

ОПТИМИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ В ЗАДАЧАХ КУСОЧНО-ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ

Н. Д. Дикусар

Объединенный институт ядерных исследований, г. Дубна

Методы кусочно-полиномиальной аппроксимации (КПА) и среднеквадратичной КПА (СКПА), как и методы сплайнов широко применяются в научных исследованиях и инженерных расчетах. Развитие современных технологий требует разработки новых более *эффективных* методов.

Эффективность методов КПА зависит от многих факторов, таких как выбор полиномиального базиса, оптимальная расстановка узлов, степень аппроксимирующих многочленов, порядок гладкости в узлах, вычислительная сложность, размер шага сетки и др. Выбор числа узлов и их оптимальное расположение является нетривиальной задачей, в которой ищется компромисс между *точностью* приближения и *длиной интервала* аппроксимации. Использование многочленов высоких степеней связано, прежде всего, с проблемой *обусловленности* нормальной матрицы и повышенной вычислительной сложностью. Вместе с тем многочлены высокой степени выгодны, так как они дают меньшую остаточную дисперсию, а их регрессионные оценки *более близко* проходят от экспериментальных значений [1, 2].

В рамках идеи П. Л. Чебышева о приближении гладкой функции многочленом на отрезке *ограниченной длины* разработан метод базисных элементов (МБЭ) [3–6]. В конструкции МБЭ-многочлена установлена *связь между узлами трехточечной сетки и базисными функциями*, в результате которой многочлен n -ой степени разлагается по *четырем базисным элементам* – одной кубической и трем квадратичным параболом. По сравнению с многочленом Тейлора МБЭ-многочлен обладает рядом полезных свойств, которые используются для оптимизации решения в задачах КПА.

В данной работе рассмотрены примеры оптимизации решений в задачах КПА и СКПА с использованием формул для вычисления коэффициентов МБЭ-многочлена 11-й степени, полученным в [6].

1. Базисные элементы и конструкция МБЭ-многочлена

В МБЭ синтезированы свойства многочленов Тейлора в узлах трехточечной сетки $\Delta_3^{\alpha\beta}$: $x_\alpha = x_0 + \alpha < x_0 < x_\beta = x_0 + \beta$, $\alpha\beta < 0$, $x, \alpha, \beta \in R$ и многочленов Лагранжа второй степени [6].

На сетке $\Delta_3^{\alpha\beta}$ МБЭ-многочлен зависит от *непрерывных параметров* x_0 , $\alpha = x_\alpha - x_0$, $\beta = x_\beta - x_0$, функционально связанных с независимой переменной $\tau = x - x_0$ правилом *двойного отношения* четырех точек

$$[\xi_1 \xi_2 \xi_3 \xi_4] = [13]/[23]:[34]/[14], \quad [ij] = \xi_j - \xi_i, \quad \xi_j \neq \xi_i.$$

Для четверки $[\tau\alpha\beta 0]$ при изменении порядка в тройке $[\alpha\beta 0]$ это правило порождает три *дробно-рациональные* функции w_1, w_2, w_3 относительно параметров α, β и τ (квадратичные относительно τ):

$$w_1 = \frac{-\tau(\tau-\beta)}{\alpha\gamma}, \quad w_2 = \frac{\tau(\tau-\alpha)}{\beta\gamma}, \quad w_3 = \frac{(\tau-\alpha)(\tau-\beta)}{\alpha\beta}, \quad \sum_{i=1}^3 w_i = 1, \quad \gamma = \beta - \alpha, \quad \alpha\beta\gamma \neq 0.$$

Функции w_1, w_2, w_3 и $Q = \alpha\beta\tau w_3 = \tau(\tau-\alpha)(\tau-\beta)$, $\tau, \alpha, \beta \in R$ называются *базисными элементами*. Привязкой к сетке $\Delta_3^{\alpha\beta}$ алгебраический многочлен $P_n(x; \mathbf{a}) = \sum_{i=0}^n a_i x^i$ преобразуется в МБЭ-многочлен [4]:

$$P_{n \downarrow m}(x, \alpha, \beta; \mathbf{r}) = \sum_{j=0}^m Q^j \mathbf{w}^T \mathbf{r}_j = \sum_{j=0}^m Q^j \Pi_j, \quad m = \lfloor n/3 \rfloor, \quad (1)$$

где $\mathbf{w} = [w_1, w_2, w_3]^T$, $\mathbf{r}_j = [r_{j\alpha}, r_{j\beta}, r_{j0}]^T$ – коэффициенты, а $\Pi_j = \mathbf{w}^T \mathbf{r}_j = r_{j\alpha} w_1 + r_{j\beta} w_2 + r_{j0} w_3$ – квадратичные параболы. Вектор $\mathbf{b}_j = [b_{j1}, b_{j2}, b_{j3}]^T = Q^j \mathbf{w}$ называется вектором *базисных функций*, в котором компоненты $b_{ji} = Q^j w_i$, $i = \overline{1,3}$ являются многочленами степени $3j + 2$ относительно τ с нулями в узлах сетки $\Delta_3^{\alpha\beta}$ (табл. 1; $n = 11$, $m = 3$).

