

**сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна**

P11-85-344

Т.Н.Купенова

**ПРОГРАММА ГЛАДКОЙ АППРОКСИМАЦИИ
ФУНКЦИИ ДВУХ ПЕРЕМЕННЫХ**

1985

Во многих экспериментах измеряемые величины являются гладкими функциями некоторых переменных. Измерения проводятся в конечном числе точек, причем с некоторой погрешностью. Чтобы найти значения функции в точках, не совпадающих с измерениями, необходимо решить задачу ее интерполяции, а чтобы снизить уровень экспериментальных шумов - задачу сглаживания данных.

В настоящей работе предлагается программа (DSMAP) для гладкой аппроксимации функции двух переменных. Использован метод, предложенный в [1]. Этот метод решает задачу интерполяции и сглаживания на основе выбора самой гладкой аналитической функции, аппроксимирующей экспериментальные данные.

Программа DSMAP дает возможность производить интерполяцию и сглаживание действительной функции переменных, заданной в N точках в неравномерной сети в некоторой области $G \subset R^2$. Она написана на языке FORTRAN-IV для ЭВМ серии ЕС и IBM. Есть версии с обычной и двойной точностью. Имеется также версия программы DSMAP на языке BASIC для персонального компьютера.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ И КРАТКОЕ ОПИСАНИЕ МЕТОДА

1.1. Интерполяция

Рассмотрим для простоты одномерный случай. Все результаты можно непосредственно обобщить для пространства двух или более измерений.

Задачу интерполяции сформулируем следующим образом:

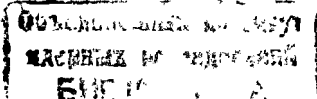
Известны значения функции $F(x)$ в N точках x^1, x^2, \dots, x^N на отрезке $[a, b]$. Требуется найти значения функции в точках $x \neq x^j$, $j = 1, 2, \dots, N$. В более общем случае надо найти и значения производных $F^{(n)}(x)$. Предложенный метод состоит в том, что аппроксимирующая функция выбирается 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 $F^{(n)}(x)$:

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

и требовать, чтобы

$$I(F) = \min. \quad /2/$$

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/ $Z(x^i) = F(x^i)$, $i=1, 2, \dots, N$,

в/ $I(Z) = \min$,

где $\Phi_k(x)$ - полная система линейно-независимых функций. Удобно выбирать $\Phi_k(x)$ ортогональными:

$$I(\Phi_k, \Phi_\ell) = \delta_{k\ell} I(\Phi_k), \quad /3/$$

где

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

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

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

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

где

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

а константы λ_j определяются как решения линейной системы уравнения:

$$Z(x^i) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(x^i, x^j) = F(x^i), \quad i=1, \dots, N. \quad /7/$$

Для $I(Z)$ получаем:

$$I(Z) = \sum_{i,j=1}^N \lambda_i \lambda_j^* R(x^i, x^j). \quad /8/$$

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 .

$$|t(x)|^2 \leq I(F) \eta(x). \quad /9/$$

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

$$\eta = \sin^2(N x_0) O(1) \exp(-(ND/2)^{2/a}). \quad /10/$$

Этот метод можно непосредственно обобщить для функции многих переменных. В случае двух переменных норма $I(F)$ будет иметь вид:

$$I(F) = \sum_{n_1, n_2=0}^{\infty} |B_{n_1 n_2}| \int_G ds \left| \frac{\partial^{n_1+n_2}}{\partial x_1^{n_1} \partial x_2^{n_2}} F(x_1, x_2) \right|^2. \quad /11/$$

В изотропном пространстве:

$$B_{n_1 n_2} = \frac{(n_1+n_2)!}{n_1! n_2!} B_{n_1+n_2}. \quad /12/$$

Все прерывающиеся рассуждения остаются в силе и в двумерном случае.

1.2. Сглаживание

Значения $F(\vec{x}^i)$, $i=1, \dots, N$; $\vec{x}^i = (x_1^i, x_2^i)$ измеряются с некоторой погрешностью. Когда функция, описывающая изучаемый процесс, является гладкой, то 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 во всей области G и не имела резких осцилляций в промежутках между соседними измерениями.

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

$$\sum_{j=1}^N |Z(\vec{x}^j) - F(\vec{x}^j)|^2 \omega_j + \omega_0 I(F) = \min, \quad /13/$$

где $\vec{x}^j = (x_1^j, x_2^j)$, $j=1, \dots, N$; $F(\vec{x}^j)$ - экспериментальные данные, а $Z(\vec{x})$ - искомая функция.

