0{,}298.10^{4}$	$0{,}368.10^{3}$	$0{,}325.10^{2}$	$0{,}437.10^{1}$	$0{,}113.10^{2}$
	1 n=5; 0 n≠5	$0{,}224.10^{4}$	$0{,}140.10^{4}$	$0{,}112.10^{4}$	$0{,}668.10^{3}$	$0{,}421.10^{3}$
$\max\|G^{(5)}-Z^{(5)}\|$	$\frac{D^{2n}}{(2n)!}$	$0{,}747.10^{5}$	$0{,}155.10^{5}$	$0{,}157.10^{4}$	$0{,}342.10^{3}$	$0{,}249.10^{3}$

Таблица 2

Ошибка интерполяции $F(x) - \dfrac{0{,}25}{x-0{,}25i}$

N	11	21	31	41	51
$\max\lvert F-Z\rvert$	$0{,}405.10^{-1}$	$0{,}868.10^{-3}$	$0{,}199.10^{-4}$	$0{,}419.10^{-5}$	$0{,}328.10^{-6}$
$\max\lvert F^{(1)}-Z^{(1)}\rvert$	$0{,}702$	$0{,}280.10^{-1}$	$0{,}216.10^{-2}$	$0{,}658.10^{-3}$	$0{,}687.10^{-4}$
$\max\lvert F^{(2)}-Z^{(2)}\rvert$	$0{,}562.10^{1}$	$0{,}440$	$0{,}749.10^{-1}$	$0{,}316.10^{-1}$	$0{,}484.10^{-2}$
$\max\lvert F^{(3)}-Z^{(3)}\rvert$	$0{,}392.10^{2}$	$0{,}501.10^{1}$	$0{,}915$	$0{,}542$	$0{,}124$
$\max\lvert F^{(4)}-Z^{(4)}\rvert$	$0{,}180.10^{3}$	$0{,}409.10^{2}$	$0{,}440.10^{1}$	$0{,}392.10^{1}$	$0{,}163.10^{1}$
$\max\lvert F^{(5)}-Z^{(5)}\rvert$	$0{,}941.10^{3}$	$0{,}300.10^{3}$	$0{,}384.10^{2}$	$0{,}129.10^{2}$	$0{,}104.10^{2}$

Автор выражает глубокую благодарность В.Ц.Банчеву и Г.Е.Георгиеву за полезные обсуждения.

ЛИТЕРАТУРА

1. Talmi A., Gilat G., J. of Comp.Physics. 1977. 23. p.93-123.
2. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения, "Мир", М., 1972.
3. Reinsch C.H. Numerical Mathematics, 1967, No 10, p. 177-183.

Рукопись поступила в издательский отдел
16 октября 1980 года.