Таблица 1

b_{ji}	\mathbf{b}_0	$\mathbf{b}_1 = Q\mathbf{b}_0$	$\mathbf{b}_2 = Q\mathbf{b}_1$	$\mathbf{b}_3 = Q\mathbf{b}_2$
b_{j1}	$-\frac{\tau(\tau-\beta)}{\alpha\gamma}$	$-\frac{\tau^2(\tau-\alpha)(\tau-\beta)^2}{\alpha\gamma}$	$-\frac{\tau^3(\tau-\alpha)^2(\tau-\beta)^3}{\alpha\gamma}$	$-\frac{\tau^4(\tau-\alpha)^3(\tau-\beta)^4}{\alpha\gamma}$
b_{j2}	$-\frac{\tau(\tau-\alpha)}{\gamma\beta}$	$\frac{\tau^2(\tau-\alpha)^2(\tau-\beta)}{\gamma\beta}$	$\frac{\tau^3(\tau-\alpha)^3(\tau-\beta)^2}{\gamma\beta}$	$\frac{\tau^4(\tau-\alpha)^4(\tau-\beta)^3}{\gamma\beta}$
b_{j3}	$\frac{(\tau-\alpha)(\tau-\beta)}{\alpha\beta}$	$\frac{\tau(\tau-\alpha)^2(\tau-\beta)^2}{\alpha\beta}$	$\frac{\tau^2(\tau-\alpha)^3(\tau-\beta)^3}{\alpha\beta}$	$\frac{\tau^3(\tau-\alpha)^4(\tau-\beta)^4}{\alpha\beta}$

Коэффициенты \mathbf{r}_j МБЭ-многочлена в форме базисных функций

$$P_{n \downarrow m}(x, \alpha, \beta; \mathbf{r}) = \sum_{j=0}^m \mathbf{b}_j^T \mathbf{r}_j, \quad m = \lfloor n/3 \rfloor \ll n,$$

зависят от параметров α , β и $P_n^{(j)}(x_v; \mathbf{a})$, $j = \overline{0, m}$, $v = \alpha, \beta, 0$.

В случае аппроксимации $f(x) \approx \sum_{j=0}^m \mathbf{b}_j^T \mathbf{r}_j$, $f(x) \in C^{(m)}[x_\alpha, x_\beta]$ \mathbf{r}_j вычисляются *рекурсивно*: $\mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_{j-1}, \alpha, \beta; f_v^{(j)})$, $j = \overline{1, m}$, $v = \alpha, \beta, 0$, $f_v \equiv f(x_v)$ [6]. Вывод формул для вычисления коэффициентов \mathbf{r}_0 , \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 и \mathbf{r}_3 аппроксимирующих многочленов степени $n = 2, 5, 8, 11$ опубликованы в [4–6].

2. Формулы для вычисления коэффициентов на неравномерной сетке

Для $n = 2$, $\mathbf{r}_0 = [f_\alpha, f_\beta, f_0]^T$. Компоненты вектора \mathbf{r}_j , $j = 1, 2, 3$ на *неравномерной* сетке $\Delta_3^{\alpha\beta}$ определяются через свертку \mathbf{r}_{j-1} с векторами $\mathbf{v} = [\beta, -\alpha, -\gamma]^T$, $\mathbf{v}_\alpha = [\beta(\gamma - \alpha), \alpha^2, -\gamma^2]^T$, $\mathbf{v}_\beta = [\beta^2, -\alpha(\beta + \gamma), -\gamma^2]^T$, $\mathbf{v}_0 = [-\beta^2, \alpha^2, \gamma(\alpha + \beta)]^T$, компоненты которых зависят от параметров сетки и длины интервала $\gamma = \beta - \alpha$.

Замечание 1. Максимальный порядок производных в формулах для вычисления коэффициентов r_{jv} в n/m раз меньше степени аппроксимирующего многочлена, что позволяет существенно *уменьшить* число операций, связанных с вычислением производных в узлах сетки.

Ниже приведены формулы *рекурсивного* вычисления коэффициентов (компоненты $r_{3\alpha}, r_{3\beta}, r_{30}$) вектора \mathbf{r}_3 для МБЭ-многочлена 11-й степени через компоненты векторов \mathbf{r}_0 , \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 (для МБЭ-многочленов 2-й, 5-й и 8-й степени).

$$\mathbf{r}_3 = \begin{bmatrix} r_{3\alpha} \\ r_{3\beta} \\ r_{30} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha^3\gamma^3} \left(\frac{-f_\alpha'''}{3!} + r_{1\alpha} - 2\alpha\gamma(\gamma - \alpha)r_{2\alpha} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_1}{\beta} - \frac{(\gamma - \alpha)\mathbf{v}_\alpha^T \mathbf{r}_1}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\alpha\gamma\mathbf{v}_\alpha^T \mathbf{r}_2}{\beta} \right) \\ \frac{1}{\beta^3\gamma^3} \left(\frac{f_\beta'''}{3!} - r_{1\beta} - 2\beta\gamma(\beta + \gamma)r_{2\beta} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_1}{\alpha} + \frac{(\beta + \gamma)\mathbf{v}_\beta^T \mathbf{r}_1}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\beta\gamma\mathbf{v}_\beta^T \mathbf{r}_2}{\alpha} \right) \\ \frac{1}{\alpha^3\beta^3} \left(\frac{f_0'''}{3!} - r_{10} + 2\alpha\beta(\alpha + \beta)r_{20} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_1}{\gamma} - \frac{(\alpha + \beta)\mathbf{v}_0^T \mathbf{r}_1}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\alpha\beta\mathbf{v}_0^T \mathbf{r}_2}{\gamma} \right) \end{bmatrix}, \quad (2)$$

где

$$\mathbf{r}_0 = \begin{bmatrix} f_\alpha \\ f_\beta \\ f_0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_1 = \begin{bmatrix} r_{1\alpha} \\ r_{1\beta} \\ r_{10} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha\gamma} \left(-f_\alpha' + \frac{\mathbf{v}_\alpha^T \mathbf{r}_0}{\alpha\beta\gamma} \right) \\ \frac{1}{\beta\gamma} \left(f_\beta' + \frac{\mathbf{v}_\beta^T \mathbf{r}_0}{\alpha\beta\gamma} \right) \\ \frac{1}{\alpha\beta} \left(f_0' + \frac{\mathbf{v}_0^T \mathbf{r}_0}{\alpha\beta\gamma} \right) \end{bmatrix}, \quad \mathbf{r}_2 = \begin{bmatrix} r_{2\alpha} \\ r_{2\beta} \\ r_{20} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha^2\gamma^2} \left(\frac{f_\alpha''}{2!} + (\gamma - \alpha)r_{1\alpha} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_0}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\mathbf{v}_\alpha^T \mathbf{r}_1}{\beta} \right) \\ \frac{1}{\beta^2\gamma^2} \left(\frac{f_\beta''}{2!} - (\beta + \gamma)r_{1\beta} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_0}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\mathbf{v}_\beta^T \mathbf{r}_1}{\alpha} \right) \\ \frac{1}{\alpha^2\beta^2} \left(\frac{f_0''}{2!} + (\alpha + \beta)r_{10} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_0}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\mathbf{v}_0^T \mathbf{r}_1}{\gamma} \right) \end{bmatrix}. \quad (3)$$