Решения этой проблемы:

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

где константы λ_j определяются из условий:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j [R(\vec{x}^i, x^j) + \omega_0 \delta_j^i / \omega_j] = F(x^i), \quad i=1, \dots, N. \quad /15/$$

Существует некоторый произвол в выборе $\omega_j, j=1, \dots, N$ и ω_0 . Обычно выбирают $\omega_j = |\Delta F_j|^{-2}$, ω_0 - параметр сглаживания. Если ω_0 очень мала, то в $Z(\vec{x})$ могут появиться осцилляции из-за экспериментального шума в $F(\vec{x}^i)$, а если ω_0 слишком велика, получается очень гладкая поверхность, но $Z(\vec{x}^i)$ удаляются от $F(\vec{x}^i)$. Если нет дополнительной информации, ω_0 определяется из условия:

$$\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N |Z(\vec{x}^j) - F(\vec{x}^j)|^2 = 1.$$

2. ПРОГРАММА РЕАЛИЗАЦИИ АЛГОРИТМА

В программе DSMAP реализован метод гладкой аппроксимации для функции двух переменных. При этом полный набор функций $\Phi_{k_1 k_2}$ задается как $\Phi_{k_1 k_2}(x) = \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2)] = \exp[i\vec{k} \cdot \vec{x}]$; $\vec{k} = (k_1, k_2)$; $k_1, k_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Этот набор ортогонален по отношению к $I(g, h)$.

Коэффициенты B_n выбраны следующим образом: $B_n = \frac{D^{2n}}{n!}$; $n = n_1 + n_2$. Тогда для R получается:

$$R(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{4\pi D^2} \exp\left[-\frac{r^2}{4D^2}\right]; \quad r = |\vec{x} - \vec{y}|, \quad /16/$$

а решение дается выражением:

$$Z(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(\vec{x}, \vec{x}^j), \quad /17/$$

где $\lambda_j, j=1, \dots, N$ определяются из условия:

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j [R(\vec{x}^i, \vec{x}^j) + \omega_0 \delta_j^i |\Delta F_j|^2] = F(\vec{x}^i), \quad i=1, \dots, N. \quad /18/$$

DSMAP реализована как подпрограмма-функция.

Обращение:

$$W = \text{DSMAP}(Z)$$

W - значение аппроксимирующей функции (REAL) в точке Z (COMPLEX). Необходимая информация задается пользователем в блоках COMMON.

(F) F(101) - F - массив значений заданной функции (REAL),

(Z) X(101) - X - массив значений аргумента заданной функции (COMPLEX).

(OM) OMO, OM(101) - OMO - параметр сглаживания (REAL)

- OMO=0 - интерполяция

- OMO>0 - сглаживание, OMO - значение параметра сглаживания

- OMO<0 - сглаживание, параметр сглаживания выбирается автоматически программой DSMAP;

- OM - массив значений квадратов экспериментальных ошибок (REAL)

(N) N - N - число точек, в которых задана функция F (INTEGER).

(DD) D - значение D выбирается в зависимости от $\{\vec{x}^i\}$. Оно должно быть больше в случае, когда мало экспериментальных данных, измеренных в редко расположенных точках. Обычно $D \in [0, 5; 1]$ дает хорошие результаты;

(IC) IC - в первом обращении к DSMAP при заданном наборе данных пользователь должен положить IC = 1.

Пример:

IC = 1

DO I = 1, M

W(I) = DSMAP(Z(I))

1 CONTINUE

3. ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

3.1. В качестве примера рассмотрим функцию двух переменных

$$F(\vec{x}) = -\frac{100}{(x_1^2 + x_2^2 + 1)^{3/2}}; \quad \vec{x} = (x_1, x_2).$$

заданную в N точках $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^N$; $\vec{x}^i = (x_1^i, x_2^i)$, расположенных в узлах прямоугольной сетки в области $x_1^i \in [-5, 5]$; $x_2^i \in [-5, 5]$.

3.1.1. Интерполяция

Интерполирующая функция вычисляется в межузельных точках $\vec{z}^i, i = 1, \dots, M$. В качестве оценки погрешности интерполяции используются: максимальное отклонение Z от F :

$$\|Z_i - F_i\|_C = \max_{i=1, M} |Z_i - F_i|; \quad Z_i = Z(\vec{z}^i), \quad F_i = F(\vec{z}^i),$$

максимальная относительная ошибка:

$$\Delta = \max_{i=1, M} |(Z_i - F_i) / F_i|$$

и средне-квадратичное отклонение:

$$D_M(Z) = \left[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (Z_i - F_i)^2 \right]^{1/2}.$$

Результаты вычислений при различных N показаны в табл.1. Видно, что точность интерполяции возрастает с ростом N .

