

Б-90



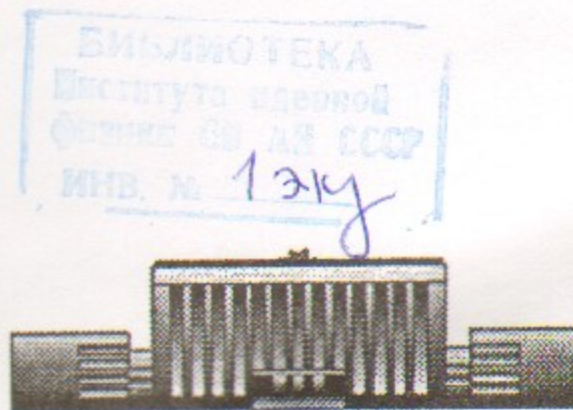
Сибирское отделение Российской Академии наук
ИНСТИТУТ ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ им.Г.И. Будкера

А.Д. Букин

ИНТЕРПОЛЯЦИЯ
ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ
С ОСЛАБЛЕНИЕМ УСЛОВИЯ ГЛАДКОСТИ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ КРИВОЙ

ИЯФ 99-108

<http://www.inp.nsk.su/publications>



НОВОСИБИРСК

1999

V

Interpolation of experimental data
with a soft smoothness criterion of the theoretical curve

A.D. Bukin

Budker Institute of Nuclear Physics
630090 Novosibirsk, Russia

Abstract

This paper continues development of a new approach to experimental data interpolation without theoretical model, recently suggested by the author. The basic idea of this method is minimization of a modified likelihood function, which includes a generalized smoothness criterion of the theoretical curve – average squared derivative of the third order (the previous variant used squared derivative of the second order). Method can be applied when the estimates of statistical errors are rather accurate (Gaussian distribution supposed) and theoretical curve is supposed to be smooth. Using several samples of theoretical curve, the comparison of these two methods is carried out, and with cubic *B*-splines method of interpolation as well.

Following the suggested algorithm a Fortran-77 subroutine is written for interpolation of experimental data. The dependence of CPU time and rounding errors effect on the number of experimental points is obtained.

Интерполяция экспериментальных данных с ослаблением
условия гладкости теоретической кривой

А.Д. Букин

Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера
630090 Новосибирск, Россия

Аннотация

Данная работа продолжает развитие недавно предложенного автором метода интерполяции экспериментальных данных при отсутствии теоретической модели. Основой метода является модификация функции правдоподобия включением обобщенного критерия гладкости теоретической кривой – среднего квадрата третьей производной (в предыдущем варианте использовался квадрат второй производной). Условием применимости этого метода является достаточно точная оценка статистических ошибок экспериментальных данных (предполагается, что результаты подчиняются гауссову распределению в соответствии с полученными средне-квадратичными отклонениями) и гладкость теоретической кривой. Проведено сравнение на нескольких примерах этих двух методов между собой, а также с методом интерполяции кубическими *B*-сплайнами.

В соответствии с предложенным алгоритмом написана программа интерполяции экспериментальных данных на языке Фортран-77. Получена зависимость от числа экспериментальных точек времени счёта и неточности решения из-за ошибок округления.

Оглавление

1 Введение	5
2 Выбор аппроксимирующей функции	6
3 Минимизация среднеквадратичного параметра гладкости I_S	10
4 Представление сплайна в виде линейной комбинации B -сплайнов	11
5 Алгоритм выбора весового множителя	15
6 Оценка статистической ошибки	17
7 Проверка работы алгоритма на нескольких примерах	21
8 Влияние ошибок округления и оценка времени счета	35
9 Заключение	36

1. Введение

Задача интерполяции экспериментальных данных является одной из наиболее важных проблем экспериментальной физики. В большинстве случаев для полученных данных имеется теоретическая модель (или несколько моделей), что позволяет использовать известные методы оптимальной оценки параметров модели (наиболее популярны метод наименьших квадратов и метод максимума правдоподобия, см., например, [1,2]). Однако, иногда бывает так, что единственное, что известно о теоретической кривой, что она – гладкая функция. В таких случаях обычно используют или полиномы, или полиномиальные сплайны. Данная работа посвящена разработке обобщенного алгоритма интерполяции и сглаживания экспериментальных данных при наличии статистических ошибок во всех точках измерений в условиях отсутствия теоретической модели. Одна из последних работ в этом направлении опубликована в [3].

В настоящей работе предлагается использовать при аппроксимации экспериментальных данных обобщенный критерий гладкости, изменяя степень гладкости кривой до тех пор, пока статистическое согласие теории и эксперимента не станет удовлетворительным. Эта работа является продолжением изучения возможностей алгоритма, начатого автором в [4]. Отличие данной работы от предыдущей – в формулировке критерия гладкости. В [4] использовался интеграл от квадрата второй производной искомой теоретической кривой, что приводило в случае "повышения гладкости" к вытягиванию теоретической кривой в прямую линию. При интерполяции экспериментальных данных с сильной неоднородностью предлагаемый алгоритм стремился спрямить пики на гладком фоне при формальном статистическом согласии теории и эксперимента. В данной работе проверяется, как изменится поведение интерполирующей кривой при замене в критерии гладкости квадрата второй производной на квадрат третьей производной от искомой теоретической кривой. Ожида-

лось, что так как в этом случае предельная "абсолютно гладкая" кривая — парабола, то такая модификация позволит лучше интерполировать нелинейные функции.

Для удобства чтения при описании алгоритма приведены все математические преобразования и формулы, включая и те, которые совпадают с предыдущим вариантом алгоритма.

2. Выбор аппроксимирующей функции

Пусть требуется провести гладкую функцию $f(x)$ через n экспериментальных измерений y_i с ошибками σ_i (предполагается гауссово распределение) в точках x_i . Стандартный подход в подобных задачах — минимизировать логарифмическую функцию правдоподобия (или χ^2)

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{[f(x_i) - y_i]^2}{\sigma_i^2} \quad (1)$$

Однако, в случае, когда нет теоретической модели, использование стандартного метода невозможно. Обычно на практике выбирают некоторую гладкую функцию, зависящую от нескольких параметров (например, полином некоторой степени, полиномиальные сплайны с каким-то образом выбранной сеткой узлов, комбинацию нескольких элементарных функций и т.п.), и решают задачу в стандартном подходе. Если результат качественно или количественно неприемлем, то изменяют выбор теоретической функции и повторяют процедуру. Процедура выбора теоретической функции очень неоднозначна и является слабым местом в таком алгоритме.

В данной работе степень гладкости теоретической кривой характеризуется функционалом

$$I_S = \int_{-\infty}^{+\infty} [f'''(x)]^2 dx \quad (2)$$

(в предыдущем варианте алгоритма [4] использовался квадрат второй производной).

В качестве целевой функции мы можем использовать модифицированную функцию правдоподобия

$$\tilde{L} = L + w \cdot I_S, \quad (3)$$

где w — некоторый положительный весовой фактор. В предлагаемом алгоритме весовой множитель увеличивается до тех пор, пока значение L не достигнет $L_0 = n - 3$. Именно этой величине равно среднее значение χ^2 при подгонке экспериментальных значений теоретической кривой с n степенями свободы, при условии, что общий уровень, наклон и средняя кривизна являются свободными параметрами. В предыдущем варианте данного алгоритма [4], как уже сказано, в качестве критерия гладкости кривой использовался квадрат второй производной. Каждый из этих критериев имеет очевидные достоинства и недостатки: минимизация квадрата второй производной даёт возможность сгладить статистические флуктуации вплоть до прямой линии, однако, все неоднородности теоретической кривой при этом тоже сглаживаются (в пределах статистических ошибок). С другой стороны, использование критерия гладкости в виде квадрата третьей производной позволяет более точно отслеживать профиль теоретической кривой, но для почти плоской теоретической зависимости интерполяционная кривая не будет "вытягиваться" в прямую линию даже для бесконечно большого значения весового множителя w .

Очевидно, что за пределами диапазона x экспериментальных измерений для искомой функции нет условий на значение функции, следовательно, можно считать, что искомая функция имеет минимальное возможное значение $[f'''(x)]^2$:

$$f'''(x) = 0, \text{ при } x < x_1 \text{ или } x > x_n \quad (4)$$

Попробуем найти решение методами вариационного исчисления [6]. Следуя стандартному приёму вариационного исчисления, введём малую произвольную функцию $\delta f(x)$ и найдём вариацию \tilde{L} .

$$\delta L = 2 \sum_{i=1}^n \frac{f(x_i) - y_i}{\sigma_i^2} \delta f(x_i) = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\sum_{i=1}^n \frac{f(x) - y_i}{\sigma_i^2} \delta f(x) \delta(x - x_i) \right] dx \quad (5)$$

где

$$\delta(x) = \begin{cases} 0, & \text{если } x \neq 0 \\ +\infty, & \text{если } x = 0 \end{cases} \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = 1$$

и

$$\delta I_S = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f'''(x) \delta f'''(x) dx = -2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d^6 f(x)}{dx^6} \delta f(x) dx \quad (6)$$

где использовано, что

$$f'''(x) \rightarrow 0, \frac{d^4 f(x)}{dx^4} \rightarrow 0, \frac{d^5 f(x)}{dx^5} \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \pm\infty \quad (7)$$

Теперь вариацию функционала \tilde{L} следует приравнять нулю:

$$\delta\tilde{L} = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \delta f(x) dx \cdot \left[-\frac{d^6 f(x)}{dx^6} + \sum_{i=0}^n \frac{f(x) - y_i}{\sigma_i^2} \delta(x - x_i) \right] = 0 \quad (8)$$

Так как функция $\delta f(x)$ – произвольная, то равенство возможно только в случае

$$-\frac{d^6 f(x)}{dx^6} + \sum_{i=0}^n \frac{f(x) - y_i}{\sigma_i^2} \delta(x - x_i) = 0 \quad (9)$$

Такое уравнение означает, что в промежутках между экспериментальными точками (x_i, x_{i+1}) $\frac{d^6 f(x)}{dx^6} \equiv 0$, что является одним из определений произвольного полинома пятой степени, а в точках экспериментальных измерений возможен разрыв одной или нескольких старших производных. Это однозначно определяет тип аппроксимирующей функции $f(x)$ – полиномиальный сплайн пятой степени дефекта 1, 2, 3 или 4 (следуя классификации сплайнов в [5], дефектом сплайна называем количество старших производных, которые терпят разрыв в узлах сплайна). Координаты узлов сплайна тоже определяются однозначно – координаты экспериментальных точек x_i .

Рассмотрим сразу же случай сплайнов дефекта 4. Очевидно, это решение представляет собой гладкую кривую, проходящую точно через экспериментальные значения y_i с непрерывной первой производной. Функционал \tilde{L} при этом точно равен нулю, а решений существует бесконечное множество, так как при заданных значениях функции и первых производных в узлах сплайна, полином пятой степени в промежутке между узлами определяется неоднозначно. Решение математически возможное, но практически не представляющее интереса, поэтому дальше будем рассматривать только случаи дефекта 1, 2 или 3.

Выберем параметризацию сплайна через значения сплайна S_i , значения первой производной сплайна D_i и второй производной C_i в узлах x_i .