Формулы (3) и (2) применяются для многочленов $P_{2\downarrow 0} = \Pi_0$, $P_{5\downarrow 1} = \Pi_0 + Q\Pi_1$, $P_{8\downarrow 2} = \Pi_0 + Q\Pi_1 + Q^2\Pi_2$ и $P_{11\downarrow 3} = \Pi_0 + Q\Pi_1 + Q^2\Pi_2 + Q^3\Pi_3$, соответственно.

Несмотря на сложность формул, число арифметических операций в них можно *уменьшить* за счет *табулирования* компонент векторов \mathbf{v} , \mathbf{v}_α , \mathbf{v}_β , \mathbf{v}_0 и множителей при свертках $\mathbf{v}_\#^T \mathbf{r}_j$. В результате затраты на вычисление одной компоненты в векторах \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 и \mathbf{r}_3 составят 8, 18 и 30 операций, соответственно для многочленов 5-й, 8-й и 11-й степени. Кроме того, число операций можно уменьшить за счет выбора равномерного шага $\alpha = -h$, $\beta = h$.

3. Коэффициенты многочлена при разложении функции по степеням $(x-x_0)$

Коэффициенты в разложении $f(x, \mathbf{d}) \approx d_0 + d_1(x-x_0) + \dots + d_n(x-x_0)^{11}$ на равномерной сетке $\Delta_3^h : x_0 - h < x_0 < x_0 + h$ с учетом обозначений $\phi_{\pm h} = f^{(j)}(x_0 \pm h)$, $I\nabla\phi = I(\phi_h - \phi_{-h})$, $\nabla^2\phi(J, K, L) = J\phi_{-h} + K\phi_0 + L\phi_h$, $I, J, K, L \in Z$ вычисляются по следующим формулам:

$$\left. \begin{aligned} d_0 &= f_0, \quad d_1 = f_0', \quad d_2 = f_0'' / 2!, \quad d_3 = f_0''' / 3! \\ d_4 &= [\nabla^2 f(480, -960, 480) - 165h\nabla f' + h^2\nabla^2 f''(21, -192, 21) - h^3\nabla f'''] / (96h^4), \\ d_5 &= [693\nabla f - h\nabla^2 f'(213, 960, 213) + 24h^2\nabla f'' - h^3\nabla^2 f'''(1, 64, 1)] / (96h^5), \\ d_6 &= [\nabla^2 f(-320, 640, -320) + 131h\nabla f' + h^2\nabla^2 f''(-19, 96, -19) + h^3\nabla f'''] / (32h^6), \\ d_7 &= [-495\nabla f + h\nabla^2 f'(175, 640, 175) - 22h^2\nabla f'' + h^3\nabla^2 f'''(1, 32, 1)] / (32h^7), \\ d_8 &= [\nabla^2 f(240, -480, 240) - 105h\nabla f' - h^2\nabla^2 f''(-17, 64, -17) - h^3\nabla f'''] / (32h^8), \\ d_9 &= [1155\nabla f - h\nabla^2 f'(435, 1440, 435) + 60h^2\nabla f'' - h^3\nabla^2 f'''(3, 64, 3)] / (96h^9), \\ d_{10} &= [\nabla^2 f(-192, 384, -192) + 87h\nabla f' + h^2\nabla^2 f''(-15, 48, -15) + h^3\nabla f'''] / (96h^{10}), \\ d_{11} &= [-315\nabla f + h\nabla^2 f'(123, 384, 123) - 18h^2\nabla f'' + h^3\nabla^2 f'''(1, 16, 1)] / (96h^{11}). \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Из (4) видно, что в многочленах 5-й и 8-й степени максимальный порядок производных равен *трем*. В [6] приведены формулы для многочлена 5-й степени, в которых используется только первый порядок производных, а для 8-й – первый и второй.

Замечание 2. Компоненты в \mathbf{r}_0 равны значениям функции в узлах сетки f_α, f_β, f_0 или их оценкам $\bar{f}_\alpha, \bar{f}_\beta, \bar{f}_0$. Переносом Π_0 в левую часть равенства (1) исходная модель трансформируется к виду $u = \sum_{j=1}^m \mathbf{b}_j^T \mathbf{r}_j$, где $u = f - \mathbf{w}^T \mathbf{r}_0$. В результате *уменьшается* число арифметических операций при вычислении коэффициентов за счет *понижения порядка* модели $u(x, \mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_j) = f(x) - \Pi_0(x, \mathbf{r}_0)$. Например, в модели 6-го порядка вместо шести будет только 3 свободных коэффициента. В случае сглаживания, в качестве оценок $\hat{r}_{0\nu}$, $\nu = \alpha, \beta, 0$ берутся средние значения *небольшого числа* точек $\bar{f}_{0\nu} = \sum_{i=-M}^M \tilde{f}_i$, расположенных вблизи \tilde{f}_ν .