Таблица 1

N	D	$\max_{i=1, M} Z_i - F_i $	$\max_{i=1, M} \left \frac{Z_i - F_i}{F_i} \right \%$	$\left[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (Z_i - F_i)^2 \right]^{1/2}$
9	2,6	$0,108 \cdot 10^{-1}$	$0,144 \cdot 10^1$	$0,660 \cdot 10^{-2}$
16	2,6	$0,872 \cdot 10^{-2}$	$0,116 \cdot 10^1$	$0,443 \cdot 10^{-2}$
25	2,3	$0,129 \cdot 10^{-3}$	$0,182 \cdot 10^{-1}$	$0,597 \cdot 10^{-4}$
36	2,3	$0,908 \cdot 10^{-4}$	$0,139 \cdot 10^{-1}$	$0,430 \cdot 10^{-4}$
49	2,1	$0,355 \cdot 10^{-4}$	$0,483 \cdot 10^{-2}$	$0,150 \cdot 10^{-4}$
64	2,1	$0,239 \cdot 10^{-4}$	$0,333 \cdot 10^{-2}$	$0,102 \cdot 10^{-4}$
81	2,1	$0,140 \cdot 10^{-5}$	$0,188 \cdot 10^{-3}$	$0,397 \cdot 10^{-6}$
100	2,1	$0,977 \cdot 10^{-6}$	$0,132 \cdot 10^{-3}$	$0,265 \cdot 10^{-6}$

3.1.2. Сглаживание

В этом случае с помощью генератора случайных чисел в значения функции F вносим искусственно случайные ошибки δ_i , распределенные по Гауссу, со средне-квадратичным отклонением $\sigma = 0,005 \sim 1\%$, $\sigma = 0,05 \sim 10\%$.

$$F_i \rightarrow F_i^{EXP} = F_i + \delta_i; \quad i=1, \dots, M.$$

Таблица 2

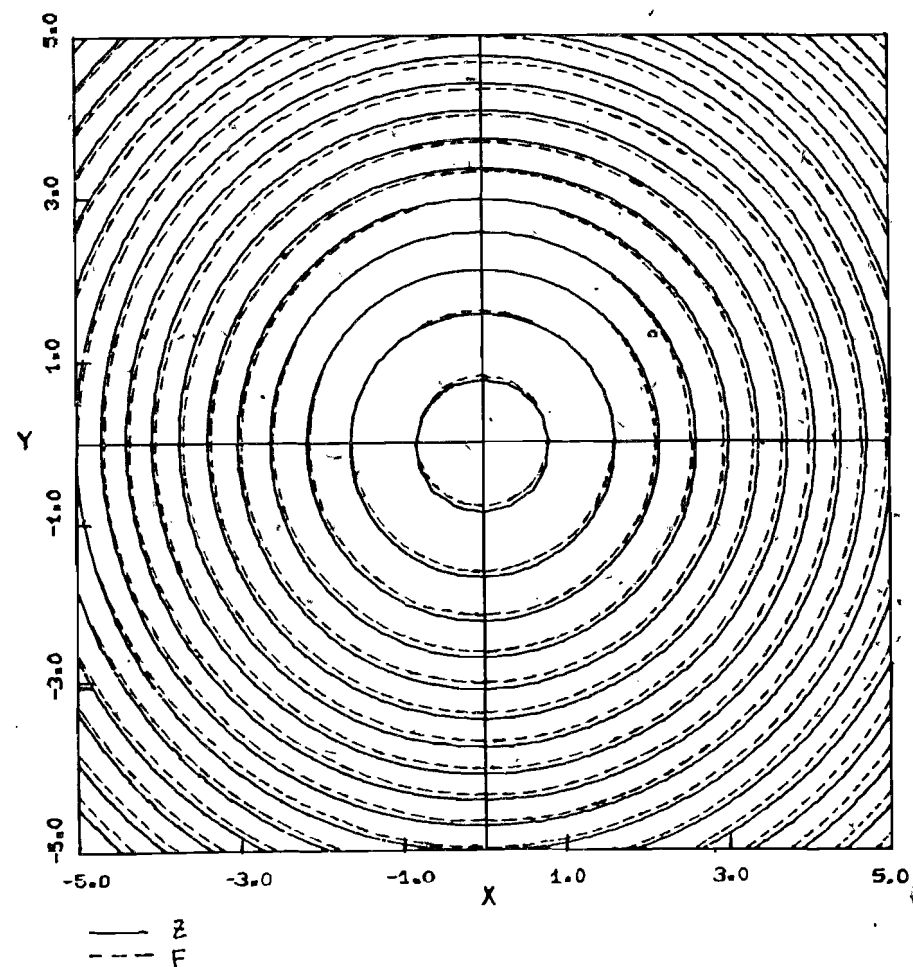
N	ω_0	$\max_{i=1, N} F_i^{EXP} - F_i $	$\max_{i=1, M} Z_i - F_i $	σ	$[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (Z_i - F_i)^2]^{1/2}$
9	4,0	0,01007	0,01550	0,00500	0,00647
16	4,0	0,01007	0,01410	0,00500	0,00571
25	4,0	0,01007	0,01080	0,00500	0,00446
36	4,0	0,01758	0,01400	0,00500	0,00488
49	0,5	0,01758	0,00574	0,00500	0,00308
64	0,5	0,01758	0,00731	0,00500	0,00254
81	4,0	0,01758	0,00785	0,00500	0,00232
100	4,0	0,01758	0,00615	0,00500	0,00224