Тогда значение сплайна в промежуточной точке

$$\begin{aligned} f(x) &= S_i \cdot p_0(x; x_i, x_{i+1}) + S_{i+1} \cdot q_0(x; x_i, x_{i+1}) + \\ &+ D_i \cdot p_1(x; x_i, x_{i+1}) + D_{i+1} \cdot q_1(x; x_i, x_{i+1}) + \\ &+ C_i \cdot p_2(x; x_i, x_{i+1}) + C_{i+1} \cdot q_2(x; x_i, x_{i+1}), \end{aligned} \quad (10)$$

if $x_i \leq x \leq x_{i+1}$

где

$$\begin{aligned} p_0(x; x_1, x_2) &= \frac{[(x_2 - x_1)^2 + 3(x_2 - x_1)(x - x_1) + 6(x - x_1)^2](x_2 - x)^3}{(x_2 - x_1)^6}, \\ q_0(x; x_1, x_2) &= \frac{[10(x_2 - x_1)^2 - 15(x_2 - x_1)(x - x_1) + 6(x - x_1)^2](x - x_1)^3}{(x_2 - x_1)^6}, \\ p_1(x; x_1, x_2) &= \frac{(x_2 + 3x - 4x_1)(x_2 - x)^3(x - x_1)}{(x_2 - x_1)^4}, \\ q_1(x; x_1, x_2) &= \frac{(x_1 + 3x - 4x_2)(x_2 - x)(x - x_1)^3}{(x_2 - x_1)^4}, \\ p_2(x; x_1, x_2) &= \frac{(x_2 - x)^3(x - x_1)^2}{2(x_2 - x_1)^3}, \quad q_2(x; x_1, x_2) = \frac{(x_2 - x)^2(x - x_1)^3}{2(x_2 - x_1)^3}. \end{aligned} \quad (11)$$

Действительно, любой полином пятой степени можно представить в виде линейной комбинации полиномов p_k, q_k . Указанные стандартные полиномы обладают легко проверяемыми свойствами:

$$\begin{aligned} \frac{d^j p_k(x_1; x_1, x_2)}{dx^j} &= \delta_{jk}; \quad \frac{d^j p_k(x_2; x_1, x_2)}{dx^j} = 0 \\ \frac{d^j q_k(x_2; x_1, x_2)}{dx^j} &= \delta_{jk}; \quad \frac{d^j q_k(x_1; x_1, x_2)}{dx^j} = 0 \end{aligned} \quad (12)$$

что и позволяет использовать их в виде (10) для параметризации произвольного сплайна пятой степени дефекта 3. Третья и четвёртая производная справа и слева от x_i выражаются через коэффициенты S_i, D_i, C_i :

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x=x_i+0} &= \frac{60(S_{i+1} - S_i)}{(x_{i+1} - x_i)^3} - \frac{12(2D_{i+1} + 3D_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2} + \frac{3(C_{i+1} - 3C_i)}{x_{i+1} - x_i} \\ \left. \frac{d^3 f}{dx^3} \right|_{x=x_i-0} &= \frac{60(S_i - S_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^3} - \frac{12(2D_{i-1} + 3D_i)}{(x_i - x_{i-1})^2} - \frac{3(C_{i-1} - 3C_i)}{x_i - x_{i-1}} \\ \left. \frac{d^4 f}{dx^4} \right|_{x=x_i+0} &= \frac{360(S_i - S_{i+1})}{(x_{i+1} - x_i)^4} + \frac{24(8D_i + 7D_{i+1})}{(x_{i+1} - x_i)^3} + \frac{12(3C_i - 2C_{i+1})}{(x_{i+1} - x_i)^2} \\ \left. \frac{d^4 f}{dx^4} \right|_{x=x_i-0} &= \frac{360(S_i - S_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^4} - \frac{24(8D_i + 7D_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^3} + \frac{12(3C_i - 2C_{i-1})}{(x_i - x_{i-1})^2} \end{aligned} \quad (13)$$

Для сплайнов дефекта 1 или 2 не все указанные коэффициенты могут быть свободными параметрами, в качестве уравнений связи между параметрами надо использовать условия непрерывности третьей и четвертой производных.

Для краткости далее будем обозначать расстояния между соседними узлами как

$$h_i = x_{i+1} - x_i \quad (14)$$

3. Минимизация среднеквадратичного параметра гладкости I_S

Для произвольного сплайна пятой степени дефекта 3 в выбранных обозначениях функция правдоподобия L зависит только от значений сплайна в узлах S_i , в то время как параметр гладкости I_S зависит от всех свободных параметров S_i, D_i, C_i . Для нахождения минимума модифицированной функции правдоподобия \tilde{L} сначала найдём минимум функции I_S по D_i, C_i при фиксированных S_i . Соответствующий интеграл на интервале (x_k, x_{k+1}) равен:

$$\begin{aligned} \int_{x_k}^{x_{k+1}} [f'''(x)]^2 dx = & 720 (S_{k+1} - S_k) \left[\frac{S_{k+1} - S_k}{h_k^5} - \frac{D_{k+1} + D_k}{h_k^4} \right] + \\ & + 24 \frac{5(S_{k+1} - S_k)(C_{k+1} - C_k) + 8D_{k+1}^2 + 14D_{k+1}D_k + 8D_k^2}{h_k^3} - \\ & - 24 \frac{(3C_{k+1} - 2C_k)D_{k+1} + (2C_{k+1} - 3C_k)D_k}{h_k^2} + \\ & + 3 \frac{3C_{k+1}^2 - 2C_{k+1}C_k + 3C_k^2}{h_k} \end{aligned} \quad (15)$$

Можно убедиться, что система линейных уравнений для определения минимума эквивалентна условию непрерывности третьей и четвертой производной сплайна:

$$\frac{\partial I_S}{\partial C_k} = 2[f'''(x_k - 0) - f'''(x_k + 0)] = 0, \quad (16)$$

$$\frac{\partial I_S}{\partial D_k} = 2[f''''(x_k + 0) - f''''(x_k - 0)] = 0.$$

Для крайних узлов это означает равенство нулю третьей и четвертой производной.

Как и в предыдущей работе [4], сплайн "не хочет" воспользоваться предоставленной свободой и превращается в сплайн дефекта 1. Поэтому далее не будем использовать эту характеристику сплайна, подразумевая только сплайны дефекта 1. На этом заканчиваются возможности отдельной минимизации "параметра гладкости" I_S , теперь следует минимизировать всю функцию \tilde{L} по оставшимся n свободным параметрам.

Имея в качестве одной из своих практических целей возможность аппроксимировать большие массивы экспериментальных точек (по крайней мере, десятки точек), мы вынуждены предусмотреть сложности работы с большими матрицами. Одним из наиболее эффективных средств, позволяющих получить почти диагональные матрицы и, следовательно, существенно ослабить эффекты ошибок округления, является представление сплайна в виде линейной комбинации B -сплайнов. Этот же приём позволил достичь успеха в работах [3,4].

4. Представление сплайна в виде линейной комбинации B -сплайнов

В отличие от наиболее распространённого случая кубических B -сплайнов, в нашем случае нам нужны B -сплайны пятой степени, которые являются полиномиальными сплайнами пятой степени специального вида [5]. Отличительной их чертой является то, что они тождественно равны нулю везде, кроме нескольких смежных интервалов между узлами сплайна. Построив систему B -сплайнов, покрывающую всю сетку узлов сплайна, можно представлять любой сплайн на этой сетке узлов в виде линейной комбинации B -сплайнов.

Следуя [5], определим B -сплайны следующим образом:

$$\begin{aligned} B_i(x) = & a_{i1} \cdot (x - x_{i-3})_+^5 + a_{i2} \cdot (x - x_{i-2})_+^5 + \\ & + a_{i3} \cdot (x - x_{i-1})_+^5 + a_{i4} \cdot (x - x_i)_+^5 \\ & + a_{i5} \cdot (x - x_{i+1})_+^5 + a_{i6} \cdot (x - x_{i+2})_+^5, \end{aligned} \quad (17)$$

при $x \leq x_{i+3}$

и

$$B_i(x) \equiv 0 \text{ при } x \geq x_{i+3},$$

где для удобства введено обозначение

$$(x)_+ = \begin{cases} 0, & x \leq 0 \\ x, & x \geq 0 \end{cases} \quad (18)$$

Очевидно, что в узлах $x_{i-3}, x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}, x_{i+2}$ при таком определении B -сплайна автоматически обеспечивается непрерывность самого сплайна и первых четырёх производных. Для обеспечения этого же в узле x_{i+3} необходимо выполнить равенства:

$$\begin{aligned} & a_{i1} \cdot (x_{i+3} - x_{i-3})^5 + a_{i2} \cdot (x_{i+3} - x_{i-2})^5 + \\ & + a_{i3} \cdot (x_{i+3} - x_{i-1})^5 + a_{i4} \cdot (x_{i+3} - x_i)^5 + \\ & + a_{i5} \cdot (x_{i+3} - x_{i+1})^5 + a_{i6} \cdot (x_{i+3} - x_{i+2})^5 = 0 \\ & a_{i1} \cdot (x_{i+3} - x_{i-3})^4 + a_{i2} \cdot (x_{i+3} - x_{i-2})^4 + \\ & + a_{i3} \cdot (x_{i+3} - x_{i-1})^4 + a_{i4} \cdot (x_{i+3} - x_i)^4 + \\ & + a_{i5} \cdot (x_{i+3} - x_{i+1})^4 + a_{i6} \cdot (x_{i+3} - x_{i+2})^4 = 0 \\ & a_{i1} \cdot (x_{i+3} - x_{i-3})^3 + a_{i2} \cdot (x_{i+3} - x_{i-2})^3 + \\ & + a_{i3} \cdot (x_{i+3} - x_{i-1})^3 + a_{i4} \cdot (x_{i+3} - x_i)^3 + \\ & + a_{i5} \cdot (x_{i+3} - x_{i+1})^3 + a_{i6} \cdot (x_{i+3} - x_{i+2})^3 = 0 \\ & a_{i1} \cdot (x_{i+3} - x_{i-3})^2 + a_{i2} \cdot (x_{i+3} - x_{i-2})^2 + \\ & + a_{i3} \cdot (x_{i+3} - x_{i-1})^2 + a_{i4} \cdot (x_{i+3} - x_i)^2 + \\ & + a_{i5} \cdot (x_{i+3} - x_{i+1})^2 + a_{i6} \cdot (x_{i+3} - x_{i+2})^2 = 0 \\ & a_{i1} \cdot (x_{i+3} - x_{i-3}) + a_{i2} \cdot (x_{i+3} - x_{i-2}) + \\ & + a_{i3} \cdot (x_{i+3} - x_{i-1}) + a_{i4} \cdot (x_{i+3} - x_i) + \\ & + a_{i5} \cdot (x_{i+3} - x_{i+1}) + a_{i6} \cdot (x_{i+3} - x_{i+2}) = 0 \end{aligned} \quad (19)$$

Введём ещё одно условие: $B_i(x_i) = 1$, и после этого все необходимые коэффициенты становятся однозначно определёнными. Выражения для коэффициентов a через координаты узлов достаточно громоздки в общем случае, поэтому система уравнений (19) решалась численно.

Теперь любой сплайн пятой степени на сетке узлов x_1, \dots, x_n можно представить линейной комбинацией B -сплайнов:

$$f(x) = \sum_{i=-1}^{n+2} \beta_i B_i(x) \quad (20)$$

Для B -сплайнов вблизи крайних узлов необходимо при этом дополнить имеющуюся сетку узлов несколькими вспомогательными узлами: $x_{-4}, x_{-3}, x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_{n+1}, x_{n+2}, x_{n+3}, x_{n+4}, x_{n+5}$. Для определённости выберем эти вспомогательные узлы в виде симметричного отражения относительно крайних узлов:

$$\begin{aligned} x_0 &= 2x_1 - x_2, & x_{n+1} &= 2x_n - x_{n-1} \\ x_{-1} &= 2x_1 - x_3, & x_{n+2} &= 2x_n - x_{n-2}, \\ x_{-2} &= 2x_1 - x_4, & x_{n+3} &= 2x_n - x_{n-3}, \\ x_{-3} &= 2x_1 - x_5, & x_{n+4} &= 2x_n - x_{n-4}, \\ x_{-4} &= 2x_1 - x_6, & x_{n+5} &= 2x_n - x_{n-5}. \end{aligned} \quad (21)$$

Сплайн, определённый в (20), при всех свободных параметрах β_i , может иметь произвольное значение третьей и четвёртой производной в крайних узлах. В то же время для обеспечения минимальности I_S нам необходимо использовать сплайны с $f'''(x_1) = f'''(x_n) = f''''(x_1) = f''''(x_n) = 0$. Эти условия легко удовлетворяются соответствующим выбором коэффициентов $\beta_{-1}, \beta_0, \beta_{n+1}$ и β_{n+2} , что, в свою очередь, позволяет модифицировать определение B -сплайнов так, чтобы нужные нам сплайны на интервале (x_1, x_n) представлялись в виде

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \beta_i \tilde{B}_i(x) \quad (22)$$

где β_i могут принимать любые значения, а

$$\begin{aligned} \tilde{B}_1 &= B_1(x) - \frac{B_1'''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_1''''(x_1)B_{-1}'''(x_1)}{B_0'''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_0''''(x_1)B_{-1}'''(x_1)} B_0(x) - \\ & - \frac{B_1''''(x_1)B_0'''(x_1) - B_1'''(x_1)B_0''''(x_1)}{B_0'''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_0''''(x_1)B_{-1}'''(x_1)} B_{-1}(x), \\ \tilde{B}_2 &= B_2(x) - \frac{B_2'''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_2''''(x_1)B_{-1}'''(x_1)}{B_0'''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_0''''(x_1)B_{-1}'''(x_1)} B_0(x) - \\ & - \frac{B_2''''(x_1)B_0'''(x_1) - B_2'''(x_1)B_0''''(x_1)}{B_0'''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_0''''(x_1)B_{-1}'''(x_1)} B_{-1}(x), \end{aligned}$$

$$\tilde{B}_3 = B_3(x) - \frac{B_3''''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_3''''(x_1)B_{-1}''''(x_1)}{B_0''''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_0''''(x_1)B_{-1}''''(x_1)}B_0(x) -$$

$$- \frac{B_3''''(x_1)B_0''''(x_1) - B_3''''(x_1)B_0''''(x_1)}{B_0''''(x_1)B_{-1}''''(x_1) - B_0''''(x_1)B_{-1}''''(x_1)}B_{-1}(x),$$

$$\tilde{B}_i = B_i(x), \quad 3 < i < n-2$$

$$\tilde{B}_{n-2} = B_{n-2}(x) - \frac{B_{n-2}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n-2}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}{B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}B_{n+1}(x) -$$

$$- \frac{B_{n-2}''''(x_n)B_{n+1}''''(x_n) - B_{n-2}''''(x_n)B_{n+1}''''(x_n)}{B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}B_{n+2}(x),$$

$$\tilde{B}_{n-1} = B_{n-1}(x) - \frac{B_{n-1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n-1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}{B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}B_{n+1}(x) -$$

$$- \frac{B_{n-1}''''(x_n)B_{n+1}''''(x_n) - B_{n-1}''''(x_n)B_{n+1}''''(x_n)}{B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}B_{n+2}(x),$$

$$\tilde{B}_n = B_n(x) - \frac{B_n''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_n''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}{B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}B_{n+1}(x) -$$

$$- \frac{B_n''''(x_n)B_{n+1}''''(x_n) - B_n''''(x_n)B_{n+1}''''(x_n)}{B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n) - B_{n+1}''''(x_n)B_{n+2}''''(x_n)}B_{n+2}(x).$$

