ДОКЛАДЫ АКАДЕМИИ НАУК, 2012, том 445, № 4, с. 393–395

МАТЕМАТИКА

УДК 517.518.42

ПОВЕРХНОСТЬ ДАННЫХ ФИЗИЧЕСКОГО ЭКСПЕРИМЕНТА

© 2012 г. В. В. Терновский, М. М. Хапаев

Представлено академиком Д.П. Костомаровым 16.02.2012 г.

Поступило 16.02.2012 г.

Вариационные принципы широко применяются в оптике, механике, электродинамике и термодинамике. Интерпретация приближенных данных также может вытекать из некоторого общего вариационного принципа. При этом принцип должен учитывать априорную информацию об ошибках измерений и восстанавливаемая функция должна совпадать с "точными" данными при отсутствии погрешностей. Метод решения также не должен опираться на "избранный" вид интерполяции.

Задачу следует считать обратной, так как причина (функция, зависимость) находится по следствию – неполной информации (дискретная функция с ошибками).

Рассмотрим проблему обработки двумерных приближенных данных, представляющих собой матрицу вещественных чисел

$$A = \{a_{ij}\},\ i = 1, 2, \ldots, N, \quad j = 1, 2, \ldots, M.$$

Предположим, ошибки данных (погрешности прибора) σ_{ij} известны. На практике принято определять функции методами наименьших квадратов Гаусса (МНК) с представлением функции в виде полинома

$$u(x, y) = \sum_{k=1}^{M} u_k \psi_k(x, y), \quad M \le N,$$

N – число данных, $\psi_k(x, y)$ – базисные функции (ортогональные полиномы), u_k – коэффициенты разложения. Метод приходится регуляризировать [1], иначе он неустойчив из-за плохой обусловленности системы уравнений для определения u_k (спектральное число обусловленности возникающей в этом методе матрицы Гильберта может достигать огромных значений, что приводит к потере значащих цифр).

Предлагается новый подход, не связанный с разложениями в функциональные ряды и решением систем линейных уравнений. Предположим, что восстановленная функция лежит на поверхности, но так, чтобы поверхность проходила внутри доверительных интервалов и имела минимальную из всех возможных площадь.

Вариационный принцип интерпретации результатов эксперимента может быть легко и доступно формализован. Пусть $u(x, y)$ – неизвестная функция. Тогда она определяется задачей минимизации на условный экстремум функционала площади

$$S = \min_{u(x,y)\subset U} \iint_{\Omega} \sqrt{1 + \left(\frac{\partial u}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial u}{\partial y}\right)^2}\, dx\, dy, \qquad (1)$$

где на множество допустимых функций $u(x, y)$ наложено ограничение в виде объединения неравенств:

$$U = \left\{ \bigcup_{i,j=1}^{N,M} \left| u(x_i, y_j) - a_{ij} \right| \le \sigma_{ij} \right\},$$

x_i, y_j – фиксированные узлы сетки, покрывающей расчетную область Ω.

Замечание 1. Задача минимизации (1) является некорректно поставленной, по терминологии академика А.Н. Тихонова [1]. Если неизвестны ошибки σ_{ij}, то ни "точно", ни приближенно решить ее нельзя, так как при отсутствии априорной информации о погрешностях можно провести бесконечно много поверхностей.

Замечание 2. Граница искомой поверхности не фиксирована, поэтому задача (1) не имеет прямой аналогии с экстремальной проблемой мыльных пленок.

Замечание 3. Задача интерпретации данных в одномерном случае сводится к минимизации длины кривой, проходящей через доверительные интервалы.

Метод решения можно сравнить с процессом штамповки стального листа. Если матрица и пуансон сомкнутся, то полученная заготовка и есть решение поставленной задачи (1).

Не умоляя общности, будем считать $\sigma = \mathrm{const}$, т.е. все измерения проводятся с одной погрешностью. Более того, вариационный метод должен быть универсальным и решать поставленные за-

Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова

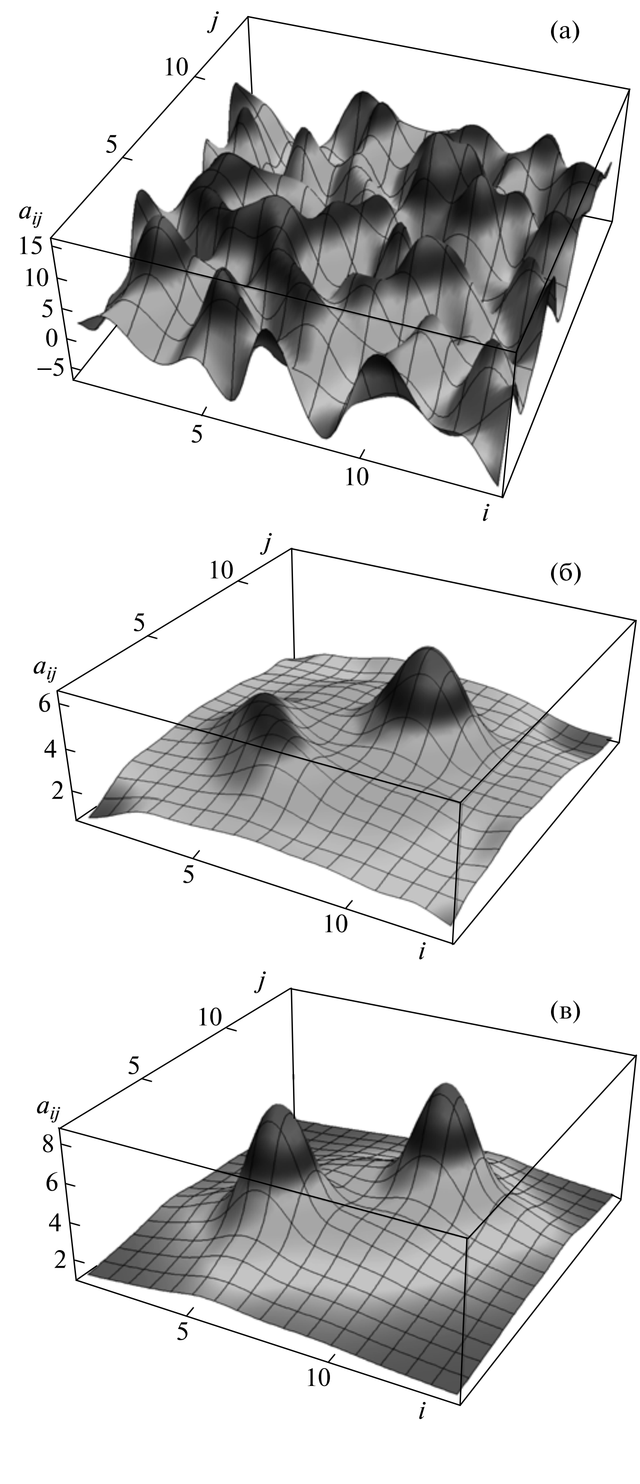

Рис. 1. На таблицу данных “эксперимента” наложена помеха. Стандартная задача восстановления состоит в обнаружении полезного сигнала:

а – Таблица возмущенных реалистичных данных с амплитудой помехи порядка величины полезного сигнала;

б – На рисунке отражена восстановленная зависимость (изображение), полученная путем численной минимизации функционала площади S, задача (1);

в – Исходная незашумленная матрица A.

дачи и при отсутствии информации об уровне ошибок (например, нерезкие фотоизображения). Тогда ошибку σ надо понимать как числовой параметр, изменение которого следует проводить от бóльших значений к меньшим до проявления искомого изображения.

Обсудим вычислительные аспекты решения задачи (1) на персональном компьютере с использованием стандартной программы NMinimize пакета “Mathematica 8.0”. В качестве неизвестных функций выберем производные от искомой зависимости (предполагая их существование)

$$\frac{\partial u}{\partial x} = q(x, y), \quad \frac{\partial u}{\partial y} = w(x, y).$$

Тогда функцию $u(x, y)$ возможно определить по формулам

$$u = \frac{1}{2}\left(\int_{x_0}^{x} q(\xi, y)d\xi + \int_{y_0}^{y} w(x, \xi)d\xi + u(x, y_0) + u(x_0, y)\right). \quad (2)$$

Далее полученное соотношение для u подставляется в неравенства задачи (1). Интегралы, входящие в задачу (1) и формулу (2), вычисляются по простейшим кубатурным и квадратурным формулам трапеций. Минимизация функционала площади S осуществляется методом случайного поиска. Отметим, что этот метод позволяет избежать попадания в “овражный” экстремум, но требует больших затрат процессорного времени.

Для примера рассмотрим модельную задачу восстановления зашумленной таблицы размерности $N \times N$, $i = 1, 2, \ldots, N$, $j = 1, 2, \ldots, N$,

$$A = \frac{1}{|2(i+1)/(N-1) - 1| + |2(j+1)/(N-1) - 1|} + \\ + \frac{1}{|2(i-3)/(N-1) - 1| + |2(j-3)/(N-1) - 1|},$$

с добавлением шума ε генератором псевдослучайных чисел:

$$\varepsilon = 7\text{RandomRe}\frac{[-ij, ij]}{(ij)}$$

и выбранным уровнем ошибки σ = 6.0. На графиках рис. 1 по горизонтальным осям отложены номера i, j элементов матрицы A, по вертикальным – значения элементов a_{ij} матрицы, которые гладко интерполированы для лучшей визуализации (но при расчетах используется только простейшая кусочно-постоянная и кусочно-линейная интерполяция). Качество результата восстановления функций в силу задачи (1) основано на требовании, что количество измерений достаточно для построения поверхности данных.

Таким образом, предлагаемый вариационный метод восстановления зашумленных таблиц данных может найти применение в физике, астрономии, томографии, фотографии и т.д. Идея метода основана на экспериментальном факте увеличения площади поверхности данных под воздействием помех. Преимущество вариационного подхода состоит в том, что он позволяет сразу оценить результаты эксперимента. Если ошибка эксперимента σ_{ij} больше определенного значения, то решение задачи (1) вырождается в плоскость $\left(\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial y} = 0\right)$, $S = \mathrm{mes}(\Omega)$ – площадь области. Это и есть абсолютный минимум функционала S. В этом случае эксперимент необходимо повторить с большей тщательностью.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. М: Наука, 1986. 288 с.