

P11-2016-85

Н. Д. Дикусар *

**ОПТИМИЗАЦИЯ РЕШЕНИЯ В ЗАДАЧАХ
КУСОЧНО-ПОЛИНОМИАЛЬНОЙ АППРОКСИМАЦИИ**

Доложено на XVI Международной конференции
«Супервычисления и математическое моделирование»,
Саров, 3–7 октября 2016 г.

* E-mail: dnd@jinr.ru

Дикусар Н. Д.

P11-2016-85

Оптимизация решения в задачах кусочно-полиномиальной аппроксимации

Кусочно-полиномиальная аппроксимация (КПА) широко используется в области цифровых технологий и обработки данных. В рамках метода базисных элементов (МБЭ) оптимизация решения задач КПА достигается за счет функциональной связи базисных функций и формул для вычисления коэффициентов с параметрами трехточечной сетки. Результаты оптимизации и сравнение с результатами соответствующих процедур из пакета Maple показаны на примерах МБЭ-аппроксимации 12-го порядка.

Работа выполнена в Лаборатории информационных технологий ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2016

Dikusar N. D.

P11-2016-85

Optimization of a Solution in Problems of Piecewise Polynomial Approximation

Piecewise polynomial approximation (PPA) is widely used in digital technology and data processing. Within the framework of the Basic Element Method (BEM), optimization of the solution of PPA problems is achieved on the basis of the functional relationship between basis functions and applying formulas to calculate the coefficients depending on parameters of the three-point grid. The results of optimization and comparison with the results of the respective Maple-procedures are illustrated by examples of the 12th-order BEM-approximation.

The investigation has been performed at the Laboratory of Information Technologies, JINR.

Preprint of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna, 2016

*Я занимался до сих пор решением задач, ибо
при изучении наук примеры полезнее правил.*

И. Ньютон

ВВЕДЕНИЕ

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 -й степени разлагается по четырем базисным элементам — одной кубической и трем квадратичным параболам. 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 [6].

1. БАЗИСНЫЕ ЭЛЕМЕНТЫ И КОНСТРУКЦИЯ МБЭ-МНОГОЧЛENA

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

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}	$\frac{(\tau - \alpha)(\tau - \beta)}{\alpha\beta}$	$\frac{\tau(\tau - \alpha)^2(\tau - \beta)^2}{\alpha\beta}$	$\frac{\tau^2(\tau - \alpha)^3(\tau - \beta)^3}{\alpha\beta}$	$\frac{\tau^3(\tau - \alpha)^4(\tau - \beta)^4}{\alpha\beta}$

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:

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

Для четверки $[\tau\alpha\beta0]$ при изменении порядка в тройке $[\alpha\beta0]$ это правило порождает три *дробно-рациональные* функции w_1, w_2, w_3 относительно параметров α, β и τ (квадратичные относительно τ):

$$w_1 = \frac{-\tau(\tau - \beta)}{\alpha\gamma}, \quad w_2 = \frac{\tau(\tau - \alpha)}{\beta\gamma}, \quad w_3 = \frac{(\tau - \alpha)(\tau - \beta)}{\alpha\beta},$$

$$\sum_{i=1}^3 w_i = 1, \quad \gamma = \beta - \alpha, \quad \alpha\beta\gamma \neq 0.$$

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; $n = 11$, $m = 3$).

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 $P_n^{(j)}(x_\nu; \mathbf{a})$, $j = \overline{0, m}$, $\nu = \alpha, \beta, 0$.

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

$$\begin{aligned} r_3 &= \begin{bmatrix} r_{3\alpha} \\ r_{3\beta} \\ r_{30} \end{bmatrix} = \\ &= \begin{bmatrix} \frac{1}{\alpha^3 \gamma^3} \left(\frac{-f_\alpha'''}{3!} + r_{1\alpha} - 2\alpha\gamma(\gamma - \alpha)r_{2\alpha} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_1}{\beta} - \frac{(\gamma - \alpha)\mathbf{v}_\alpha^T \mathbf{r}_1}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\alpha\gamma\mathbf{v}_\alpha^T \mathbf{r}_2}{\beta} \right) \\ \frac{1}{\beta^3 \gamma^3} \left(\frac{f_\beta'''}{3!} - r_{1\beta} - 2\beta\gamma(\beta + \gamma)r_{2\beta} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_1}{\alpha} + \frac{(\beta + \gamma)\mathbf{v}_\beta^T \mathbf{r}_1}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\beta\gamma\mathbf{v}_\beta^T \mathbf{r}_2}{\alpha} \right) \\ \frac{1}{\alpha^3 \beta^3} \left(\frac{f_0'''}{3!} - r_{10} + 2\alpha\beta(\alpha + \beta)r_{20} + \frac{\mathbf{v}^T \mathbf{r}_1}{\gamma} \frac{(\alpha + \beta)\mathbf{v}_0^T \mathbf{r}_1}{\alpha\beta\gamma} + \frac{\alpha\beta\mathbf{v}_0^T \mathbf{r}_2}{\gamma} \right) \end{bmatrix}, \end{aligned} \tag{2}$$