Далее, с небольшими отличиями, всё очень похоже на ранее разработанный алгоритм [4] с другим критерием гладкости. Функция правдоподобия представляется в виде

$$L = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} \beta_i \beta_j - 2 \sum_{i=1}^n P_i \beta_i + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}, \quad (23)$$

где

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\tilde{B}_i(x_k) \tilde{B}_j(x_k)}{\sigma_k^2}; \quad P_i = \sum_{k=1}^n \frac{y_k \tilde{B}_i(x_k)}{\sigma_k^2} \quad (24)$$

Если ввести матрицу В и вектор Y:

$$B_{ij} = \tilde{B}_i(x_j); \quad Y_i = \frac{y_i}{\sigma_i^2} \quad (25)$$

то выражения для L и P можно переписать в следующем виде

$$L = \beta^T A \beta - 2P^T \beta + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}; \quad P = BY \quad (26)$$

где индекс T означает транспонирование.

5. Алгоритм выбора весового множителя

Модифицированная функция правдоподобия теперь может быть записана так:

$$\tilde{L} = \beta^T A \beta - 2P^T \beta + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} + w \beta^T R \beta \quad (27)$$

где симметричная матрица R равна

$$R_{ij} = \int_{x_1}^{x_n} \tilde{B}_i''''(x) \tilde{B}_j''''(x) dx =$$

$$= \sum_{k=1}^{n-1} \frac{h_k}{60} \cdot \left\{ 2h_k^2 \tilde{B}_i''''(x_k) \tilde{B}_j''''(x_k) + \right.$$

$$+ 7h_k \left[\tilde{B}_i''''(x_k) \tilde{B}_j''''(x_k) + \tilde{B}_i''''(x_k) \tilde{B}_j''''(x_k) \right] +$$

$$+ 3h_k \left[\tilde{B}_i''''(x_{k+1}) \tilde{B}_j''''(x_k) + \tilde{B}_i''''(x_k) \tilde{B}_j''''(x_{k+1}) \right] +$$

$$+ 8\tilde{B}_j''''(x_k) \left[\tilde{B}_i''''(x_{k+1}) + 4\tilde{B}_i''''(x_k) \right] +$$

$$+ \tilde{B}_j''''(x_{k+1}) \left[12\tilde{B}_i''''(x_{k+1}) + 8\tilde{B}_i''''(x_k) \right] \left. \right\} \quad (28)$$

Хорошо известен алгоритм приведения одновременно двух симметричных матриц к диагональному виду с помощью линейного преобразования [7,8]. Следуя этому алгоритму, проведём цепочку линейных преобразований.

Для матрицы A найдётся преобразование поворота T_1 , приводящее матрицу к диагональному виду:

$$u = T_1 \beta; \quad T_1 A T_1^T = G; \quad G_{ij} = \delta_{ij} g_i; \quad g_i > 0 \quad (29)$$

Теперь преобразованием

$$u = G^{-1/2} v; \quad Q = G^{-1/2} T_1 P; \quad F = G^{-1/2} T_1 R T_1^T G^{-1/2} \quad (30)$$

можно привести \tilde{L} к виду:

$$\tilde{L} = v^T v - 2Q^T v + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} + w \cdot v^T F v \quad (31)$$

Наконец, найдётся преобразование поворота T_2 , приводящее к диагональному виду матрицу F:

$$z = T_2 v; \quad E = T_2 Q; \quad T_2 F T_2^T = \Lambda; \quad \Lambda_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i; \quad \lambda_i \geq 0 \quad (32)$$

Три собственных значения из всех λ_i должны быть точно равны нулю. Это следует из того, что трёхпараметрическое множество линий второго порядка, являющихся возможным результатом подгонки, имеет параметр кривизны $I_S = 0$.

Обе функции правдоподобия теперь могут быть записаны в виде:

$$L = z^T z - 2E^T z + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}; \quad \tilde{L} = L + w \cdot z^T \Lambda z \quad (33)$$

Система линейных уравнений для поиска минимума \tilde{L} распадается на независимые уравнения

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial z_i} = z_i - E_i + w \lambda_i z_i = 0, \quad (34)$$

имеющие решения

$$z_i = \frac{E_i}{1 + \lambda_i w}, \quad i = 1, \dots, n \quad (35)$$

Подставляем полученное решение в формулу для L и получаем зависимость L от w :

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^n \frac{E_i^2 \cdot (1 + 2\lambda_i w)}{(1 + \lambda_i w)^2} \quad (36)$$

Очевидно, что при $w \rightarrow 0$ сплайн должен точно проходить через экспериментальные точки и $L \rightarrow 0$, то есть

$$\sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^n E_i^2 \quad (37)$$

Кстати, это тождество может быть использовано для проверки правильности использования формул при реализации алгоритма в программах.

С учётом последнего формула для L превращается в

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{(E_i \lambda_i w)^2}{(1 + \lambda_i w)^2} \quad (38)$$

Каждое слагаемое в этой сумме монотонно возрастает при увеличении w , поэтому и функция L является монотонно возрастающей функцией от w . Решение уравнения

$$L = L_0 = n - 3 \quad (39)$$

относительно w можно найти любым численным методом, например, методом деления пополам [7].

Может оказаться так, что даже при увеличении весового множителя до бесконечности значение функции L остаётся меньше L_0 . Это условие надо проверять до начала численного решения уравнения 39. Максимально возможное значение L получается при интерполяции экспериментальных данных параболой ($w \rightarrow \infty$), при этом

$$\max L = L_{max} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - y_0)^2 - a_1^2 \cdot (x_i - x_0)^2}{\sigma_i^2} - \frac{a_5^2}{a_4}, \quad (40)$$

где

$$\begin{aligned} a_0 &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}, & x_0 &= \frac{1}{a_0} \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2}, \\ y_0 &= \frac{1}{a_0} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2}, & a_2 &= \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)^2}{\sigma_i^2}, \\ a_1 &= \frac{1}{a_2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)(y_i - y_0)}{\sigma_i^2}, & a_3 &= \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)^3}{\sigma_i^2}, \\ a_4 &= \sum_{i=1}^n \frac{\rho^2(x_i)}{\sigma_i^2}, & a_5 &= \sum_{i=1}^n \frac{y_i \cdot \rho(x_i)}{\sigma_i^2}, \\ \rho(x) &= (x - x_0)^2 - \frac{a_3}{a_2} (x - x_0) - \frac{a_4}{a_0}. \end{aligned} \quad (41)$$

После того, как выбран весовой множитель w и соответствующие коэффициенты β_j , полный набор коэффициентов S_i , D_i и C_i может быть получен из формул:

$$S_i = \sum_{j=1}^n \beta_j \tilde{B}_j(x_i); \quad D_i = \sum_{j=1}^n \beta_j \tilde{B}'_j(x_i); \quad C_i = \sum_{j=1}^n \beta_j \tilde{B}''_j(x_i). \quad (42)$$

В случае, когда сплайн вырождается в параболу, выражения для S_i , D_i , C_i упрощаются:

$$S_i = y_0 + a_1 \cdot (x_i - x_0) + \frac{a_5}{a_4} \rho(x_i); \quad D_i = a_1 + \frac{a_5}{a_4} \rho'(x_i); \quad C_i = 2 \frac{a_5}{a_4}. \quad (43)$$

6. Оценка статистической ошибки

При оценке статистической ошибки будем считать, что экспериментальные измерения в разных точках статистически независимы. В принципе,

корреляции в линейном приближении можно учесть, если для экспериментальных данных известна ковариационная матрица. Однако, в данной работе корреляциями пренебрежем.

В произвольной точке $x \in (x_i, x_{i+1})$ в соответствии с формулой (10) можно написать формулу для дисперсии значения сплайна:

$$\begin{aligned}
 \sigma^2(x) = & p_0^2 (\langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2) + q_0^2 (\langle S_{i+1}^2 \rangle - \langle S_{i+1} \rangle^2) + \\
 & + p_1^2 (\langle D_i^2 \rangle - \langle D_i \rangle^2) + q_1^2 (\langle D_{i+1}^2 \rangle - \langle D_{i+1} \rangle^2) + \\
 & + p_2^2 (\langle C_i^2 \rangle - \langle C_i \rangle^2) + q_2^2 (\langle C_{i+1}^2 \rangle - \langle C_{i+1} \rangle^2) + \\
 & + 2p_0q_0 (\langle S_i S_{i+1} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_1q_1 (\langle D_i D_{i+1} \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_0p_1 (\langle S_i D_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_i \rangle) + \\
 & + 2p_0q_1 (\langle S_i D_{i+1} \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_1q_0 (\langle D_i S_{i+1} \rangle - \langle D_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2q_0q_1 (\langle D_{i+1} S_{i+1} \rangle - \langle D_{i+1} \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_2q_2 (\langle C_i C_{i+1} \rangle - \langle C_i \rangle \langle C_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_2q_1 (\langle C_i D_{i+1} \rangle - \langle C_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_2q_0 (\langle C_i S_{i+1} \rangle - \langle C_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2p_2p_1 (\langle C_i D_i \rangle - \langle C_i \rangle \langle D_i \rangle) + \\
 & + 2p_2p_0 (\langle C_i S_i \rangle - \langle C_i \rangle \langle S_i \rangle) + \\
 & + 2q_2q_0 (\langle C_{i+1} S_{i+1} \rangle - \langle C_{i+1} \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2q_2q_1 (\langle C_{i+1} D_{i+1} \rangle - \langle C_{i+1} \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\
 & + 2q_2p_0 (\langle C_{i+1} S_i \rangle - \langle C_{i+1} \rangle \langle S_i \rangle) + \\
 & + 2q_2p_1 (\langle C_{i+1} D_i \rangle - \langle C_{i+1} \rangle \langle D_i \rangle)
 \end{aligned} \tag{44}$$

где для краткости стандартные полиномы из (11) обозначены

$$p_k = p_k(x; x_i, x_{i+1}), \quad q_k = q_k(x; x_i, x_{i+1}), \quad k = 0, 1, 2$$

При $x < x_1$ сплайн переходит в параболу $f(x) = S_1 + D_1 \cdot (x - x_1) + C_1 \cdot (x - x_1)^2$, поэтому

$$\begin{aligned}
 \sigma^2(x)|_{x < x_1} = & (\langle S_1^2 \rangle - \langle S_1 \rangle^2) + \\
 & + (x - x_1)^2 (\langle D_1^2 \rangle - \langle D_1 \rangle^2) + \\
 & + (x - x_1)^4 (\langle C_1^2 \rangle - \langle C_1 \rangle^2) + \\
 & + 2(x - x_1) (\langle S_1 D_1 \rangle - \langle S_1 \rangle \langle D_1 \rangle) + \\
 & + 2(x - x_1)^2 (\langle S_1 C_1 \rangle - \langle S_1 \rangle \langle C_1 \rangle) + \\
 & + 2(x - x_1)^3 (\langle C_1 D_1 \rangle - \langle C_1 \rangle \langle D_1 \rangle)
 \end{aligned} \tag{45}$$

Аналогично, при $x > x_n$

$$\begin{aligned}
 \sigma^2(x)|_{x > x_n} = & (\langle S_n^2 \rangle - \langle S_n \rangle^2) + \\
 & + (x - x_n)^2 (\langle D_n^2 \rangle - \langle D_n \rangle^2) + \\
 & + (x - x_n)^4 (\langle C_n^2 \rangle - \langle C_n \rangle^2) + \\
 & + 2(x - x_n) (\langle S_n D_n \rangle - \langle S_n \rangle \langle D_n \rangle) + \\
 & + 2(x - x_n)^2 (\langle S_n C_n \rangle - \langle S_n \rangle \langle C_n \rangle) + \\
 & + 2(x - x_n)^3 (\langle C_n D_n \rangle - \langle C_n \rangle \langle D_n \rangle)
 \end{aligned} \tag{46}$$

