В.И. Дмитриев, Ж.Г. Ингтем

ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЕ НЕТОЧНО ЗАДАННОЙ ФУНКЦИИ С ПОМОЩЬЮ СПЛАЙН-АППРОКСИМАЦИИ.

Введение

Во многих задачах сглаживания экспериментальных данных возникает необходимость построить производную таблично заданной функции. Обычно для решения таких задач строится интерполяционный многочлен (Лагранжа или Ньютона), производная которого принимается в качестве искомой производной функции. Однако такой подход требует известность значений функции на сетке с маленьким шагом, что не всегда является возможным. В настоящей статье для решения данной задачи строится параболическая аппроксимационная сплайн-функция с минимальной нормой производной. Минимизация нормы производной сплайна позволяет получить на границе значение производной близкое к точному значению производной функции и подавить колебания сплайна [2-4]. Таким образом, можно построить сплайн, эффективно приближающий функцию, заданную на сетке с крупным шагом [1-4]. Производная такого сплайна позволяет приблизить искомую производную [1-4]. Если область, в которой надо построить приближение функции является большой, то в силу того, что сплайн все равно на некотором шаге начнет накапливать ошибки, её следует разбить на несколько частей и в каждой подобласти строить свой сплайн с минимальной нормой производной. Однако, учитывая, что производная параболического сплайна является линейной функцией, то на стыке двух подобластей она будет иметь разрыв, поскольку слева от границы значение производной получено из условия гладкой склейки, а справа – из минимизации производной. Чтобы устранить этот разрыв необходимо внести поправку в производную слева от границы стыка.

Пусть на отрезке $[a,b]$ заданна функция своими табличными значениями $\bar{f}^{\delta} = (f_0^{\delta}, f_1^{\delta}, \ldots, f_M^{\delta})$, измеренными с погрешностью δ на сетке $\Delta_M = \{a = t_0 < t_1 < \ldots < t_M = b\}$ с равномерным шагом. Для построения производной такой функции необходимо, для начала, построить сплайн-аппроксимацию самой функции.

Будем строить параболическую сплайн-аппроксимационную функцию на сетке $\Delta'_N = \{a = x_0 < x_1 < \ldots < x_N = b\}$ где $N < M$; число N желательно взять хотя бы в 2 раза меньше чем M:

$$S_i(x,\bar f) = -\frac{(-x+x_i)(-x+x_{i+1})}{h} p_i(\bar f) + \frac{(-x+x_{i+1})(x_{i+1}-2x_i+x)}{h^2} f_i + \\ + \frac{(-x+x_i)^2}{h^2} f_{i+1}. \qquad (1)$$

где $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0,1,\ldots,N-1$, $h = x_{i+1} - x_i = const$ – шаг сетки, $\bar f = (f_0, f_1, \ldots, f_N)$ – вектор аппроксимационных значений, которые следует найти и по которым строится сплайн. $p_i(\bar f)$ – значения производной сплайна в точках x_i, $i = 0,1,\ldots,N$ [2,3]. Эти значения связаны рекуррентной формулой:

$$p_{i+1} = -p_i + 2\frac{(f_{i+1} - f_i)}{h} \qquad (2)$$

для $i = 1,2,\ldots,N$. Таким образом, необходимо найти $\bar f$ и p_0. Значение p_0 находится из условия минимизации нормы первой производной сплайна $\min\limits_{p_0}\|S'(x,\bar f)\|_{L_2[a,b]}$ [2,3]:

$$p_0(\bar f) = -\frac{\sum\limits_{i=0}^{N\text{-}1}\left((-1)^i(f_i - f_{i+1}) + 2\sum\limits_{j=1}^{i}(-1)^j(f_j - f_{j-1})\right)}{hN}. \qquad (3)$$

