

**СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
ДУБНА**

P5-86-505

Т.Н.Купенова

**ПРОГРАММА ГЛАДКОЙ АППРОКСИМАЦИИ
ФУНКЦИИ ТРЕХ ПЕРЕМЕННЫХ**

1986

Многие величины, измеряемые в эксперименте, являются аналитическими 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 TSMAP для гладкой аппроксимации функции трех переменных. Использован метод, предложенный в [1]. Этот метод решает задачу интерполяции и сглаживания на основе выбора самой гладкой аналитической функции, аппроксимирующей экспериментальные данные. Программа TSMAP дает возможность производить интерполяцию и сглаживание действительной функции трех переменных, заданной в N точках в неравномерной сети в некоторой области $G \subset R^3$ и приближенно находить ее производные. Она написана на языке FORTRAN для ЭВМ серии IBM и ЕС с двойной точностью.

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.

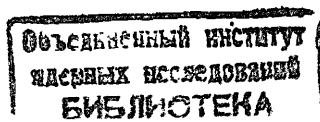
Задачу интерполяции сформулируем следующим образом:

Известны значения функции $F(x)$ в 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 $F^{(n)}(x)$:

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

/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/ $I(Z) = \min,$

в/ $Z(x^j) = F(x^j)$, $j = 1, 2, \dots, N$,
где $\Phi_k(x)$ - полная система линейно-независимых функций. Удобно выбирать $\Phi_k(x)$ ортогональными:

$$I(\Phi_k, \Phi_l) = \delta_{kl} I(\Phi_k), \quad /3/$$

где

$$I(f, h) = \sum_{n=0}^{\infty} |B_n| \int_a^b f^{(n)*}(x) f^{(n)}(x) dx, \quad /4/$$

$$I(f, f) = I(f). \quad /5/$$

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

$$Z(x) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(x, x^j), \quad /6/$$

где

$$R(x, y) = \sum_{k=1}^{\infty} \Phi_k(x) \Phi_k^*(y) / I(\Phi_k), \quad /7/$$

а константы λ_j определяются как решения линейной системы уравнения:

$$Z(x^\ell) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(x^\ell, x^j) = F(x^\ell), \quad \ell = 1, 2, \dots, N. \quad /8/$$

Для $I(Z)$ получаем

$$I(Z) = \sum_{\ell, j=1}^N \lambda_\ell \lambda_j^* R(x^j, x^\ell). \quad /9/$$

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^j и ограничен сверху величиной, убывающей

экспоненциально с ростом N . Такая граница существует и для производных:

$$|t(x)|^2 \leq I(F) \eta(x), \quad /10/$$

$$|t^{(n)}(x)|^2 = |Z^{(n)}(x) - F^{(n)}(x)|^2 \leq I(F) \eta_n(x). \quad /11/$$

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

$$\eta \approx \sin^2(Nx) O(1) \exp(-ND/2)^{2/a}, \quad /12/$$

$$\eta_n \approx (N/2 + 1)^{2n} O(1) \exp(-ND/2)^{2/a}. \quad /13/$$

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

$$I(F) = \sum_{n_1 n_2 n_3=0}^{\infty} |B_{n_1 n_2 n_3}| \int_G dv \left| \frac{\partial^{n_1+n_2+n_3}}{\partial x_1^{n_1} \partial x_2^{n_2} \partial x_3^{n_3}} F(x_1, x_2, x_3) \right|^2 \quad /14/$$

В изостроном пространстве:

$$B_{n_1 n_2 n_3} = \frac{(n_1 + n_2 + n_3)}{n_1! n_2! n_3!} B_{n_1 + n_2 + n_3} \quad /15/$$

Все предыдущие рассуждения остаются в силе и в трехмерном случае. Решение задачи будет иметь вид

$$Z(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(\vec{x}, \vec{x}^j), \quad \vec{x} = (x_1, x_2, x_3); \quad \vec{x}^j = (x_1^j, x_2^j, x_3^j), \quad /16/$$

где

$$R(\vec{x}, \vec{y}) = \sum_{k=1}^{\infty} \Phi_k(\vec{x}) \Phi_k^*(\vec{y}) / I(\Phi_k), \quad \vec{y} = (y_1, y_2, y_3). \quad /17/$$