Точно вычислить необходимые корреляторы, соответствующие предложенному алгоритму, представляется трудной задачей. Однако, достаточно хорошая оценка статистической ошибки может быть сделана в приближении фиксированного весового фактора w . Эти корреляторы можно вычислить при подгонке экспериментальных данных и запомнить во вспомогательном массиве, чтобы использовать их при необходимости оценить статистическую ошибку подгонки в произвольной точке x . Если множитель w считать фиксированным, то выражения для S_i и D_i становятся линейными по y_j . Действительно,

$$\begin{aligned}
 \beta = H^T z; \quad H = T_2 G^{-1/2} T_1; \\
 S = OY; \quad D = NY; \quad C = KY
 \end{aligned} \tag{47}$$

где

$$\begin{aligned}
 Y_i &= \frac{y_i}{\sigma_i^2}; \quad O_{ij} = \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n M_{km} \tilde{B}_k(x_i) \tilde{B}_m(x_j); \\
 N_{ij} &= \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n M_{km} \tilde{B}'_k(x_i) \tilde{B}_m(x_j); \\
 K_{ij} &= \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n M_{km} \tilde{B}''_k(x_i) \tilde{B}_m(x_j); \\
 M_{ij} &= \sum_{k=1}^n H_{ki} H_{kj} \frac{1}{1+\lambda_k w}
 \end{aligned}
 \tag{48}$$

Используя матрицы O_{ij} , N_{ij} и K_{ij} , легко получить выражения для корреляторов:

$$\begin{aligned}
 \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{O_{ik} O_{jk}}{\sigma_k^2} \\
 \langle S_i D_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{O_{ik} N_{jk}}{\sigma_k^2} \\
 \langle D_i D_j \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{N_{ik} N_{jk}}{\sigma_k^2} \\
 \langle C_i C_j \rangle - \langle C_i \rangle \langle C_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{K_{ik} K_{jk}}{\sigma_k^2} \\
 \langle S_i C_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle C_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{O_{ik} K_{jk}}{\sigma_k^2} \\
 \langle D_i C_j \rangle - \langle D_i \rangle \langle C_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{N_{ik} K_{jk}}{\sigma_k^2}
 \end{aligned}
 \tag{49}$$

В вырожденном случае, когда фактически производится интерполяция параболой, соответствующие матрицы O_{ik} , N_{ik} , K_{ik} выглядят следующим образом:

$$\begin{aligned}
 O_{ik} &= \frac{1}{a_0} + \frac{(x_i - x_0)(x_k - x_0)}{a_2} + \frac{\rho(x_i)\rho(x_k)}{a_4}; \\
 N_{ik} &= \frac{(x_k - x_0)}{a_2} + \frac{\rho'(x_i)\rho(x_k)}{a_4}; \quad K_{ik} = \frac{2\rho(x_k)}{a_4};
 \end{aligned}
 \tag{50}$$

и отсюда выражения для корреляторов получаются:

$$\begin{aligned}
 \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle &= \frac{1}{a_0} + \frac{(x_i - x_0)(x_j - x_0)}{a_2} + \frac{\rho(x_i)\rho(x_j)}{a_4}, \\
 \langle S_i D_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_j \rangle &= \frac{(x_i - x_0)}{a_2} + \frac{\rho(x_i)\rho'(x_j)}{a_4}, \\
 \langle D_i D_j \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_j \rangle &= \frac{1}{a_2} + \frac{\rho'(x_i)\rho'(x_j)}{a_4}, \\
 \langle C_i C_j \rangle - \langle C_i \rangle \langle C_j \rangle &= \frac{4}{a_4}, \\
 \langle C_i D_j \rangle - \langle C_i \rangle \langle D_j \rangle &= \frac{2\rho'(x_j)}{a_4}, \\
 \langle C_i S_j \rangle - \langle C_i \rangle \langle S_j \rangle &= \frac{2\rho(x_j)}{a_4}.
 \end{aligned}
 \tag{51}$$

7. Проверка работы алгоритма на нескольких примерах

В соответствии с изложенным алгоритмом была написана программа FITABU на языке Фортран-77 для аппроксимации экспериментальных данных, а также соответствующие программы VALSPLU и ERRSPLU для вычисления значения сплайна и оценки статистической ошибки. Формат обращения к программам следующий:

```
call FITABU(n, Xi, Yi, Sigi, qLik, Si, Di, Ci, Tcor)
```

где

integer *4 n – количество экспериментальных точек ($n \leq 300$),

real *8 Xi(n) – координаты экспериментальных точек,

real *8 Yi(n) – измеренные значения изучаемой величины,

real *8 Sigi(n) – оценки статистической ошибки в точках,

real *8 qLik – множитель к величине $(n-3)$, к которой "притягивается" значение χ^2 . Если этот множитель меньше нуля, то целевое значение χ^2 остается стандартным ($L \rightarrow n-3$). Изменяя величину этого множителя, можно управлять гладкостью аппроксимирующей кривой: чем больше значение qLik, тем ближе к параболе становится интерполирующая кривая (выше некоторого предела для аппроксимации будет использоваться парабола).

real *8 Si(n) – значения сплайна в узлах,
 real *8 Di(n) – значения первой производной в узлах,
 real *8 Ci(n) – значения второй производной в узлах,
 real *8 Tcor(15,n) – таблица корреляторов.

Входные параметры: n, Xi, Yi, Sigi, qLik. Выходные: Si, Di, Ci, Tcor.
 Для вычисления значения сплайна в произвольной точке x используются массивы Si, Di, Ci, полученные из программы FITABU:

f = VALSPLU(x, n, Xi, Si, Di, Ci)
 где

real *8 f, VALSPLU – значение сплайна,
 real *8 x – координата точки, в которой надо вычислить значение сплайна,
 integer *4 n – количество узлов сплайна,
 real *8 Xi(n) – координаты узлов,
 real *8 Si(n) – значения сплайна в узлах,
 real *8 Di(n) – значения первой производной в узлах,
 real *8 Ci(n) – значения второй производной в узлах.

Для получения оценки статистической ошибки в точке x используется таблица корреляторов Tcor, полученная в программе FITABU:

sig = ERRSPLU(x, n, Xi, Tcor)
 где

real *8 sig, ERRSPLU – оценка стат. ошибки,
 real *8 x – координата точки, в которой надо вычислить ошибку,
 integer *4 n – количество узлов сплайна,
 real *8 Xi(n) – координаты узлов,
 real *8 Tcor(15,n) – таблица корреляторов.

Для приведения симметричной матрицы к диагональному виду используется программа EIGVALU (используется метод последовательных поворотов с целью уменьшить влияние ошибок округления):

call EIGVALU(iM1,iM2)

где

integer *4 iM1 – порядковый номер в общем блоке исходной матрицы A (матрица после обращения к EIGVAL содержит на диагонали собственные значения λ_i),

integer *4 iM2 – порядковый номер в общем блоке матрицы, которая после обращения к EIGVAL содержит матрицу преобразования поворота T такую, что $TAT^T = \Lambda$, $\Lambda_{ij} = \delta_{ij}\lambda_i$.

Матрицы находятся в общем блоке

/ALLWRKU/nMax,na,Tw1(nMax,nMax),Tw2(nMax,nMax),...

integer *4 nMax – максимально возможное количество точек,

integer *4 na – заданное в данном счете количество точек,

real *8 Tw1,Tw2... – рабочие матрицы.

Рассмотрим несколько простых случаев применения описанного алгоритма (в том же порядке, что и в [4]).

Синусоида, большие экспериментальные ошибки. Возьмем 10 точек, лежащих на синусоиде с амплитудой 1:

$$x_i = i - 1, \quad \langle y_i \rangle = \sin x_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (52)$$

разбросанных относительно синусоиды по гауссову распределению с помощью соответствующего генератора псевдослучайных чисел.

$$\frac{dW}{dy_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp \left[-\frac{(y_i - \langle y_i \rangle)^2}{2\sigma_i^2} \right] \quad (53)$$

На рис.1 сплошной кривой нарисована синусоида $y = \sin x$ (точная теория), 10 точек с ошибками получены для $\sigma_i = 1$. Во всех примерах будем приводить для сравнения результаты аппроксимации данных по алгоритму из работы [3] (штриховая линия) и по алгоритму из [4] (штрихпунктирная линия).

Для того, чтобы иметь количественные критерии для оценки качества аппроксимации, используем тот факт, что мы здесь знаем точную

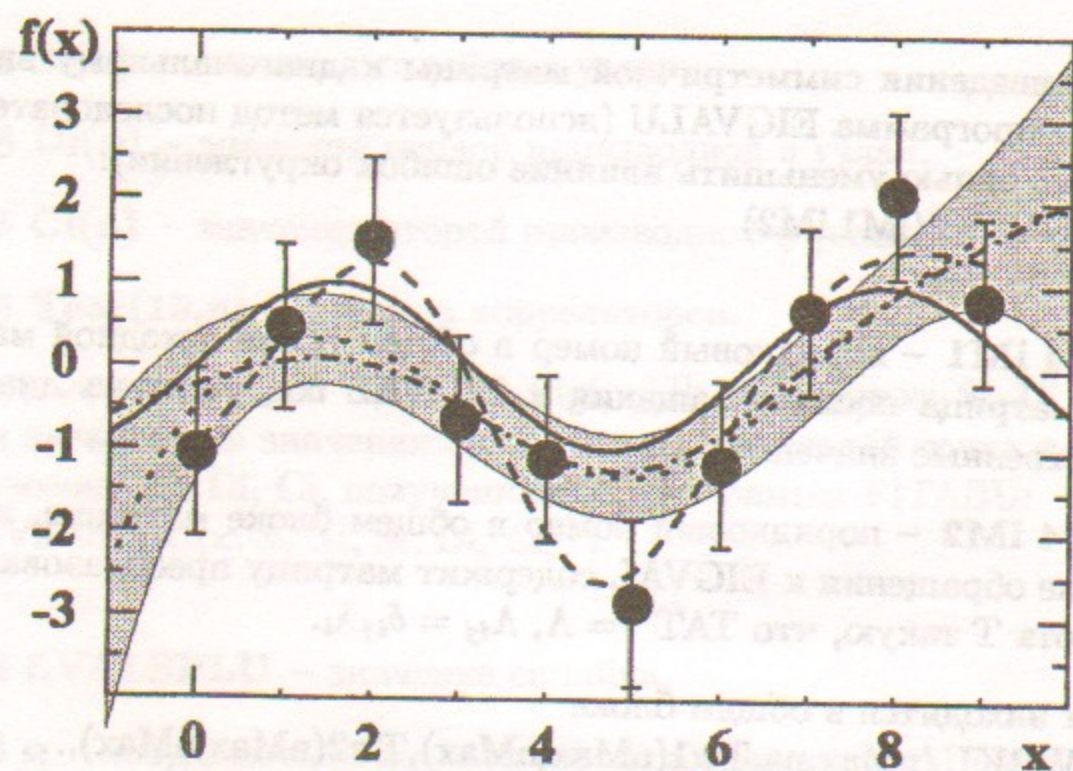


Рис. 1: Интерполяция точек, лежащих на синусоиде ($\sigma_i = 1$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая – интерполяция B-сплайнами [3], штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4].

теоретическую кривую. Введём две характеристики отклонения аппроксимирующей кривой $f(x)$ от истинной теоретической кривой $f_{exact}(x)$: максимальное отклонение по абсолютной величине

$$\Delta f_{abs} = \max_{x_1 < x < x_n} |f(x) - f_{exact}(x)|, \quad (54)$$

и средне-квадратичное отклонение

$$\Delta f_{rms} = \sqrt{\frac{1}{x_n - x_1} \int_{x_1}^{x_n} [f(x) - f_{exact}(x)]^2 dx} \quad (55)$$

Результаты аппроксимации на рис.1 характеризуются следующими параметрами:

Алгоритм сглаживания	Δf_{abs}	Δf_{rms}
Работа [3]	1.60	0.79
Работа [4]	1.09	0.57
Данная работа	1.23	0.56

В данном случае оба варианта критерия гладкости дают результат лучше, чем интерполяция B-сплайнами [3], однако, явного преимущества одного из них не наблюдается.