Аппроксимационные значения $\bar f$ находятся из минимизации функционала $\Phi(S) = \|\bar f^{\delta} - S(x,\bar f)\|^2_{\mathrm{R}^{M+1}}$ [2]. В принципе, по теории регуляризации Тихонова, для построения сплайн-аппроксимации следует минимизировать функционал $\|\bar f^{\delta} - S(x,\bar f,p_0)\|^2_{\mathrm{R}^{M+1}} + \alpha\|S(x,\bar f,p_0)\|^2_{L_2[a,b]}$ по p_0 и $\bar f$, т.е. решать следующую задачу:

$$\min_{p_0,\bar f}\left\{\|\bar f^{\delta} - S(x,\bar f,p_0)\|^2_{\mathrm{R}^{M+1}} + \alpha\|S(x,\bar f,p_0)\|^2_{L_2[a,b]}\right\}, \qquad (4)$$

где $\|\cdot\|_{\mathrm{R}^{M+1}}$ обозначает евклидову норму в $M+1$ - мерном пространстве значений на равномерной сетке Δ_M. Втрое слагаемое в (4) является стабилизатором, а α – параметром регуляризации [5].

Однако, учитывая, что сплайн $S(x,\bar f,p_0)$ обладает свойством минимальной нормы производной, то он частично удовлетворяет условиям минимизации, накладываемым на стабилизатор. Таким образом, задача (4) сводится к следующей задачи минимизации:

$$\min_{\bar f}\left\{\|\bar f^{\delta} - S(x,\bar f)\|^2_{\mathrm{R}^{M+1}}\right\}, \qquad (5)$$

откуда находятся все значения $\bar{f} = (f_0, f_1, \ldots, f_N)$, необходимые для построения сплайна. Следует обратить внимание на то, что $(N+1)$ – число искомых значений $\bar{f}$ – должно быть в несколько раз меньше, чем $(M+1)$ – число заданных значений $\bar{f}^{\delta}$, если же количество искомых и заданных значений одинаково, то задача (5) перестает быть задачей аппроксимации и становится задачей интерполяции.

Полученные таким образом значения $\bar{f}$, позволяют построить сплайн и, следовательно, продифференцировав сплайн, получаем производную, которая приближает искомую производную таблично заданной функции.

Преимущество такого сплайна заключается, с одной стороны, в том, что нет необходимости в подборе параметра регуляризации α [5], поскольку сам сплайн построен таким образом, что он заведомо частично удовлетворяет условиям минимизации (4), а с другой стороны в том, что минимальная норма производной позволяет построить сплайн на более протяженном участке, нежели производная разностная [1,2,3].

Пример 1

Построим сплайн, приближающий производную функции $\cos\left(\frac{3}{2}\pi \cdot x\right) \cdot \sin(\pi \cdot x)$, заданной на отрезке $[0,\pi]$, 41-м значением с погрешностью $\delta \approx 10^{-2}$. Таким образом мы получим кусочно-линейную функцию, приближающую функцию $\frac{-\pi}{4}\cos\left(\frac{1}{2}\pi \cdot x\right) + \frac{5\pi}{4}\cos\left(\frac{5\pi}{2}x\right)$.

На рисунке 1а построенная производная (кусочно-линейная функция) параболического сплайна эффективно позволяет аппроксимировать искомую производную функцию.

На рисунке 1б построена сплайн аппроксимация по значениям сплайна рисунка 1а, т.е. с равномерным шагом на отрезке $[0,\pi]$ взято 41 значение кусочно-линейной функции $S'(x_i)$, $i = 0,1,\ldots 40$, и построена сплайн-аппроксимационная функция $\sigma(x,\overline{\varphi})$, где $\overline{\varphi} = (\varphi_0, \varphi_1, \ldots \varphi_{20}) - 21$ значение полученное по аналогии задачи (5).

Рисунок 1в показывает, что, если отрезок на котором надо построить производную слишком большой и заданно очень большое количество значений функций, то на некотором шаге становятся заметными колебания производной сплайна, которые происходят от накопления ошибок при пересчете всех p_i из (2). Рисунок 1в изображает аппроксимацию производной функции $f(x) = J_0(x)\cos(\pi x)$, заданной 121 значением с погрешностью $\delta \approx 10^{-2}$, $f'(x) = -J_1(x)\cos(\pi x) - \pi J_0(x)\sin(\pi x)$.

