

УДК 519.65

АППРОКСИМАЦИЯ ДАННЫХ ГИСТОГРАММЫ МЕТОДОМ УСЛОВНОЙ МИНИМИЗАЦИИ ДЛИНЫ КУБИЧЕСКОГО СПЛАЙНА КЛАССА C^1 , ОБЛАДАЮЩЕГО СВОЙСТВАМИ НЕОТРИЦАТЕЛЬНОСТИ И ЛОКАЛЬНОЙ МОНОТОННОСТИ. ЧАСТЬ 2

С. В. Мжачих, Н. В. Колобянина, Ю. Н. Лапшина
(ФГУП "РФЯЦ-ВНИИЭФ", г. Саров Нижегородской области)

Представленная работа является продолжением опубликованной ранее работы с теми же авторами и названием. Освещены некоторые вопросы теории конструирования кубического сплайна, аппроксимирующего данные гистограммы, приводится рекомендуемая тактика расчета задач, основанная на многоэтапности, демонстрируются результаты расчетов некоторых тестовых задач, подтверждающие работоспособность алгоритма. В заключительном разделе обсуждаются достоинства и особенности метода.

Ключевые слова: кубический сплайн, условная минимизация, локально монотонная аппроксимация, неотрицательная аппроксимация.

Введение

Настоящая работа является продолжением работы [1], при этом наследуются ранее введенные переменные, сокращения и обозначения. Используются также ссылки на математические выражения работы [1], нумерация которых имеет вид (1.*).

Первые три раздела относятся к теоретическим вопросам методики. Затем приводится рекомендуемая тактика счета, которая заключается в том, что решение задачи разбивается на несколько этапов, на каждом из которых метод надежен и эффективен по быстродействию. И наконец, демонстрируются результаты расчетов некоторых довольно сложных, по мнению авторов, задач, для которых значения гистограммы отличаются на несколько порядков, а полученная аппроксимация имеет острые пики.

1. Расчет шагового множителя (метод одномерной минимизации)

Согласно формуле (1.35) новая итерация решения $\mathbf{f}_{k,l}$ рассчитывается с использованием коэффициента $\alpha_{k,l}$, который призван ограничивать смещение от вектора $\mathbf{f}_{k,l-1}$ в направлении векторного шага $\delta\mathbf{f}_{k,l}$. Коэффициент шага $\alpha_{k,l}$, максимальное значение которого равно 1, необходимо выбрать так, чтобы обеспечить понижение значения $\mathcal{L}_k(\mathbf{f})$ при переходе от точки $\mathbf{f}_{k,l-1}$ к точке $\mathbf{f}_{k,l}$. Для нахождения коэффициента используется итерационная процедура. В методе генерируется положительная убывающая последовательность (γ_j) , где $j \geq 0$ ($j \in \mathbb{Z}$), последнее значение которой объявляется значением $\alpha_{k,l}$. Определим $\gamma_0 = 0$; $\gamma_1 = 1$; $\mathbf{x} \equiv \mathbf{f}$; $\mathbf{x}_0 = \mathbf{f}_{k,l-1}$;

$$\mathbf{x}_j = \mathbf{x}_0 + \Delta\mathbf{x}_j, \quad \Delta\mathbf{x}_j = \gamma_j \delta\mathbf{f}_{k,l}. \quad (1)$$

Далее считаем, что для $j = 1$ истинно неравенство (см. (1.36))

$$(\Delta\mathbf{x}_j, \nabla\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_0)) < 0. \quad (2)$$

Тогда оно будет истинным и для $j > 1$ при условии $\gamma_j > 0$. Это означает, что существует окрестность точки \mathbf{x}_0 , в которой функция $\mathcal{L}_k(\mathbf{x})$ убывает в направлении вектора $\Delta\mathbf{x}_j$.

Для расчета значения шагового множителя $\alpha_{k,l}$ выполняем следующие действия в цикле по $j = \overline{1, J+1}$ (J — параметр, задаваемый пользователем):

- 1) рассчитываем значения $\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_j)$ и $\nabla\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_j)$;
- 2) если

$$\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_j) \leq \mathcal{L}_k(\mathbf{x}_0) + \sigma_\alpha (\Delta\mathbf{x}_j, \nabla\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_0)), \quad (3)$$

где σ_α — параметр,

$$\sigma_\alpha \in (0, 1/2], \quad (4)$$

или $j > J$, то определяем $J_{k,l} = j$ и принудительно выходим из цикла по j ;

- 3) определяем число γ_{j+1} из интервала $(0, \gamma_j)$, затем рассчитываем векторы $\Delta\mathbf{x}_{j+1}$ и \mathbf{x}_{j+1} по формулам (1);
- 4) повторяем алгоритм с шага 1 для следующего индекса j (в рамках нового цикла).

Чем меньше значение σ_α , тем больше вероятность выполнения условия (3). С ростом значения σ_α уменьшаются значения γ_j , т. е. шаги $\Delta\mathbf{x}_{j+1}$ прогнозируются более мелкими.

Если цикл по индексу j завершен по причине истинности неравенства (3), то полагаем $\alpha_{k,l} = \gamma_j$. Выход из цикла при условии $j > J$ означает, что решение найти не удалось.

Рассмотрим метод расчета значения γ_{j+1} (см. шаг 3 алгоритма), полагая, что неравенство (2) истинно, а неравенство (3) ложно, т. е. имеет место случай

$$p_0 < 0; \quad (5)$$

$$\Delta z_j > \sigma_\alpha p_0, \quad (6)$$

где

$$p_0 = (\Delta\mathbf{x}_j, \nabla\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_0)); \quad \Delta z_j = z_j - z_0, \quad z_j = \mathcal{L}_k(\mathbf{x}_j).$$

Для одномерного профиля $\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_0 + C\Delta\mathbf{x}_j)$, где $C \in [0, 1]$, используем аппроксимацию в виде кубического полинома

$$y(C) = z_0 + p_0 C + 3BC^2 - 2AC^3, \quad (7)$$

где

$$\begin{aligned} A &= \Delta z_j - \frac{1}{2}(p_0 + p_1); \quad B = \Delta z_j - \frac{2}{3}p_0 - \frac{1}{3}p_1 = A + \theta, \quad \theta = \frac{1}{6}(p_1 - p_0); \\ p_1 &= (\Delta\mathbf{x}_j, \nabla\mathcal{L}_k(\mathbf{x}_j)). \end{aligned} \quad (8)$$

Полином (7) обладает следующими свойствами:

$$y(0) = z_0; \quad y(1) = z_j; \quad y'(0) = p_0, \quad y'(1) = p_1.$$

Из выражений (6) и (8) следует, что

$$A > A_{\min} = -\left(\frac{1}{2} - \sigma_\alpha\right)p_0 - \frac{1}{2}p_1; \quad B > B_{\min} = -\left(\frac{2}{3} - \sigma_\alpha\right)p_0 - \frac{1}{3}p_1. \quad (9)$$

Рассмотрим случай $p_1 > 0$. На основании выражений (5) и (8) получаем оценку $\theta > 0$. Из условия (4) следует, что переменные A_{\min} и B_{\min} могут иметь как положительные, так и отрицательные значения, т. е. с учетом первого неравенства из (9) возможен случай $A = 0$.

Для полинома третьей степени $y(C)$ со свойствами $y'(0) < 0$ и $y'(1) > 0$ существует единственная точка локального минимума $C = C_{\min}$, где $C_{\min} \in (0, 1)$. Найдем точку C_{\min} из условия $y'(C_{\min}) = 0$. Учитывая (7), приходим к квадратному уравнению

$$-6AC^2 + 6BC + p_0 = 0, \quad (10)$$

действительный корень которого существует. Значение дискриминанта определяется по формуле

$$D = 36B^2 + 24Ap_0. \quad (11)$$

Решение уравнения (10) не является кратным корнем, так как для полинома третьей степени точка перегиба возможна только при условии $p_0p_1 > 0$. Следовательно, $D > 0$.

