

КРАТКИЕ СООБЩЕНИЯ

УДК 616.07

И. Д. ГРАЧЕВ, М. Х. САЛАХОВ, Н. К. ЩЕРБАКОВА
(Казань)

ПРОЕКЦИОННЫЙ АЛГОРИТМ СГЛАЖИВАНИЯ И ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ
МНОГОМЕРНЫХ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Введение. Разработку различных алгоритмов сглаживания, дифференцирования, интерполяции экспериментальных данных стимулирует стремление к компромиссу между простотой и вычислительной эффективностью, с одной стороны, и адекватностью описания с эффективным включением априорной информации — с другой. Так, широкое распространение в последние годы получили алгоритмы сглаживания и дифференцирования, основанные на аппроксимации функций сплайнами [1—4], в частности, регуляризованными [5]. Однако алгоритмы построения многомерных сплайнов (бикубических и т. д.), обеспечивающих k -кратную дифференцируемость исходных данных, оказываются очень сложными [1]. Эффективные алгоритмы обработки многомерных массивов экспериментальных данных на основе метода статистической регуляризации (МСР) с использованием методов быстрых преобразований Фурье рассмотрены в [6, 7]. Но применение фурье-техники существенно усложняет включение априорной информации о неотрицательности, монотонности и т. д. искомой функции, что может быть не менее важным, чем гладкость. В связи с этим в [7] рассмотрена принципиальная возможность вычисления МСР-оценок с использованием проекционного метода [8] для решения систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ). В настоящей работе представлена практическая реализация этого метода.

Описание алгоритма. Для линейной задачи

$$K\varphi + \xi = \mathbf{f}, \quad (1)$$

где $\mathbf{f}(n \times 1)$ — вектор измерительных данных; $\xi(n \times 1)$ — вектор ошибок измерений с нулевым математическим ожиданием и ковариационной матрицей $V(n \times n)$; $K(n \times m)$ — преобразующая матрица, общая МСР-оценка вектора $\varphi(m \times 1)$ может быть получена в виде [7]

$$\varphi = (K^T W K + \alpha \Omega_p)^{-1} K^T W \mathbf{f} \quad (2)$$

или

$$\varphi = \beta^2 \Omega_p^{-1} K^T (\beta^2 K \Omega_p^{-1} K^T + V)^{-1} \mathbf{f}, \quad (3)$$

где

$$\beta^2 = \frac{1}{\alpha} = \frac{(\mathbf{f}^T L \mathbf{f}) - \text{Sp}(VL)}{\text{Sp}(K \Omega_p^{-1} K^T L)},$$

$$W = V^{-1}; \quad \Omega_p = D_p^T D_p; \quad D_p = \underbrace{DD \dots D}_p; \quad (4)$$

$D(n \times n)$ — матрица численного дифференцирования; $L(n \times n)$ — любая неотрицательно определенная матрица.

Оценка параметра регуляризации α (4) получена в [7] с использованием концепции квадратичного оценивания. От известных оценок она отличается тем, что вычисление α по (4) осуществляется за один шаг непосредственно по квадратичной форме $(\mathbf{f}^T L \mathbf{f})$ от измерительных данных. Это обстоятельство является очень важным для построения любых итерационных алгоритмов оценивания $\varphi(m \times 1)$, что позволяет мириться с некоторыми недостатками оценки α по (4), в частности с ненулевой вероятностью отрицательных α при $K\varphi \approx \xi$. В этом случае мы должны либо принять $\varphi = 0$, либо отказаться от гипотезы о гладкости $\varphi(m \times 1)$ порядка p .

Работа с массивами большого размера непосредственно по (2) и (3) вызывает серьезные вычислительные трудности, связанные с обращением матриц. Представляется целесообразным их преодоление с использованием эффективных методов псевдообращения матриц, в частности проекционных методов.

Рассмотрим совместную СЛАУ

$$Ax = b \Leftrightarrow a_i^T x = b_i, \quad i = \overline{1, n}, \quad (5)$$

где A — матрица размерности $(n \times m)$; x — искомый вектор размерности $(m \times 1)$; b — вектор $(n \times 1)$. Проекционные алгоритмы [9] основаны на том, что решение СЛАУ (5), ближайшее к заданному y ($m \times 1$), может быть выражено через обобщенную обратную матрицу A^{-*} [9, 10] в виде

$$x_y = \arg \min_{x \in R^m} \{(x - y)^T (x - y)\} = y + A^{-*} (b - Ay). \quad (6)$$

