

УДК 517.518.8

М. Ю. Катаев, А. А. Мицель
(Томск)

ОБ ОДНОМ СПОСОБЕ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ

Исследуется задача сглаживания и дифференцирования эмпирических данных. На основе сглаживающего функционала Тихонова получены аналитические формулы для регуляризованного аналога сглаживаемой функции и ее первых двух производных. Приводятся результаты численного эксперимента.

Известно [1], что задача дифференцирования эмпирической функции, заданной на сетке $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$ своими измеренными значениями $\tilde{f}(x_i), i = 1, \dots, n$, является некорректно поставленной*. Некорректность задачи дифференцирования связана с нарушением третьего условия корректности по Адамару — условия устойчивости. Для решения этой задачи используются различные методы [1—3], среди которых широкое распространение получили метод сплайн-функций [2, 3] и метод регуляризации Тихонова [1—4]. В последнем методе задача дифференцирования сводится к решению уравнения Фредгольма I рода. В обоих методах устойчивое решение находится из системы линейных алгебраических уравнений численным образом. Существуют и другие методы дифференцирования экспериментальной информации (см., например, [5]), однако и здесь задача решается численным путем.

В настоящей работе получено аналитическое решение задачи сглаживания и дифференцирования эмпирических данных и приводятся результаты численного эксперимента.

Постановка задачи и метод решения. Рассмотрим функцию $f \in L_2$. Пусть вместо f нам известно ее приближение \tilde{f}_δ , такое что

$$\|f - \tilde{f}_\delta\|_{L_2}^2 \leq \delta^2. \quad (1)$$

Предположим дополнительно, что $f(x)$ непрерывно дифференцируема по $x \in [a, b]$. Необходимо по измеренным значениям $\tilde{f}(x_i)$ найти производную функции $f(x)$. Очевидно, что если \tilde{f}_δ имеет производную в каждой точке x_i , то эта производная может сколь угодно сильно отличаться от $f'(x)$. Поэтому будем искать непрерывную функцию $Z(x)$ и ее производные $Z'(x), Z''(x)$, приближенно описывающие $f(x), f'(x)$ и $f''(x)$.

Рассмотрим задачу сглаживания:

$$EZ = f; \quad Z \in W_2^1; \quad f \in L_2, \quad (2)$$

где E — единичный оператор.

Построим сглаживающий функционал Тихонова со стабилизатором первого порядка

* Некорректность задачи здесь рассматривается на паре метрических пространств (L_2, W_2^1) . В другой метрике задача дифференцирования может быть корректно поставленной [1].

$$M^\alpha [Z, \tilde{f}_0] = \|Z - \tilde{f}_0\|_{L_2}^2 + \alpha \|Z\|_{W_2^1}^2 \quad (3)$$

и найдем экстремаль этого функционала, которая является решением уравнения Эйлера [6]:

$$Z'' - RZ = -\gamma \tilde{f}_0, \quad (4)$$

где $\gamma = 1/\alpha$; $R = 1 + \gamma$; α — параметр регуляризации ($\alpha > 0$).
Решение уравнения (4) имеет вид

$$Z(x) = C_1 \exp(\sqrt{R}x) + C_2 \exp(-\sqrt{R}x) - \frac{\gamma}{\sqrt{R}} \int_a^x \tilde{f}_0(t) \operatorname{sh}(\sqrt{R}(x-t)) dt, \quad (5)$$

где C_1, C_2 — константы интегрирования, которые определяются из граничных условий (ГУ).

Константы C_1 и C_2 будем искать для следующих граничных условий:

$$1) Z'(a) = Z'(b) = 0, \quad (6)$$

$$2) Z(a) = A; \quad Z(b) = B, \quad (7)$$

$$3) Z''(a) = Z''(b) = 0, \quad (8)$$

$$4) Z''(a) = 0; \quad Z(b) = B. \quad (9)$$

Выпишем окончательный результат для всех приведенных ГУ:

$$Z_j(x) = V_j(x) + U_j(x), \quad (10)$$

$$Z_j'(x) = V_j'(x) + U_j'(x), \quad (11)$$

$$Z_j''(x) = RZ_j(x) - \gamma \tilde{f}_0(x), \quad (12)$$

здесь j пробегает значения от 1 до 4 соответственно для граничных условий (6) — (9). Функции V_j и U_j имеют вид

$$V_1(x) = 0; \quad (13)$$

$$V_2(x) = C \{ A \operatorname{sh}[\sqrt{R}(b-x)] + B \operatorname{sh}[\sqrt{R}(x-a)] \}; \quad (14)$$

$$V_3(x) = D \{ \tilde{f}_0(a) \operatorname{sh}[\sqrt{R}(b-x)] + \tilde{f}_0(b) \operatorname{sh}[\sqrt{R}(x-a)] \}; \quad (15)$$