Пусть $A \neq 0$. Рассчитаем корни уравнения (10) по формуле

$$C_{\pm} = \frac{-6B \pm \sqrt{D}}{-12A}. \quad (12)$$

В работе [1] было показано, что локальному минимуму кубического полинома $y(C)$ в случае $A \neq 0$ отвечает значение C_+ . В случае возможного значения $A = 0$ формула (12) становится некорректной.

Пусть $B \leq 0$. Учитывая выражение (8), а также оценку $\theta > 0$, получаем $A = B - \theta \leq -\theta < 0$. Следовательно, для $B \leq 0$ формула (12) применима.

Если $B > 0$, то преобразуем формулу (12) для расчета C_+ . С учетом (11) получим

$$C_+ = \frac{36B^2 - D}{12A(6B + \sqrt{D})} = \frac{-2p_0}{6B + \sqrt{D}}. \quad (13)$$

Числитель и знаменатель дроби в выражении (13) положительны, т. е. формула (13) численно корректна. Но ей, как видим, лучше не пользоваться в случае $B < 0$.

Теперь рассмотрим аппроксимацию $y(C)$, для которой истинны неравенства (5) и (6), но при этом $p_1 \leq 0$. Учитывая выражения (4), (5), (9), получаем оценки $A > A_{\min} \geq 0$, $B > B_{\min} > 0$. Следовательно, для расчета значения C_+ приемлемы как формула (12), так и формула (13). Функция $y(C)$ может иметь точку перегиба ($D = 0$).

Определяем значение γ_{j+1} по формуле $\gamma_{j+1} = \zeta C_+ \gamma_j$, где ζ — параметр: $\zeta \in (0, 1]$.

2. Расчет начального приближения

Метод Ньютона, использованный для решения задачи безусловной минимизации, относится к методам локальной сходимости, и его эффективность и надежность во многом определяются стартовой итерацией вектора решения.

В качестве начальной функции $F(t)$ зададим кубический сплайн класса $C^1[t_0, t_N]$ (см. 1.3) с естественными граничными условиями (ГУ), для которого истинны соотношения (1.6). Свойствами локальной монотонности (ЛМ) и неотрицательности на данном этапе будем пренебрегать.

Для расчета значений d_0 и d_N привлечем формулы (1.10) и (1.9). Значения переменных d_n , где $n = \overline{1, N-1}$, будем определять по трехточечной формуле

$$d_n = \sum_{k=-1}^1 \xi_{k,n} f_{n+k} + r_n. \quad (14)$$

Определим значения $\xi_{k,n}$. Для этого рассмотрим полином четвертой степени

$$S_n(t) = f_n + \sum_{i=1}^4 s_{i,n} (t - t_n)^i,$$

обладающий следующими свойствами:

$$S_n(t_{n+k}) = f_{n+k}, \quad k = \overline{-1, 1}; \quad \int_{t_{n-1}}^{t_n} S_n(t) dt = \bar{f}_n \Delta_n; \quad \int_{t_n}^{t_{n+1}} S_n(t) dt = \bar{f}_{n+1} \Delta_{n+1}.$$

На практике исследовались и другие формы функции $S_n(t)$. Заслуживает внимания вариант задания функции $S_n(t)$ в виде сплайна класса C^2 , состоящего из двух кубических полиномов. Сплайн

опирается на известные значения f_{n-1} , f_n , f_{n+1} и известные значения интегралов на множествах $[t_{n-1}, t_n]$, $[t_n, t_{n+1}]$.

Для расчета коэффициентов многочлена $S_n(t)$ составим систему уравнений

$$Q_n(s_{1,n}, s_{2,n}, s_{3,n}, s_{4,n})^T = (\bar{f}_n - f_n, f_{n-1} - f_n, f_{n+1} - f_n, \bar{f}_{n+1} - f_n)^T, \quad n = \overline{1, N-1}, \quad (15)$$

$$\text{где } Q_n \equiv \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}\Delta_n & \frac{1}{3}\Delta_n^2 & -\frac{1}{4}\Delta_n^3 & \frac{1}{5}\Delta_n^4 \\ -\Delta_n & \Delta_n^2 & -\Delta_n^3 & \Delta_n^4 \\ \Delta_{n+1} & \Delta_{n+1}^2 & \Delta_{n+1}^3 & \Delta_{n+1}^4 \\ \frac{1}{2}\Delta_{n+1} & \frac{1}{3}\Delta_{n+1}^2 & \frac{1}{4}\Delta_{n+1}^3 & \frac{1}{5}\Delta_{n+1}^4 \end{pmatrix}.$$

Известно, что $d_n = F'_n(t_n)$. Определим $d_n = S'_n(t_n)$. Следовательно, $d_n = s_{1,n}$.

Найдем значение $s_{1,n}$ из решения системы (15) методом Крамера:

$$d_n = \frac{\det Q_{1,n}}{\det Q_n}, \quad (16)$$

где $\det A$ — определитель матрицы A . Матрица $Q_{1,n}$ получается из матрицы Q_n заменой 1-го столбца на вектор правой части системы (15). Используем формулу

$$\det Q_{1,n} = (\bar{f}_n - f_n) \det R_{1,n} - (f_{n-1} - f_n) \det R_{2,n} + (f_{n+1} - f_n) \det R_{3,n} - (\bar{f}_{n+1} - f_n) \det R_{4,n}, \quad (17)$$

где матрица $R_{i,n}$ получается из матрицы Q_n вычеркиванием i -й строки и 1-го столбца.

Учитывая (16) и (17), получаем коэффициенты для формулы (14):

$$\xi_{-1,n} = -z_{2,n}; \quad \xi_{1,n} = z_{3,n}; \quad \xi_{0,n} = z_{2,n} + z_{4,n} - z_{1,n} - z_{3,n}; \quad r_n = z_{1,n}\bar{f}_n - z_{4,n}\bar{f}_{n+1},$$

где $z_{i,n} \equiv \frac{\det R_{i,n}}{\det Q_n}$, т. е.

$$z_{2,n} = \frac{-2\Delta_{n+1}^2}{\Delta_n(\Delta_{n+1} + \Delta_n)^2}; \quad z_{3,n} = \frac{-2\Delta_n^2}{\Delta_{n+1}(\Delta_{n+1} + \Delta_n)^2};$$

$$z_{1,n} = z_{2,n} \left(4 - \frac{\Delta_{n+1} - \Delta_n}{\Delta_{n+1} + \Delta_n} \right); \quad z_{4,n} = z_{3,n} \left(4 + \frac{\Delta_{n+1} - \Delta_n}{\Delta_{n+1} + \Delta_n} \right).$$

Из N соотношений (1.6), учитывая (1.9), (1.10) и (14), получаем N уравнений:

$$\begin{aligned} & \left(\frac{3}{\Delta_1} - \xi_{-1,1} \right) f_0 + \left(\frac{5}{\Delta_1} - \xi_{0,1} \right) f_1 - \xi_{1,1} f_2 = g_1; \\ & \xi_{-1,n-1} f_{n-2} + \left(\frac{6}{\Delta_n} + \xi_{0,n-1} - \xi_{-1,n} \right) f_{n-1} + \left(\frac{6}{\Delta_n} + \xi_{1,n-1} - \xi_{0,n} \right) f_n - \\ & \quad - \xi_{1,n} f_{n+1} = g_n, \quad n = \overline{2, N-1}; \\ & \xi_{-1,N-1} f_{N-2} + \left(\frac{5}{\Delta_N} + \xi_{0,N-1} \right) f_{N-1} + \left(\frac{3}{\Delta_N} + \xi_{1,N-1} \right) f_N = g_N, \end{aligned} \quad (18)$$

где

$$g_1 = \frac{8}{\Delta_1} \bar{f}_1 + r_1; \quad g_n = \frac{12}{\Delta_n} \bar{f}_n + r_n - r_{n-1}, \quad n = \overline{2, N-1}; \quad g_N = \frac{8}{\Delta_N} \bar{f}_N - r_{N-1}.$$

Для формирования замкнутой системы уравнений относительно неизвестного вектора $(f_n)_{n=\overline{0,N}}$ требуется одно дополнительное соотношение (ДС). Можно, например, первым уравнением системы сделать соотношение

$$f_0 + \alpha_0 f_1 = g_0 \quad (19)$$

или в качестве последнего уравнения системы использовать соотношение

$$\alpha_{N+1}f_{N-1} + f_N = g_{N+1}. \quad (20)$$

Если для задачи известно значение $f_0 = g_0$, то полагаем $\alpha_0 = 0$. Аналогично можно задать ГУ $f_N = g_{N+1}$.