Для $m > n$ и $\text{rang}(A) = n$ выражение (6) легко показать прямым дифференцированием соответствующей функции Лагранжа по x . Вектор x_y называют проекцией y на плоскость $Ax = b$. В вычислительном плане важна возможность приближения к оценке (6) последовательным проецированием y на гиперплоскость:

$$\begin{aligned} a_i^T x &= b_i; \\ x_{k+1} &= x_k + (a_i^T)^{-1} (b_i - a_i^T x_k) = x_k + a_i (a_i^T a_i)^{-1} (b_i - a_i^T x_k); \\ i &= k \pmod{m} + 1 \text{ и } x_0 = y. \end{aligned} \quad (7)$$

Последовательность $\{x_k\}_{k=0}^{\infty}$ по (7) для совместных систем (5) сходится к оценке (6), что и составляет существо проекционных алгоритмов. После каждого шага могут быть учтены ограничения типа неравенств $x \geq 0$, совместные с (5).

Наша задача — построение вспомогательных СЛАУ, решение которых по (6) и (7) дает МСР-оценки (2) или (3).

Одним из статистически эквивалентных способов учета гладкости является дополнение уравнений (1), которые домножим на невырожденную матрицу H , априорными уравнениями, учитывающими гладкость p -го порядка вектора φ [7]:

$$\{HK\varphi + H\xi = H\eta; \quad (8)$$

$$\{V\alpha D_p \varphi + \Psi = 0, \quad (9)$$

где Ψ — нормированный нормальный случайный вектор. Если $H^T H = W$, то обобщенное обращение (6) системы (8), (9) совпадает со статистической регуляризованной оценкой (2). Однако с учетом несовместности уравнений (8), (9) не гарантирована сходимость к нему последовательного проектирования по (7). В связи с этим будем рассматривать вектор η в качестве дополнительного неизвестного вектора и построим несколько иную вспомогательную систему уравнений

$$\alpha^{-1/2} K D_p^{-1} \Psi + H^{-1} \eta = [\alpha^{-1/2} K D_p^{-1} ; H^{-1}] \begin{bmatrix} \Psi \\ \eta \end{bmatrix} = A \begin{bmatrix} \Psi \\ \eta \end{bmatrix} = f, \quad (10)$$

где матрица H , как и ранее, определена условием $H^T H = W$. Система уравнений (10) совместна, так как всегда можно построить решение $\Psi = 0$, $\eta = Hf$. Ее ранг равен n , ибо матрица H невырожденная размером $(n \times n)$. Следовательно, решение минимальной нормы для (10) может быть найдено по проекционному алгоритму (7).

Пологая, что $\beta = \alpha^{-1/2}$, $K = E$ (E — единичная матрица) и $W = E/\sigma^2$, перепишем (10) в форме, удобной для проектирования:

$$\beta S_i^T \Psi + \sigma I_i^T \eta = f_i, \quad i = \overline{1, n}, \quad (11)$$

где S_i^T — строки матрицы D_p^{-1} ; I_i^T — строки единичной матрицы E .

Проекционное решение СЛАУ (11), которое согласно вышеизложенному дает МСР-оценку p -й производной от φ , запишем аналогично (7) в виде

$$\Psi_{k+1} = \Psi_k + \beta S_i (\beta^2 S_i^T S_i + \sigma^2)^{-1} (f_i - \beta S_i^T \Psi_k - \sigma I_i^T \eta_k); \quad (12)$$

$$\eta_{k+1} = \eta_k + \sigma I_i (\beta^2 S_i^T S_i + \sigma^2)^{-1} (f_i - \beta S_i^T \Psi_k - \sigma I_i^T \eta_k); \quad (13)$$

$$\Psi_0 = \eta_0 = 0, \quad i = k \pmod{n} + 1. \quad (14)$$

В соответствии с развитой в [11] техникой учета многомерной гладкости для сглаживания многоиндексных массивов данных достаточно в (12), (13) заменить S_i на $S_i \otimes G_j \otimes \dots$, где \otimes — символ прямого произведения; G_j — строки матрицы D_g^{-1} учитывающей гладкость по второй координате и т. д. Структура алгоритма (12) — (14) остается при этом без изменений.