где

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

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

Формулы (2) и (3) 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 степеней. 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 Δ_3^h : $x_0 - h < x_0 < x_0 + h$ с учетом обозначений $\phi_{\pm h} = f^{(j)}(x_0 \pm h)$, $I\nabla\phi = I(\phi_h - \phi_{-h})$, $\nabla^2\phi(J, K, L) = J\phi_{-h} + K\phi_0 + L\phi_h$ вычисляются по следующим формулам:

$$d_0 = f_0, d_1 = f'_0, d_2 = f''_0/2!, d_3 = f'''_0/3!,$$

$$d_4 = [\nabla^2 f(480, -960, 480) - 165h\nabla f' + h^2 \nabla^2 f''(21, -192, 21) - h^3 \nabla f''']/(96h^4),$$

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

Из (4) видно, что в многочленах 5-й и 8-й степеней 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 $\hat{r}_{\nu 0}$, $\nu = \alpha, \beta, 0$, берутся средние значения небольшого числа точек $\bar{f}_{\nu 0} = \sum_{i=-M}^M \tilde{f}_i$, 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 и γ 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 количества сегментов.

5. МБЭ В ЗАДАЧАХ КПА И СКПА

Особый интерес МБЭ-многочлены представляют для алгоритмов КПА гладких функций и сглаживания экспериментальных данных. 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 $x = x_\nu$ и 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 $\bar{f}_{\alpha_k}, \bar{f}_{\beta_k}, \bar{f}_{0_k}$ зависят от числа усредненных точек M_k . Они также влияют на точность 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, *a*) представлены результаты применения формул (4) для КПА кривой $f(x, 0,3)$ на поверхности «мексиканской шляпы» $f = \sin(\sqrt{x^2 + y^2})$, $x \in [-5, 5]$, на сетках $\Delta_{3k}^h : x_{0k} - h < x_{0k} < x_{0k} + h$ ($h = 1,25$) многочленами $\hat{f}_k(x, \mathbf{d}_k)$, $x \in [x_{k-1}, x_k]$, $k = \overline{1, 4}$.

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].

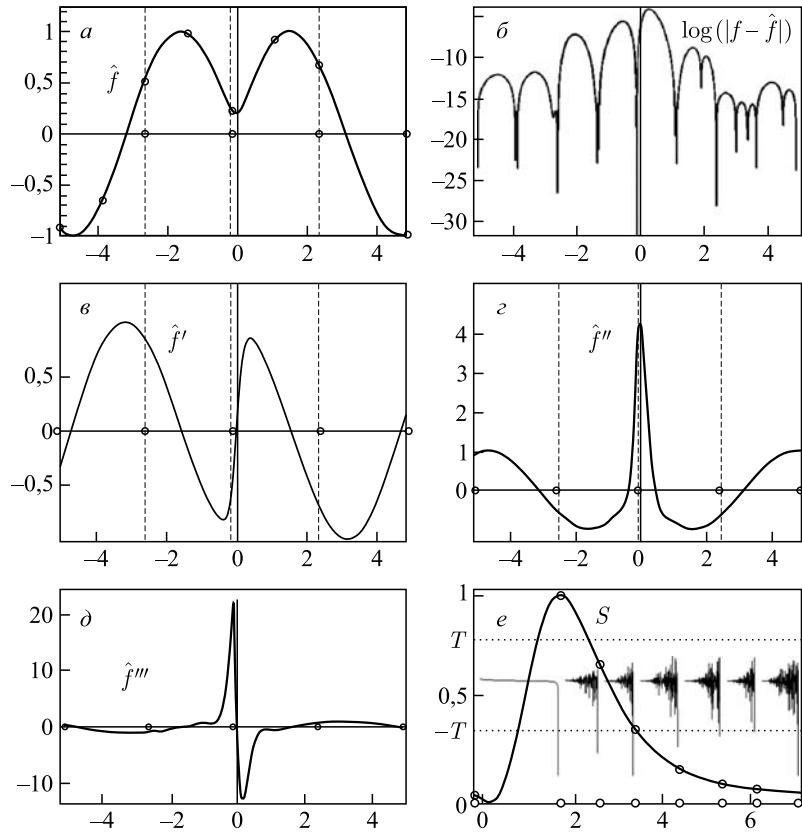


Рис. 1. КПА кривой на «мексиканской шляпе» ($a-d$) и обнаружение узлов (e)

