

Ю. Е. ВОСКОБОЙНИКОВ

(Новосибирск)

**ПОСТРОЕНИЕ СГЛАЖИВАЮЩИХ КУБИЧЕСКИХ СПЛАЙНОВ
ПРИ МАШИННОЙ ОБРАБОТКЕ
РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТА**

Введение. Во многих физических экспериментах исследуемая физическая зависимость $y(x)$ определяется своими значениями, измеренными при $x=x_i$, $i=1, n$, с некоторой погрешностью, т. е. на сетке значений аргумента $a=x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ зарегистрированы величины $\tilde{y}_i = y(x_i) + \xi_i$, $i=1, n$, где ξ_i — погрешности измерений. Сглаживание таких экспериментальных данных заключается в построении на $[a, b]$ некоторой гладкой (дифференцируемой требуемое число раз) функции, приближающей в некотором смысле функцию $y(x)$. Будем рассматривать задачу сглаживания в постановке, приводящей к кубическим сплайнам, в последнее время широко применяемым в численном анализе [1].

Необходимо построить дважды дифференцируемую функцию $S_{n,\alpha}(x)$, минимизирующую функционал [1]

$$\Phi_\alpha [S] = \alpha \int_a^b (S''(x))^2 dx + \sum_{i=1}^n p_i^{-1} (\tilde{y}_i - S(x_i))^2,$$

где α — параметр сглаживания; p_i — весовые множители, характеризующие значимость i -го измерения ($p_i > 0$, $i=1, n$).

Как показано в работе [1], решение этой задачи существует в классе кубических сплайнов, т. е. $S_{n,\alpha}(x)$ является кусочно-непрерывной функцией, удовлетворяющей условиям [1]:

а) на каждом из интервалов $[x_i, x_{i+1}]$, $i=1, n-1$, функция $S_{n,\alpha}(x)$ есть кубический полином:

$$S_{n,\alpha}(x) = a_i + b_i(x-x_i) + c_i(x-x_i)^2 + d_i(x-x_i)^3; \quad (1)$$

б) функция $S_{n,\alpha}(x)$ и ее первые две производные $S'_{n,\alpha}(x)$, $S''_{n,\alpha}(x)$ непрерывны в узлах сетки x_i , $i=2, n-1$;

в) $S''_{n,\alpha}(a) = S''_{n,\alpha}(b) = 0$ (граничные условия сплайна).

Коэффициенты a_i , b_i , c_i , d_i , $i=1, n-1$, сплайна $S_{n,\alpha}(x)$ выражаются через значения вторых производных $M_j = S''_{n,\alpha}(x_j)$, $j=1, n$. Из граничных условий «в» следует, что $M_1 = M_n = 0$. Оставшиеся $n-2$ значения определяются из системы алгебраических уравнений (подробно см. [2])

$$(\alpha H P H^T + A) m = H \tilde{y}. \quad (2)$$

В этой системе: m — $(n-2)$ -мерный вектор с координатами $\{m\}_i = M_{i+1}$, $i=1, n-2$; H — верхняя трехдиагональная $(n-2) \times n$ -матрица с элементами $\{H\}_{j,j} = 1/h_j$, $\{H\}_{j,j+1} = -1/h_j - 1/h_{j+1}$, $\{H\}_{j,j+2} = 1/h_{j+1}$, $j=1, n-2$; P — диагональная $n \times n$ -матрица $\text{diag} \{p_1, \dots, p_n\}$; A — трехдиагональная положительно-определенная $(n-2) \times (n-2)$ -матрица с элементами $\{A\}_{j,j} = (h_j + h_{j+1})/3$, $j=1, n-2$, $\{A\}_{j,j+1} = \{A\}_{j+1,j} = h_{j+1}/6$, $j=1, n-3$; \tilde{y} — n -мерный вектор $\{\tilde{y}\}_j = \tilde{y}_j$, $j=1, n$; $h_j = x_{j+1} - x_j$, $j=1, n-1$; T — символ транспонирования.