Проекционный МСР алгоритм предельно прост в вычислительном плане, но его сходимость при непосредственной реализации невысока, так как гиперплоскости (11) при больших i образуют малые углы. В соответствии с рекомендациями [11] проектирование может быть выполнено за строго определенное число шагов, если матрица A предварительно ортогонализирована по Граму — Шмидту, но в таком случае существенно усложняется алгоритм. В связи с этим предлагается преобра-

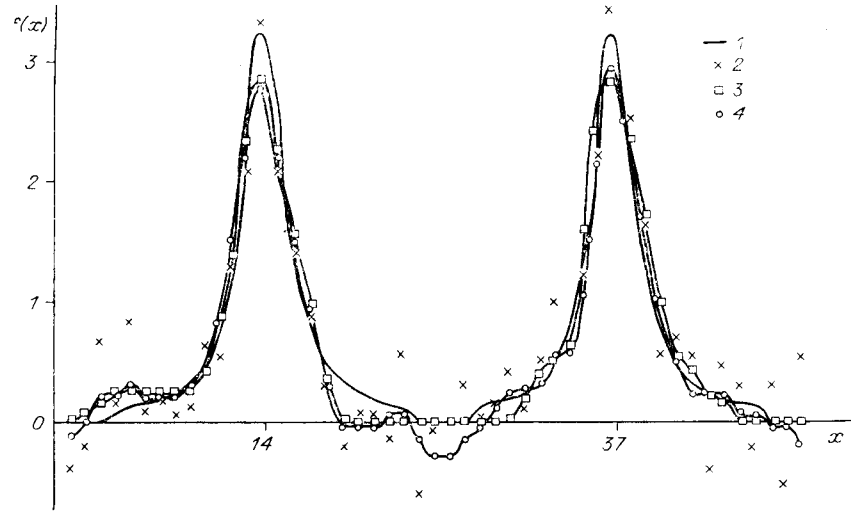


Рис. 1. Сглаживание «экспериментальных» данных, полученных при помощи модельной функции (18):
 1 — точная функция; 2 — экспериментальные значения; 3, 4 — сглаженные значения с учетом и без учета неотрицательности восстанавливаемых функций соответственно

зование (10) к «почти ортогональному виду» умножением слева на матрицу D_p :

$$[\beta E : \sigma D_p] \begin{bmatrix} \Psi \\ \eta \end{bmatrix} = D_p \mathbf{f}. \quad (15)$$

Для невырожденных D_p проекционное решение (15) также дает МСР-оценку p -й производной от \mathbf{f} :

$$\begin{bmatrix} \Psi \\ \eta \end{bmatrix}_\infty = [\beta E : \sigma D_p]^{-*} D_p \mathbf{f} = \begin{bmatrix} \beta E \\ \sigma D_p^T \end{bmatrix} (\beta^2 E + \sigma^2 D_p D_p^T)^{-1} D_p \mathbf{f}, \quad (16)$$

откуда

$$\begin{aligned} \Psi_\infty &= \beta [\beta^2 E + \sigma^2 D_p D_p^T]^{-1} D_p \mathbf{f} = \beta [D_p (\beta^2 D_p^{-1} D_p^{-T} + \sigma^2 E) D_p^T]^{-1} D_p \mathbf{f} = \\ &= \frac{1}{\beta} \beta^2 D_p (\beta^2 D_p^{-1} D_p^{-T} + \sigma^2 E)^{-1} D_p^{-1} D_p^{-T} \mathbf{f} = \frac{1}{\beta} D_p \Phi, \end{aligned} \quad (17)$$

где использовано (3) с $K = E$, $H = \sigma E$.

Задача вычисления l -й производной от гладкой функции f порядка p сводится к вышеизложенной заменой $p' = p + l$ без каких-либо изменений алгоритма.

Типичные результаты сглаживания и дифференцирования «экспериментальных» данных иллюстрируют рис. 1–3. Тестовые функции задавались в виде

$$f(x) = \begin{cases} 0, & 0 \leq x < 3; \\ \frac{1}{(x - a_1)^2 + b_1^2}, & 3 \leq x < 25; \\ 0, & 25 \leq x \leq 29; \\ \frac{1}{(x - a_2)^2 + b_2^2}, & 29 < x \leq 47, \end{cases} \quad (18)$$

здесь $a_1 = 14$, $a_2 = 37$, $b_1 = b_2 = 3$ и параболоид

$$f(x, y) = 1/(x - a)^2 + b^2, \quad (19)$$

где $b = 3$, $a = 6$.

Математические эксперименты проводились следующим образом. На (18), (19) «побрасывалась» нормально распределенная случайная ошибка с нулевым математическим ожиданием и дисперсией $S = \sigma f_{\max}$, где $\sigma = 0,01 + 0,15$, что составляет от 1 до 15 % от максимального значения тестовой функции. Созданное таким образом распределение считалось «экспериментальным».

На рис. 1, 2 показаны результаты сглаживания и дифференцирования «экспериментальной» кривой, полученной из (18).

