

Общероссийский математический портал

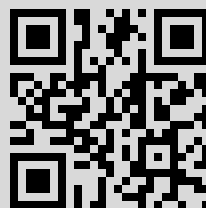
Н. И. Терихова, Кубические сглаживающие сплайны, *Матем. моделирование*, 1990, том 2, номер 8, 112–118

Использование Общероссийского математического портала Math-Net.Ru подразумевает, что вы прочитали и согласны с пользовательским соглашением  
<http://www.mathnet.ru/rus/agreement>

Параметры загрузки:

IP: 91.193.176.53

8 февраля 2022 г., 18:04:56



## ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АЛГОРИТМЫ И МЕТОДЫ

УДК 53.088

### КУБИЧЕСКИЕ СГЛАЖИВАЮЩИЕ СПЛАЙНЫ

© Н.И. Терихова

Институт прикладной математики им. М.В. Келдыша АН СССР, Москва

Предложен эффективный алгоритм аппроксимации сложных экспериментальных кривых, основанный на базе сглаживающих сплайнов со специальным выбором внутренних узлов. Приведены примеры построения средневзвешенных кубических сплайнов с несколькими экстремумами для транспортных сечений рассеяния.

#### CUBIC MIDDLE-SQUARE SPLAINES

N.I. Terikhova

Effective method of approximation of experimental results has based on middle-square splines with specific choice of inner knots. There are examples of splines with some min-points and max-points of transport disperse cross section in this paper; they have satisfactory accuracy.

**Введение.** В различных задачах математического моделирования возникает необходимость некоторого функционального представления исходных экспериментальных данных. Например, в нейтронной физике это зависимость сечений нейтронных процессов на ядрах от энергий нейтронов. Аналогично, для задач переноса в газах это зависимость сечения рассеяния при столкновениях различных частиц от их энергий. Разумеется, экспериментально измеряются не кривые, а значения величин в большом количестве отдельных точек. Часто исследуемые кривые имеют сложную форму с несколькими экстремумами (например, для сечений рассеяния резонансные процессы приводят к наличию узких максимумов).

В данной работе предложен метод аппроксимации сложных кривых на основе средневзвешенных сплайнов со специальным выбором узлов. Сплайны имеют возможно меньшее число неравномерно поставленных узлов, обеспечивающее нужную точность. Эффективность предложенного метода показана на примерах аппроксимации транспортных сечений рассеяния электронов на атомах и молекулах.

**1. Оценка достоверности.** 1. Пусть в точках сетки  $z_j$  ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) известны экспериментальные значения функции  $y_j$  ( $1 \leq j \leq N$ ) и их абсолютные погрешности  $\delta_j$ , т.е.

$$y(z_j) = y_j \pm \delta_j \quad (1 \leq j \leq N). \quad (1)$$

Разобьем множество  $N$  точек сетки на несколько подмножеств, на каждом из которых функция  $y(z)$  меняется так, что может быть аппроксимирована куском

сглаживающего кубического сплайна с требуемой точностью. Границы разбиения будут узлами сплайна, обозначим их через  $\xi_l$ ,  $l = 1, 2, \dots, L$ ,  $L \ll N$ . Для определенности полагаем

$$\xi_1 = z_1, \quad \xi_L = z_N. \quad (2)$$

Каждый узел  $\xi_l$  совпадает с какой-нибудь точкой сетки  $z_j$  (см. рис. 1). Это условие не является существенно ограничивающим, если сетка экспериментальных данных достаточно густа.

Для построения кубического сплайна с непрерывной второй производной и узлами  $\xi_l$  потребуем минимальности среднеквадратичных отклонений значений

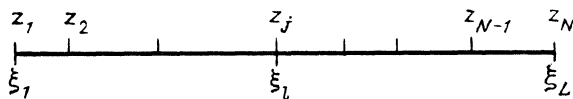


Рис. 1. Расположение точек сетки и узлов сплайна

сплайна  $S(z_j)$  в точках сетки от соответствующих экспериментальных значений  $y_j$ , т.е.

$$\sum_{j=1}^N \rho_j (y_j - S(z_j))^2 = \min, \quad \rho_j \leq 0. \quad (3)$$

Если известны абсолютные погрешности значений функции и ее производной, то веса целесообразно положить равными

$$\rho_j = c/\delta_j^2, \quad j = 1, 2, \dots, N, \quad (4)$$

где  $c > 0$  — произвольная постоянная; например,  $c = 1$ . Нетрудно видеть, что константа  $c$  на значения коэффициентов сплайна не влияет. Если же ошибки определения функции неизвестны, но предполагается, что они примерно одинаковые, то веса можно положить равными единице.