Система (2) с симметричной положительно-определенной пяти-диагональной $(n-2) \times (n-2)$ -матрицей имеет единственное решение, вычисляемое методом прогонки [3]. После нахождения вектора m (а следовательно, и $M_j = \{m\}_{j-1}$, $j = \overline{2, n-1}$) коэффициенты сплайна $S_{n,\alpha}(x)$ определяются из соотношений [1]:

$$a_j = S_{n,\alpha}(x_j), \quad c_j = M_j/2, \quad d_j = (M_{j+1} - M_j)/6h_j,$$

$$b_j = (S_{n,\alpha}(x_{j+1}) - S_{n,\alpha}(x_j))/h_j - h_j(2M_j + M_{j+1})/6, \quad j = \overline{1, n-1},$$

где $S_{n,\alpha}(x_j)$ — значения сглаживающего сплайна при $x = x_j$, вычисляемые в виде $S_{n,\alpha}(x_j) = \tilde{y}_j - \{\alpha PH^T m\}_j$, $j = \overline{1, n}$.

Таким образом, сглаживающий сплайн $S_{n,\alpha}(x)$ существенно зависит от параметра сглаживания α , входящего в (2). Выбор величины этого параметра представляет основную трудность, встречающуюся при использовании сплайнов для сглаживания экспериментальных данных. При малой величине α сглаживание получается незначительным, а при завышенных значениях α функция $S_{n,\alpha}(x)$ становится чрезмерно гладкой (в пределе при $\alpha \rightarrow \infty$ $S_{n,\alpha}(x)$ — ломаная прямая). Кроме того, выбор α должен осуществляться таким образом, чтобы при стремлении уровня шума к нулю сглаживающий сплайн сходил к интерполирующему кубическому сплайну $S_n(x)$, который, кроме «а» — «в», удовлетворяет условию интерполяции «г»: $S_n(x_i) = \tilde{y}_i$, $i = \overline{1, n}$.

В работах [4—6] для выбора параметра сглаживания использовались различные варианты критерия невязки, где в качестве α берется значение, для которого функционал $\sum_{i=1}^n (\tilde{y}_i - S_{n,\alpha}(x_i))^2$ равен заданной величине. Хотя такие способы выбора α и гарантируют сходимость $S_{n,\alpha}(x)$ к интерполирующему сплайну, однако остается открытым вопрос об оптимальности такого определения α с точки зрения точности сглаживания, которую естественно определить функционалом [7]

$$MT(\alpha) = M \left[\sum_{i=1}^n (y(x_i) - S_{n,\alpha}(x_i))^2 \right], \quad (3)$$

характеризующим среднеквадратическую ошибку сглаживания. Здесь M — оператор усреднения по ансамблю полиномов (1) со случайными коэффициентами. Значение $\alpha_{\text{опт}}$, минимизирующее $MT(\alpha)$, называется оптимальным параметром сглаживания.

Предложенные в последнее время методы [7, 8] вычисления $\alpha_{\text{опт}}$ опираются на такую априорную информацию о функции $y(x)$, получение которой представляется затруднительным, а в ряде случаев и невозможным. Кроме того, обычно предполагается статистическая независимость погрешностей измерений ξ_i .

В данной работе задача нахождения оптимального параметра сглаживания решается без привлечения априорной информации о функции $y(x)$ и при весьма общих предположениях о погрешностях измерений. Для случая известной корреляционной матрицы погрешностей приводится критерий оптимальности параметра сглаживания и строится алгоритм вычисления оптимального параметра сглаживания. Алгоритм по своей вычислительной схеме аналогичен алгоритму выбора параметра регуляризации, изложенному в совместных работах автора [9, 10], по решению интегральных уравнений Вольтерра 1-го рода при коррелированных погрешностях измерений. Для неизвестной корреляционной матрицы приводится процедура, оценивающая квази-оптимальное значение α , являющееся приближенным решением задачи минимизации функционала $MT(\alpha)$.

Критерий оптимальности параметра сглаживания. Предположим, что вектор погрешностей $\xi = \{\xi_1, \dots, \xi_n\}$ имеет нулевое среднее и известную корреляционную матрицу $V_\xi = M[\xi\xi^T]$. Обозначим через $e(\alpha)$ вектор невязки с координатами $e_i(\alpha) = \tilde{y}_i - S_{n,\alpha}(x_i)$, $i = \overline{1, n}$, а через $V_e(\alpha) = M[e(\alpha)e^T(\alpha)]$ матрицу вторых моментов этого вектора.