Предложим еще способы задания коэффициентов для ДС. Рассмотрим кубический полином третьей степени

$$S_0(t) = f_0 + \sum_{i=1}^3 s_{i,0} (t - t_0)^i,$$

обладающий свойствами

$$S_0(t_0) = f_0; \quad S_0(t_1) = f_1; \quad \int_{t_0}^{t_1} S_0(t) dt = \bar{f}_1 \Delta_1; \quad \int_{t_1}^{t_2} S_0(t) dt = \bar{f}_2 \Delta_2.$$

Для расчета коэффициентов многочлена $S_0(t)$ составим систему уравнений

$$Q_0(s_{1,0}, s_{2,0}, s_{3,0})^T = (f_1 - f_0, \bar{f}_1 - f_0, \bar{f}_2 - f)^T,$$

где $Q_0 \equiv \begin{pmatrix} \Delta_1 & \Delta_1^2 & \Delta_1^3 \\ \frac{1}{2}\Delta_1 & \frac{1}{3}\Delta_1^2 & \frac{1}{4}\Delta_1^3 \\ \Delta_1 + \frac{1}{2}\Delta_2 & \Delta_1^2 + \Delta_1\Delta_2 + \frac{1}{3}\Delta_2^2 & \Delta_1^3 + \frac{3}{2}\Delta_1^2\Delta_2 + \Delta_1\Delta_2^2 + \frac{1}{4}\Delta_2^3 \end{pmatrix}$.

Определим $d_0 = S'_0(t_0) = s_{1,0}$. Рассчитаем значение $s_{1,0}$ с помощью формулы (16), задав $n = 0$. После преобразования определителей приходим к формуле вида (14), но модифицированной, применительно к случаю $n = 0$:

$$d_0 = \sum_{k=0}^1 \xi_{k,0} f_k + r_0, \quad (21)$$

где

$$\xi_{0,0} = z_{2,0} - z_{1,0} - z_{3,0}; \quad \xi_{1,0} = z_{1,0}; \quad r_0 = z_{3,0}\bar{f}_2 - z_{2,0}\bar{f}_1.$$

Приравнивая правые части в равенствах (1.10) и (21), получаем ДС (19), для которого

$$\alpha_0 = \frac{1 + \Delta_1 \xi_{1,0}}{3 + \Delta_1 \xi_{0,0}} = \frac{(2\Delta_1 + \Delta_2)(\Delta_1 + \Delta_2)}{\Delta_2(3\Delta_1 + \Delta_2)};$$

$$g_0 = \frac{4\bar{f}_1 - \Delta_1 r_0}{3 + \Delta_1 \xi_{0,0}} = \frac{2\Delta_1^3}{\Delta_2(3\Delta_1 + \Delta_2)(\Delta_1 + \Delta_2)} \bar{f}_2 + \frac{2(2\Delta_1 + \Delta_2)^2}{(3\Delta_1 + \Delta_2)(\Delta_1 + \Delta_2)} \bar{f}_1.$$

Анализ кубического полинома $S_N(t)$, построенного по данным для двух крайних правых интервалов, который аналогичен (в некотором смысле "симметричен") полиному $S_0(t)$, приводит к значениям

$$\alpha_{N+1} = \frac{(2\Delta_N + \Delta_{N-1})(\Delta_N + \Delta_{N-1})}{\Delta_{N-1}(3\Delta_N + \Delta_{N-1})};$$

$$g_{N+1} = \frac{2\Delta_N^3}{\Delta_{N-1}(3\Delta_N + \Delta_{N-1})(\Delta_N + \Delta_{N-1})} \bar{f}_{N-1} + \frac{2(2\Delta_N + \Delta_{N-1})^2}{(3\Delta_N + \Delta_{N-1})(\Delta_N + \Delta_{N-1})} \bar{f}_N.$$

Матрица системы, образуемой уравнениями (18) и ДС (19) (или (20)), содержит четыре ненулевые смежные диагонали, включая главную. При задании соотношения (19) матрица имеет две нижние и одну верхнюю диагонали, а при задании соотношения (20) — одну нижнюю и две верхние. Элементы матрицы, а также одномерные числовые массивы, зависящие от сеточного вектора Δ , которые нужны для быстрого расчета вектора правой части системы, запасаются на стадии расчета

начальных данных (РНД). Для решения системы уравнений применяется метод исключения Гаусса, оптимизированный под ленточную матрицу, с выбором главного элемента в строке.

3. Ограничения в виде четырех линейных неравенств, гарантирующие неотрицательность сплайна на отрезке данных

В подразд. 2.4 работы [1] для расчета значения функции $F_n(t)$ в точке локального экстремума $t_n^* = t_{n-1} + \gamma_n^* \Delta_n$ получена формула

$$f_n^* = \frac{3}{2} \bar{f}_n - \frac{1}{2} (1 - \gamma_n^*) f_n - \frac{1}{2} \gamma_n^* f_{n-1} + \Delta_n^3 U(\gamma_n^*) b_n,$$

где

$$U(\gamma) \equiv \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2} - \gamma \right) \left[\left(\frac{1}{2} - \gamma \right)^2 + \frac{1}{4} \right]. \quad (22)$$

Интерес представляет случай, когда значение γ_n^* соответствует точке локального минимума функции $F_n(t)$, при этом $\gamma_n^* \in (0, 1)$.

Определим функцию

$$H_n(\gamma) \equiv \frac{3}{2} \bar{f}_n - \frac{1}{2} (1 - \gamma) f_n - \frac{1}{2} \gamma f_{n-1} + \Delta_n^3 b_n U(\gamma), \quad (23)$$

для которой $f_{n-1} \geq 0$; $f_n \geq 0$;

$$H_n(\gamma_n^*) = F_n(t_n^*) = f_n^*; \quad (24)$$

$$H_n'(\gamma) = \frac{1}{2} \Delta f_n - \frac{3}{2} \Delta_n^3 \left[\left(\frac{1}{2} - \gamma \right)^2 + \frac{1}{12} \right] b_n; \quad H_n''(\gamma) = 3 \Delta_n^3 \left(\frac{1}{2} - \gamma \right) b_n. \quad (25)$$

Предположим, что уравнение $H_n'(\gamma) = 0$ имеет действительные корни. Пусть значение $\gamma = \gamma_n^+$ соответствует точке локального минимума полинома третьей степени $H_n(\gamma)$, а значение $\gamma = \gamma_n^-$ — точке локального максимума. Уравнение $H_n'(\gamma) = 0$ преобразуем к виду

$$b_n = \frac{\frac{1}{3} \Delta f_n}{\Delta_n^3 \left[\left(\frac{1}{2} - \gamma_n^\pm \right)^2 + \frac{1}{12} \right]}. \quad (26)$$

Поскольку $H_n''(\gamma_n^+) > 0$, то на основании (25) и (26) истинно неравенство

$$\left(\frac{1}{2} - \gamma_n^+ \right) \Delta f_n > 0. \quad (27)$$

Учитывая (27), получаем значения

$$\gamma_n^+ = \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{12} \left(\frac{4v_n}{b_n} - 1 \right)} \operatorname{sign} b_n; \quad \gamma_n^- = 1 - \gamma_n^+, \quad (28)$$