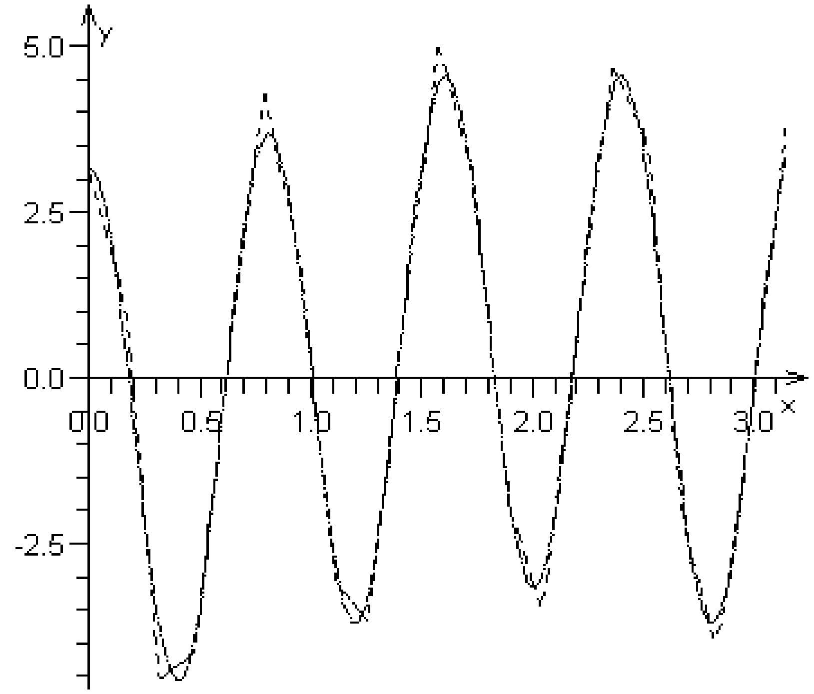


Рисунок 1а. Аппроксимация производной кусочно-линейной производной параболического сплайна.

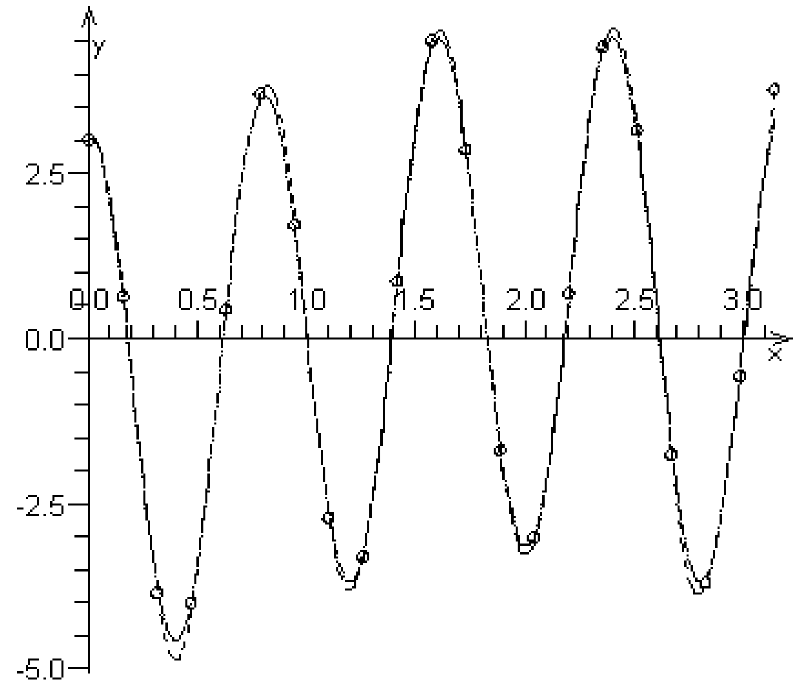
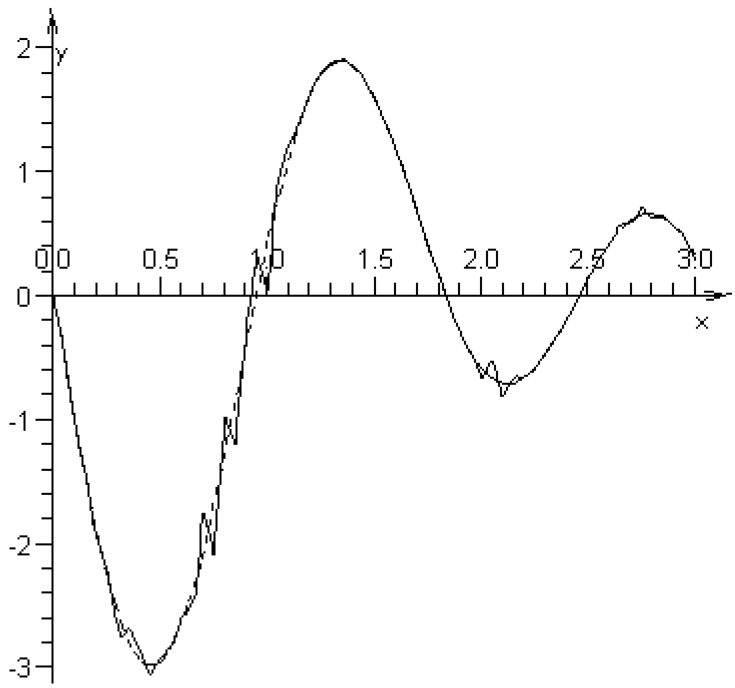