Используя метод из работы [11], можно показать, что значение α оптимально, если

$$V_e(\alpha) = \alpha V_\xi H^T (\alpha H P H^T + A)^{-1} H P. \quad (4)$$

Это равенство является критерием для проверки оптимальности того или иного значения α без привлечения информации о функции $y(x)$. Однако при практическом использовании (4) возникает трудность, связанная с оценением матрицы $V_e(\alpha)$ по одной реализации случайного вектора $e(\alpha)$. Поэтому для проверки (4) приходится применять методы испытания статистических гипотез о равенстве вторых моментов случайного вектора. За нулевую гипотезу Γ_0 берется предположение

$$\Gamma_0: V_e(\alpha) = \alpha V_\xi H^T (\alpha H P H^T + A)^{-1} H P, \quad (5)$$

т. е. $V_e(\alpha)$ удовлетворяет критерию оптимальности, а в качестве альтернативы —

$$\Gamma_1: V_e(\alpha) \neq \alpha V_\xi H^T (\alpha H P H^T + A)^{-1} H P. \quad (6)$$

Обозначим через α_{Γ_0} значение параметра сглаживания, при котором происходит принятие нулевой гипотезы, а через $\{\alpha\}_{\Gamma_1}$ — множество значений $\alpha > 0$, при которых справедлива гипотеза Γ_1 . Тогда [11] $MT(\alpha_{\Gamma_0}) < \inf_{\alpha \in \{\alpha\}_{\Gamma_1}} MT(\alpha)$, т. е. значение α_{Γ_0} оптимально на множестве

значений параметра сглаживания, состоящем из α_{Γ_0} и значений, противоречащих нулевой гипотезе. Поэтому в качестве параметра сглаживания при построении $S_{n,\alpha}(x)$ можно взять значение α_{Γ_0} .

Алгоритм вычисления α_{Γ_0} . Простейший критерий для проверки гипотезы Γ_0 при альтернативе Γ_1 удастся построить, введя в рассмотрение квадратичную форму $\rho(\alpha) = e^T(\alpha) V_{\Gamma_0}^{-1} e(\alpha)$, где $V_{\Gamma_0} = \alpha V_\xi H^T (\alpha H P H^T + A)^{-1} H P$. Форма $\rho(\alpha)$ — случайная величина со следующими свойствами: 1) при нормальном распределении вектора ξ она представляет сумму квадратов нормально распределенных случайных величин; 2) при выполнении (5) математическое ожидание $\rho(\alpha)$ равно n . Первое свойство вытекает из возможности представления симметричной положительно-определенной матрицы V_{Γ_0} в виде $V_{\Gamma_0} = B B^T$ и тождества $e^T(\alpha) V_{\Gamma_0}^{-1} e(\alpha) = z_\alpha^T z_\alpha$, где $z_\alpha = \alpha B^{-1} P H^T (\alpha H P H^T + A)^{-1} H \tilde{y}$ — n -мерный вектор, подчиняющийся нормальному распределению; B — неособенная квадратная $n \times n$ -матрица. Второе свойство следует из (5) и равенств $M[\rho(\alpha)] = M[\text{Sp}[V_{\Gamma_0}^{-1} e(\alpha) e^T(\alpha)]] = \text{Sp}[V_{\Gamma_0}^{-1} V_e(\alpha)]$.

Вектор $e(\alpha)$ не обязательно имеет нулевое среднее, поэтому при принятии гипотезы Γ_0 величина $\rho(\alpha)$ не подчиняется, вообще говоря, χ^2 -распределению [12]. Тем не менее при принятии гипотезы Γ_0 свойства 1, 2 позволяют аппроксимировать распределение величины $\rho(\alpha)$ χ^2 -распределением с n степенями свободы. Поэтому в качестве α_{Γ_0} можно взять значение параметра сглаживания, при котором $\rho(\alpha)$ попадает в доверительный интервал

$$\Theta_n(\beta) = [\vartheta_n(\beta/2), \vartheta_n(1-\beta/2)], \quad (7)$$

что соответствует принятию гипотезы Γ_0 с ошибкой первого рода, равной β [12]. Величина $\vartheta_n(\beta/2)$ — $\beta/2$ -квантиль χ^2 -распределения с n степенями свободы.