где $v_n \equiv \Delta f_n / \Delta_n^3$. Уравнение (26) имеет действительное решение (28) при условии

$$b_n \Delta f_n > 0 \quad \text{и} \quad |b_n| \leq 4 |v_n|. \quad (29)$$

Рассмотрим случай $\gamma_n^+ \in [0, 1]$. Для этого к условиям (29) добавим неравенство $|v_n| \leq |b_n|$. Для любого значения γ из отрезка $[0, 1]$ истинно неравенство

$$H_n(\gamma) \geq \min \{ H_n(0), H_n(1), H_n(\gamma_n^+) \}, \quad (30)$$

где

$$H_n(0) \equiv -\frac{1}{8}Q_{n,1}(\mathbf{f}); \quad H_n(1) \equiv -\frac{1}{8}Q_{n,2}(\mathbf{f}); \quad (31)$$

$$Q_{n,1}(\mathbf{f}) \equiv 4f_n - \Delta_n^3 b_n - 12\bar{f}_n; \quad Q_{n,2}(\mathbf{f}) \equiv 4f_{n-1} + \Delta_n^3 b_n - 12\bar{f}_n. \quad (32)$$

С учетом (22), (23) и (26) получаем

$$\begin{aligned} H_n(\gamma_n^+) &= \frac{3}{2}\bar{f}_n - \frac{1}{2}(1 - \gamma_n^+)f_n - \frac{1}{2}\gamma_n^+f_{n-1} + \Delta_n^3 \frac{\frac{1}{3}\Delta f_n}{\Delta_n^3 \left[\left(\frac{1}{2} - \gamma_n^+ \right)^2 + \frac{1}{12} \right]} U(\gamma_n^+) = \\ &= \frac{3}{2}\bar{f}_n - \frac{1}{2}f_n + \frac{1}{2}\Delta f_n W(\gamma_n^+), \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} W(\gamma) &\equiv \frac{1}{2} - \frac{\frac{2}{3} \left(\frac{1}{2} - \gamma \right)^3}{\left(\frac{1}{2} - \gamma \right)^2 + \frac{1}{12}}; \quad W'(\gamma) = \frac{2}{3} \left[\frac{\frac{1}{2} - \gamma}{\left(\frac{1}{2} - \gamma \right)^2 + \frac{1}{12}} \right]^2 \left[\left(\frac{1}{2} - \gamma \right)^2 + \frac{1}{4} \right]; \\ W'(\gamma) &\geq 0; \quad W(0) = \frac{1}{4}; \quad W(1) = \frac{3}{4}. \end{aligned} \quad (33)$$

Определим функцию

$$\tilde{H}_n(\gamma) \equiv \frac{3}{2}\bar{f}_n - \frac{1}{2}f_n + \frac{1}{2}\Delta f_n W(\gamma). \quad (34)$$

На основании (27) истинны неравенства

$$\tilde{H}_n(\gamma_n^+) \geq \min_{\gamma \in [0, 1/2]} \tilde{H}_n(\gamma), \quad \text{если } \Delta f_n > 0;$$

$$\tilde{H}_n(\gamma_n^+) \geq \min_{\gamma \in [1/2, 1]} \tilde{H}_n(\gamma), \quad \text{если } \Delta f_n < 0,$$

где с учетом (33) и (34)

$$\min_{\gamma \in [0, 1/2]} \tilde{H}_n(\gamma) = \frac{3}{2}\bar{f}_n - \frac{1}{2}f_n + \frac{1}{2}\Delta f_n \min_{\gamma \in [0, 1/2]} W(\gamma) = \tilde{H}_n(0), \quad \text{если } \Delta f_n > 0;$$

$$\min_{\gamma \in [1/2, 1]} \tilde{H}_n(\gamma) = \frac{3}{2}\bar{f}_n - \frac{1}{2}f_n + \frac{1}{2}\Delta f_n \max_{\gamma \in [1/2, 1]} W(\gamma) = \tilde{H}_n(1), \quad \text{если } \Delta f_n < 0;$$

$$\tilde{H}_n(0) \equiv -\frac{1}{8}Q_{n,3}(\mathbf{f}); \quad \tilde{H}_n(1) \equiv -\frac{1}{8}Q_{n,4}(\mathbf{f}); \quad (35)$$

$$Q_{n,3}(\mathbf{f}) \equiv 3f_n + f_{n-1} - 12\bar{f}_n; \quad Q_{n,4}(\mathbf{f}) \equiv f_n + 3f_{n-1} - 12\bar{f}_n. \quad (36)$$

Заметим, что $\tilde{H}_n(0) = \tilde{H}_n(1)$, если $\Delta f_n = 0$. Учитывая, что $\tilde{H}_n(\gamma_n^+) = H_n(\gamma_n^+)$, получаем оценку

$$H_n(\gamma_n^+) \geq \min \left\{ \tilde{H}_n(0), \tilde{H}_n(1) \right\}. \quad (37)$$

Рассмотрим неравенство (30) для $\gamma = \gamma_n^*$, где $\gamma_n^* \in (0, 1)$. Учтем (24), (31), (35) и (37). Неравенство $f_n^* \geq 0$ всегда будет истинным, если

$$\min \left\{ H_n(0), H_n(1), \tilde{H}_n(0), \tilde{H}_n(1) \right\} \geq 0,$$

т. е. при условии (см. (32), (36))

$$q_{n,1} = Q_{n,1}(\mathbf{f}) \leq 0; \quad q_{n,2} = Q_{n,2}(\mathbf{f}) \leq 0; \quad (38)$$

$$q_{n,3} = Q_{n,3}(\mathbf{f}) \leq 0; \quad q_{n,4} = Q_{n,4}(\mathbf{f}) \leq 0. \quad (39)$$

В случае $\gamma_n^+ \notin [0, 1]$ (при этом $\gamma_n^- \notin [0, 1]$, см. (28)), а также в случае, когда уравнение $H'_n(\gamma) = 0$ не имеет действительных корней, функция $H_n(\gamma)$ на отрезке $[0, 1]$ монотонна и, следовательно, истинно неравенство

$$H_n(\gamma_n^*) = f_n^* \geq \min \{H_n(0), H_n(1)\}.$$

Как видим, при этом достаточно ограничений (38).

Исследования показали, что в случае $\gamma_n^+ \notin [0, 1]$

$$\max \{q_{n,1}, q_{n,2}, q_{n,3}, q_{n,4}\} = \begin{cases} q_{n,1}, & \text{если } \Delta f_n > 0 \text{ и } b_n \in (0, v_n); \\ q_{n,2}, & \text{если } \Delta f_n < 0 \text{ и } b_n \in (v_n, 0). \end{cases}$$

Если уравнение $H'_n(\gamma) = 0$ не имеет действительных корней, то

$$\max \{q_{n,1}, q_{n,2}, q_{n,3}, q_{n,4}\} = \begin{cases} q_{n,2}, & \text{если } (\Delta f_n > 0 \text{ и } b_n > 4v_n) \text{ или } (\Delta f_n \leq 0 \text{ и } b_n \geq 0); \\ q_{n,1}, & \text{если } (\Delta f_n < 0 \text{ и } b_n < 4v_n) \text{ или } (\Delta f_n \geq 0 \text{ и } b_n \leq 0). \end{cases}$$

Итак, если функция $H_n(\gamma)$ на отрезке $[0, 1]$ монотонна, то неравенства (39) не могут быть активными, т. е. они всегда истинны и не определяют область неотрицательности функции $F_n(t)$. Следовательно, неравенства (39) в рассматриваемом случае не влияют на решение и могут быть включены в систему ограничений.

Если функция $F_n(t)$ всюду монотонна ($p_n \leq 0$, см. (1.5)) или $\gamma_n^* \notin (0, 1)$, то, вообще говоря, никаких ограничений на неотрицательность функции $F_n(t)$ вводить не требуется, но, как показала практика расчетов, можно использовать ограничения (38) и (39).

Обратим внимание на некоторые следствия неравенств (38) и (39):

- 1) $q_{n,1} + q_{n,2} = q_{n,3} + q_{n,4} = 8 \left(\frac{f_n + f_{n-1}}{2} - 3\bar{f}_n \right)$, и, следовательно, $\frac{f_n + f_{n-1}}{2} \leq 3\bar{f}_n$;
- 2) $f_{n-1} \leq 4\bar{f}_n$, $f_n \leq 4\bar{f}_n$.