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

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

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

$$\underbrace{-1,28 < -1,00 < -0,7}_{\Delta_{3_1}^h} \underbrace{2 < -0,44 < -0,1}_{\Delta_{3_2}^h} \underbrace{6 < 0,12 < 0,4}_{\Delta_{3_3}^h} \underbrace{0 < 0,68 < 0,9}_{\Delta_{3_4}^h} \underbrace{6 < 1,24 < 1,5}_{\Delta_{3_5}^h} \underbrace{2 < 1,80 < 2,08}_{\Delta_{3_6}^h}$$

выделим шесть локальных сеток $\Delta_{3_k}^h$ 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 в процедуре `with(CurveFitting) : Sp := Spline(...)` из пакета Maple для вычисления кубического сплайна. На графиках рис. 2, *a* показаны функция f (в формате dot), многочлены \hat{f}_k , $k = \overline{1,6}$, обозначенные как $\hat{f}_{\text{МБЭ}}$, и сплайн $\hat{f}_S = Sp$.

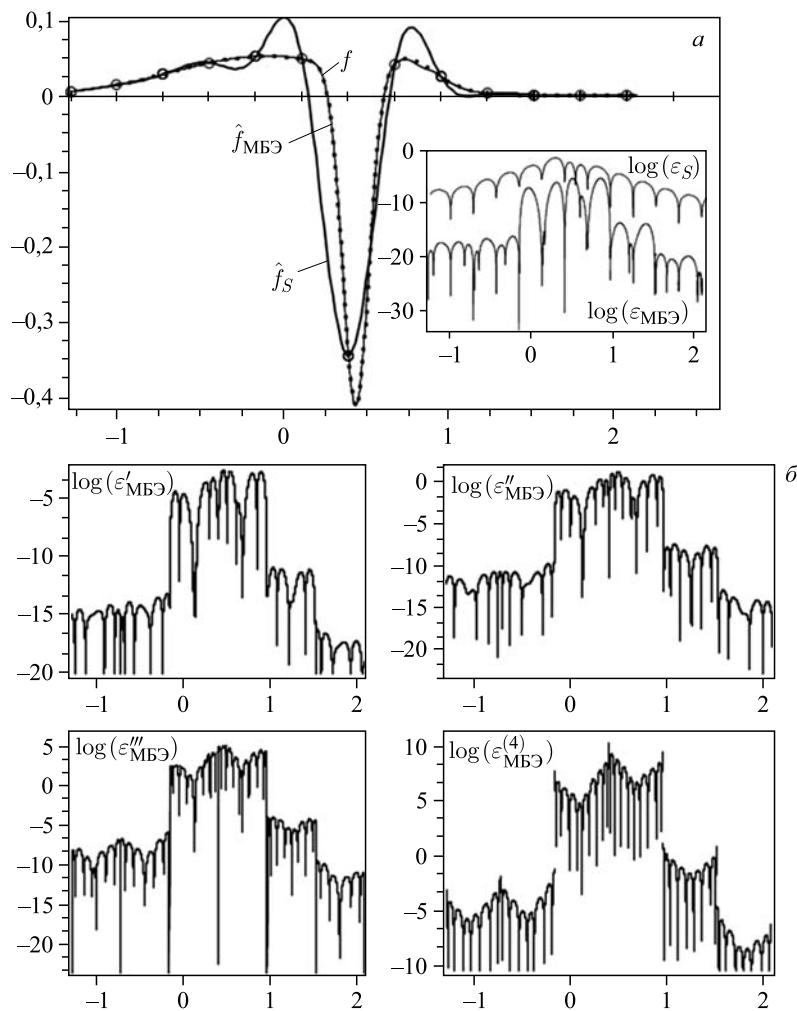


Рис. 2. Узлы функции f , кубический сплайн \hat{f}_S , аппроксиманта $\hat{f}_{\text{МБЭ}}$ (*a*) и невязки для производных $\hat{f}'_{\text{МБЭ}}$, $\hat{f}''_{\text{МБЭ}}$, $\hat{f}'''_{\text{МБЭ}}$ и $\hat{f}^{(4)}_{\text{МБЭ}}$ (*b*)