Алгоритм вычисления α_{Γ_0} упрощается введением $\gamma = 1/\alpha$ и соответствующей квадратичной формы

$$R(\gamma) = \rho(1/\gamma) = \tilde{y}^T V_{\xi}^{-1} P H^T (H P H^T + \gamma A)^{-1} H \tilde{y}.$$

При этом значение $\gamma_{\Gamma_0} = 1/\alpha_{\Gamma_0}$ определяется как решение нелинейного уравнения $R(\gamma) = n$. Форма $R(\gamma)$ представляет собой монотонно убывающую выпуклую вниз функцию от γ . Поэтому итерационный процесс

$$\gamma_{k+1} = \gamma_k - [R(\gamma_k) - n] / R'(\gamma_k), \quad k = 0, 1, \dots; \quad \gamma_0 \ll 1 \quad (8)$$

вычисления корня уравнения $R(\gamma) = n$ сходится при любом начальном значении $\gamma_0 > 0$. В качестве γ_{Γ_0} принимается значение γ_k , удовлетворяющее условию

$$R(\gamma_k) \in \Theta_n(\beta). \quad (9)$$

Схематично вычисление значения α_{Γ_0} можно представить следующими этапами:

- 1) задание начального значения $\gamma = \gamma_0$ и вычисление $(n-2)$ -мерного вектора $g = H P V_{\xi}^{-1} \tilde{y}$;
- 2) решение системы $(H P H^T + \gamma A) m_{\gamma} = H \tilde{y}$ относительно $(n-2)$ -мерного вектора m_{γ} ;
- 3) вычисление значения формы $R(\gamma) = g^T m_{\gamma}$;
- 4) проверка условия $R(\gamma_k) \in \Theta_n(\beta)$ (при выполнении этого условия следует этап 7, при невыполнении — этап 5);
- 5) вычисление производной $R'(\gamma) = g^T m'_{\gamma}$, где m'_{γ} — решение системы $(H P H^T + \gamma A) m'_{\gamma} = -A m_{\gamma}$;
- 6) вычисление по формуле (8) нового значения γ и повторение этапов 2—4;
- 7) вычисление параметра сглаживания $\alpha_{\Gamma_0} = 1/\gamma_{\Gamma_0}$ и вектора $m = \gamma_{\Gamma_0} m_{\gamma}$.

Примечание. Приведенный алгоритм выбора параметра сглаживания гарантирует равномерную сходимость сглаживающего сплайна к интерполирующему сплайну при стремлении уровня погрешностей к нулю, т. е.

$$\lim_{\alpha \in [a, b]} \max |S_{n, \alpha}(x) - S_n(x)| = 0 \quad \text{при} \quad \text{Sp}[V_{\xi}] \rightarrow 0.$$

Выбор параметра сглаживания при неизвестной корреляционной матрице погрешностей. В этой ситуации можно применить подход, основанный на ортогональности случайной и систематической ошибок и использованный для выбора параметра регуляризации в [13].

Предположим, что, кроме вектора \tilde{y} , определен n -мерный вектор $\tilde{y}(\alpha)$, допускающий представление $\tilde{y}_i(\alpha) = y(x_i) + \eta_i(\alpha)$, $i = \overline{1, n}$, где $\eta_i(\alpha)$ — случайная величина, некоррелированная с ξ_j , $j = \overline{1, n}$, дисперсия и математическое ожидание которой зависят от некоторого параметра α . Требуется определить значение α , минимизирующее функционал $M T(\alpha) = M[\|y - \tilde{y}(\alpha)\|^2]$, где $y = \{y(x_1), y(x_2), \dots, y(x_n)\}$, $\|y\|^2 = y^T y$. Рассмотрим

$$Q(\alpha) = \|\tilde{y} - \tilde{y}(\alpha)\|^2 = \|\tilde{y} - y\|^2 + 2 \sum_{i=1}^n \xi_i \eta_i(\alpha) + \|y - \tilde{y}(\alpha)\|^2. \quad (10)$$

Так как первое слагаемое не зависит от α , $M \xi_i = 0$, $M[\xi_i \eta_i(\alpha)] = 0$, $i = \overline{1, n}$, то значение α , минимизирующее функционал $M Q(\alpha)$, доставляет минимум $M T(\alpha)$. Таким образом, возвращаясь к задаче выбора оптимального параметра сглаживания ($y_i(\alpha)$ отождествляется со зна-

чением сглаживающего сплайна $S_{n,\alpha}(x_i)$, достаточно в качестве $\alpha_{\text{опт}}$ взять значение α , минимизирующее $MQ(\alpha)$, при этом не требуется информация о функции $y(x)$ и корреляционной матрице V_{ξ} . Однако при практическом использовании такого подхода к определению $\alpha_{\text{опт}}$ встречаются следующие трудности.