Рисунок 1б. Аппроксимация простроенной кусочно-линейной производной сплайна из рисунка 1а

__________ искомая производная

_ _ _ _ _ сплайн-аппроксимация производной параболического сплайна

○ – ○ – ○ – полученные аппроксимационные значения



_ _ _ _ _ искомая производная

_______ производная параболического сплайна

Рисунок 1в. Аппроксимация большого количества данных.

Как показано на рисунке 1в, при обработке большого количества данных колебания в производной все равно начинают возникать. Для того чтобы устранить колебания, в статье предлагается разделить область, в которой строится сплайн, на несколько частей и в каждой такой подобласти построить свою сплайн-аппроксимацию с минимальной нормой производной. Принцип разбиения области состоит в том, чтобы обрывать построения сплайна, как только его производная начинает колебаться и с этого момента заново строить сплайн-аппроксимацию и т.д. Для каждого условно называемого «локального» сплайна аппроксимационные значения и минимальная норма производной, необходимые для его построения, вычисляются на том участке, на котором этот сплайн определен. Построенный таким образом сплайн получается непрерывным, поскольку аппроксимационное значение на границе, определенное одним сплайном, учитывается смежным сплайном.

Пусть $\bar{f}^{\delta}=(f_0^{\delta},f_1^{\delta},\ldots,f_M^{\delta})$ – измеренные с погрешностью δ значения некоторой функции на сетке $\Delta_M=\{a=t_0<t_1<\ldots<t_M=b\}$. Разобьем отрезок $[a,b]$ еще раз на K частей $[X_{k-1},X_k]$, $k=1,2,\ldots,K$, таким образом, чтобы каждый частичный отрезок $[X_{k-1},X_k]$ содержал M_k+1 значение $\bar{f}_k^{\delta}=(f_0^{\delta},f_1^{\delta},\ldots,f_{M_k}^{\delta})$, $k=1,2,\ldots,K$, на сетке

$\Delta_{M_k} = \{X_{k-1} = t_0^k < t_1^k < \ldots < t_{M_k}^k = X_k\}$. На каждом частичном отрезке $[X_{k-1}, X_k]$ будет строиться сплайн-аппроксимация по $N_k + 1$ аппроксимационным значениям $\bar{f}^k = (f_0^k, f_1^k, \ldots, f_{N_k}^k)$, $k = 1,2,\ldots,K$, полученным на сетке $\Delta'_{N_k} = \{X_{k-1} = x_0^k < x_1^k < \ldots < x_{N_k}^k = X_k\}$ из минимизации задачи (5). Обозначим сплайн $S(x) = S^k(x)$ при $x \in [X_{k-1}, X_k]$, $k = 1,2,\ldots,K$. При $x \in [x_i^k, x_{i+1}^k]$, $i = 0,1,\ldots,N_k - 1$, сплайн $S(x) = S^k(x) = S_i^k(x)$ имеет представление (1).