а константы λ_j определяются как решения линейной системы уравнения:

$$Z(\vec{x}^\ell) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(\vec{x}^\ell, \vec{x}^j) = F(\vec{x}^\ell), \quad \ell = 1, 2, \dots, N. \quad /18/$$

1.2. Сглаживание

Значения $F(\vec{x}^j)$, $j = 1, 2, \dots, N$; $\vec{x}^j = (x_1^j, x_2^j, x_3^j)$ 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:

$$\sum_{j=1}^N |Z(\vec{x}^j) - F(\vec{x}^j)|^2 \omega_j + \omega_0 I(F) = \min, \quad /19/$$

где $\vec{x}^j = (x_1^j, x_2^j, x_3^j)$, $j = 1, 2, \dots, N$; $F(\vec{x}^j)$ - экспериментальные данные, а $Z(\vec{x})$ - искомая функция.

Решение этой проблемы:

$$Z(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(\vec{x}, \vec{x}^j), \quad /20/$$

где $R(\vec{x}, \vec{x}^j)$ определяется из /17/, а константы λ_j из условий

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j [R(\vec{x}^\ell, \vec{x}^j) + \omega_0 \delta^{\ell j} / \omega_j] = F(\vec{x}^\ell), \quad \ell = 1, \dots, N. \quad /21/$$

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

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

2. ПРОГРАММНАЯ РЕАЛИЗАЦИЯ АЛГОРИТМА

В программе TSMAP реализован метод гладкой аппроксимации для функции трех переменных. При этом полный набор ортогональных функций $\Phi_{k_1 k_2 k_3}$ задается как $\Phi_{k_1 k_2 k_3}(\vec{x}) = \exp[i(k_1 x_1 + k_2 x_2 + k_3 x_3)] = \exp(i\vec{k} \cdot \vec{x})$, $\vec{k} = (k_1, k_2, k_3)$; $k_1, k_2, k_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

Коэффициенты B_n выбраны следующим образом: $B_n = \frac{D^{2n}}{n!}$; $n = n_1 + n_2 + n_3$. Тогда для R получаем

$$R(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{8\pi D^3} \exp\left[-\frac{r^2}{4D^2}\right]; \quad r = |\vec{x} - \vec{y}|, \quad /22/$$

а решение дается выражением

$$Z(\vec{x}) = \sum_{j=1}^N \lambda_j R(\vec{x}, \vec{x}^j), \quad /23/$$

где λ_j , $j = 1, \dots, N$ определяются из

$$\sum_{j=1}^N \lambda_j [R(\vec{x}^\ell, \vec{x}^j) + \omega_0 \delta^{\ell j} |\Delta F_j|^2] = F(\vec{x}^\ell), \quad \ell = 1, \dots, N. \quad /24/$$

TSMAP реализована как подпрограмма-функция.

Обращение:

W = TSMAP(WX, WY, WZ, KX, KY, KZ),

W - значение аппроксимирующей функции (REAL*8)

$$W = \frac{\partial}{\partial x_1 \partial x_2 \partial x_3} (KX + KY + KZ) Z(x_1, x_2, x_3) \Big|_{\substack{x_1 = WX \\ x_2 = WY \\ x_3 = WZ}}$$

WX, WY, WZ - REAL*8,

KX, KY, KZ - INTEGER.

Необходимая информация задается пользователем в COMMON блоках. /Размер COMMON блоков тоже задается пользователем/:

COMMON/FEXP/F(N)/XEXP/X(N)/YEXP/Y(N)/ZEXP/Z(N)

/OM/OM(N)/DD/OMO, D/N/N, IC,

где F(N) - массив значений заданной функции (REAL*8).

X(N), Y(N), Z(N) - массивы значений координат тех точек, в которых задана функция F(REAL*8);

OM(N) - массив значений квадратов экспериментальных ошибок (REAL*8);

OMO - параметр сглаживания (REAL*8);

- OMO = 0 - интерполяция;

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

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

D - выбирается программой;

N - число точек, в которых задана функция;

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

Пример:

IC = 1

DO I I = 1, M

Таблица 1

N	M	$D_M(Z)$	$\max_{\ell=1, M} Z_\ell - F_\ell $
27	125	$0,674 \cdot 10^{-1}$	0,366
64	343	$0,524 \cdot 10^{-1}$	0,364
125	729	$0,267 \cdot 10^{-1}$	0,281
216	1331	$0,840 \cdot 10^{-2}$	0,174