1. Вычисление эффективной оценки функционала $MQ(\alpha)$ при заданном значении α по одной реализации случайных векторов $\tilde{y}, \tilde{y}(\alpha)$ не представляется возможным. Поэтому перейдем к оцениванию величины α , минимизирующей функционал $T_n(\alpha) = \|y - \tilde{y}(\alpha)\|^2/n$, который определяет приведенную ошибку сглаживания заданного вектора измерения. Для этого найдем значение α_0 , доставляющее минимум функционалу

$$Q_n(\alpha) = \frac{1}{n} \|\tilde{y} - \tilde{y}(\alpha)\|^2 = \frac{1}{n} \|\tilde{y} - y\|^2 + \frac{2}{n} \sum_{i=1}^n \xi_i \eta_i(\alpha) + T_n(\alpha). \quad (11)$$

Так как первое слагаемое не зависит от α , то второе слагаемое в (11) можно интерпретировать как случайную ошибку измерения $T_n(\alpha)$, приводящую к несовпадению значений α_0, α_T , соответственно доставляющих минимум функционалам $Q_n(\alpha), T_n(\alpha)$. Дисперсия этой ошибки уменьшается при возрастании n и приближении $\tilde{y}(\alpha)$ к y .

2. Предположение о наличии двух векторов $\tilde{y}, \tilde{y}(\alpha)$ выполняется редко. В отсутствие $\tilde{y}(\alpha)$ часть координат вектора \tilde{y} используется для построения сглаживающего сплайна, а по оставшимся значениям \tilde{y} вычисляют $Q_n(\alpha)$. В работе [14] предложена следующая процедура вычисления значения α_0 :

1) измеренные значения $\tilde{y}_i, i = \overline{1, n}$, функции $y(x)$ делятся на p групп по l значений в каждой, при этом $lp \leq n$ и в k -ю группу входят $\tilde{y}_k, \tilde{y}_{k+p}, \dots, \tilde{y}_{k+(l-1)p}$;

2) задается начальное значение α_0 параметра сглаживания;

3) из значений $\tilde{y}_i, i = \overline{1, n}$, исключается первая группа данных, а по оставшимся строится сглаживающий сплайн $S_{n-l,\alpha}(x)$ и вычисляется $Q_l^{(1)}(\alpha) = \frac{1}{l} \sum_{i=1,1+p,\dots,1+(l-1)p} (\tilde{y}_i - S_{n-l,\alpha}(x_i))^2$ по первой группе данных;

4) из значений $\tilde{y}_i, i = \overline{1, n}$, исключается очередная k -я группа, а по оставшимся значениям строится сглаживающий сплайн и вновь вычисляется $Q_l^{(k)}(\alpha)$;

5) после использования всех p групп определяется значение

$$Q_{lp}(\alpha) = \frac{1}{p} \sum_{i=1}^p Q_l^{(i)}(\alpha);$$

6) изменяется величина параметра α и этапы 3—5 повторяются до тех пор, пока функционал $Q_{lp}(\alpha)$ не достигнет минимума при $\alpha = \alpha_0$. Это значение принимается в качестве параметра сглаживания при построении кубического сплайна $S_{n,\alpha}(x)$.

3. Для каждого значения α при построении $S_{n-l,\alpha}(x)$ необходимо p раз решать систему (2) размерностью $n-l-2$, что связано с определенными затратами машинного времени. Для уменьшения числа повторений этапов 3—6 рекомендуется задать заведомо завышенные значения дисперсий погрешностей измерений и определить α_{T_0} , а затем, изменяя α по закону $\alpha_{j+1} = q\alpha_j, j = 0, 1, \dots$, где $\alpha_0 = \alpha_{T_0}, q < 1$, вычислить α_0 .