$$V_4(x) = D \{ \tilde{f}_0(a) \operatorname{sh}[\sqrt{R}(b-x)] + \frac{R}{\gamma} B \operatorname{sh}[\sqrt{R}(x-a)] \}; \quad (16)$$

$$U_1(x) = L \{ \operatorname{ch}[\sqrt{R}(b-x)] \int_a^x \tilde{f}_0(t) \operatorname{ch}[\sqrt{R}(t-a)] dt + \\ + \operatorname{ch}[\sqrt{R}(x-a)] \int_x^b \tilde{f}_0(t) \operatorname{ch}[\sqrt{R}(b-t)] dt \}; \quad (17)$$

$$U_2(x) = L \{ \text{sh}[\sqrt{R}(b-x)] \int_a^x \tilde{f}_\delta(t) \text{sh}[\sqrt{R}(t-a)] dt + \\ + \text{sh}[\sqrt{R}(x-a)] \int_x^b \tilde{f}_\delta(t) \text{sh}[\sqrt{R}(b-t)] dt \}; \quad (18)$$

$$U_3(x) = U_4(x) = U_2(x), \quad (19)$$

где

$$L = \gamma \{ \sqrt{R} \text{sh}[\sqrt{R}(b-a)] \}^{-1}; \quad (20)$$

$$C = \{ \text{sh}[\sqrt{R}(b-a)] \}^{-1}; \quad (21)$$

$$D = \gamma \{ R \text{sh}[\sqrt{R}(b-a)] \}^{-1}. \quad (22)$$

Устойчивость полученного решения следует из общей теории регуляризации.

Точность решения зависит от величины γ , связанного с параметром регуляризации α соотношением $\gamma = 1/\alpha$. Выбор γ представляет особую трудность при решении обратных задач. Основное требование к выбору параметра γ — согласованность величины γ с ошибкой правой части δ . В настоящее время развиты различные критерии выбора параметра γ [1—3]. Наиболее широкое распространение получили критерий невязки [1] и статистический принцип невязки [2]. Оба эти способа предполагают знание ошибки правой части δ . В данной работе при моделировании использовались оба способа выбора γ .

Функции, описывающие приближенно первую и вторую производные $f'(x)$ и $f''(x)$, легко получаются из (11) и (12) и входящих в эти формулы функций $V_j'(x)$ и $V_j''(x)$, $j = 1, \dots, 4$, которые вычисляются элементарным дифференцированием выражений (13)—(19).

Решение $Z(x)$, определенное формулой (5), непрерывно зависит от x и поэтому может быть вычислено для любой наперед заданной сетки $\{x_k\}$, $k = 1, \dots, N$, с любым числом узлов N . Для этой же сетки $\{x_k\}$ может быть вычислена и первая производная $Z'(x)$. Что касается второй производной $Z''(x)$, то ее вычисление практически возможно лишь на исходной сетке $\{x_i\}$, $i = 1, \dots, n$, на которой задана измеренная функция \tilde{f}_δ (см. (12)).

Численный алгоритм легче всего реализовать для сетки $\{x_k\} \equiv \{x_i\}$. В качестве примера приведем формулы для вычисления $Z(x)$ и $Z'(x)$ на равномерной сетке с шагом h для ГУ (8):

$$Z(x_k) = \frac{\gamma}{R \text{sh}[\sqrt{R}(b-a)]} \{ \tilde{f}(b) \text{sh}[\sqrt{R}(x_k-a)] + \tilde{f}(a) \text{sh}[\sqrt{R}(b-x_k)] \} + \\ + 2 \frac{\gamma}{R} \frac{\text{sh}[\sqrt{R}h/2]}{\text{sh}[\sqrt{R}(b-a)]} \left\{ \text{sh}[\sqrt{R}(b-x_k)] \sum_{l=1}^{k-1} \tilde{f}_l \text{sh}[\sqrt{R}(l-0,5)h] + \right. \\ \left. + \text{sh}[\sqrt{R}(x_k-a)] \sum_{l=k}^{n-1} \tilde{f}_l \text{sh}[\sqrt{R}(n-l-0,5)h] \right\}, \quad (23)$$

$$Z'(x_k) = \frac{\gamma}{\sqrt{R} \operatorname{sh}[\sqrt{R}(b-a)]} [\tilde{f}(b) \operatorname{ch}(\sqrt{R}(x_k - a)) - \tilde{f}(a) \operatorname{ch}(\sqrt{R}(b - x_k))] +$$

$$+ 2 \frac{\gamma}{\sqrt{R}} \frac{\operatorname{sh}[\sqrt{R}h/2]}{\operatorname{sh}[\sqrt{R}(b-a)]} \left\{ -\operatorname{ch}[\sqrt{R}(b - x_k)] \sum_{i=1}^{k-1} \tilde{f}_i \operatorname{sh}[\sqrt{R}(l - 0,5)h] + \right.$$

$$\left. + \operatorname{ch}[\sqrt{R}(x_k - a)] \sum_{i=k}^{n-1} \tilde{f}_i \operatorname{sh}[\sqrt{R}(n - l - 0,5)h] \right\}. \quad (24)$$

Численный эксперимент. Алгоритмы построения регуляризованного решения задачи сглаживания и дифференцирования реализованы в виде пакета программ на РС/XT и проверены на ряде модельных функций. Ниже приводятся результаты двух численных экспериментов.