Таблица 2

N	M	$D_M(Z)$	$\max_{\ell=1, M} Z_\ell - F_\ell $	ω_0
27	125	$0,578 \cdot 10^{-1}$	0,294	800
64	343	$0,303 \cdot 10^{-1}$	0,237	1120
125	729	$0,110 \cdot 10^{-1}$	0,210	1600
216	1331	$0,100 \cdot 10^{-1}$	0,195	2240

$W(I) = \text{TSMAP}(Z1(I), Z2(I), Z3(I), KX, KY, KZ)$

1 CONTINUE

Пользователь должен задавать также размеры следующих COMMON блоков:

COMMON/XX/XX(N)/YY/YY(N)/ZZ/ZZ(N)/BB/B(N)
/PIVOT/PIVOT(N)/HA/HA(N, 11)/AA/A(NN)/RNR/RNR(NN)
/SNR/SNR(NN),

где XX, YY, ZZ, B, PIVOT, A (REAL*8) и HA, RNR, SNR, (INTEGER*2) - рабочие массивы, а

$NN; \frac{N^2}{10} < NN < N^2$.

3. ПРИМЕРЫ ПРИМЕНЕНИЯ И РЕЗУЛЬТАТЫ ЧИСЛЕННЫХ РАСЧЕТОВ

3.1. В качестве примера рассмотрим функцию трех переменных:

$$F(\vec{x}) = \frac{1}{x_1^2 + x_2^2 + (x_3 + 1)^2}$$

заданную в N точках $\vec{x}^1, \vec{x}^2, \dots, \vec{x}^N; \vec{x}^j = (x_1^j, x_2^j, x_3^j)$, расположенных в узлах прямоугольной сети в области $x_1^j \in [0, 5]; x_2^j \in [0, 5]; x_3^j \in [0, 5]$.

3.1.1. Интерполяция

Интерполирующая функция вычисляется в межузельных точках z^j , $j = 1, \dots, M$. В качестве оценки погрешности интерполяции используется: максимальное отклонение Z от F:

$$\|Z - F\|_C^M = \max_{\ell=1, M} |Z_\ell - F_\ell|; \quad Z_\ell = Z(\vec{z}^\ell), \quad F_\ell = F(\vec{z}^\ell),$$

и среднее квадратичное отклонение:

$$D_M(Z) = \left[\frac{1}{M} \sum_{\ell=1}^M (Z_\ell - F_\ell)^2 \right]^{1/2}.$$

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

3.1.2. Сглаживание

В этом случае с помощью генератора случайных чисел в значения функции F вносим искусственно случайные ошибки δ_j , распределенные по Гауссу, со среднеквадратичным отклонением $\sigma = 0,001 / 1\%$.

$$F_j \rightarrow F_j^{\text{exp}} = F_j + \delta_j; \quad j = 1, \dots, N.$$

Затем вычисляем аппроксимирующую функцию Z в точках \vec{z}^ℓ , $\ell = 1, \dots, M$ /включающих как заданные точки \vec{x}^j , так и дополнительные межузельные точки/. Результаты вычислений показаны в табл.2.

3.2. Решение реальных физических задач

Программа TSMAP использовалась 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

при решении реальной физической задачи показывает, что алгоритм гладкой аппроксимации данных работает быстро и надежно. Он дает высокую точность при интерполяции и снижает 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. Talmi A., Gilat G., J.of Comp.Physics, 1977, 23, p.93-123.

Рукопись поступила в издательский отдел
21 июля 1986 года.

Купенова Т.Н.
Программа гладкой аппроксимации
функции трех переменных

P5-86-505

Предложен пакет программ на языке Фортран для интерполяции и сглаживания функции трех переменных. Использован метод гладкой аппроксимации, основанный на выборе самой гладкой аналитической функции, аппроксимирующей данные. Численные эксперименты показывают, что получается очень хорошее приближение не только для функции, но и для ее производных.

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1986

Перевод автора.

Kupenova T.N.
Subroutines for Smooth Approximation
of Three Dimensional Functions

P5-86-505

A set of Fortran subroutines for data interpolation and smoothing in three 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 fit to the data and can also be applied to the calculation of numerical derivatives of data points.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1986