Форму записи сплайнов можно выбрать любую, например,  $B$ -сплайны, описанные в [1]. Продифференцировав выражение (3) по неизвестным коэффициентам сплайна, можно получить систему линейных уравнений для их определения.

2. Сплайн хорошо аппроксимирует функцию, если математическая погрешность аппроксимации  $|y_j - S_j|$  не превышает ошибок  $\delta_j$ , с которыми известны значения функции. Однако, если все  $|y_j - S_j| \ll \delta_j$ , то такой сплайн будет близок к интерполяционному и его сглаживающие свойства окажутся плохими. Поэтому оптимальным будет сплайн, у которого значения  $|y_j - S_j|$  близки по порядку величины к  $\delta_j$ .

Рассмотрим ситуацию, наиболее типичную для физических экспериментов, когда каждое измерение проводится несколько раз и в качестве  $y_j$  берется среднее из этих измерений, а в качестве  $\delta_j$  — корень из дисперсии этого среднего. Тогда  $\delta_j$  имеют статистическую природу и фактическая ошибка среднего в отдельных точках может превышать  $\delta_j$ . Поэтому критерий согласованности сплайна с функцией должен быть также статистическим.

Рассмотрим нормированное отклонение сплайна от функции  $(y_j - S_j)/\delta_j$ . Очевидно, это отклонение должно быть по модулю порядка единицы. Однако это случайная величина и ее разброс определяется законами статистики. Запишем математи-

ческое ожидание и дисперсию нормированного уклонения

$$My = N^{-1} \sum_{j=1}^N (y_j - S_j) / \delta_j, \quad (5)$$

$$Dy = (N - 1)^{-1} \sum_{j=1}^N [(y_j - S_j) / \delta_j - My]^2. \quad (6)$$

Очевидно, сплайн будет оптимальным, если

$$|My| \leq 1/N^{1/2}, \quad Dy \approx 1. \quad (7)$$

Этот критерий допускает заметное отклонение сплайна от функции в небольшом числе точек, т.е. не является чрезмерно жестким. Если  $My$  не мало, то сплайн имеет систематическое уклонение от функции, заметное в рамках заданных ошибок. Если  $Dy \gg 1$ , то сплайн имеет недопустимо большое случайное уклонение. Наконец, если  $Dy \ll 1$ , то сплайн не будет оптимальным. На практике это означает, что можно получить хорошую аппроксимацию и при меньшем числе коэффициентов сплайна.

**З а м е ч а н и е.** Критерий (5)–(7) очевидным образом обобщается на случай задания производной функции и ее погрешностей в точках: суммирование в формулах производится по нормированным уклонениям как самой функции, так и ее производных (а делитель  $N$  заменяется на  $2N$ ).

3. При проведении эксперимента обычно не только значения функции и ее производной, но также их аргумент измеряются с ошибкой. Пусть координаты  $z_j$  ( $1 \leq j \leq N$ ) известны с точностью  $\xi_j$ . Если известна зависимость  $y(z)$ , то ошибку аргумента можно пересчитать в эквивалентную ошибку функции при точно заданном аргументе:

$$\delta'_j = \xi_j \cdot dy/dz. \quad (8)$$

В исходной информации нет зависимости  $dy/dz$ , однако, построив сплайн, только на основании погрешности функции мы получаем достаточное представление о поведении функции. После этого можно вычислить ошибки (8), подставляя вместо  $dy/dz$  величину  $dS/dz$ . Полученные значения  $\delta'_j$  надо суммировать с погрешностями непосредственного измерения функции, считая, что измерения функции и аргумента независимы. Тогда полная погрешность такова:

$$\Delta_j = \sqrt{\delta_j^2 + \delta_j'^2}. \quad (9)$$

После этого следует заново вычислить математическое ожидание и дисперсию с ошибками  $\Delta_j$ ; естественно, они будут меньше.

Можно также повторить вычисление сплайна, исходя из погрешности (9). Такая процедура позволит построить оптимальный сплайн с меньшим числом коэффициентов.

Процедура пересчета погрешностей естественно обобщается на случай задания производной функции.