Метод построения непрерывной сплайн-аппроксимации заключается в следующем:

1. на 1-м частичном отрезке $[X_0, X_1]$ решается задача минимизации (5), которая даёт $N_1 + 1$ аппроксимационных значений $\bar{f}^1 = (f_0^1, f_1^1, \ldots, f_{N_1}^1)$.

2. На втором и последующих отрезках, для сохранения непрерывности сплайна, аппроксимационное значение f_0^{k+1} в точке стыка X_k считается известным и равным значению $f_{N_k}^k$, $k = 1,2,\ldots,K-1$. Все остальные значения находятся из минимизации.

Таким образом, вместо задачи минимизации (5) имеем:

$$\min_{\left(f_1^k, f_2^k, \ldots, f_{N_k}^k\right)} \left\{ \left\| \bar{f}_k^\delta - S(x, f_0^k, f_1^k, \ldots, f_{N_k}^k) \right\|_{\mathsf{R}^{M_k+1}}^2 \right\}, \qquad (6)$$

где $f_0^k = f_{N_{k-1}}^{k-1}$, $k = 2,3,\ldots,K$.

Получаем $\dfrac{\partial}{\partial f_l^k} \sum_{j=0}^{M_k} \left| f_j^\delta - S^k(t_j^k, f_0^k, f_1^k, \ldots, f_{N_k}^k) \right|^2 = 0$, $l = 1,2,\ldots,N_k$. Как видно из (1), (2) и (3) сплайн $S_i^k(x)$, $x \in [x_i^k, x_{i+1}^k]$, $i = 0,1,\ldots,N_k - 1$ линейно зависит от всех значений $\bar{f}^k = (f_0^k, f_1^k, \ldots, f_{N_k}^k)$, а значит, сплайн можно представить в виде линейной комбинации значений $(f_0^k, f_1^k, \ldots, f_{N_k}^k)$:

$$S_i^k(x) = \sum_{n=0}^{N_k} s_n^{k,i}(x) f_n^k \,, \qquad (7)$$

для $x \in [x_i^k, x_{i+1}^k]$, $i = 0,1,\ldots,N_k - 1$, $k = 1,2,\ldots,K$, где $s_n^{k,i}(x)$ – коэффициенты при элементах f_n^k. В дальнейшем индексы i и k в (7) будем опускать и иметь в виду, что это выражение имеет смысл только при $x \in [x_i^k, x_{i+1}^k]$.

После сделанных преобразований и, учитывая, что из (7) следует $\frac{\partial}{\partial f_l}\sum_{n=0}^{N_k} s_n(x) f_n = s_l(x)$, $l = 0,1,\dots,N_k$ имеем:

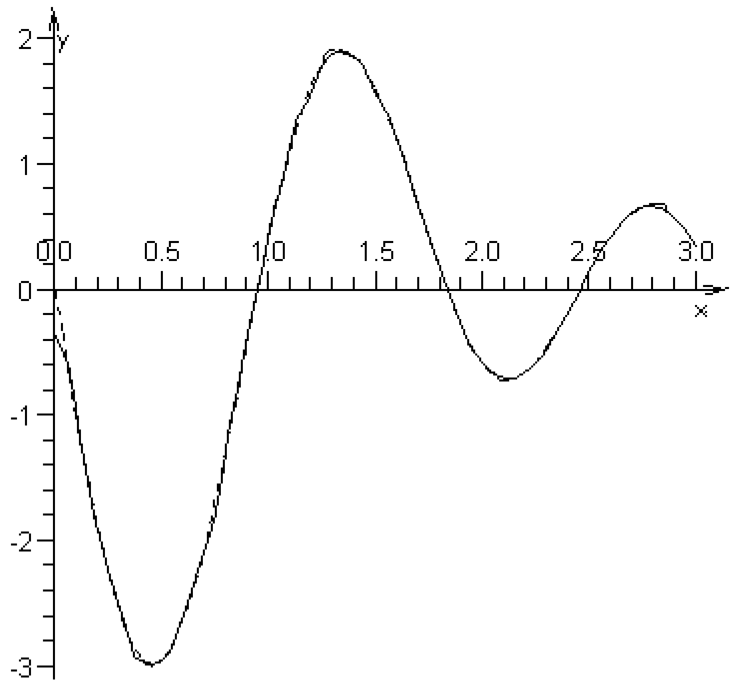
$$\frac{\partial}{\partial f_l}\sum_{j=0}^{M_k}\left| f_j^\delta - \sum_{n=0}^{N_k} s_n(t_j) f_n \right|^2 = 2\sum_{j=0}^{M_k}\left(\left(f_j^\delta - \sum_{n=0}^{N_k} s_n(t_j) f_n \right)\frac{\partial}{\partial f_l}\sum_{n=0}^{N_k} s_n(t_j) f_n \right) =$$
$$= 2\sum_{j=0}^{M_k}\left(\left(f_j^\delta - \sum_{n=0}^{N_k} s_n(t_j) f_n \right) s_l(t_j)\right) = 0, \qquad l = 1,2,\dots,N_k .$$