Таблица 3

N	ω_0	$\max_{i=1, N} F_i^{EXP} - F_i $	$\max_{i=1, M} Z_i - F_i $	σ	$[\frac{1}{M} \sum_{i=1}^M (Z_i - F_i)^2]^{1/2}$
9	1.	0,1007	0,1300	0,0500	0,0719
16	1.	0,1007	0,0593	0,0500	0,0323
25	2.	0,1007	0,0712	0,0500	0,0274
36	2.	0,1758	0,0512	0,0500	0,0280
49	2.	0,1758	0,0307	0,0500	0,0150
64	4.	0,1758	0,0361	0,0500	0,0092
81	4.	0,1758	0,0340	0,0500	0,0104
100	4.	0,1758	0,0458	0,0500	0,0119

Затем вычисляем аппроксимирующую функцию Z в точках $\vec{z}^i, i=1, \dots, M$ /включающих как заданные точки \vec{x}^i , так и дополнительные межузельные точки/. Результаты вычислений для $\sigma = 0,05$ и $\sigma = 0,05$ показаны в табл.2 и 3 соответственно. Видно, что расстояние между Z и F в C - норме значительно меньше расстояния между F^{EXP} и F . Средне-квадратичное отклонение Z от F меньше σ^* .

На рисунке показаны изолинии функции Z /пунктир/ и F /плотные линии/ при $\sigma = 0,05$ и $N = 81$.



3.2. Программа DSMAP для решения реальных физических задач

3.2.1. Эта программа использована и при решении обратной гравиметрической задачи. В результате сглаживания данных по-

вышается точность нахождения контура рудного тела по измерениям гравитационного потенциала на земной поверхности.

3.2.2. Программа DSMAP используется при решении задачи восстановления энергораспределения в активной зоне энергетического ядерного реактора по показаниям фиксированного числа нейтронно-эмиссионных детекторов, с учетом экспериментальных ошибок. Алгоритм устойчив, дает необходимую точность и работает достаточно быстро, выдавая он-лайн-информацию о состоянии зоны.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Численные эксперименты с модельными функциями с искусственно внесенными случайными ошибками, а также использование программы DSMAP при решении реальных физических задач показывает, что алгоритм гладкой аппроксимации данных работает быстро и надежно. Он дает высокую точность при интерполяции и снижает в несколько раз уровень экспериментальных шумов при сглаживании. По сравнению с полиномиальной аппроксимацией показывает более хорошие результаты, так как не допускает возникновения резких осцилляций между двумя соседними измерениями. Рассмотренный алгоритм найдет широкое применение во многих областях физики и техники, там, где экспериментальные данные описываются аналитическими функциями.

ЛИТЕРАТУРА

1. Talml A., Gilat G. J. of Comp. Physics, 1977, 23, p.93-123.

Рукопись поступила в издательский отдел
12 мая 1985 года

Купенова Т.И.

P11-85-344

Программа гладкой аппроксимации
функции двух переменных

Предложен пакет программ на языке FORTRAN-IV для интерполяции и сглаживания функции двух переменных. Использован метод гладкой аппроксимации, основанный на выборе самой гладкой аналитической функции, аппроксимирующей данные. Численные эксперименты показывают, что получается очень хорошее приближение.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1985.

Перевод автора

Kupenova T.N.

P11-85-344

Subroutines for Smooth Approximation
of Two Dimensional Functions

A set of Fortran subroutines for data interpolation and smoothing in two dimensional isotropic space is proposed. The method of approximation is based on selecting the smoothest analytical function approximating the data points. Numerical experiments show that the algorithm is computationally efficient and gives a very good fit to the data.

The investigation has been performed at the Laboratory of Computing Techniques and Automation, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1985