4. Функциональные свойства МБЭ-многочленов

Базисные элементы w_1, w_2, w_3 и Q определяются по координатам четырех точек и зависят от непрерывных параметров α и β . Параметр x_0 используется для *сдвига* сетки $\Delta_3^{\alpha\beta}$, а перемещение x_0 в пределах сетки изменяет значения параметров и влияет на поведение базисных функций $b_{j\nu}$. При этом, параметры α, β и *длина* интервала $\gamma = \beta - \alpha$ в базисных функциях (табл. 1) и в формулах (2), (3) находятся в *знаменателях*, т. е. подбором значений α, β можно подавлять ошибки. Таким образом, с помощью параметров x_0, α, β и γ можно *управлять* эффективностью КПА, в том числе за счет *повышения степени* аппроксимирующего многочлена и *уменьшения* числа сегментов.

5. МБЭ в задачах КПА и СКПА

Особый интерес МБЭ-многочлены представляют для алгоритмов кусочно-полиномиальной аппроксимации гладких функций (КПА) и сглаживания экспериментальных данных (СКПА). В алгоритмах КПА и СКПА обеспечивается 11-й порядок гладкости k -го сегмента в пределах границ сетки $\Delta_3^{\alpha_k \beta_k}$, $k = \overline{1, K}$. Так как $r_{j\nu}$ располагаются на линиях $x = x_\nu$, а на границах отрезка зависят от $f_\nu^{(j)}$, $\nu = \alpha, \beta$, $j = \overline{0, 3}$, то условия $x_{\alpha_k} \equiv x_{\beta_{k-1}}$ и $f_{\alpha_k}^{(j)} \equiv f_{\beta_{k-1}}^{(j)}$, $k = \overline{1, K}$ обеспечивают только 3-й порядок гладкости в узлах стыковки сегментов.

В задачах КПА и СКПА *точность локальной* аппроксимации на отрезке $[x_{\alpha_k}, x_{\beta_k}]$ регулируется параметрами $x_{0_k}, \alpha_k, \beta_k$ и M_k . В случае СКПА средние значения $\bar{f}_{\alpha_k}, \bar{f}_{\beta_k}, \bar{f}_{0_k}$ определяются по числу точек M_k и их точность влияет на результат аппроксимации. *Качество* сглаживания на глобальной сетке $[a, b]: a = x_{\alpha_1} < x_{0_1} < x_{\beta_1} < x_{0_2} < x_{\beta_2} < \dots < x_{\beta_{k-1}} < x_{0_k} < x_{\beta_k} = b$ зависит от числа сегментов K . Таким образом, для оптимизации решения используются *пять* параметров $x_{0_k}, \alpha_k, \beta_k, M_k$ и K . Результаты работы алгоритмов КПА и СКПА [5, 6], основанных на формулах (2–4), покажем на следующих примерах.

6. Пример КПА гладкой функции на равномерной сетке

В качестве первого примера (рис. 1,а) представлены результаты применения формул (4) для КПА кривой $f(x) = F(x; 0, 3)$ на поверхности «мексиканской шляпы» $F = \sin\left(\sqrt{x^2 + y^2}\right)$, $x \in [-5, 5]$, многочленами $\hat{f}_k(x, \mathbf{d}_k)$, $x \in [x_{k-1}, x_k]$, $k = \overline{1, 4}$ на сетках $\Delta_{3k}^h : x_{0k} - h < x_{0k} < x_{0k} + h$, ($h = 1, 2, 5$).

Логарифм модуля невязок и производные аппроксиманты \hat{f}' , \hat{f}'' , \hat{f}''' представлены соответственно на рис. 1,б–д. На рис. 1,е показан пример использования формул (4) для кривой S (7 сегментов) в алгоритме *автоматического обнаружения узлов*, изложенного в работе [5].

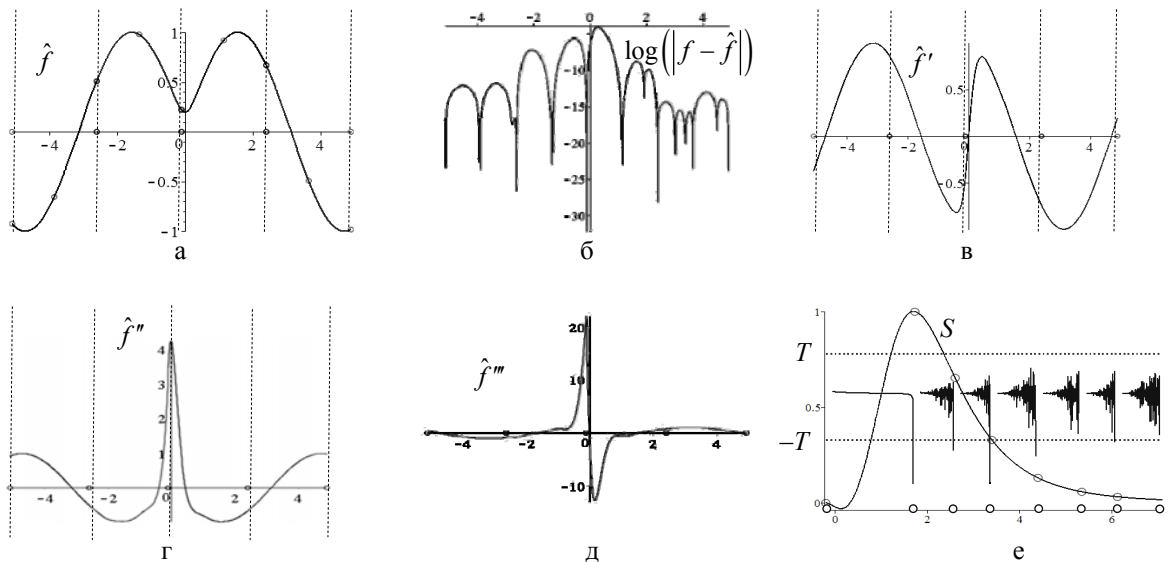


Рис. 1. КПА кривой на «мексиканской шляпе» (а, б, в, г, д) и обнаружение узлов (е)