Синусоида, маленькие экспериментальные ошибки. Теперь уменьшим в 5 раз "экспериментальные" ошибки ($\sigma_i = 0.2$) и повторим эту операцию (рис.2). Видно, что кривизна интерполирующей кривой автоматически увеличилась, несмотря на то, что количество узлов сплайна не изменилось. Характеристики аппроксимации для этого случая:

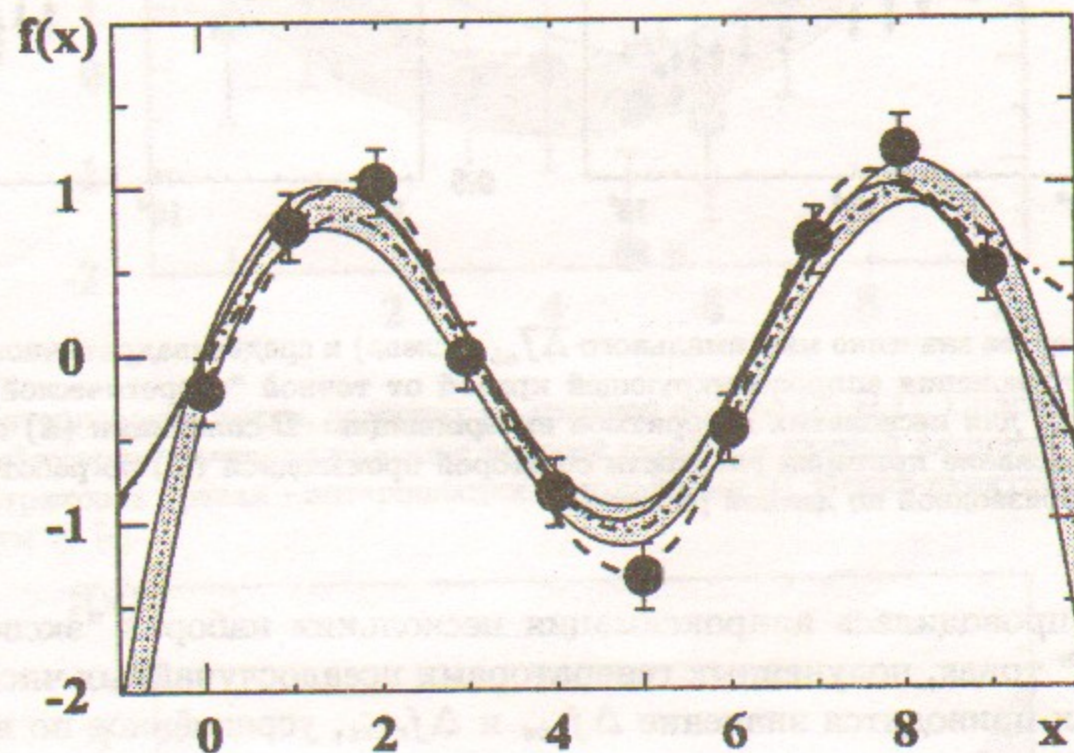


Рис. 2: Интерполяция точек, лежащих на синусоиде ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая – интерполяция B-сплайнами [3], штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4].

Алгоритм сглаживания	Δf_{abs}	Δf_{rms}
Работа [3]	0.35	0.18
Работа [4]	0.28	0.12
Данная работа	0.24	0.12

Несмотря на то, что обе модификации предлагаемого алгоритма имеют заметно лучшие характеристики аппроксимации, чем в методе [3], нельзя делать выводы на основе одной статистической выборки. На рис.3 приведены зависимости качества аппроксимации от значения ошибок в "экспериментальных" точках. При каждом значении экспериментальной

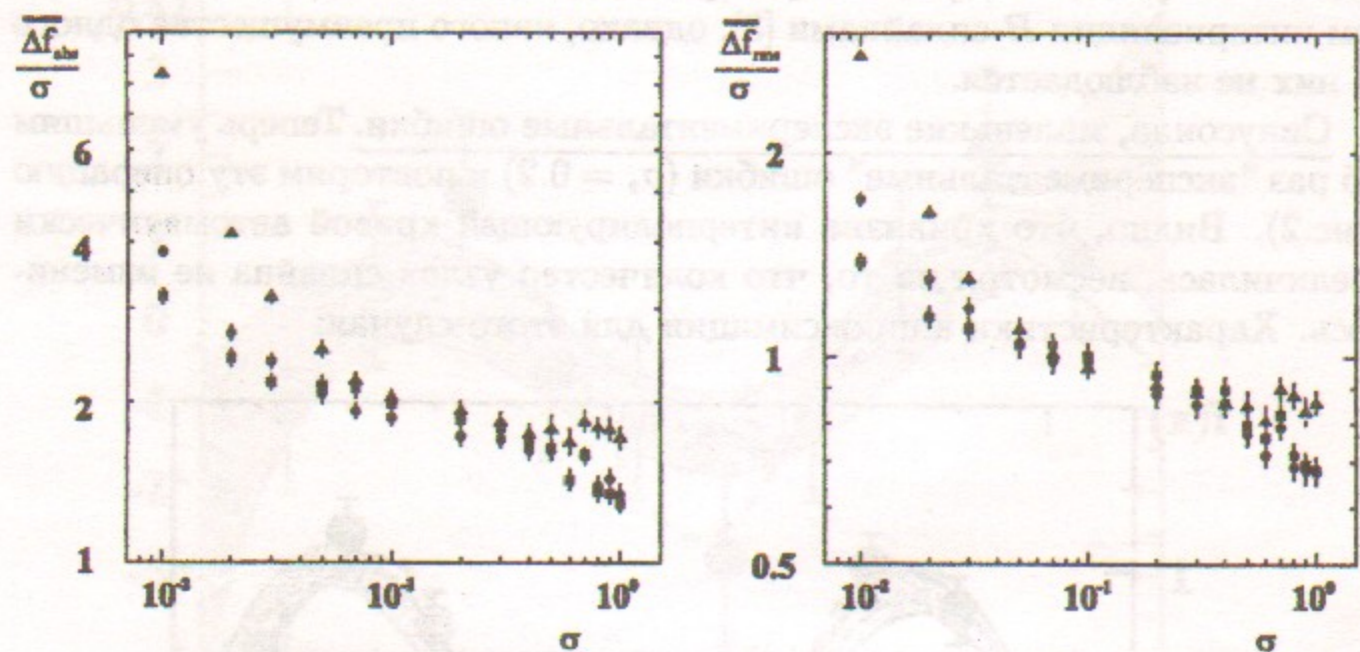


Рис. 3: Среднее значение максимального $\overline{\Delta f_{abs}}$ (слева) и среднеквадратичного $\overline{\Delta f_{rms}}$ (справа) отклонения аппроксимирующей кривой от точной "теоретической" кривой (синусоиды) для нескольких алгоритмов интерполяции: B -сплайнами (Δ) по работе [3], использование критерия гладкости со второй производной (\blacksquare) по работе [4], и с третьей производной по данной работе (\bullet)

ошибки проводилась аппроксимация нескольких наборов "экспериментальных" точек, полученных генераторами псевдослучайных чисел, и на графиках приводится значение Δf_{abs} и Δf_{rms} , усреднённое по нескольким выборкам.

Ломаная прямая. Проведём теперь аналогичную операцию с ломаной линией

$$x_i = i - 1, \quad \langle y_i \rangle = 0.3 \cdot |x_i - 5|, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (56)$$

Точно так же проведём две серии подгонок: один раз с $\sigma_i = 1$ (рис.4), а другой раз с $\sigma_i = 0.2$ (рис.5).

Характеристики аппроксимации для этих случаев:

σ	Алгоритм сглаживания	Δf_{abs}	Δf_{rms}
1	Работа [3]	1.02	0.61
	Работа [4]	0.99	0.45
	Данная работа	0.87	0.56
0.2	Работа [3]	0.27	0.15
	Работа [4]	0.15	0.10
	Данная работа	0.22	0.12

По-прежнему обе модификации обсуждаемого алгоритма имеют качество аппроксимации лучше, чем алгоритм с B -сплайнами [3], однако, од-

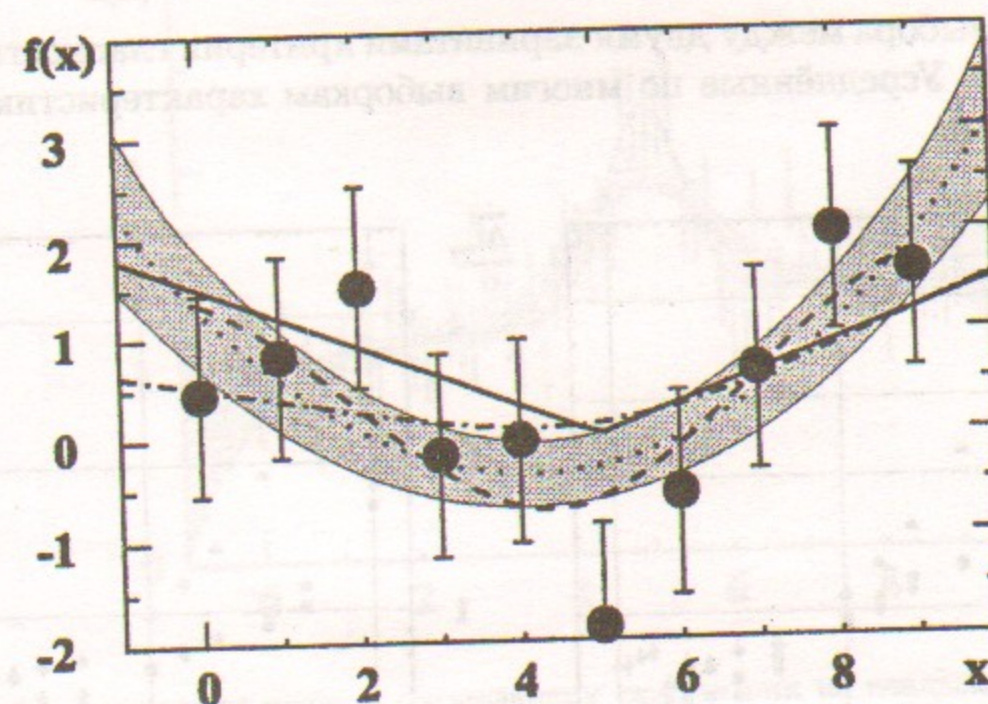


Рис. 4: Интерполяция точек, лежащих на ломаной прямой ($\sigma_i = 1$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая – интерполяция B -сплайнами [3], штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4].

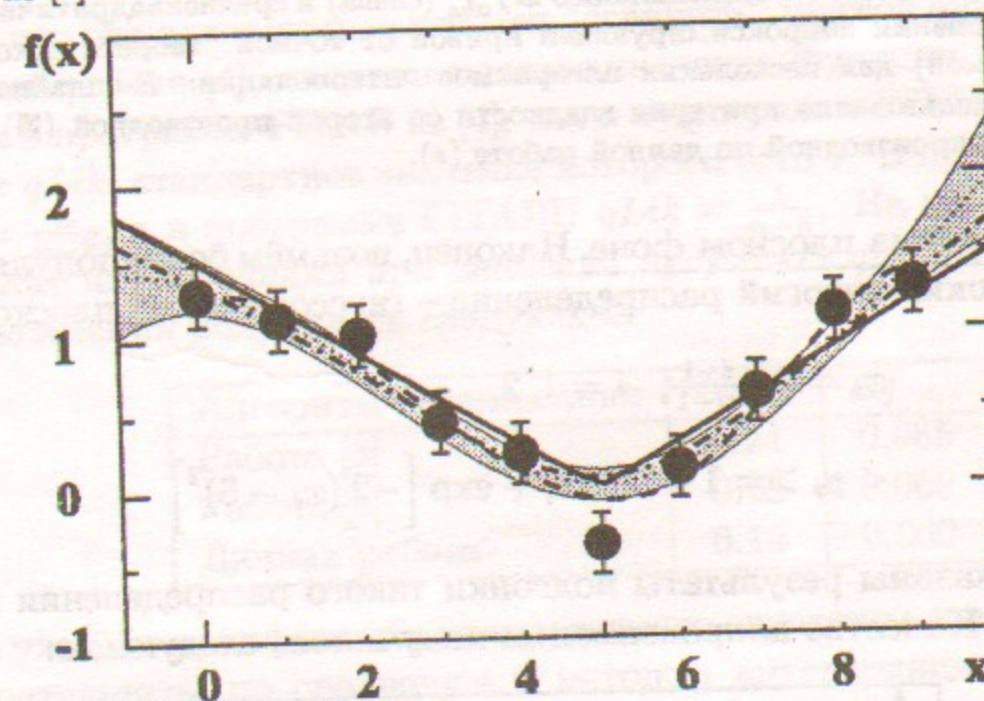


Рис. 5: Интерполяция точек, лежащих на ломаной прямой ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая – интерполяция B -сплайнами [3], штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4].

нозначного выбора между двумя вариантами критерия гладкости сделать невозможно. Усреднённые по многим выборкам характеристики приведены на рис.6.