Если сплайн становится неотрицательным благодаря полученным ограничениям, то в критерий завершения расчета задачи нахождения условного минимума можно к четырем линейным неравенствам (1.38) добавить два константных ограничения:

$$f_{n-1} \leq (4 + \varepsilon_1) \bar{f}_n + \varphi_4, \quad f_n \leq (4 + \varepsilon_1) \bar{f}_n + \varphi_4.$$

4. Тактика счета

В ходе численного тестирования выяснилось, что попытка рассчитать задачу с нелинейными ограничениями (1.17) и (1.29), используя при этом начальное приближение \mathbf{f}_0 , полученное по методу из разд. 2, может оказаться неудачной. Это связано с тем, что метод Ньютона при всех его достоинствах имеет существенный недостаток: он относится к методам локальной итерационной сходимости и при неудачном выборе стартовой итерации может отказать. Поэтому была выработана тактика расчетов, согласно которой задача аппроксимации данных гистограммы делится на несколько этапов, при этом решение предыдущего этапа является начальной итерацией для этапа текущего. Такой подход приводит к тому, что стартовый вектор \mathbf{f} на каждом этапе всегда находится в области итерационной сходимости метода Ньютона. Опишем эти этапы.

Этап 0: расчет начального приближения (см. разд. 2).

Этап 1: решение задачи безусловной минимизации целевой функции (ЦФ) $\Gamma(\mathbf{f})$. На данном этапе рассчитывается аппроксимирующая функция для данных гистограммы, обеспечивающая минимум длины кривой сплайна $F(t)$, при этом на вектор решения \mathbf{f} не накладываются ограничения по ЛМ и неотрицательности.

Далее пользователь должен определиться с выбором, какая аппроксимирующая функция ему больше подходит. Если задачу аппроксимации нужно рассчитать быстро и надежно, то применяет-

5. Численное тестирование

Тестирование методики проводилось на большом числе задач. Для демонстрации результатов были выбраны сложные, по мнению авторов, задачи с общей разницей значений гистограммы (между $\min_n \bar{f}_n$ и $\max_n \bar{f}_n$) в шесть-семь порядков и примерно три порядка для соседних значений \bar{f}_n . Но, как будет показано далее, представленный в работе метод хорошо аппроксимирует и такие данные.

Для численного исследования метода рассмотрим две задачи, начальные данные которых представлены в табл. 2. Здесь символом "+" отмечены отрезки с номерами n (от t_{n-1} до t_n), для которых задавались ограничения на ЛМ и неотрицательность (столбец "Н") сплайна. Символом "×" отмечены те отрезки, для которых изначально заданные ограничения на монотонность затем были отменены, так как эти отрезки непосредственно соседствуют с отрезками, для которых условия ЛМ (1.13) и (1.18) для $\varsigma = 0,05$ не выполняются (см. разд. 2.2 работы [1]). Алгоритм, снимающий ограничения на монотонность, не затронул отрезок $[t_1, t_2]$ в задаче 2: в заданной постановке аппроксимирующая кривая больше соответствует ожиданиям. Снятие на отрезке ограничения на монотонность автоматически приводило к заданию ограничения на неотрицательность.

Как видно из табл. 2, в задаче 1 были удалены из рассмотрения первые три "плохих" отрезка согласно неравенствам (1.2), так как они затрудняли процесс расчета.

Отметим, что среднее значение данных гистограммы для обеих задач нормировано на единицу (см. (1.1)).

В табл. 3 и 4 приведены следующие результаты решения задач 1 и 2 соответственно:

Таблица 2

Начальные данные задач 1 и 2

n	t_n	Задача 1			Задача 2		
		\bar{f}_n	ЛМ	Н	\bar{f}_n	ЛМ	Н
0	-3,49952e-1						
1	-3,30023e-1	< 1e-6			3,37632e+1		+
2	-2,70027e-1	< 1e-6			2,54973e+0	+	
3	-2,15111e-1	< 1e-6			1,93391e+0	+	
4	-1,57004e-1	6,52211e-6	+		1,63123e+0	+	
5	-4,87902e-2	6,96467e-5	+		1,28882e+0	+	
6	7,25707e-2	1,53577e-4	+		9,82365e-1	+	
7	2,67879e-1	3,90299e-4	+		7,73837e-1	×	+
8	5,00051e-1	1,06887e-3	+		7,20681e-1		+
9	9,16291e-1	3,34121e-3	+		9,50591e-1	×	+
10	1,25527e+0	7,19463e-3	+		1,36119e+0	+	
11	1,60944e+0	1,11954e-2	+		1,89346e+0	+	
12	2,00026e+0	1,52261e-2	+		2,35504e+0	+	
13	2,52573e+0	2,16939e-2	×	+	2,83103e+0	×	+
14	2,99994e+0	2,70693e-2		+	3,52408e+0		+
15	3,57985e+0	2,67399e-2		+	3,67026e+0		+
16	4,19971e+0	1,83153e-2	×	+	2,91576e+0	×	+
17	4,79997e+0	1,29529e-2	+		2,51957e+0	+	
18	5,50019e+0	7,32085e-3	+		2,20811e+0	+	
19	6,21461e+0	4,21292e-3	×	+	1,33515e+0	+	
20	6,99998e+0	2,71077e-2		+	4,98446e-1	×	+
21	7,99989e+0	4,77779e-2	×	+	1,12247e-1		+
22	8,80488e+0	1,51389e+0	×	+	1,20412e-1		+
23	9,21034e+0	6,69244e+0		+	3,43351e-2	×	+
24	1,07475e+1	4,05383e+0	×	+	7,95946e-4	+	
25	1,24292e+1	3,24865e+0	+		3,25819e-5	+	
26	1,54249e+1	5,67953e-3	+		3,60883e-6	+	

Таблица 3

Результаты решения задачи 1

k	L_k	J_k	θ_{k+1}	N_k	$\delta\mathcal{L}_k$	$ \Omega_k^+ $
Этап 1						
0	13	4				
Этап 2а						
1	3	0	2	-5	4,55e-4	8,84e-1
2	3	0	2	-4	1,39e-3	7,44e-1
3	3	0	2	-3	2,88e-3	6,89e-1
4	2	0	4	-2	5,97e-3	6,79e-1
5	2	0	4	0	1,65e-2	6,76e-1
6	3	0	4	2	5,42e-2	6,41e-1
7	5	0	4	4	1,14e-1	4,53e-1
8	4	0	4	6	3,17e-2	7,97e-2
9	70	1	1	8	1,26e+1	9,63e-3
10	70	1	1	8	1,57e+1	7,97e-3
11	70	1	1	8	1,69e+1	6,81e-3
12	70	1	1	8	1,78e+1	5,56e-3
13	44	1	2	8	1,36e-2	3,85e-2
14	14	1	4	9	7,59e-3	9,68e-3
15	3	0	1	11	2,98e-4	3,48e-4
16	2	0	1	11	8,61e-6	9,91e-6
17	1	0		11	2,44e-7	2,81e-7
Этап 2б						
1	4	0	2	-5	3,07e-4	7,26e-1
2	3	0	2	-4	1,13e-3	6,86e-1
3	2	0	2	-3	2,48e-3	6,37e-1
4	2	0	4	-2	4,78e-3	5,97e-1
5	3	0	4	0	1,19e-2	5,69e-1
6	3	0	4	2	3,89e-2	5,44e-1
7	5	0	4	4	1,06e-1	4,44e-1
8	5	0	4	6	5,51e-2	1,26e-1
9	3	0	1	8	4,26e-3	7,72e-3
10	2	0	1	8	2,91e-4	5,01e-4
11	2	0	1	8	1,89e-5	3,26e-5
12	1	0		8	1,23e-6	2,12e-6
Этап 3						
1	9	2	2	-5	3,07e-4	7,26e-1
2	8	1	2	-4	1,19e-3	7,13e-1
3	2	0	2	-3	2,95e-3	7,10e-1
4	2	0	4	-2	6,42e-3	7,06e-1
5	6	1	4	0	1,74e-2	6,91e-1
6	4	1	4	2	5,59e-2	6,49e-1
7	5	0	4	4	1,14e-1	4,50e-1
8	6	0	4	6	1,79e-2	6,93e-2
9	5	1	4	8	4,36e-3	1,79e-2
10	4	0	4	10	1,66e-3	3,93e-3
11	3	0	1	12	1,66e-4	3,53e-4
12	2	0	1	12	1,64e-5	3,32e-5
13	1	0		12	1,55e-6	3,13e-6