Сравнение МБЭ-аппроксимации с кубическим сплайном рассмотрим на примере приближения функции, заданной суммой четырех экспонент

$$f(x) = 100 \left\{ 75 \exp\left[-(2,25x - 0,5)^2 - 15,6025\right] + 75 \exp\left[-(0,1836x + 0,0204)^2 - 11,8810\right] + 50 \exp\left[-(2,25x - 1,75)^2 - 11,9025\right] - 20 \exp\left[-(9x - 4)^2 - 8,41\right] \right\}, \quad x \in [-1,25; 2,15].$$

На глобальной сетке $[a, b]$ с тринадцатью узлами x_l , $l = \overline{1, 13}$

$$\underbrace{-1,28 < -1,00 < -0,72 < -0,44 < -0,16 < 0,12 < 0,40 < 0,68 < 0,96 < 1,24 < 1,52 < 1,80 < 2,08}_{\Delta_{31}^h} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\Delta_{32}^h} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\Delta_{33}^h} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\Delta_{34}^h} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\Delta_{35}^h} \quad \underbrace{\hspace{10em}}_{\Delta_{36}^h}$$

выделим шесть локальных сеток Δ_{3k}^h с шагом $h = 0,28$ на которых вычислим коэффициенты многочленов \hat{f}_k , $k = \overline{1, 6}$ по формулам (4). Узлы x_l используем также для вычисления кубического сплайна в процедуре *with(CurveFitting)*: $Sp := Spline(\dots)$ из пакета Maple. На графиках рис. 2,а показаны функция f (в формате dot), многочлены \hat{f}_k , $k = \overline{1, 6}$, обозначенные, как $\hat{f}_{\text{МБЭ}}$ и сплайн $\hat{f}_S = Sp$. Максимальные значения модулей невязок $\varepsilon_S = |f - \hat{f}_S|$ и $\varepsilon_{\text{МБЭ}} = |f - \hat{f}_{\text{МБЭ}}|$ равны соответственно 0,215 и 0,005. На графике видно, что для приближения кубическим сплайном надо исполь-

зовать другую сетку с увеличенным числом узлов (рис. 2,а). На графике невязок для производных разрывы появляются только в четвертой производной (рис. 2,б).

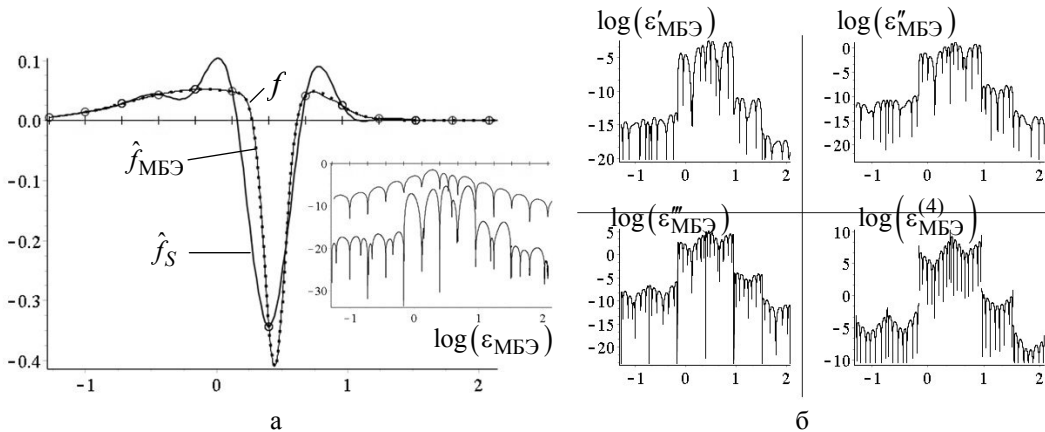


Рис. 2. Узлы функции f , кубический сплайн \hat{f}_S , аппроксиманта $\hat{f}_{MBЭ}$ (а) и невязки для производных $\hat{f}'_{MBЭ}$, $\hat{f}''_{MBЭ}$, $\hat{f}'''_{MBЭ}$ и $\hat{f}^{(4)}_{MBЭ}$ (б)

7. Примеры сглаживания данных на неравномерной сетке

Управление точностью и качеством сглаживания с помощью параметров x_0 , α , β , M и K в пределах границ сетки $\Delta_3^{\alpha\beta}$ покажем на примере выборки данных $\{\tilde{f}_i = f_i + e_i\}_{i=1}^N$, $e_i \approx N(0, \sigma)$, $x \in [1, 25; 1, 5]$, рассеянных вблизи кривой, моделирующей сигнал в радиационном детекторе

$$f(x) = \exp\left\{-\frac{(x-m)^2}{2[s+c(x-m)]^2}\right\} + 0,3, \quad (5)$$

где s , c , m – параметры, определяющие форму сигнала.

На сетке $\Delta_3^{\alpha\beta}$ данные $\{\tilde{f}_i\}_{i=1}^N$ трансформируются к виду $\{\tilde{u}_i = \tilde{f}_i - \hat{\Pi}_{0i}\}_{i=1}^N$, где $\hat{\Pi}_{0i} = \mathbf{w}_i^T \hat{\mathbf{r}}_0$. Для сглаживания $\{\tilde{u}_i\}_{i=1}^N$ методом наименьших квадратов (МНК) в пределах одного сегмента при $K=1$ используются формулы (2), (3) и МБЭ-полином с девятью коэффициентами

$$u = Q\Pi_1 + Q^2\Pi_2 + Q^3\Pi_3 = \mathbf{b}_1^T \mathbf{r}_1 + \mathbf{b}_2^T \mathbf{r}_2 + \mathbf{b}_3^T \mathbf{r}_3, \quad x \in [x_\alpha, x_\beta]. \quad (6)$$

Оценки \hat{r}_{jv} определяются из условия $\frac{\partial}{\partial r_{jv}} \left\{ \sum_{i=1}^N \left[\tilde{u}_i - \sum_{j=1}^3 \mathbf{b}_{ji}^T \mathbf{r}_j \right]^2 \right\} = 0$, $v = \alpha, \beta, 0$.