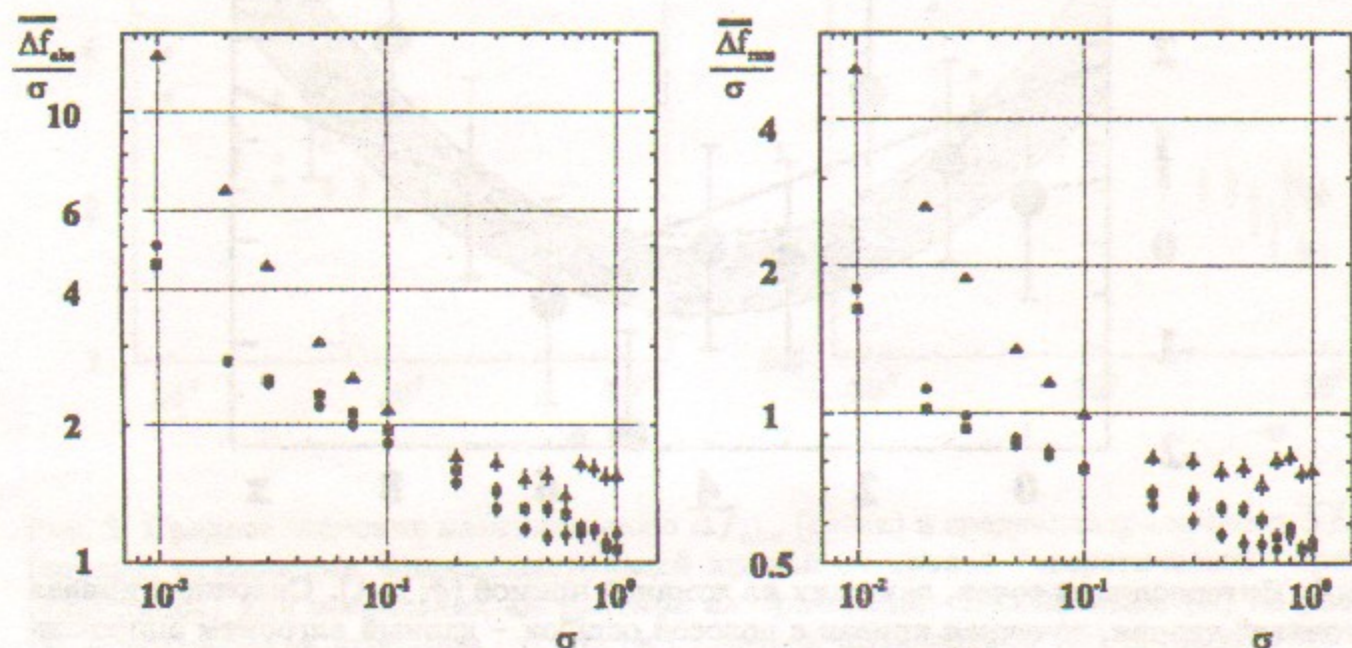


Рис. 6: Среднее значение максимального $\overline{\Delta f_{abs}}$ (слева) и среднеквадратичного $\overline{\Delta f_{rms}}$ (справа) отклонения аппроксимирующей кривой от точной "теоретической" кривой (ломаной прямой) для нескольких алгоритмов интерполяции: B -сплайнами (▲) по работе [3], использование критерия гладкости со второй производной (■) по работе [4] и с третьей производной по данной работе (●).

Гауссов пик на плоском фоне. Наконец, возьмём более популярное для физики высоких энергий распределение – гауссов пик на плоском фоне:

$$x_i = 9 \cdot \frac{i-1}{n-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n$$

$$\langle y_i \rangle = 1 + 0.05x_i + \exp[-2(x_i - 5)^2] \quad (57)$$

На рис.7 показаны результаты подгонки такого распределения при $n = 60$, $\sigma_i = 0.2$. Качество аппроксимации получилось следующее:

Алгоритм сглаживания	Δf_{abs}	Δf_{rms}
Работа [3]	0.24	0.085
Работа [4]	0.38	0.13
Данная работа	0.35	0.12

Как и первоначальная версия алгоритма [4], так и данная его модификация проигрывают методу интерполяции B -сплайнами [3]. На рисунке

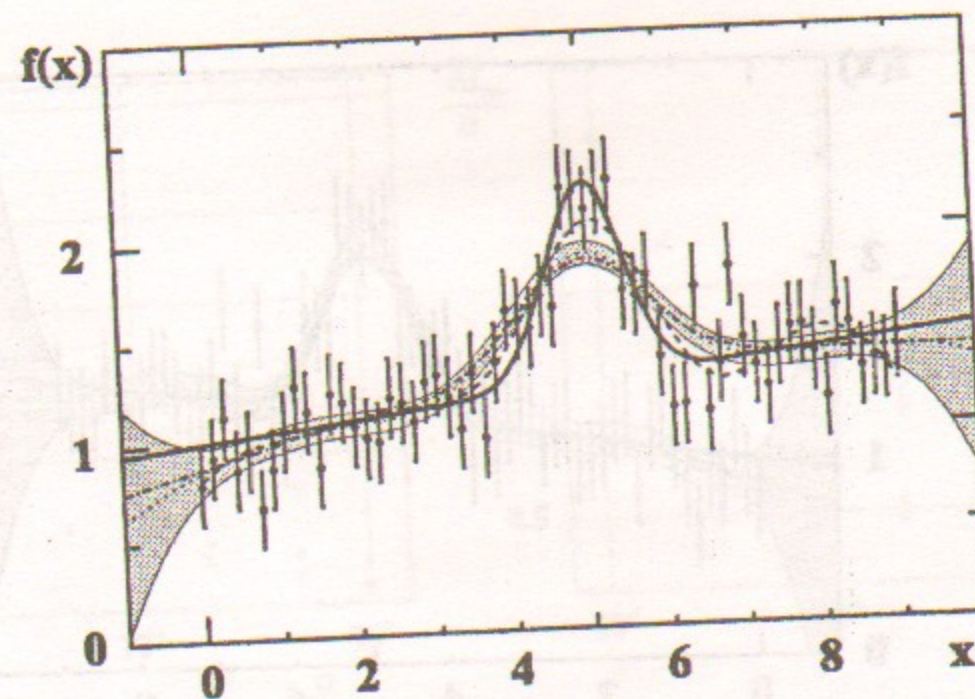


Рис. 7: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая – интерполяция B -сплайнами [3], штрихпунктирная кривая – алгоритм из [4].

видно, что оба алгоритма пытаются "сгладить" гауссов пик. Как и в предыдущей работе [4], изменим целевое значение функции правдоподобия L . Как в программе FITAB из [4], так и в программе FITABU имеется аргумент $qLik$, стандартное значение которого есть 1. В программе FITAB $qLik = \frac{L}{n-2}$, а в программе FITABU $qLik = \frac{L}{n-3}$. На рис.8 представлен результат интерполяции при значении аргумента $qLik = 0.7$. Качество аппроксимации получилось следующее:

Алгоритм сглаживания	Δf_{abs}	Δf_{rms}
Работа [3]	0.24	0.085
Работа [4]	0.18	0.069
Данная работа	0.14	0.060

Здесь уже обе модификации предлагаемого алгоритма дают заметно лучшие результаты по сравнению с методом интерполяции B -сплайнами, причём вариант с критерием гладкости с использованием квадрата третьей производной, как и ожидалось, позволяет лучше описывать неоднородности теоретической кривой. Степень согласия по критерию χ^2 при этом становится "чересчур хорошей", всё же оставаясь в пределах стати-

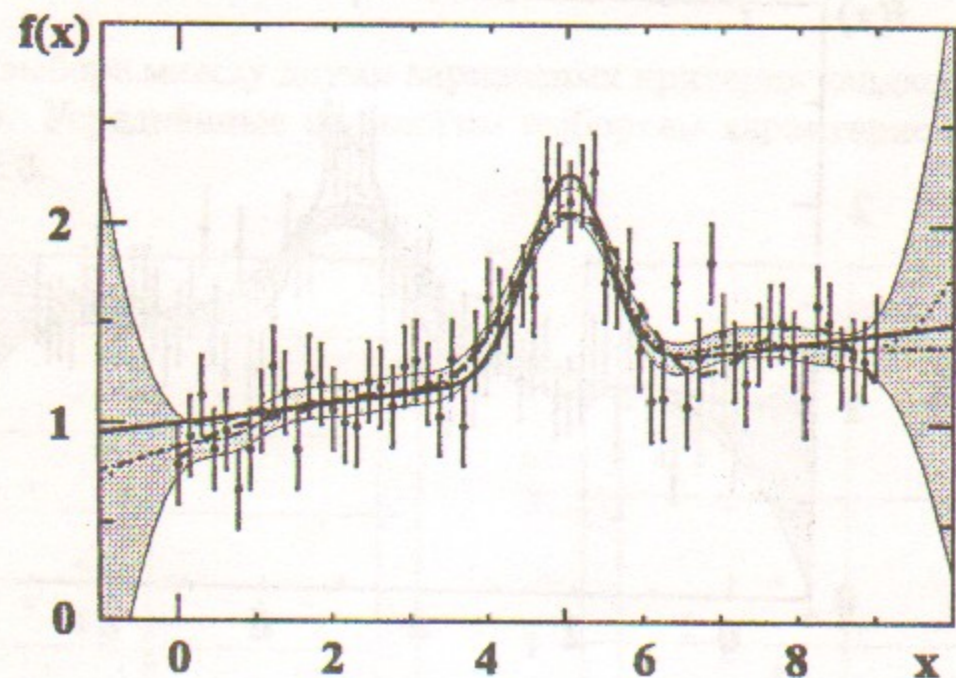


Рис. 8: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая – интерполяция B-сплайнами [3], штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4]. В программах FITAB и FITABU аргумент $qLik = 0.7$

стически возможного:

$$P_n(\chi^2) = P_{60-3} [0.7 \cdot (60 - 3)] = P_{57}(39.9) = 95.85\%;$$

$$P_n(\chi^2) = P_{60-2} [0.7 \cdot (60 - 2)] = P_{58}(40.6) = 95.99\%.$$
(58)

На рис.9 представлена зависимость среднего качества аппроксимации от величины экспериментальных ошибок (параметр $qLik = 0.7$ в программах FITAB и FITABU).

Мы уже видели, как по-разному прошли интерполяционные кривые в предлагаемом алгоритме при значениях аргумента $qLik$ 0.7 и 1. Интересно взглянуть, как трансформируется интерполяционная кривая от одного крайнего случая проведения точно через "экспериментальные" точки ($qLik = 0$) до другого крайнего случая прямой линии или параболы ($qLik \rightarrow \infty$). Несколько вариантов для последней теоретической модели "Гаусс + фон" при $n = 60$, $\sigma_i = 0.2$ изображено на рис.10 – 14, более подробная информация приведена в следующей таблице:

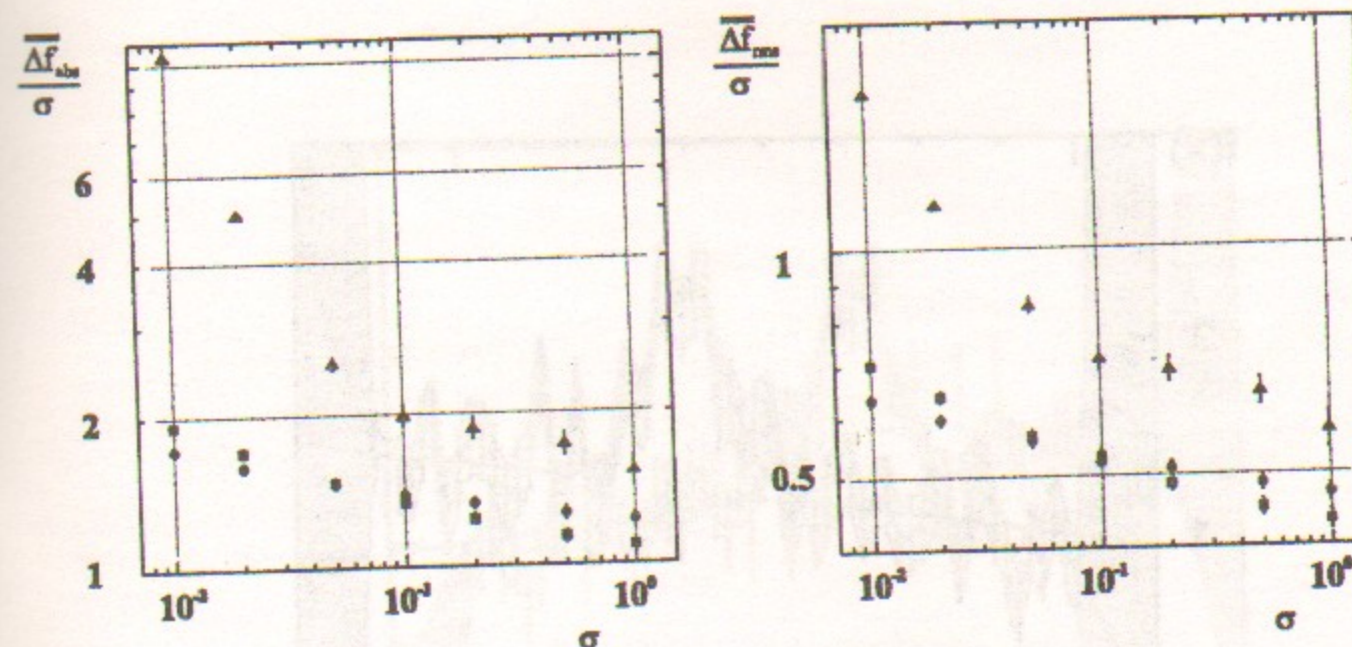


Рис. 9: Среднее значение максимального $\overline{\Delta f_{abs}}$ (слева) и среднеквадратичного $\overline{\Delta f_{rms}}$ (справа) отклонения аппроксимирующей кривой от точной "теоретической" кривой (гаусс + гладкий фон) для нескольких алгоритмов интерполяции: B-сплайнами (Δ) по работе [3], использование критерия гладкости со второй производной (\blacksquare) по работе [4] и с третьей производной по данной работе (\bullet). Число "экспериментальных" точек $n = 60$. Аргумент $qLik = 0.7$ в программах FITAB и FITABU.