На интервале $[0, 1]$ задавались функции

$$f_1(x) = \int_0^x \varphi(x') dx',$$

где

$$\varphi(x) = \exp[-(x - 0,5)^2/0,1],$$

и

$$f_2(x) = \varphi(x),$$

значения которых вычислялись в узлах $x_i = (i - 1)h$, $h = 0,025$, $i = 1, \dots, 41$. Рассчитанные значения $f(x_i)$ искажались случайными числами ξ_i , распреде-

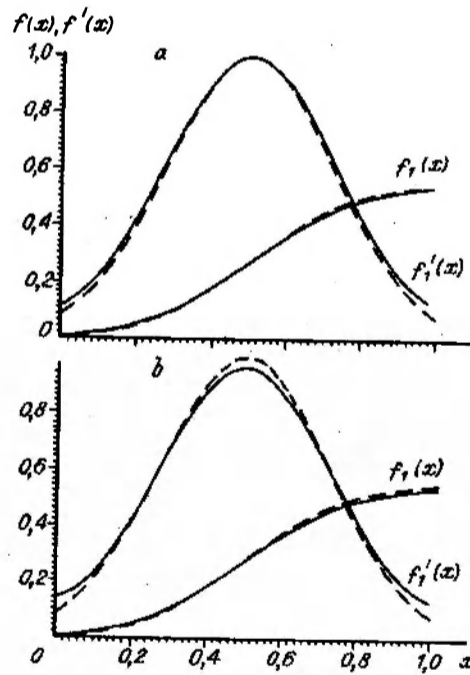


Рис. 1. Точные (штриховые) и восстановленные (сплошные кривые) значения функции: $\epsilon = 1$ (a) и 3% (b)

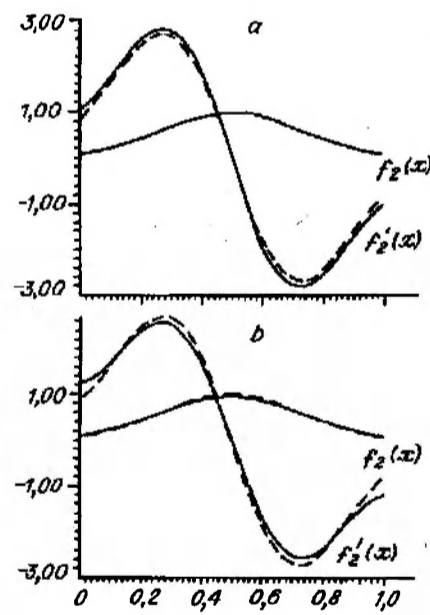


Рис. 2. Точные (штриховые) и восстановленные (сплошные кривые) значения функции: $\epsilon = 1$ (a) и 3% (b)

ленными по нормальному закону с нулевым средним и дисперсией $\sigma_i^2 = (\epsilon f(x_i)/2,5)^2$, где ϵ — относительная «погрешность измерения». Параметр регуляризации выбирался по невязке. Результаты сглаживания и дифференцирования для ГУ (8) приведены на рис. 1, 2. Видно, что в целом наблюдается вполне удовлетворительное согласие между восстановленными функциями $f(x) = Z(x)$ и $f'(x) = Z'(x)$ и точными значениями $f(x)$ и $f'(x)$. Наибольшее расхождение наблюдается вблизи границ интервала.

Таким образом, полученные аналитические формулы (10)—(22) могут быть успешно использованы для сглаживания и дифференцирования экспериментальных данных.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Тихонов А. И., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач.—М.: Наука, 1979.
2. Воскобойников Ю. Е., Преображенский И. Г., Седельников А. И. Математическая обработка эксперимента в молекулярной газодинамике.—М.: Наука, 1984.
3. Морозов В. А. Регулярные методы решения некорректно поставленных задач.—М.: Наука, 1987.
4. Гончарский А. В., Черепашук А. М., Ягола А. Г. Численные методы решения обратных задач астрофизики.—М.: Наука, 1978.
5. Колемаев В. А., Староверов О. В., Турундаевский В. В. Теория вероятностей и математическая статистика.—М.: Наука, 1991.
6. Гельфанд И. М., Фомин С. В. Вариационное исчисление.—М.: Изд-во физ.-мат. лит-ры, 1961.

Поступило в редакцию 24 августа 1992 г.