**2. Выбор узлов сплайна.** 1. С л у ч а й д в у х к у с к о в. Пусть функция на сетке меняется так, что ее можно аппроксимировать сплайном, состоящим всего из двух кусков, т.е. нужно поставить только один внутренний узел  $\xi_2$ . Его целесообразно выбрать из условия минимума дисперсии (6). Поскольку объем расчетов при этом очень невелик, то можно ограничиться простейшим неэкономичным алгоритмом — перебором всех возможных постановок внутреннего узла сплайна.

**П р и м е р 1.** На рис. 2 представлен график сечения рассеяния атомов гелия на гелии. На нем нанесены экспериментальные точки с их ошибками. Сплошной линией изображен построенный по описанному алгоритму сплайн, его узлы допол-

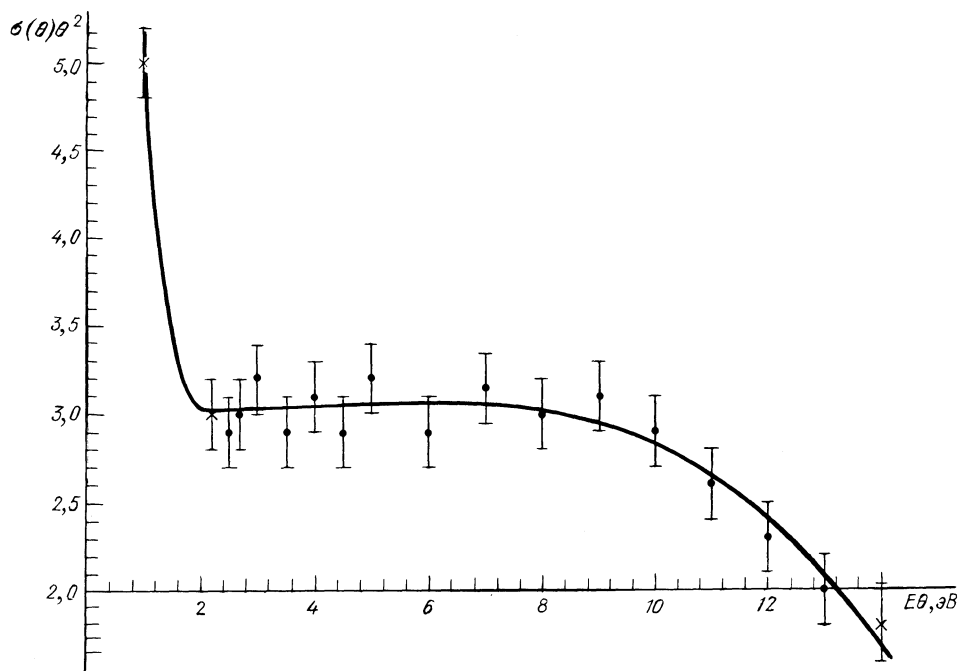


Рис. 2. Зависимость сечения рассеяния атомов гелия на гелии от их энергий

нительно выделены крестиками. Видно, что построенный сплайн хорошо описывает функцию и не несет избыточной информации, так как одним куском кубической параболы аппроксимировать такую функцию нельзя. Математическое ожидание и дисперсия имеют значения  $M\mu = 5,4 \cdot 10^{-9}$ ,  $D\mu = 0,3$ .

2. С л у ч а й м н о г и х к у с о в. Пусть поведение функции таково, что при аппроксимации ее сплайн должен состоять из числа кусков, большего двух.

Задача построения оптимального сплайна, т.е. обеспечивающего  $D\mu \approx 1$  при минимальном числе коэффициентов, чрезмерно сложна для решения (простой перебор всех возможных расположений узлов неприемлемо трудоемок).

Ограничимся задачей построения сплайна с  $D\mu \approx 1$ , состоящего из не очень большого числа кусков. Можно предложить следующий способ выбора внутренних узлов сплайна  $\xi_2 \dots \xi_{L-1}$ .

Любые четыре точки кубический многочлен воспроизводит точно. Будем строить первый кусок сплайна, начиная с пяти точек и прибавляя к нему по одной точке, вычисляя на каждом шаге значения математического ожидания и дисперсии, до тех пор пока выполняются  $|M\mu| < A$ ,  $D\mu < B_1$ . Узел  $\xi_2$  ставим в последнюю точку, в которой еще выполняются эти неравенства.