Многочлен $\hat{f}_B = \hat{\Pi}_0 + \hat{u}$ сравнивается с \hat{f}_A – результатом сглаживания многочленом 11-й степени $\hat{f}_A := \text{LeastSquares}(xdat, ydat, \dots)$ из пакета Maple.

На рис. 3 представлены результаты среднеквадратичной аппроксимации кривой (5) ($s=0,00425$, $c=0,125$, $m=1,3$) процедурой $\hat{f}_A := \text{LeastSquares}(\dots)$ и МБЭ-многочленом \hat{f}_B при различных значениях x_0 , α и β (табл. 2). Максимальные значения модулей невязок $\varepsilon_B = |f - \hat{f}_B|$ и $\varepsilon_A = |f - \hat{f}_A|$ приведены в табл. 2, а их графики показаны в нижней части рисунка.

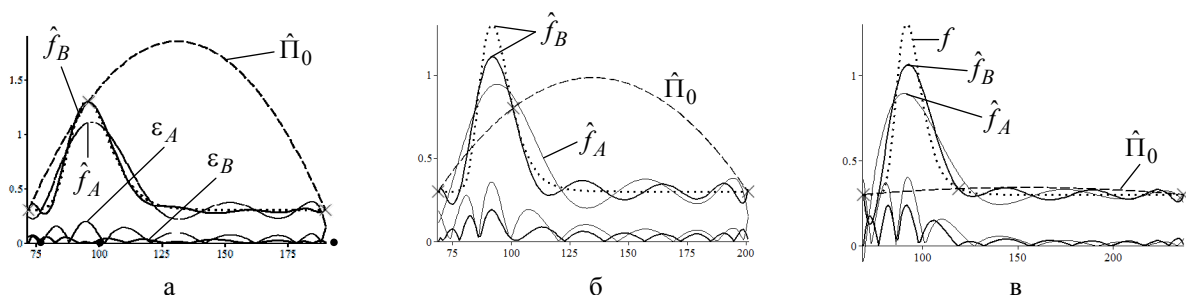


Рис. 3. Графики \hat{f}_B , \hat{f}_A и модули невязок при изменении \hat{f}_B , α и β

Таблица 2

Рис.	N	σ	M	α	x_0	β	$\max(\epsilon_B)$	$\max(\epsilon_A)$
3а	189	10^{-6}	0	-0,0125	1,3	0,05	0,057	0,201
3б	132	10^{-6}	0	-0,0175	1,305	0,055	0,189	0,364
3в	168	10^{-6}	0	-0,0275	1,315	0,065	0,241	0,407
4а	131	0,05	1	-0,0125	1,3	0,05	0,064	0,167
4б	189	0,1	1	-0,275	1,315	0,065	0,153	0,318
4в	189	0,25	4	-0,02295	1,315	0,06045	0,110	0,253

Наименьшие невязки ϵ_B получаются при выборе x_0 в окрестности пика (рис. 3,а), тогда как при сдвиге x_0 вправо невязка увеличивается (рис. 3,б,в).

На рис. 4,а-в показаны сравнения результатов сглаживания \hat{f}_B и \hat{f}_A при изменении формы сигнала ($s=0,006$, $c=0,4$, $m=1,3$) и увеличении ошибок. Показаны «реперные параболы» $\hat{\Pi}_0$, модифицированные данные \tilde{u}_i (6) и аппроксиманты $\hat{u} = \mathbf{b}_1\hat{\mathbf{r}}_1 + \mathbf{b}_2\hat{\mathbf{r}}_2 + \mathbf{b}_3\hat{\mathbf{r}}_3$.

Справа показаны графики функции $f(x)$ (5), регрессионных многочленов $\hat{f}_B = \hat{\Pi}_0 + \hat{u}$, \hat{f}_A и модули невязок ϵ_B , ϵ_A . МБЭ-ошибки меньше ошибок аппроксимант \hat{f}_A за счет подбора параметров \hat{f}_B , α , β и M (см. табл. 2).

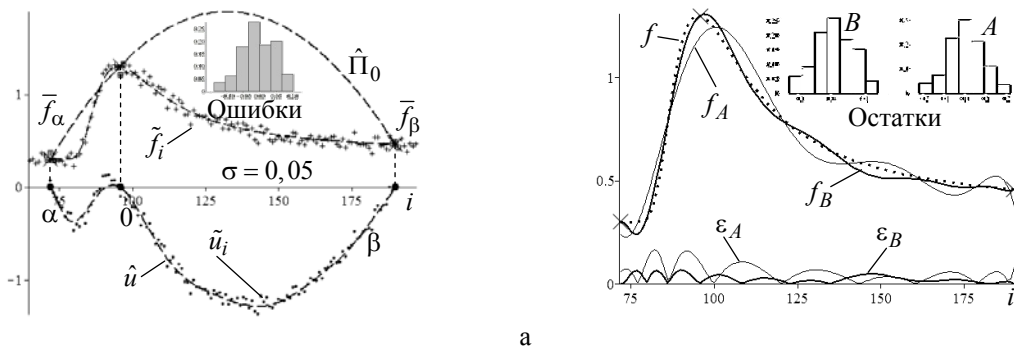


Рис. 4. СКПА МБЭ-многочленами при изменении σ , \hat{f}_B , α , β и M (выделены ближайшие к узлам точки, по которым определяются компоненты $\hat{\mathbf{r}}_0$) (см. также с. 120)