Перенесем в правую часть свободный член и получим:

$\sum_{j=0}^{M_k}\left(s_l(t_j)\sum_{n=0}^{N_k} s_n(t_j) f_n \right) = \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j) f_j^\delta$ поменяем порядок суммирования, $\sum_{n=0}^{N_k}\left(f_n \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j) s_n(t_j) \right) = \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j) f_j^\delta$ учитывая, что f_0 известное значение, перенесем также в правую часть член суммирования зависящий от него: $\sum_{n=1}^{N_k}\left(f_n \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j) s_n(t_j) \right) = \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j) f_j^\delta - f_0 \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j) s_0(t_j) = \sum_{j=0}^{M_k} s_l(t_j)\left(f_j^\delta - f_0 s_0(t_j)\right)$, $l = 1,2,\dots,N_k$. Решая это уравнение, находим значения $(f_1, f_2, \dots, f_{N_k})$ на каждом участке $[X_k, X_{k+1}]$, $k = 1,2,\dots,K-1$, что позволяет построить непрерывный сплайн $S(x) = S^k(x)$, $k = 1,2,\dots,K-1$ на всем отрезке $[a,b]$.

Пример 2

В данном примере строится производная функции $f(x) = J_0(x)\cos(\pi x)$, заданной 121 значением с погрешность $\delta \le 2/100$ на отрезке $[0,3]$. Как было показано в примере 1 (рисунок1в), при построении производной на всем отрезке возникают нежелательные колебания. Здесь отрезок разбивается пополам и в каждой части строиться сплайн по 21 аппроксимационным значениям, как описано выше. Таким образом, построен сплайн класса $C^1[0,3]$. На рисунке 2 построена непрерывная кусочно-линейная производная параболического сплайна, которая эффективно приближает искомую производную функции заданной с погрешностью.



_ _ _ _ _ искомая производная.
_______производная сплайн-аппроксимации параболического сплайна.

Рисунок 2. Аппроксимация производной функции с помощью производной сплайна, состоящего из двух сплайнов с минимальной нормой производной.

Литература

1. V.I.Dmitriev J.G.Ingtem A two-dimensional minimum-derivative spline// Computational mathematics and modeling vol.21 № 2 pp 206-211// Springer 2010.
2. Ингтем Ж.Г. Сплайн функция с минимальной нормой производной в задачах интерполяции и аппроксимации// Вестник Московского Университета Вычислительная математика и кибернетика №4, 2008, с.16-27.
3. V.I.Dmitriev, J Ingtem Solving an integral equation of the first kind by spline approximation// Computational mathematics and modeling vol.15 № 2 April-June 2004//Kluwer academic consultants bureau.
4. В.И.Дмитриев, Ж.Г. Ингтем О численном дифференцировании с помощью сплайн функций.// Прикладная математика и информатика: Труды факультета ВМК МГУ им.М.В. Ломоносова М.: МАКС Пресс,2011. – №38. стр. 58– 65.
5. Тихонов А.Н. Некорректно поставленные задачи и методы их решения.// Методы решения некорректных задач и их применение. Тр. всесоюзной школы молодых ученных. М.: МГУ 1974 с. 6-11.