После этого будем "пристраивать" к первому куску сплайна второй, прибавляя аналогично изложенному по одной точке, пока выполняются  $|M\mu| < A$ ,  $D\mu < B_2$ , где  $B_1 < B_2$ . Тем самым мы разрешаем дисперсии ненамного возрасти на втором куске. Аналогично предыдущему узел  $\xi_3$  ставим в последнюю точку, в которой еще выполняются используемые неравенства. Таким образом, сплайн у нас состоит из двух кусков и аппроксимирует  $\xi_3$  начальных точек. Теперь фиксируем узел  $\xi_3$  и оптимизируем положение узла  $\xi_2$  в пределах  $\xi_1 < \xi_2 < \xi_3$  так, чтобы дисперсия была наименьшей. После этого положение узла  $\xi_2$  не меняем.

Теперь начинаем по одной точке "пристраивать" к сплайну третий кусок, пока  $|My| < A$ ,  $Dy < B_3$ , где  $B_2 < B_3$ . Узел  $\xi_4$  ставим в последнюю точку, для которой справедливы эти оценки. Затем фиксируем узел  $\xi_4$ , а узел  $\xi_3$  оптимизируем по минимуму дисперсии в пределах  $\xi_2 < \xi_3 < \xi_4$ . Этот процесс постановки внутренних узлов сплайна продолжаем, пока не дойдем до последней точки  $z_N$ , совпадающей с узлом  $\xi_L$ .

Описанный способ построения сплайна был реализован в программе. Исходя из критерия (7), в ней был задан следующий массив дисперсий  $\{B_k\} = \{0,9; 1,0; 1,1; 1,2; 1,3; \dots\}$ , а математическое ожидание ограничивалось константой  $A = 0,1$ .

Из общих соображений не желательно, чтобы две соседних точке  $z_j, z_{j+1}$  были бы узлами сплайна: на этом отрезке сплайн по характеру скорей будет ближе к интерполяционному, чем к сглаживающему. Однако визуальная оценка ряда расчетов показала, что внутри отрезка определения функции это не приводило к ухудшению результатов, а на правой границе, т.е. при  $\xi_{L-1} = \xi_N - 1$ , отмечались случаи появления "паразитного" экстремума. Поэтому в программе последний случай был запрещен.

**П р и м е р 2.** На рис. 3 и 4 представлены построенные таким образом сплайны для транспортных сечений рассеяния электронов на молекулах  $N_2$  и атомах Ar. На рисунках использованы те же обозначения, что и на рис. 1. Математическое ожидание и дисперсия имеют следующие значения: для азота  $My = -6 \cdot 10^{-6}$ ,  $Dy = 0,7$ , для аргона  $My = 5 \cdot 10^{-2}$ ,  $Dy = 0,7$ . Видно, что полученные сплайны достаточно хорошо описывают сложные функции при небольшом числе кусков, а предложенный алгоритм их построения оказался достаточно эффективным.

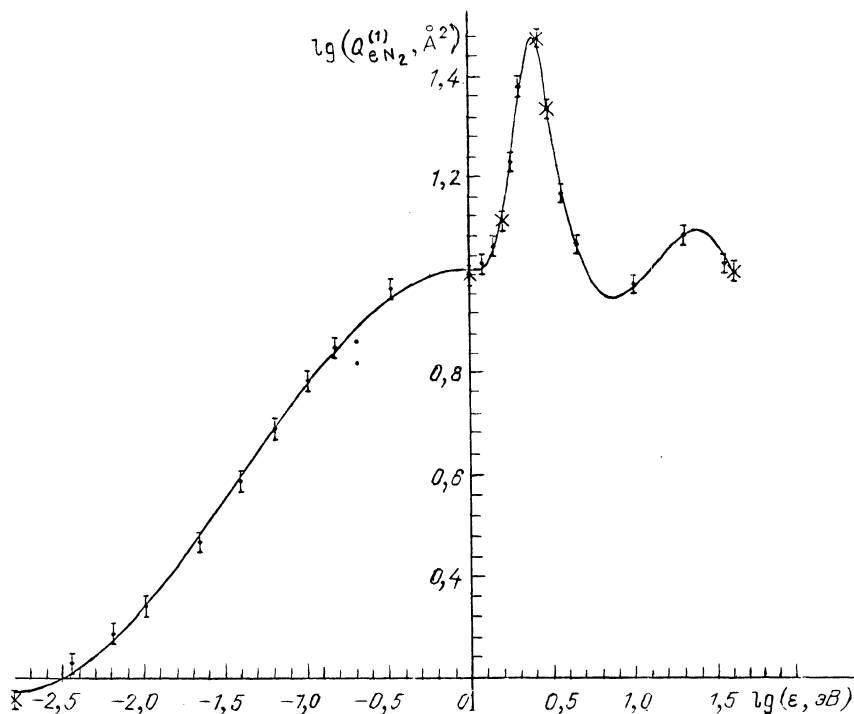


Рис. 3. Зависимость транспортного сечения рассеяния электронов на молекулах азота от энергий электронов