$qLik$	ΔF_{abs}		ΔF_{rms}	
	Работа [4]	Данная работа	Работа [4]	Данная работа
0.01	0.44	0.45	0.15	0.16
0.02	0.42	0.44	0.15	0.15
0.05	0.39	0.41	0.14	0.14
0.10	0.35	0.38	0.13	0.13
0.20	0.29	0.31	0.11	0.12
0.40	0.22	0.25	0.079	0.089
0.50	0.17	0.20	0.067	0.076
0.55	0.15	0.17	0.062	0.067
0.60	0.13	0.14	0.059	0.059
0.65	0.14	0.12	0.061	0.055
0.70	0.18	0.14	0.069	0.060
0.80	0.26	0.22	0.089	0.080
0.90	0.32	0.29	0.11	0.10
1.00	0.38	0.35	0.13	0.12
1.40	0.55	0.52	0.19	0.18
2.00	0.75	0.68	0.24	0.24
20.0	0.86	0.68	0.28	0.24

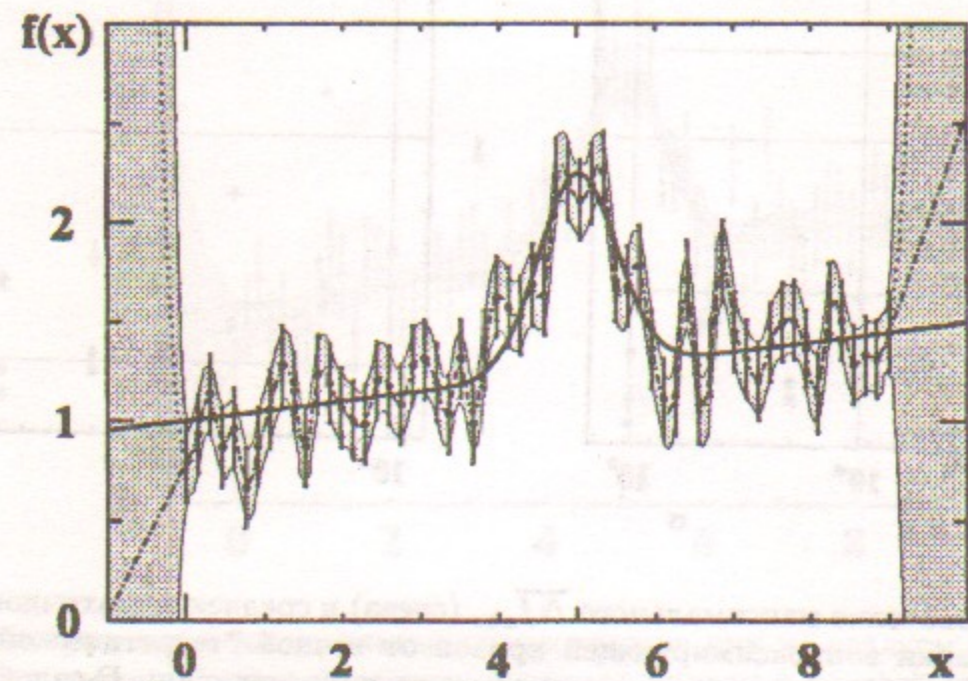


Рис. 10: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4]. В программах FITAB и FITABU аргумент $qLik = 0.01$.

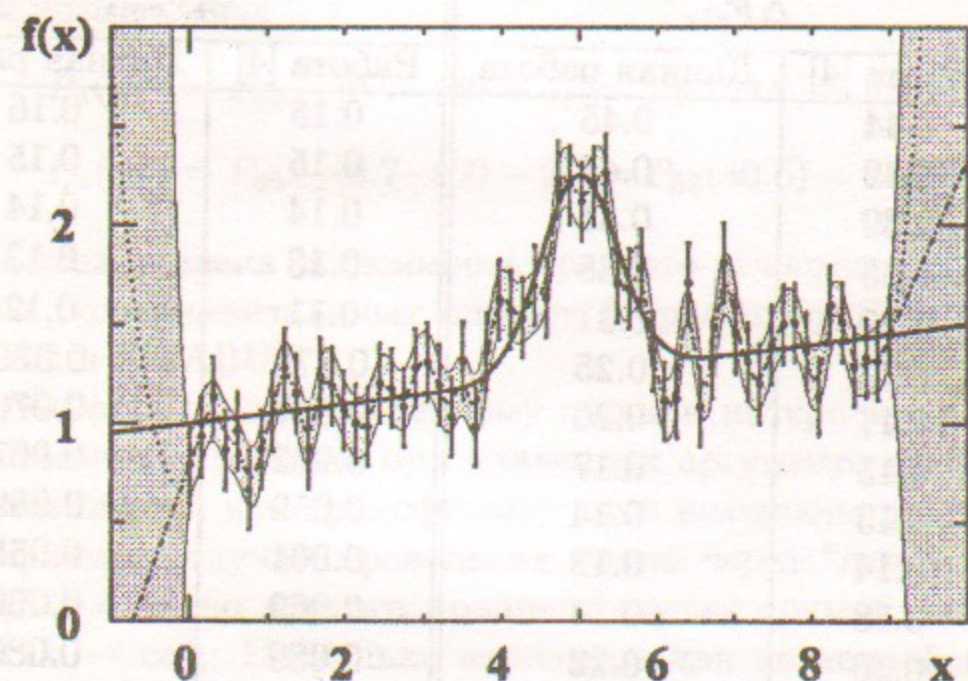


Рис. 11: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4]. В программах FITAB и FITABU аргумент $qLik = 0.1$.

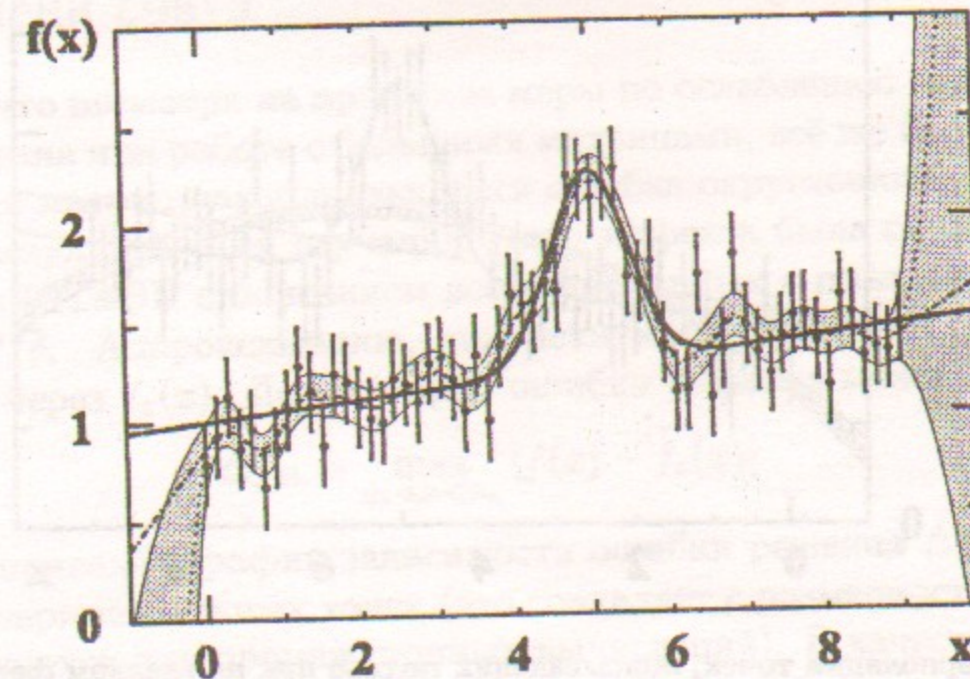


Рис. 12: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4]. В программах FITAB и FITABU аргумент $qLik = 0.5$.

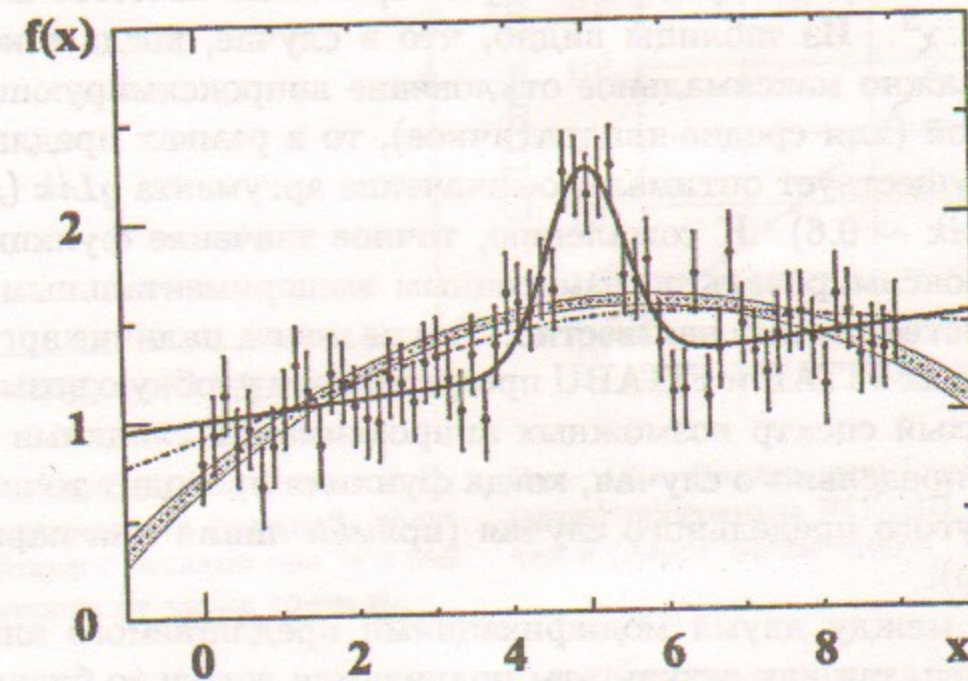


Рис. 13: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4]. В программах FITAB и FITABU аргумент $qLik = 2$.

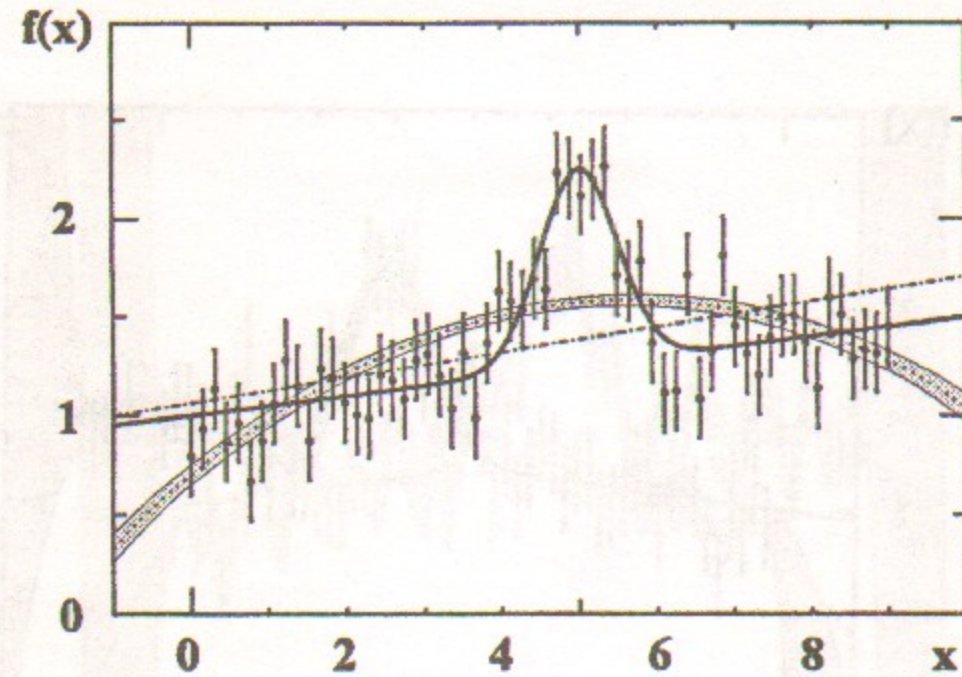


Рис. 14: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне ($\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая – "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок – данный алгоритм аппроксимации, штрих-пунктирная кривая – алгоритм из [4]. В программах FITAB и FITABU аргумент $qLik = 20$

Вообще говоря, неправильно характеризовать качество интерполяции значением χ^2 . Из таблицы видно, что в случае, когда в конечном результате важно максимальное отклонение аппроксимирующей функции от истинной (или средне-квадратичное), то в рамках предлагаемого алгоритма существует оптимальное значение аргумента $qLik$ (для данного случая $qLik \sim 0.6$). К сожалению, точное значение функции, которую надо аппроксимировать по измеренным экспериментальным значениям, в большинстве случаев неизвестно. Тем не менее, наличие аргумента $qLik$ в программах FITAB и FITABU предоставляет удобную возможность получать целый спектр возможных аппроксимаций гладкими функциями от одного предельного случая, когда функция проходит точно через точки, до другого предельного случая (прямая линия или парабола, соответственно).