Результаты решения задач сглаживания. Алгоритмы построения сглаживающих кубических сплайнов с использованием изложенных методов выбора параметра сглаживания были реализованы в виде пакета подпрограмм, написанных на алгоритмическом языке ФОРТ-

Таблица 1

σ^2	$\alpha_{\text{опт}}$	$\bar{\alpha}_{\Gamma_0}$	$\varepsilon_0(\alpha_{\text{опт}})$	$\varepsilon_0(\bar{\alpha}_{\Gamma_0})$	$\varepsilon_1(\alpha_{\text{опт}})$	$\varepsilon_1(\bar{\alpha}_{\Gamma_0})$
0,0001	0,021	0,019	$0,415 \cdot 10^{-3}$	$0,442 \cdot 10^{-3}$	$0,319 \cdot 10^{-2}$	$0,394 \cdot 10^{-2}$
0,0004	0,048	0,046	$0,142 \cdot 10^{-2}$	$0,151 \cdot 10^{-2}$	$0,871 \cdot 10^{-2}$	$0,998 \cdot 10^{-2}$
0,0016	0,159	0,170	$0,482 \cdot 10^{-2}$	$0,512 \cdot 10^{-2}$	$0,171 \cdot 10^{-1}$	$0,192 \cdot 10^{-1}$
0,0100	0,625	0,712	$0,251 \cdot 10^{-1}$	$0,318 \cdot 10^{-1}$	$0,571 \cdot 10^{-1}$	$0,698 \cdot 10^{-1}$

РАН IV, и проверены на ряде модельных задач. Ниже приводятся результаты некоторых численных экспериментов по исследованию параметров сглаживания α_{Γ_0} , α_Q .

На интервале $[a, b]$ задавалась функция $y(x) = \exp(-(x-5)^2/2)$, значения которой вычислялись в узлах $x_i = a + (i-1)h_x$, $i = \overline{1, n}$, $h_x = (b-a)/n_x$, где $a=1$, $b=9$, $n_x=48$. Проекция вектора измерения определялись соотношением $\tilde{y}_j = y(x_j) + \xi_j$, $i = \overline{1, n}$, где ξ_i — нормально распределенные случайные числа с нулевым средним и дисперсией σ^2 , которая в экспериментах принимала значения 0,0001; 0,0004; 0,0016; 0,01, что примерно соответствовало относительным ошибкам измерения 2, 5, 10, 25%.

Для определения оптимального значения $\alpha_{\text{опт}}$ методом статистического моделирования были получены зависимости

$$\varepsilon_0(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{n_z} (y(z_i) - S_{n,\alpha}^{(j)}(z_i))^2 \right);$$

$$\varepsilon_1(\alpha) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \left(\sum_{i=1}^{n_z} (y'(z_i) - S'_{n,\alpha}{}^{(j)}(z_i))^2 \right),$$

где $S_{n,\alpha}^{(j)}(z_i)$, $S'_{n,\alpha}{}^{(j)}(z_i)$ — значения сглаживающего сплайна и его первой производной, вычисленные по j -й реализации случайного вектора \tilde{y} в точках $z_i = a + (i-1)h_z$, $i = \overline{1, n_z}$, $h_z = (b-a)/n_z$, $n_z = 16$. При этом объем выборки $N=500$. Определенные таким образом $\varepsilon_0(\alpha)$, $\varepsilon_1(\alpha)$ есть оценки среднеквадратических ошибок сглаживания и дифференцирования функции $y(x)$. Поэтому в качестве $\alpha_{\text{опт}}$ принималось значение, при котором $\varepsilon_0(\alpha)$ достигает минимума. На рис. 1, а построены зависимости $\varepsilon_0(\alpha)$, $\varepsilon_1(\alpha)$ ($\sigma^2=0,0016$), а в табл. 1 приведены значения $\varepsilon_0(\alpha_{\text{опт}})$, $\varepsilon_1(\alpha_{\text{опт}})$, $\alpha_{\text{опт}}$.