Результаты решения задачи 2

k	L_k	J_k	θ_{k+1}	N_k	$\delta\mathcal{L}_k$	$ \Omega_k^+ $
Этап 1						
0	34	7				
Этап 2а						
1	21	3	2	-5	2,23e-2	1,02e+1
2	7	0	2	-4	5,75e-3	1,25e+0
3	5	0	2	-3	1,11e-3	2,71e-1
4	4	0	4	-2	7,63e-4	1,81e-1
5	4	0	4	0	4,53e-4	9,15e-2
6	3	0	4	2	1,62e-4	2,83e-2
7	3	0	4	4	2,79e-5	5,04e-3
8	2	0	1	6	1,92e-6	5,92e-4
9	2	0	2	6	2,19e-7	1,08e-4
10	1	0	4	7	2,39e-8	4,97e-5
11	1	0	4	9	1,45e-8	4,36e-5
12	1	0	4	11	2,12e-9	1,14e-5
13	1	0	4	13	7,68e-9	3,77e-6
14	1	0	4	15	7,66e-8	1,89e-5
15	1	0	4	17	-7,34e-9	5,85e-6
16	6	1	4	19	3,79e-8	2,54e-6
17	1	0		21	4,35e-9	1,68e-7
Этап 2б						
1	11	3	2	-5	6,69e-2	1,67e+1
2	10	3	2	-4	1,31e-2	1,75e+0
3	6	0	2	-3	1,71e-3	2,53e-1
4	5	0	4	-2	8,73e-4	1,24e-1
5	4	0	4	0	3,97e-4	5,59e-2
6	3	0	4	2	9,99e-5	1,28e-2
7	2	0	4	4	1,10e-5	3,36e-2
8	2	0	4	6	1,71e-6	1,01e-3
9	2	0	1	8	2,22e-7	1,13e-4
10	1	0	2	8	3,87e-8	5,02e-5
11	1	0	4	9	7,51e-9	1,28e-5
12	1	0	4	11	3,48e-10	4,11e-6
13	1	0	4	13	1,47e-9	2,55e-6
14	1	0	4	15	2,88e-9	2,41e-6
15	1	0	4	17	9,19e-9	2,41e-6
16	1	0	4	19	3,44e-8	2,41e-6
17	1	0		21	3,31e-9	9,30e-7
Этап 3						
1	6	0	2	-5	1,39e-3	2,60e+0
2	4	0	2	-4	1,01e-3	7,68e-1
3	4	0	2	-3	4,87e-4	3,12e-1
4	4	0	4	-2	2,38e-4	1,42e-1
5	3	0	4	0	7,64e-5	4,86e-2
6	3	0	4	2	2,36e-5	1,61e-2
7	3	0	4	4	7,63e-6	5,96e-3
8	3	0	4	6	9,87e-6	3,18e-3
9	4	0	4	8	1,01e-5	1,50e-3
10	5	0	1	10	1,16e-7	2,98e-5
11	1	0	2	10	1,25e-8	2,13e-5
12	1	0	4	11	2,14e-8	2,11e-5
13	1	0	4	13	5,07e-8	2,10e-5

Результаты решения задачи 2

k	L_k	J_k	θ_{k+1}	N_k	$\delta\mathcal{L}_k$	$ \Omega_k^+ $
14	1	0	4	15	1,69e-7	2,10e-5
15	2	0	4	17	6,43e-7	2,10e-5
16	4	1	4	19	7,91e-7	9,70e-6
17	2	0		21	5,56e-7	3,44e-6

- значения $J_k = \max(J_{k,1}, J_{k,2}, \dots, J_{k, \min(L, L_k)})$, где k — номер итерации; $J_{k,l}$ — число пересчетов шагового множителя $\alpha_{k,l}$ (см. разд. 1). В случае $J_{k,l} = 0$ использовалась начальная итерация $\alpha_{k,l} = 1$;
- значения θ_{k+1} , определяющие возрастание на итерациях параметра квадратичного штрафа χ_k ;
- показатель степени N_k : $\chi_k = 2^{N_k}$;
- значения $\delta\mathcal{L}_k = \frac{\mathcal{L}_k(\mathbf{f}_k)}{\Gamma(\mathbf{f}_k)} - 1$ и $|\Omega_k^+|$, которые с возрастанием χ_k должны сходиться к нулю.

В задаче 1 на этапе 3 был задействован метод градиентного спуска с масштабированием.

На рисунках далее показаны графики сплайна $F(t)$, полученные на разных этапах решения. Значения гистограмм представлены прямоугольниками красного цвета.

На рис. 1 приводятся результаты расчетов задачи 1. Рис. 1, а демонстрирует решение на всем множестве задания гистограммы. На рис. 1, б–г результаты представлены более детально на фрагментах множества $[t_0, t_{26}]$.

В процессе тестирования методики проводились расчеты с заданием ограничений только на неотрицательность сплайна. На рис. 1, в, г показаны графики полученных сплайнов в двух вариантах расчета. Видно, что функции, рассчитанные с ограничениями на монотонность и без них, различаются. При задании условия монотонности локальный максимум функции переместился из точки $t \approx 11$ на границу "ступеней" (см. рис. 1, г). Пользователю предоставляется возможность выбрать, какой сплайн больше соответствует его представлению о решении. (В табл. 3 приведены данные для задачи со свойством ЛМ.) На рис. 1, б не приведен график решения этапа 3 без свойства ЛМ, так как он визуально не отличим от результата этапа 3 со свойством ЛМ. На рис. 1, в не представлен график этапа 2а без свойства ЛМ, поскольку он совпадает с графиком решения этапа 3 без свойства ЛМ.

На рис. 2 показаны графики сплайна $F(t)$ для задачи 2. Данная задача интересна тем, что в значениях гистограммы присутствует "острый пик" на первом отрезке. На некоторых изображениях рис. 2 графики сплайна этапа 2а не приводятся, так как они не отличимы от графиков сплайна этапа 3. На рис. 2, е показано различие решений для трех постановок задачи этапа 2а, сформулированных для значений I из множества $\{1, 2, 3\}$ (см. [1], подразд. 2.3). (В табл. 4 приведены данные для случая $I = 1$.)

Анализ результатов расчетов двух задач позволяет сделать следующие выводы:

1. Этап 1 эффективно сглаживает функцию начального приближения этапа 0, и сплайны, полученные на этих этапах, хорошо совпадают между собой для "значимых" отрезков гистограммы, т. е. отрезков, определяющих интеграл.
2. Аппроксимирующая функция, рассчитанная на этапе 1, близка к точному решению задачи (этапа 3) для большинства отрезков. Отметим, что вычислительные затраты на расчет одной итерации этапа 1 относительно невелики по сравнению с этапами 2 и 3.
3. Метод хорошо аппроксимирует гистограмму, которая характеризуется большими перепадами значений для соседних отрезков. Значения "ступеней" для двух крайних справа отрезков в задаче 1 отличаются почти на три порядка, тем не менее, свойства монотонности и неотрицательности сплайна обеспечиваются (см. рис. 1, в).