Выбор между двумя модификациями предлагаемого алгоритма затруднителен, так как результаты получаются довольно близкими. В тех случаях, когда интерполирующая функция должна иметь непрерывную 3-ю или 4-ю производную, выбор однозначен – надо использовать программу FITABU. В других случаях, по-видимому, предпочтительнее более простая версия FITAB, в частности, и из-за более естественной экстраполяции функции прямой линией за пределами интервала измерений.

8. Влияние ошибок округления и оценка времени счета

Очевидно, что несмотря на принятые меры по ослаблению влияния ошибок округления при работе с большими матрицами, всё же при некоторой размерности матриц накапливающаяся ошибка округления будет сильно искажать результат. Для изучения этого эффекта была сделана версия программы FITABU с описанием всех переменных с плавающей точкой вида *real *16*. Аппроксимацию, полученную этой версией программы, обозначим через $f_e(x)$. Далее, мерой ошибки решения можно считать

$$\Delta f_m = \max_{x_1 < x < x_n} |f(x) - f_e(x)| \quad (59)$$

На рис.15 приведён график зависимости ошибки решения Δf_m от количества экспериментальных точек (это совпадает с размерностью матриц, использующихся для промежуточных вычислений). В качестве тестовой

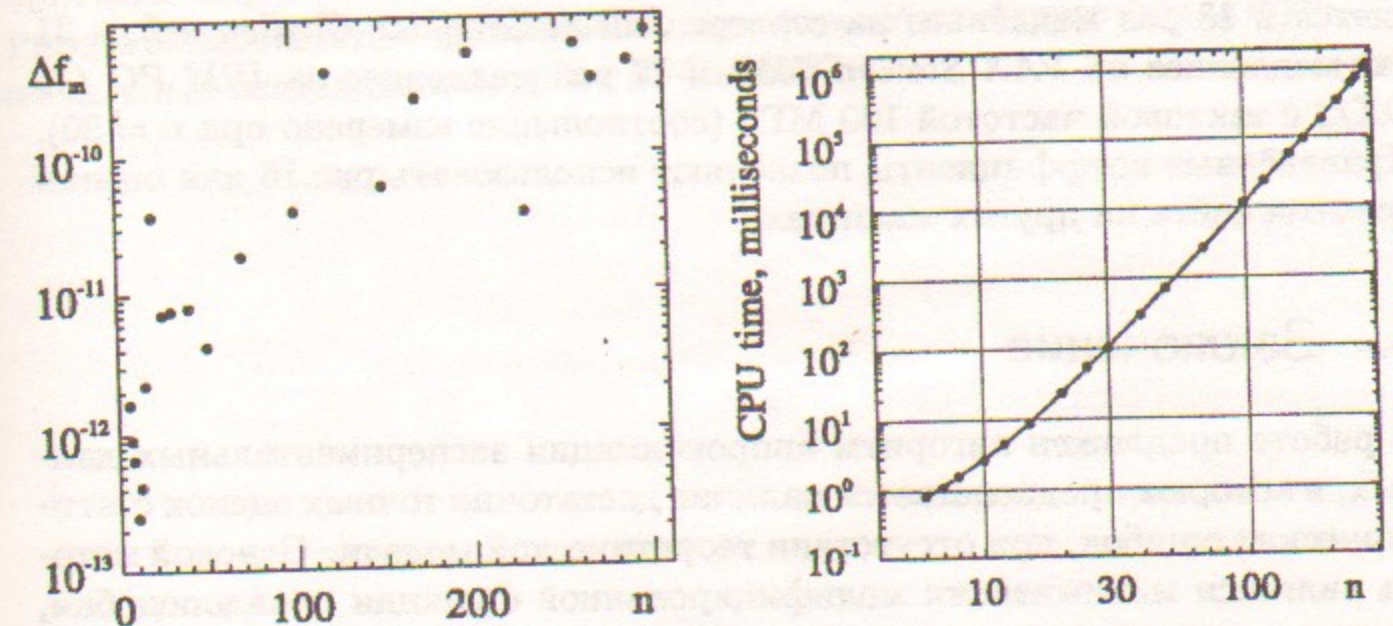


Рис. 15: Максимальное отличие Δf_m двух интерполяционных функций, полученных расчётами с числами *real *8* и *real *16*, в зависимости от числа точек n .

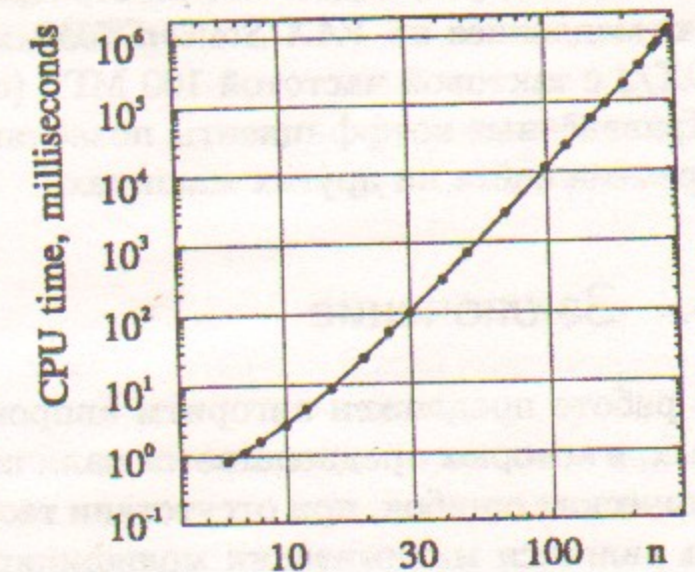


Рис. 16: Зависимость времени счёта (мсек) программы FITABU от числа точек n (Alpha Server 4100).

задачи использовался последний пример (гауссов пик на плоском фоне). Вообще говоря, зависимость ошибки расчёта от количества точек не должна быть гладкой, более того, ошибка зависит и от конкретного положения точек, и от уровня L_0 (в данном случае $L_0 = 0.7 \cdot (n - 3)$), и от модели вычислительной машины (точнее, от формы представления чисел и правил округления). Данное исследование точности расчётов было

проведено на *Alpha server 4100* под операционной системой Digital UNIX v4.0B (Rev. 564), с компилятором Digital Fortran 77. Видно, что эффект накопления ошибок округления проявляется довольно слабо, хотя и сильнее, чем в аналогичной работе [4].

Что касается времени счёта (рис.16), то здесь зависимость от числа точек, конечно, гладкая. Однако, не все матричные операции в алгоритме выполняются в виде прямых циклов. Для приведения симметричных матриц к диагональному виду используется итерационный метод последовательных поворотов. Это существенно усложняет зависимость времени счёта от числа точек n . Если подогнать кривую на рис.16 полиномом пятой степени, то получим

$$t_{CPU} = \frac{n - 3.2}{4} + \left(\frac{n - 4.6}{7.6}\right)^3 + \left(\frac{n}{11}\right)^4 + \left(\frac{n}{21.6}\right)^5 \text{ msec} \quad (60)$$

Указанный *Alpha Server 4100* имеет достаточно высокое быстродействие (тактовая частота 400 МГц). Эта же программа FITABU выполняется в 13 раз медленнее на сервере *Silicon Graphics Challenge-L*, в 31 раз медленнее на *VAX Station 3600*, в 47 раз медленнее на *IBM PC 486 DX/4* с тактовой частотой 100 МГц (соотношение измерено при $n = 20$). Приведённые коэффициенты позволяют использовать рис.16 для оценки времени счёта на других машинах.

9. Заключение

В работе предложен алгоритм аппроксимации экспериментальных данных, в которых предполагается наличие достаточно точных оценок статистических ошибок, при отсутствии теоретической модели. Основой метода является минимизация модифицированной функции правдоподобия, включающей обобщённый критерий гладкости. В результате исследований с помощью методов вариационного исчисления обоснован выбор в качестве интерполяционной функции полиномиального сплайна пятой степени дефекта 1 с узлами в координатах экспериментальных точек. С целью существенно ослабить влияние ошибок округления при операциях с матрицами большой размерности, выбрана внутренняя параметризация сплайна в виде линейной комбинации B -сплайнов.

В работе приведён ряд практических примеров интерполяции с одновременным сравнением качества интерполяции относительно работы [3] и [4]. Больших отличий при этом не должно быть, так как во всех этих

случаях используются сплайны. Однако, существенным различием алгоритма интерполяции B -сплайнами от двух модификаций предлагаемого алгоритма является количество и расположение узлов сплайна.

Недостатком предложенного алгоритма является то, что интерполяционная кривая стремится "вытянуться в параболу" (или в прямую линию в [4]), насколько это позволяют статистические ошибки экспериментальных данных (аналогичный эффект присутствует во всех алгоритмах сглаживания). Здесь это связано с формулировкой критерия гладкости в виде интеграла от квадрата третьей производной интерполяционной функции. При желании ослабить этот эффект следует обобщить данный алгоритм с критерием гладкости в виде интеграла от квадрата производной более высокой степени, что, естественно, приведёт к сплайнам более высокой степени, или разрабатывать принципиально другой подход.

В соответствии с предложенным алгоритмом написана программа интерполяции на языке Фортран-77. Исследовано влияние ошибок округления на точность расчётов и измерено время счёта для данной реализации алгоритма в широком диапазоне $n = 6 \div 300$.

Работа выполнена при финансовой поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант 96-15-96327.

Литература

- [1] *Худсон Д.* Статистика для физиков. М.: Мир, 1970.
Hudson, Derek J. Lectures on Elementary Statistics and Probability. CERN, 1963 (CERN 63-29).
- [2] *Яноши Л.* Теория и практика обработки результатов измерений. М.: Мир, 1965.
Janosy, L. Theory and Practice of the Evaluation of Measurements. Clarendon Press, 1965.
- [3] *V.V.Anikeev, A.V.Popov, V.P.Zhigunov.* An approach to a B-spline description of experimental distributions. Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A 372(1996) 482-488.
- [4] *А.Д.Букин.* Интерполяция экспериментальных данных при отсутствии теоретической модели. Препринт ИЯФ 98-95, Новосибирск, 1998.
А.Д.Букин. Интерполяция экспериментальных данных при отсутствии теоретической модели. ЖЭТФ 116, вып. 3(9) (1999), стр. 760-776.
A.D.Bukin. Interpolation of experimental data without a theoretical model. Journal of Experimental and Theoretical Physics 89 (1999), No.3, pp.404-412.
- [5] *С.Б.Стечкин, Ю.Н.Субботин.* Сплайны в вычислительной математике. М.: "Наука", 1976.
- [6] *И.М.Гельфанд и С.В.Фомин.* Вариационное исчисление. М.: Физматгиз, 1961.
- [7] *G.A.Korn and T.M.Korn.* Mathematical handbook for scientists and engineers. McGraw-Hill, 1968.
- [8] *А.Г.Курош.* Курс высшей алгебры. М.: Физматгиз, 1963

А.Д. Букин

**Интерполяция экспериментальных данных
с ослаблением условия гладкости
теоретической кривой**

A.D. Bukin

**Interpolation of experimental data
with a soft smoothness criterion
of the theoretical curve**

Ответственный за выпуск А.М. Кудрявцев
Работа поступила 22.12. 1999 г.

Сдано в набор 23.12.1999 г.

Подписано в печать 23.12.1999 г.

Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 2.8 печ.л., 2.3 уч.-изд.л.

Тираж 120 экз. Бесплатно. Заказ № 108

Обработано на IBM PC и отпечатано на
ротапринте ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН
Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.