Качество сглаживания и дифференцирования можно также оценить при помощи погрешностей восстановления [12]

$$\Delta = 1/\sqrt{N} \|\mathbf{f}_B - \mathbf{f}_T\|_2; \quad (20)$$

$$H = \|\mathbf{f}_B - \mathbf{f}_T\|_1 / \|\mathbf{f}_B\|_1. \quad (21)$$

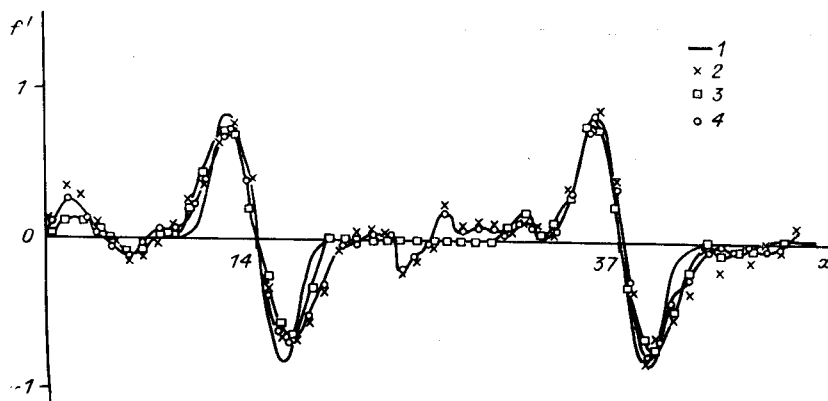


Рис. 2. Дифференцирование «экспериментальных» данных (рис. 1):
1 — точная первая производная; 2 — первая производная без регуляризации; 3, 4 — регуляризованные первые производные с учетом и без учета неотрицательности функций соответственно

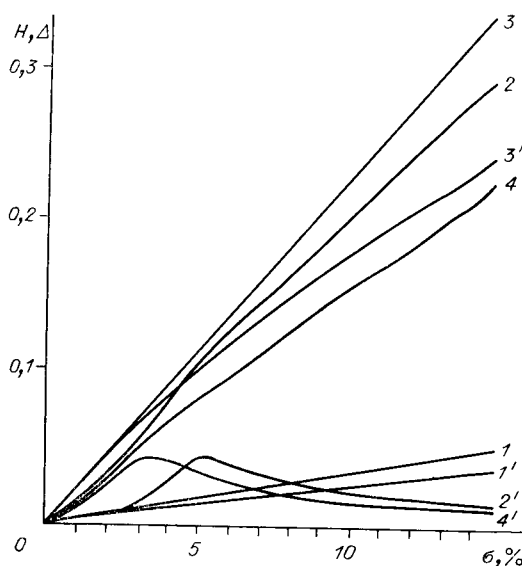
Рис. 3. Меры погрешностей восстановления в зависимости от уровня ошибок:

среднеквадратичная мера различия (20): 1 — экспериментальная функция; 1' — сглаженное решение; 2, 2' — нерегуляризованная и регуляризованная производные соответственно; относительная погрешность восстановления (21); 3, 3' — экспериментальная и сглаженная функции соответственно; 4, 4' — нерегуляризованная и регуляризованная производные соответственно

Здесь f_v — вектор восстановленных значений экспериментальной функции; f_r — вектор значений тестовой функции:

$$\|X_1\|_1 = \sum_{k=1}^N |X_{1k}|; \quad (22)$$

$$\|X\|_2 = \left(\sum_{k=1}^N X_k^2 \right)^{1/2} = (X^T X)^{1/2}. \quad (23)$$



На рис. 3 представлены меры различия в зависимости от уровня ошибок для «экспериментальной» функции вида (19) и для второй смешанной производной

$$f''(x, y) = df(x, y) / dx dy \quad (24)$$

от этой же функции. Видно, что данный метод позволяет успешно сглаживать и дифференцировать экспериментальные данные с довольно большой погрешностью.

В заключение отметим, что предлагаемый алгоритм достаточно прост и эффективен в реализации. Так, например, на микроЭВМ «ДЗ-28» 25 экспериментальных точек могут быть обработаны за 30–40 с.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики. — М.: Наука, 1980.
2. Стечкин С. В., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. — М.: Наука, 1976.
3. Альберг Дж., Нильсон Э., Уоми Дж. Теория сплайнов и ее приложения. — М.: Мир, 1972.
4. Корнейчук Н. П. Сплайны в теории приближения. — М.: Наука, 1984.
5. Воскобойников Ю. Е., Преображенский Н. Г., Седельников А. И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике. — Новосибирск: Наука, 1984.
6. Грачев И. Д., Салахов М. Х. Численное дифференцирование многомерных экспериментальных данных // Автотметрия. — 1985. — № 2.
7. Грачев И. Д., Салахов М. Х., Фишман И. С. Статистическая регуляризация при обработке экспериментов в прикладной спектроскопии. — Казань: КГУ, 1986.