Учитывая, что в общем случае α_{Γ_0} — случайная величина, вычислялись $\varepsilon_0(\alpha_{\Gamma_0})$, $\varepsilon_1(\alpha_{\Gamma_0})$, среднее значение $\bar{\alpha}_{\Gamma_0} = \sum_{j=1}^N \alpha_{\Gamma_0}^{(j)} / N$, где $\alpha_{\Gamma_0}^{(j)}$ — значение параметра сглаживания, определенное по j -й реализации \tilde{y} , и строилась гистограмма значений α_{Γ_0} (для $\sigma^2=0,0016$ такая гистограмма показана на рис. 1, б). Значения $\varepsilon_0(\alpha_{\Gamma_0})$, $\varepsilon_1(\alpha_{\Gamma_0})$, $\bar{\alpha}_{\Gamma_0}$ приведены в табл. 1. Из таблицы и рис. 1 видно, что все значения α_{Γ_0} находятся в области минимума функционала $MT(\alpha)$, а средние значения $\bar{\alpha}_{\Gamma_0}$ с точностью до статистического разброса совпадают с $\alpha_{\text{опт}}$. Небольшое ухудшение в точности сглаживания при $\alpha = \alpha_{\Gamma_0}$ по сравнению с $\alpha = \alpha_{\text{опт}}$ объясняется статистической природой значений α_{Γ_0} , определяемых испытанием гипотез Γ_0, Γ_1 .

Для параметра сглаживания α_Q также вычислялись величины $\bar{\alpha}_Q$, $\varepsilon_0(\alpha_Q)$, $\varepsilon_1(\alpha_Q)$ и отношения $\mathcal{E}_0 = \varepsilon_0(\alpha_{\Gamma_0})/\varepsilon_0(\alpha_Q)$, $\mathcal{E}_1 = \varepsilon_1(\alpha_{\Gamma_0})/\varepsilon_1(\alpha_Q)$, характеризующие эффективность сглаживающих сплайнов, построенных

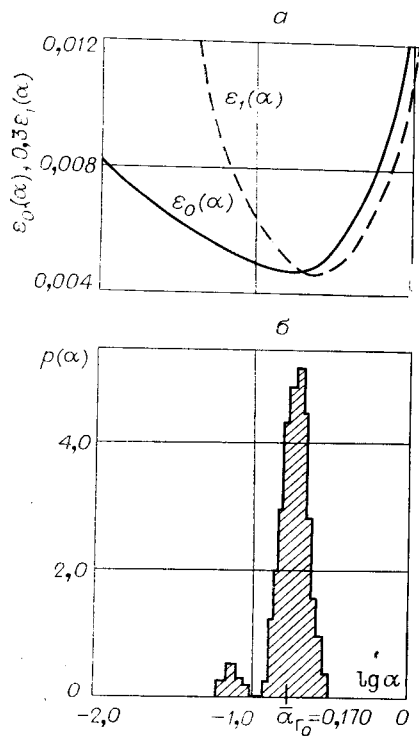


Рис. 1.

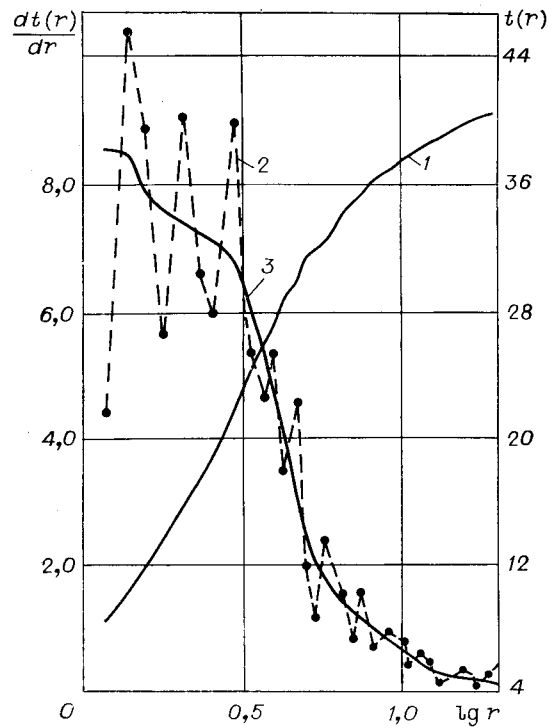


Рис. 2.