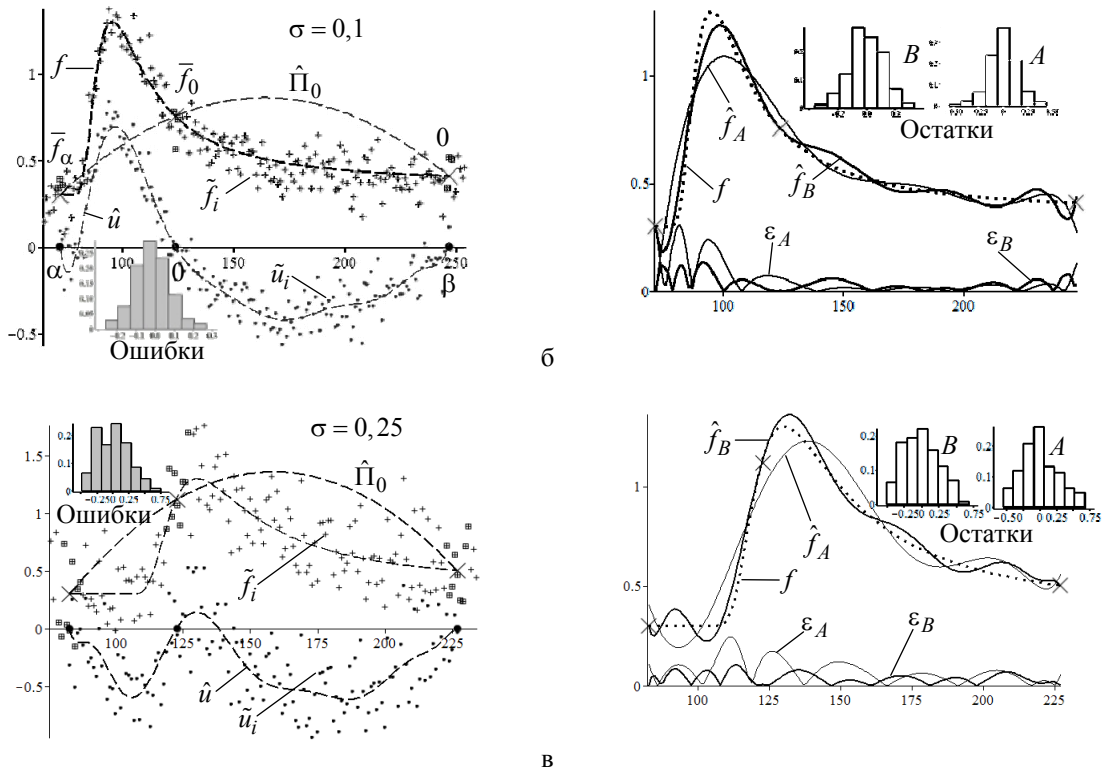


Рис. 4. Окончание

8. Примеры сглаживания и сегментации контурных линий

Приближение и сглаживание параметрически заданных кривых МБЭ-многочленами рассмотрено в работе [6]. На рис. 5, 6 показаны результаты *параметрического* сглаживания МБЭ-многочленами 11-й степени и сегментации контурных линий более сложной топологии.

Сглаживание контуров треков α -частиц на микрофотографии со следами взаимодействия быстрых нейтронов с ядрами полимеров [7] показано на рис. 5. На каждом треке измерялись координаты 30 точек (б), которые сглаживались одним сегментом – параметрической кривой $\Gamma(\hat{x}, \hat{y}, s)$, где $\hat{x}(s)$ и $\hat{y}(s)$ – регрессионные многочлены 11-й степени, а s – параметр дуги (в).

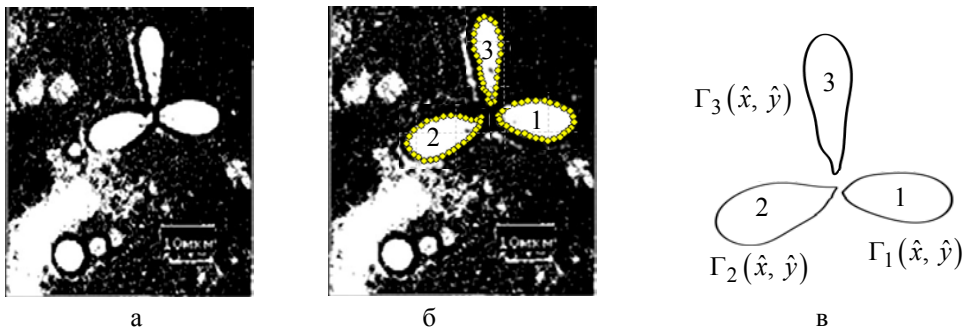


Рис. 5 Микрофотография следов взаимодействия быстрых нейтронов с ядрами полимеров (а), измерения точек (б) и результаты сглаживания α -треков (в)

При решении классических задач математической физики, распознавания образов и многих задач в области техники, медицины и т. д. необходимо знать *аналитическое* выражение для границ

объекта (уравнение контурной линии). Например, построение системы *информативных* признаков (*кривизна, отношение толщины* объекта и т. д.), *инвариантных* к геометрическим преобразованиям является ключевой проблемой в задачах распознавания [8, 9]. Примеры применения многочленов высоких степеней и формул (2), (3) для аналитического описания контурных линий показаны на рис. 6.