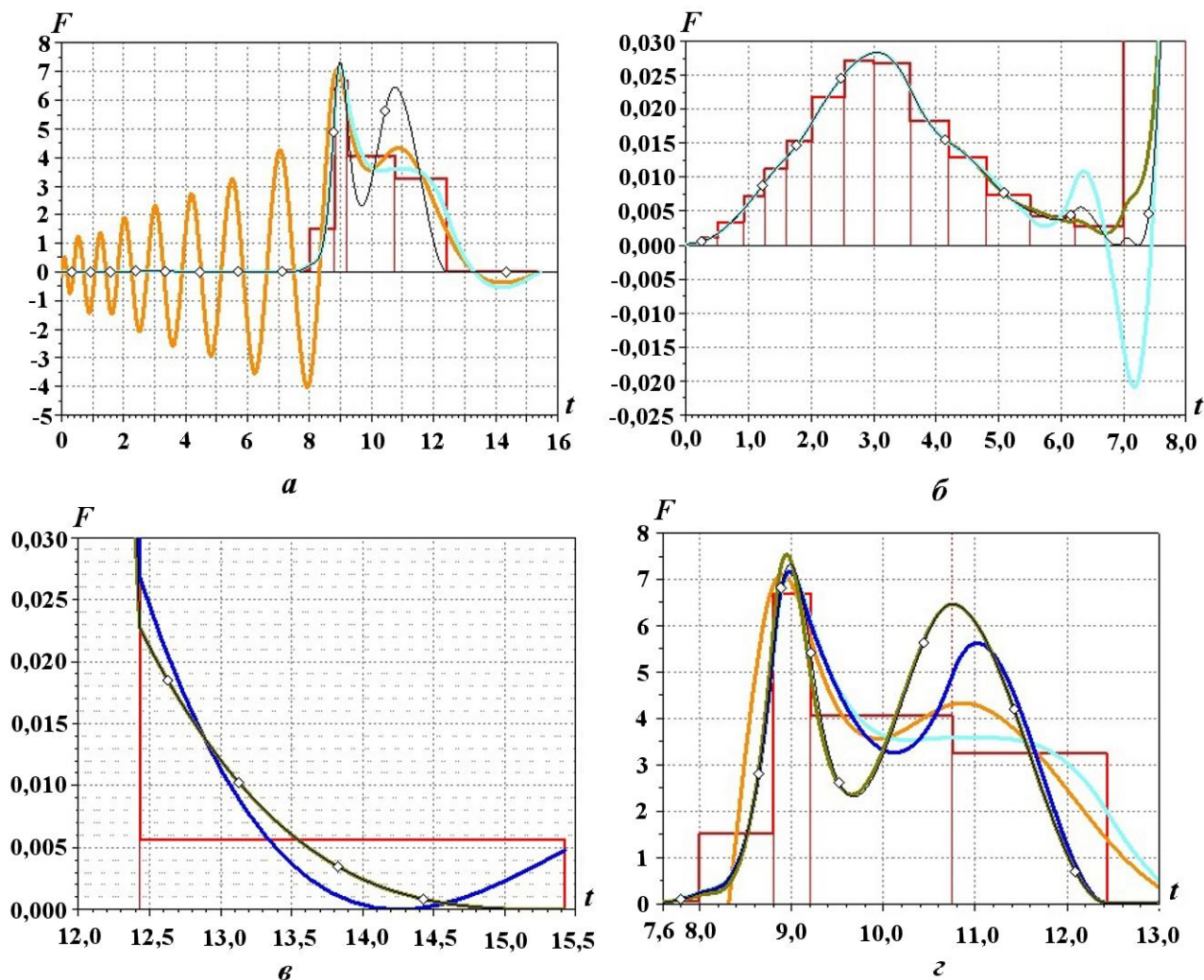


Рис. 1. Графики данных гистограммы и аппроксимирующих сплайнов для задачи 1, рассчитанной в двух постановках: *a* — общее решение; *б* — $0 \leq t \leq 8$; *в* — $12 \leq t \leq 15,5$; *г* — $7,6 \leq t \leq 13$; — этап 0; — этап 1; — этап 2а со свойством ЛМ; — этап 3 со свойством ЛМ; — этап 3 без свойства ЛМ

4. На этапе 2а лучше использовать небольшое число неравенств. Замечено, что с увеличением числа ограничений эффективность метода падает, при этом решение с точки зрения пользователя, как правило, уточняется не существенно. Так, например, при использовании неравенств (1.23) для $I = 3$ метод позволил успешно справиться с расчетом задачи 2. Сравнивая полученную функцию $F(t)$ со сплайном, в расчете которого использовалось значение $I = 1$, можно заметить, что в окрестности точки $t = 11$ решение уточнилось (см. рис. 2, *e*). Но платой за малозначимую поправку был более чем двукратный рост общего числа итераций ($\sum L_k$). С увеличением значения параметра M , отвечающего за число используемых неравенств-ограничений (1.30), также, начиная с некоторого значения, наблюдается резкое удорожание расчетов на этапе 2б. Для рассматриваемых тестов оптимальным оказалось значение $M = 8$. Как оказалось, использовать на этапе 2б дорогостоящие алгоритмы не имеет смысла, так как небольшое уточнение сплайна практически не сказывается на скорости сходимости итераций решения на этапе 3.

Заключение

В работе предложены некоторые алгоритмы аппроксимации ступенчатой диаграммы с помощью кубического сплайна $F(t)$ класса C^1 , обладающего свойствами ЛМ и неотрицательности. Алгоритмы базируются на методе поиска точки условного минимума функции нескольких переменных.