при значении $\alpha = \alpha_{\Gamma_0}$. Из анализа этих характеристик (табл. 2) видно, что среднеквадратическая ошибка сглаживания при $\alpha = \alpha_0$ выше, чем при $\alpha = \alpha_{\Gamma_0}$, особенно это увеличение становится значительным при высоком уровне погрешностей измерений. Это объясняется смещением α_0 относительно $\alpha_{\text{опт}}$. По-видимому, параметр сглаживания α_0 следует применять только в ситуациях, когда невозможно получить информацию о корреляционной матрице погрешностей измерений. Следует также заметить, что построение сглаживающего сплайна в вышеприведенной задаче при $\alpha = \alpha_{\Gamma_0}$ требовало 0,8 с, а при $\alpha = \alpha_0$ затраты времени составили 7 с (счет проводился на ЭВМ М4030), т. е. не только по точности, но и по быстродействию алгоритм выбора параметра сглаживания α_0 уступает алгоритму (8).

На рис. 2 приведены результаты дифференцирования профиля температуры $t(r)$ в неизотермическом потоке (кривая 1). Первая производная вычислялась в узлах исходной сетки дифференцированием интерполирующего сплайна (кривая 2) и сглаживающего сплайна (кривая 3), построенного при значении $\alpha = \alpha_0$. Видно, что даже при незначительной погрешности в экспериментальных данных использование сглаживающего сплайна существенно уменьшает ошибку дифференцирования и исключает осцилляции, присутствующие в производной, вычисленной по интерполирующему сплайну.

В заключение отметим, что предложенные алгоритмы выбора параметра сглаживания могут быть использованы при построении сглаживающих B-сплайнов.

Таблица 2

α_0	$\bar{\alpha}_0$	\mathcal{E}_0	\mathcal{E}_1
0,0001	0,017	0,975	0,871
0,0004	0,052	0,948	0,732
0,0016	0,048	0,885	0,596
0,0100	0,131	0,819	0,412

ЛИТЕРАТУРА

1. Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. М., «Наука», 1976.
2. Ананьин А. З., Смелов В. В., Василенко В. А. Эффективный способ преобразования вариационной задачи сглаживания к линейной алгебраической системе.— В кн.: Дифференциальные и дифференциально-интегральные уравнения. Вып. 1. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1977.
3. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. М., «Наука», 1977.
4. Reinsch C. H. Smoothing by spline functions. I.—“Numerische Mathematik”, 1967, vol. 10, N 1.
5. Wald S. Spline function in data analyses.—“Technometrics”, 1974, vol. 16, N 1.
6. Морозов В. А. Теория сплайнов и задача устойчивого вычисления неограниченного оператора.— «Журн. вычисл. мат. и мат. физ.», 1971, т. 11, № 3.
7. Wahba G. Smoothing noisy data with spline functions.—“Numerische Mathematik”, 1975, vol. 24, N 3.
8. Василенко В. А. Обработка содержащей ошибки информации методом сплайн-сглаживания.— В кн.: Машинная графика и ее применение. Новосибирск, изд. ВЦ СО АН СССР, 1973.
9. Воскобойников Ю. Е., Томсонс Я. Я. Выбор параметра регуляризации и ошибки восстановления входного сигнала в методе статистической регуляризации.— «Автоматизация», 1975, № 4.
10. Воскобойников Ю. Е., Томсонс Я. Я. Построение регуляризованного решения одной обратной задачи теплопроводности при случайных ошибках в исходных данных.— «Инженерно-физический журнал», 1977, т. 33, № 6.
11. Воскобойников Ю. Е. Критерий и алгоритмы выбора параметра при сглаживании сплайн-функциями.— В кн.: Алгоритмы обработки и средства автоматизации теплофизического эксперимента. Новосибирск, изд. ИТФ СО АН СССР, 1978.
12. Шметтерер. Введение в математическую статистику. М., «Наука», 1976.
13. Кочетов И. И. О новом способе выбора параметра регуляризации.— «Журн. вычисл. мат. и мат. физ.», 1976, т. 16, № 2.
14. Wahba G. A completely automatic french curve: fitting spline functions by cross validation.—“Commun. in Statistics”, 1975, vol. 4, N 1.

*Поступила в редакцию 25 апреля 1978 г.;
окончательный вариант — 22 октября 1978 г.*