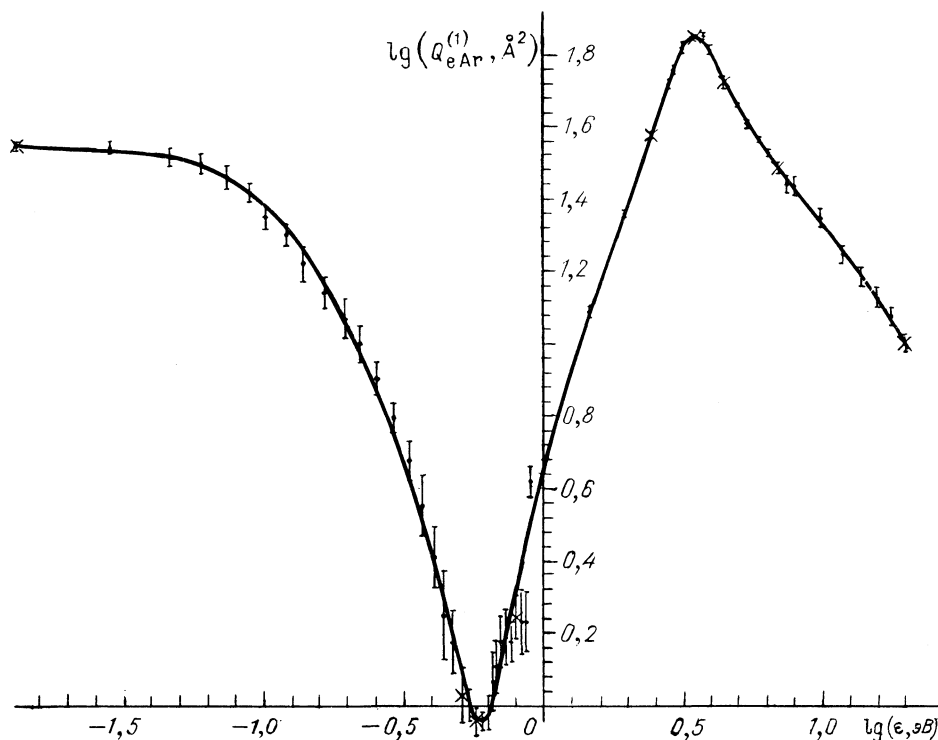


Рис. 4. Зависимость транспортного сечения рассеяния электронов на атомах аргона от энергий электронов

**З а м е ч а н и е.** Конечный результат оценивается не только по величине дисперсии и математического ожидания, но и визуально: например, график не должен иметь "паразитные" экстремумы. Поэтому работу по построению сплайна желательно проводить в диалоговом режиме, выдавая графическое изображение сплайна и экспериментальных точек. В некоторых случаях поведение графика сплайна наводит на мысль, что погрешности были заданы необоснованно. В других случаях принудительное размещение узлов сплайна может дать более хорошие результаты.

По предложенной методике составлены программы и создан каталог коэффициентов сплайнов транспортных сечений рассеяния электронов на атомах и молекулах для пятнадцати различных веществ.

В заключение я хочу выразить благодарность Н.Н. Калиткину, проявившему большое внимание к этой работе.

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Стечкин С.Б., Субботин Ю.Н. Сплайны в вычислительной математике. — М.: Наука, 1976. — 248 с.
2. Терихова Н.И. Кубический сглаживающий сплайн. — Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В. Келдыша АН СССР, 1985. — № 170.
3. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения. — М.: Мир, 1972.
4. Василенко В.А. Теория сплайн-функций. — Новосибирск: НГУ, 1978.

5. Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л. Методы сплайн-функций. — М.: Наука, 1980.
6. Форсайт Дж., Мальком М., Моулер К. Машинные методы математических вычислений. — М.: Мир, 1980.
7. Василенко В.А. Сплайн-функции: теория, алгоритмы, программы. — Новосибирск: Наука, 1983. — 210 с.
8. Макаров В.Л., Хлобыстов В.В. Сплайн-аппроксимация функций. — М.: Высшая школа, 1983.

Поступила в редакцию  
08.01.90