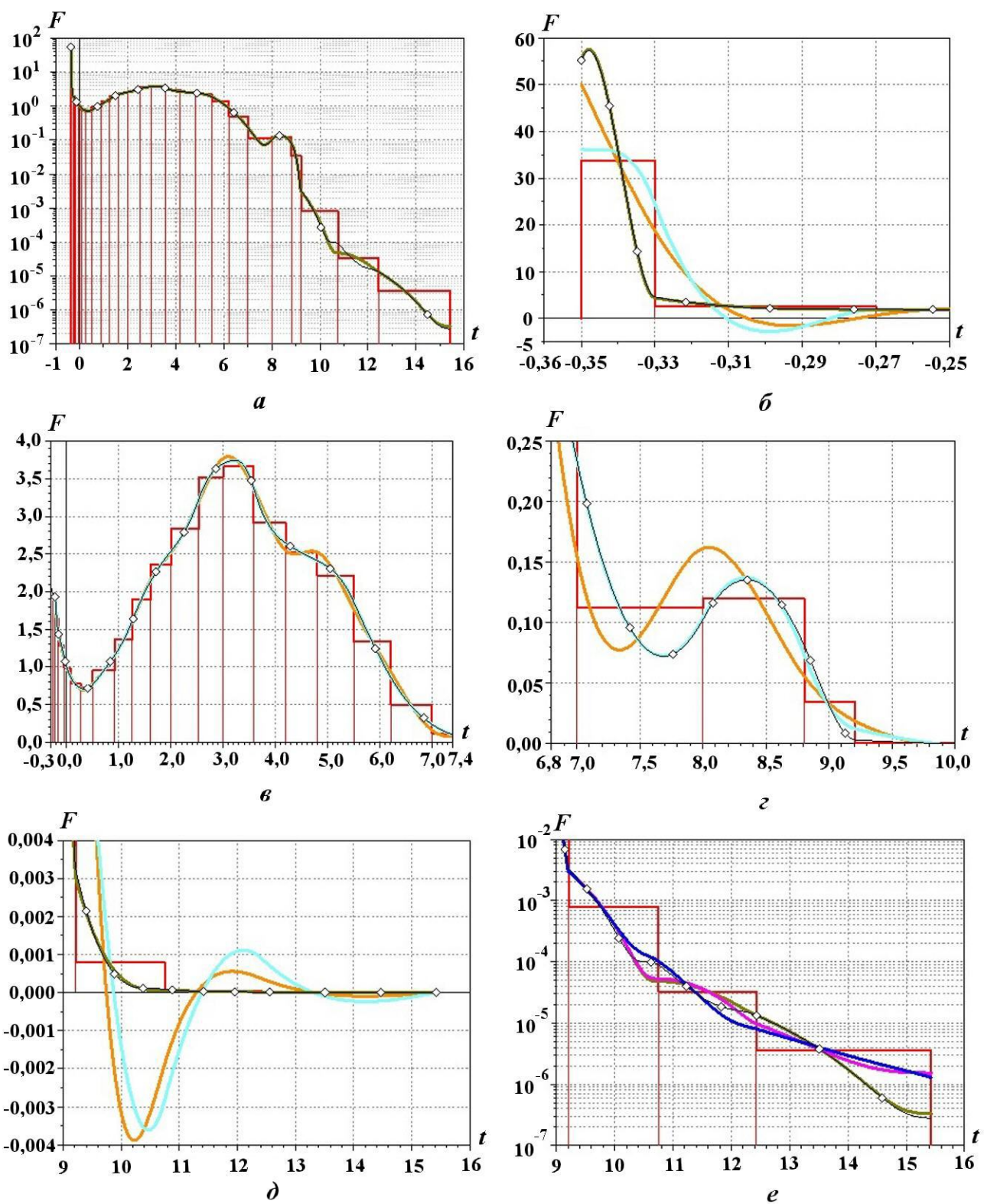


Рис. 2. Графики данных гистограммы и аппроксимирующих сплайнов для задачи 2: *a* — общее решение; *б* — $-0,36 \leq t \leq -0,25$; *в* — $-0,3 \leq t \leq 7,4$; *г* — $6,8 \leq t \leq 10$; *д*, *е* — $9 \leq t \leq 16$; — — этап 0; — — этап 1; — — этап 2а ($I = 1$); — — этап 2а ($I = 2$); — — этап 2а ($I = 3$); — — этап 3

Очень хорошо показала себя ЦФ $\Gamma(\mathbf{f})$ в виде длины кривой сплайна, которая, хотя не определяет свойство его ЛМ, но эффективно влияет на сглаживание искомой аппроксимации. Это свойство подтверждается результатами расчетов задач этапа 1, в которых от сплайна не требовались свойства ЛМ и неотрицательности.

Нелинейные неравенства-ограничения решают проблему неотрицательности и ЛМ сплайна точно. Здесь следует пояснить: авторы использовали итерационный метод, и свойства, которые требуются от сплайна, могут оказаться не очень строгими, что обусловлено задаваемой точностью сведения итераций решения \mathbf{f}_k . Заметим также, что не точно формулируется и сама задача минимизации длины кривой сплайна, так как значения ЦФ $\Gamma(\mathbf{f}_k)$ определяются приближенно с помощью метода численного интегрирования Гаусса.

Линейные ограничения, задающие свойство ЛМ, решают проблему ЛМ сплайна точно на этапе 2а и приближенно — на этапе 2б.

Линейные ограничения настоящей работы (см. разд. 3), задающие свойство неотрицательности на этапе 2а, решают проблему неотрицательности сплайна точно.

Линейные ограничения работы [1], задающие свойство неотрицательности на этапе 2б, решают проблему неотрицательности сплайна приближенно. Ограничения в таком виде хорошо зарекомендовали себя на практике. Задачи этапа 2б, как правило, решаются быстрее задач этапа 2а. Но при данных ограничениях сплайн в общем случае может принимать отрицательные значения. В пределах отрезка $[t_{n-1}, t_n]$ размер участка, на котором сплайн может быть отрицателен, не превышает значения Δ_n/M , где M — параметр метода, отвечающий за число используемых неравенств-ограничений (1.30). В узловых точках сетки $(t_n)_{n=0, \overline{N}}$ сплайн всегда неотрицателен (с заданной точностью). Увеличивая значение параметра M , пользователь может нивелировать дефект решения. При необходимости функцию на участках отрицательности можно легко скорректировать простейшими алгоритмами.

Отметим достоинства постановки задачи с линейными ограничениями.

Во-первых, этап 2а дает выигрыш по сравнению с этапом 3 в скорости расчета одной итерации по Ньютону, так как все производные для функций неравенств-ограничений рассчитываются на этапе РНД. При этом матрицы вторых частных производных для модифицированной функции Лагранжа $\mathcal{L}_k(\mathbf{f})$ и ЦФ $\Gamma(\mathbf{f})$ совпадают, т. е. матрица $\nabla^2 \mathcal{L}_k(\mathbf{f})$ обладает свойством положительной главной диагонали. Для "плохой" точки \mathbf{f} , в которой вектор Ньютона $\delta \mathbf{f}$ не задает для ЦФ направление спуска, такой вид матрицы Гессе позволяет задействовать менее эффективный, но надежный метод градиентного спуска с масштабированием.

Во-вторых, в ходе тестирования была отмечена надежность алгоритма с линейными ограничениями, тогда как метод с нелинейными ограничениями мог отказать. Хотя надо заметить, что это происходило крайне редко. При этом расчеты с немного измененными параметрами оказывались успешными. Для повышения надежности расчета с нелинейными ограничениями пришлось пожертвовать эффективностью метода и ввести в практику вспомогательный этап 2б. Как уже отмечалось, на этапе 2б не требуется задания большого числа ограничений, что позволяет методу быстро "выходить" на решение.

Достоинство постановки задачи с нелинейными ограничениями заключается в том, что она позволяет наиболее точно решить математическую задачу нахождения минимального значения длины кривой сплайна с заданными свойствами. Однако практика расчетов показала, что аппроксимирующие функции этапов 3 и 2а почти не различаются. Поэтому можно предположить, что для большинства приложений вполне подойдет более "дешевое" (в общем случае) и более надежное решение этапа 2а с использованием небольшого числа неравенств-ограничений.

Отметим еще одно свойство представленной методики. Значения параметров, отвечающих за относительную точность сведения итераций решения, нельзя задавать слишком маленькими, т. е. нельзя требовать высокой точности решения. Дело в том, что ЦФ может слабо зависеть от длины кривой сплайна на каком-нибудь отрезке данных. В этом случае задача, которая фактически уже решена, не всегда может выйти из итерационного цикла: итерации сплайна с ростом значения k не могут сойтись с заданной точностью, при этом значение ЦФ и вектор ее градиента практически не

меняются из-за ошибок округления на ЭВМ. Если такой процесс сопровождается ростом значения штрафа, то он неминуемо приведет к вычислительной катастрофе.

Следует учитывать, что успешность решения задачи описанным методом зачастую определяется постановкой, которая является отдельной проблемой, иногда достаточно сложной. Прежде всего надо определиться с выбором независимой переменной: желательно, чтобы сетка по ней была близка к равномерной. Затем следует по возможности преобразовать переменную гистограммы так, чтобы избежать больших перепадов значений для соседних ступеней. Формулировка задачи также включает в себя назначение областей ЛМ для аппроксимирующей функции. И здесь может возникнуть сложность в случае, когда алгоритм является частью нестационарной задачи, а входные данные для него с течением времени сильно меняются. Для подобных задач, к методу решения которых предъявляется требование повышенной надежности, следует учитывать, что безаварийность расчета возрастает с уменьшением числа "монотонных" отрезков сплайна, а также при использовании только этапа 2а при задании $I = 1$.

Итак, можно утверждать, что алгоритм работоспособен. Он не требует больших вычислительных затрат. Однако метод решения необходимо настроить на конкретный класс задач (преобразовать независимую переменную и переменную гистограммы, подобрать значения параметров, определить ГУ и т. п.).

Список литературы

1. Мжачих С. В., Колобянина Н. В., Лапшина Ю. Н. Аппроксимация данных гистограммы методом условной минимизации длины кубического сплайна класса $C1$, обладающего свойствами неотрицательности и локальной монотонности. Часть 1 // Вопросы атомной науки и техники. Сер. Математическое моделирование физических процессов. 2023. Вып. 2. С. 30–44.
Mzhachikh S. V., Kolobyenin N. V., Lapshina Yu. N. Approximatsiya dannykh gistogrammy metodom uslovnoy minimizatsii dliny kubicheskogo splayna klassa $C1$, obladayushchego svoystvami neotritsatelnosti i lokalnoy monotonnosti. Chast 1 // Voprosy atomnoy nauki i tekhniki. Ser. Matematicheskoe modelirovanie fizicheskikh protsessov. 2023. Vyp. 2. S. 30–44.

Статья поступила в редакцию 07.07.22.