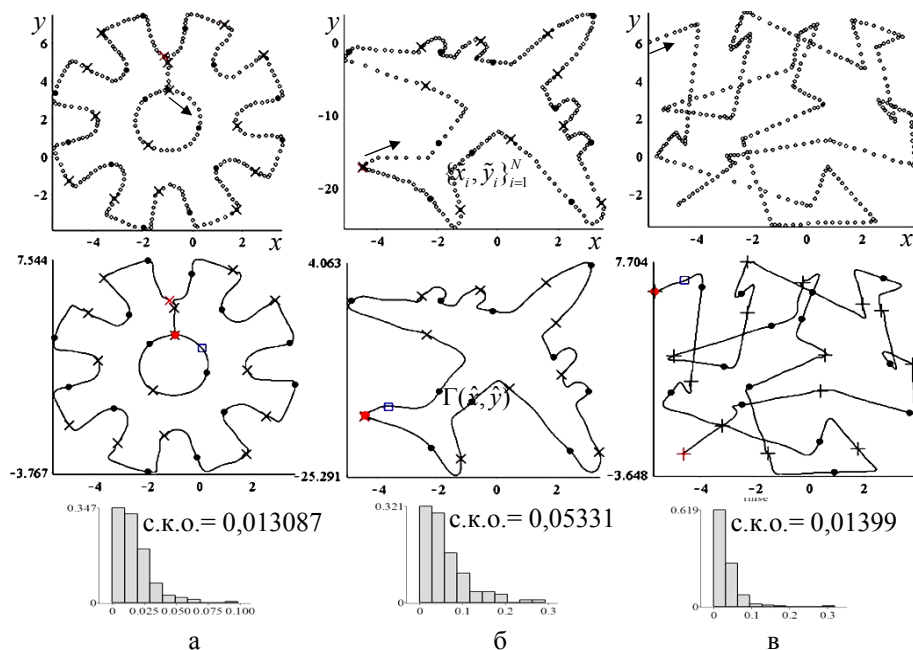


Рис. 6. Сглаживание и сегментирование контуров МБЭ-многочленами 11-й степени

На изображениях входных (вверху) и выходных (в середине) данных крестиками отмечены стыковочные узлы с координатами $(\bar{x}_{\alpha_k}, \bar{y}_{\alpha_k})$ и $(\bar{x}_{\beta_k}, \bar{y}_{\beta_k})$, а внутренние узлы $(\bar{x}_{0_k}, \bar{y}_{0_k})$ отмечены жирными точками. Стрелки указывают начало и направление измерений. Уравнение контура шестеренки (рис. 6,а) включает 28 регрессионных многочленов 11-й степени $\hat{x}_k(s)$ и $\hat{y}_k(s)$, $k = \overline{1,14}$ – всего 336 коэффициентов (при среднеквадратичной ошибке с.к.о. = 0,013087).

Координаты 225 точек, измеренные на контуре самолета сглажены десятью сегментами (240 коэффициентов, с.к.о. = 0.05331) (рис. 6,б), а для сглаживания 329 точек траектории броуновского движения частицы использовано 14 сегментов (с.к.о. = 0.01399) (рис. 6,в). Внизу показаны гистограммы среднеквадратичных ошибок.

Заключение

Предложен новый подход к решению задач полиномиальной аппроксимации и сглаживания экспериментальных данных многочленами *высокой степени* на *трехточечной сетке* – *метод базисных элементов* (МБЭ).

В рамках МБЭ предложена новая конструкция МБЭ-многочлена, в которой синтезированы свойства многочлена Тейлора в узлах трехточечной сетки и многочлена Лагранжа второй степени. МБЭ-многочлены выгодно использовать при работе с полиномиальными моделями высоких порядков. МБЭ расширяет границы применимости классических методов.

Повышение эффективности полиномиальной МБЭ-модели в задачах КПА и СКПА обеспечивается за счет:

- Использования *трехточечной сетки*.

- Разложения многочлена по *базисным элементам*.
- Зависимости *базисных элементов* и *коэффициентов* от непрерывных параметров трехточечной сетки.
- *Понижения порядка* производных и *увеличения шага* сетки.
- *Понижения вычислительной сложности*.
- *Управления качеством* регрессионной матрицы.
- *Устойчивости вычислений* к входным ошибкам и др.

Указанные свойства позволяют создавать алгоритмы с включением режима *оптимизации* решения в задачах КПА.

Эффективность расчетов подтверждена нетривиальными примерами аппроксимации аналитически заданных кривых, сегментации и сглаживания по координатам точек на контурных линиях. Формулы для вычисления коэффициентов аппроксимирующих многочленов могут быть использованы как для решения практических задач, так и для теоретических исследований.

Литература

1. Калиткин Н. Н., Шляхов Н. М. В-сплайны произвольной степени // ДАН, 1999. Т. 367, № 2. С. 157–160.
2. де Бор К. Практическое руководство по сплайнам. М.: «Радио и связь», 1985.
3. Dikoussar N. D. Function parameterization by using 4-point transforms // Comput. Phys. Commun. 1997. Vol. 99. P. 235–254.
4. Дикусар Н. Д. Метод базисных элементов // Матем. модел. 2010. Т. 22, № 12. С. 115–136 (MMCS. 2011. Vol. 3, N 4. P. 492–507).
5. Дикусар Н. Д. Кусочно-полиномиальная аппроксимация шестого порядка с автоматическим обнаружением узлов // Матем. модел. 2014. Т. 26, № 3. С. 31–48 (MMCS. 2014. Vol. 6, N 5. P. 509–522).
6. Дикусар Н. Д. Полиномиальная аппроксимация высоких порядков // Матем. модел. 2015. Т. 27, № 9. С. 89–109 (MMCS. 2016. Vol. 8, N 2. P. 183–200).
7. Зорин Г. Н., Стрелков А. В., Третьякова С. П., Воинов А. М., Горбачев В. М., Емельянов Б. А., Ильич Р., Скварч Ю. Изучение возможности регистрации термоядерных нейтронов в условиях высокого фона атомного реактора // Атомная энергия. 1996. Т. 80, № 6. С. 473–474.
8. Дуда Р., Харт П. Распознавание образов и анализ сцен. М.: Мир, 1976.
9. Методы компьютерной обработки изображений. Под ред. В. А. Сойфера. М.: Физматлит, 2003.

ТЕНДЕНЦИИ РАЗВИТИЯ ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ВЫЧИСЛЕНИЙ. ТЕПЕРЬ ИЛИ ОПЯТЬ СПЕЦИАЛИЗАЦИЯ?

Г. С. Елизаров

НИИ «Квант», г. Москва

Введение

Вокруг супер вычисления. В кармане каждого из нас вычислительное устройство, которое превосходит по производительности все вычислительные машины вместе взятые, которые были в распоряжении человечества, когда оно было уже достаточно развито, чтобы взорвать атомную бомбу, преодолеть земное притяжение и устремиться в космос.