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

7. ПРИМЕРЫ СГЛАЖИВАНИЯ ДАННЫХ НА НЕРАВНОМЕРНОЙ СЕТКЕ

Управление точностью и качеством сглаживания с помощью параметров x_0, α, β и M 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

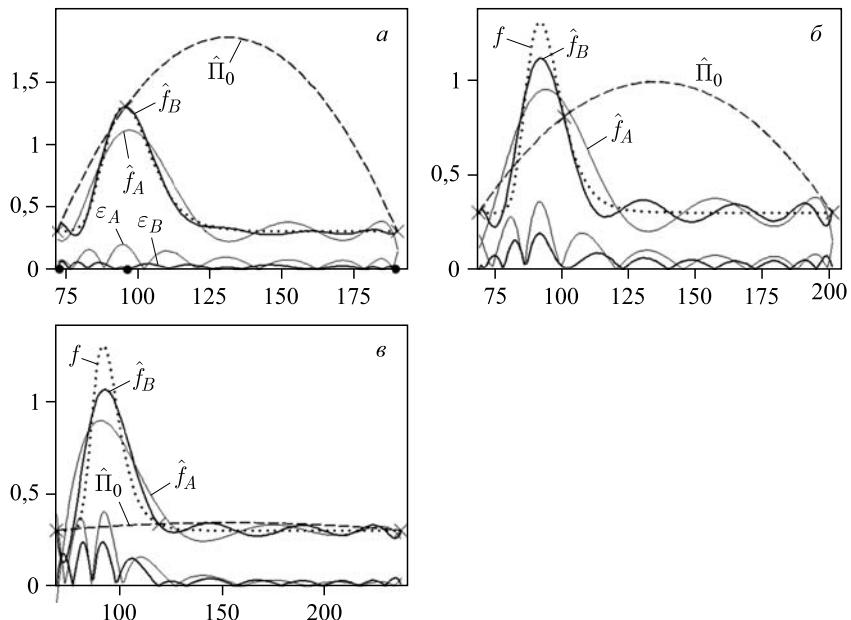


Рис. 3. Графики \hat{f}_B , \hat{f}_A и модули невязок при изменении x_0, α и β

Таблица 2

№ рисунка	N	σ	M	α	x_0	β	$\max(\varepsilon_B)$	$\max(\varepsilon_A)$
3, а	189	10^{-6}	0	-0,0125	1,3	0,05	0,057	0,201
3, б	132	10^{-6}	0	-0,0175	1,305	0,055	0,189	0,364
3, в	168	10^{-6}	0	-0,0275	1,315	0,065	0,241	0,407
4, а, б	131	0,05	1	-0,0125	1,3	0,05	0,064	0,167
4, в, г	189	0,1	1	-0,275	1,315	0,065	0,153	0,318
4, д, е	189	0,3	13	-0,275	1,315	0,065	0,311	0,391

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.

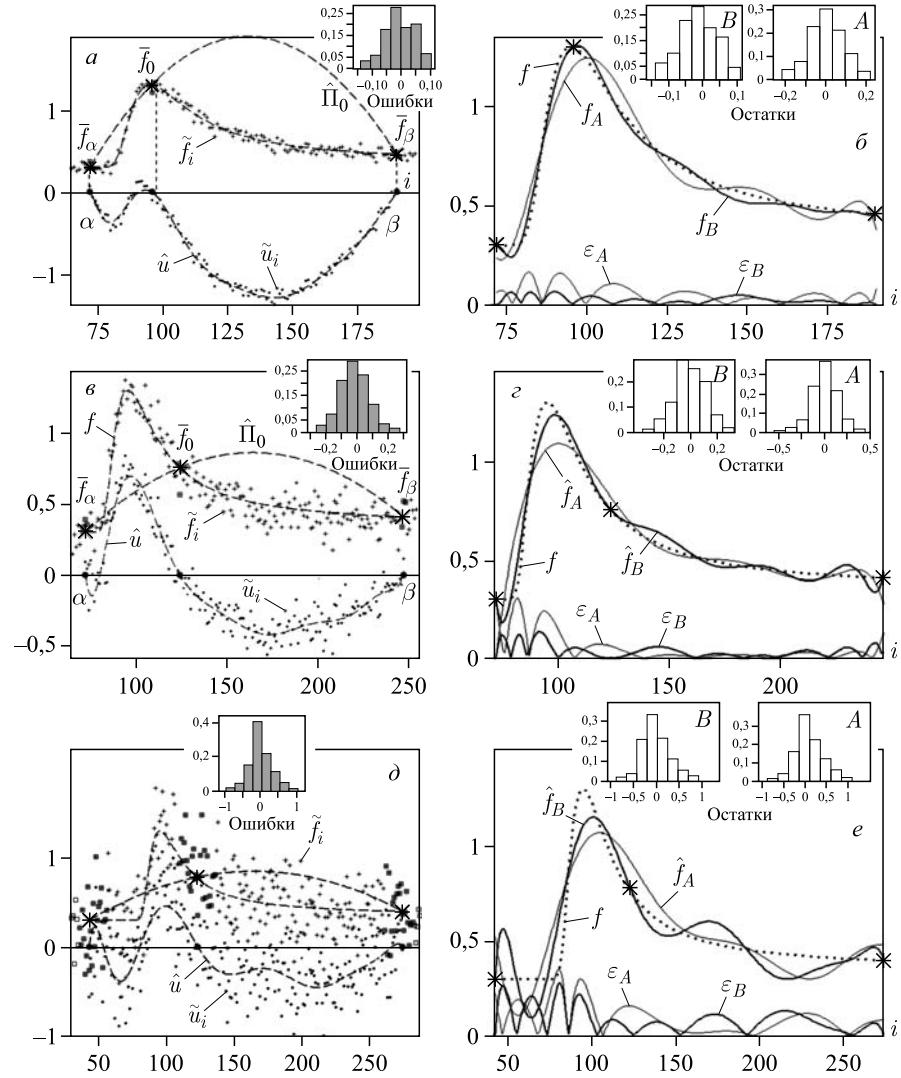


Рис. 4. СКПА МБЭ-многочленами при изменении $\sigma, x_0, \alpha, \beta$ и M (выделены ближайшие к узлам точки, по которым определяются компоненты \hat{r}_0)

Оценки компонент в \mathbf{r}_0 на сетке $\Delta_3^{\alpha\beta}$ используются для модификации данных $\{\tilde{u}_i = \hat{f}_i - \hat{\Pi}_0 i\}_{i=1}^N$. Данные $\{\tilde{u}_i\}_{i=1}^N$ сглаживаются одним сегментом ($K = 1$) на основе формул (2), (3) и полиномиальной модели 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 $\hat{r}_{j\nu}$ определяются из условия $\frac{\partial}{\partial r_{j\nu}} \left\{ \sum_{i=1}^N \left[\tilde{u}_i - \sum_{j=1}^3 \mathbf{b}_{ji}^T \mathbf{r}_j \right]^2 \right\} = 0$, $\nu = \alpha, \beta, 0$.

Многочлен $\hat{f}_B = \hat{\Pi}_0 + \hat{u}$ сравнивается с \hat{f}_A — результатом процедуры *LeastSquares*(...) из пакета Maple (модель $f \approx \hat{f}_A = a_0 + a_1 x + \dots + a_{11} x^{11}$).

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.

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

На рис. 4, a–e показано сравнение 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 приведены 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 для $\sigma, x_0, \alpha, \beta$ и M из табл. 2.

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.

Пример сглаживания контуров треков α -частиц на микрофотографии со следами взаимодействия быстрых нейтронов с ядрами полимеров [7] показан на рис. 5. На каждом треке измерялись координаты 30 точек (рис. 5, б), которые были аппроксимированы 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 (рис. 5, в).

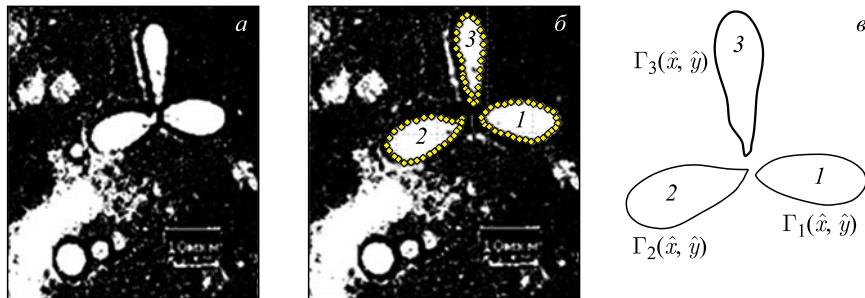


Рис. 5. Следы взаимодействия быстрых нейтронов с ядрами полимеров (а), измерение точек (б) и результаты сглаживания α -треков (в)

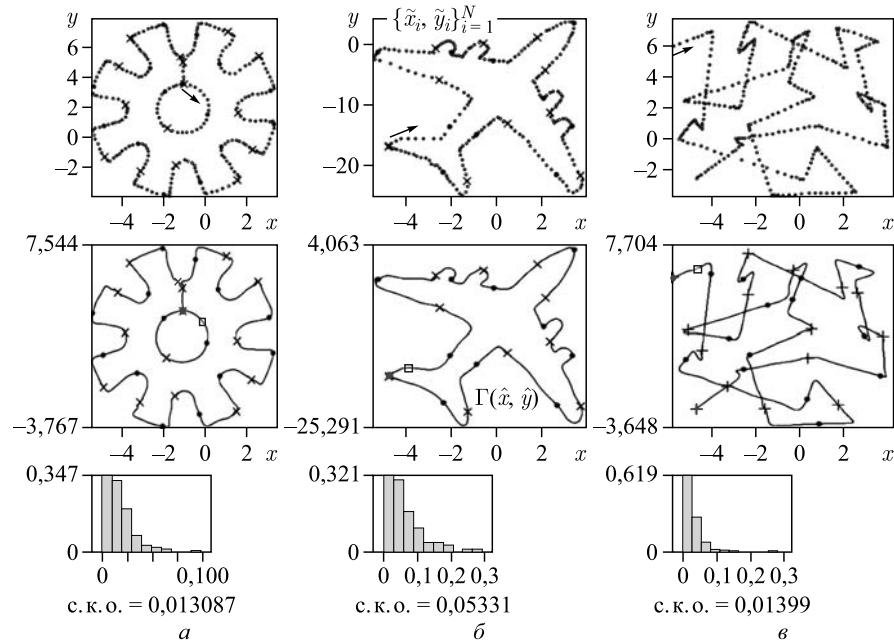


Рис. 6. Сглаживание и сегментирование контуров МБЭ-многочленами 11-й степени

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.

На входных данных (вверху) и на выходе (в средине) крестиками отмечены стыковочные узлы с координатами $(\bar{x}_{\alpha_k}, \bar{y}_{\alpha_k})$ и $(\bar{x}_{\beta_k}, \bar{y}_{\beta_k})$, а точками — внутренние узлы $(\bar{x}_{0_k}, \bar{y}_{0_k})$. Стрелки указывают начало и направление измерений. Уравнение контура шестеренки (рис. 6, *a*) 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.), равной 0,013087).

Координаты 225 точек, измеренные на контуре самолета, сглажены десятью сегментами (240 коэффициентов, с. к. о. = 0,05331) (рис. 6, *b*), а для сглаживания 329 точек траектории броуновского движения частицы использовано 14 сегментов (с. к. о. = 0,01399) (рис. 6, *c*). 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*.

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. *B*-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. V. 99. P. 235–254.
4. Дикусар Н.Д. Метод базисных элементов // Матем. моделирование. 2010. Т. 22, № 12. С. 115–136 (MMCS. 2011. V. 3, No. 4. P. 492–507).
5. Дикусар Н.Д. Кусочно-полиномиальная аппроксимация шестого порядка с автоматическим обнаружением узлов // Матем. моделирование. 2014. Т. 26, № 3. С. 31–48 (MMCS. 2014. V. 6, No. 5. P. 509–522).
6. Дикусар Н.Д. Полиномиальная аппроксимация высоких порядков // Матем. моделирование. 2015. Т. 27, № 9. С. 89–109 (MMCS. 2016. V. 8, No. 2. P. 183–200).
7. Зорин Г.Н. и др. 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.

Получено 7 декабря 2016 г.

Редактор *A. И. Петровская*

Подписано в печать 31.01.2017.

Формат 60 × 90/16. Бумага офсетная. Печать офсетная.
Усл. печ. л. 1,06. Уч.-изд. л. 1,28. Тираж 215 экз. Заказ № 59021.

Издательский отдел Объединенного института ядерных исследований
141980, г. Дубна, Московская обл., ул. Жолио-Кюри, 6.
E-mail: publish@jinr.ru
www.jinr.ru/publish/