

Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера

А.Д. Букин

**Интерполяция экспериментальных данных
при отсутствии теоретической модели**

Budker INP 98-95

Новосибирск
1998

Интерполяция экспериментальных данных при отсутствии теоретической модели

А.Д.Букин

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

Аннотация

В работе предложен новый подход к интерполяции экспериментальных данных при отсутствии теоретической модели. Основой метода является минимизация модифицированной функции правдоподобия, включающей обобщенный критерий гладкости теоретической кривой. 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.

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

Interpolation of experimental data without theoretical model

A.D.Bukin

Budker Institute of Nuclear Physics,
630090, Novosibirsk, Russia

Abstract

In the paper a new approach to experimental data interpolation is suggested for the case when a theoretical model of the process is not available. The general idea is minimization of a modified likelihood function, which includes a generalized smoothness criterion of the theoretical curve. Method can be applied when the estimates of statistical errors are rather accurate (Gaussian distribution supposed) and theoretical curve is supposed to be smooth.

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.

©Институт ядерной физики им. Г.И.Будкера СО РАН

Оглавление

1	Введение	5
2	Выбор аппроксимирующей функции	5
3	Минимизация среднеквадратичного параметра гладкости I_S	9
4	Представление сплайна в виде линейной комбинации B -сплайнов	10
5	Алгоритм выбора весового множителя	13
6	Оценка статистической ошибки	16
7	Проверка работы алгоритма на нескольких примерах	18
8	Влияние ошибок округления и оценка времени счета	28
9	Заключение	30

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 невозможно использовать теоретическую модель для интерполяции данных, но известно, что теоретическая кривая, описывающая экспериментальные данные, должна быть гладкой. 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]. Основной идеей этой работы является выбор в качестве сглаживающей функции линейной комбинации кубических В-сплайнов с равномерной сеткой узлов, а для обеспечения статистического характера отклонений экспериментальных точек от теоретической кривой предлагается уменьшать число узлов сплайна I_{opt} до тех пор, пока согласие теории и эксперимента по критерию χ^2 не станет удовлетворительным. В настоящей работе предлагается использовать при аппроксимации экспериментальных данных обобщенный критерий гладкости, изменяя степень гладкости кривой до тех пор, пока согласие теории и эксперимента не станет удовлетворительным.

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 — миними-

зировать логарифмическую функцию правдоподобия (или χ^2)

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

В отличие от стандартного подхода здесь нет ещё никаких параметров модели, по которым можно было бы минимизировать функцию L . Далее мы должны каким-то образом сформулировать критерий гладкости. Для этого предлагается минимизировать функционал

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

Для объединения критерия гладкости и согласия с экспериментальными данными, модифицируем функцию правдоподобия следующим образом

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

где w — некоторый положительный весовой фактор. Как раз этот приём объединения функции правдоподобия и критерия гладкости в одну целевую функцию применялся в [4] при решении задачи сглаживания экспериментальных данных сплайнами второго и третьего порядка, однако, в [4] не приводятся обоснования, почему именно полиномиальные сплайны являются наилучшим способом аппроксимации экспериментальных данных, кроме того, в [4] нет рекомендации по выбору координат узлов сплайна и весового множителя w (рассматривается чисто математическая задача). В предлагаемом алгоритме весовой множитель увеличивается до тех пор, пока значение L не достигнет $L_0 = n - 2$. Именно этой величине равно среднее значение χ^2 при подгонке экспериментальных значений теоретической кривой с n степенями свободы, при условии, что общий уровень и наклон являются свободными параметрами. Хотя можно установить и несколько другой уровень.

Очевидно, что за пределами диапазона x экспериментальных измерений для искомой функции нет условий на значение функции, следовательно, и причин для отклонения от прямой линии, поэтому 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 [5]. Следуя стандартному приёму вариационного исчисления, введём малую про-

извольную 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

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

и

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

где использовано, что

$$f''(x) \rightarrow 0, f''''(x) \rightarrow 0 \text{ при } x \rightarrow \pm\infty \quad (7)$$

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

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

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

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

Такое уравнение означает, что в промежутках между экспериментальными точками (x_i, x_{i+1}) $f''''(x) \equiv 0$, что является одним из определений произвольного полинома третьей степени, а в точках экспериментальных измерений возможен разрыв одной или нескольких старших производных. Это однозначно определяет тип аппроксимирующей функции $f(x)$ — кубический сплайн дефекта 1, 2 или 3 (следуя классификации сплайнов в [4], 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 3. Очевидно, это решение представляет собой ломаную прямую, проходящую точно через

экспериментальные значения y_i . Функционал \tilde{L} при этом точно равен нулю. Решение математически возможное, но практически не представляющее интереса, поэтому дальше будем рассматривать только случаи дефекта 1 и 2.

Выберем параметризацию сплайна через значения сплайна S_i и значения производной сплайна D_i в узлах x_i . Тогда значение сплайна в промежуточной точке

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

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

где

$$\begin{aligned} p_1(x; x_1, x_2) &= \frac{(x-x_2)^2(2x+x_2-3x_1)}{(x_2-x_1)^3}, & q_1(x; x_1, x_2) &= \frac{(x-x_2)^2(x-x_1)}{(x_2-x_1)^2}, \\ p_2(x; x_1, x_2) &= \frac{(x-x_1)^2(3x_2-2x-x_1)}{(x_2-x_1)^3}, & q_2(x; x_1, x_2) &= \frac{(x-x_1)^2(x-x_2)}{(x_2-x_1)^2}. \end{aligned} \quad (11)$$

Действительно, любой полином третьей степени можно представить в виде линейной комбинации полиномов p_1, p_2, q_1, q_2 . С другой стороны, указанные стандартные полиномы обладают легко проверяемыми свойствами:

$$\begin{aligned} p_1(x_2; x_1, x_2) &= p_1'(x_1; x_1, x_2) = p_1'(x_2; x_1, x_2) = 0 \\ p_2(x_1; x_1, x_2) &= p_2'(x_1; x_1, x_2) = p_2'(x_2; x_1, x_2) = 0 \\ q_1(x_1; x_1, x_2) &= q_1(x_2; x_1, x_2) = q_1'(x_2; x_1, x_2) = 0 \\ q_2(x_1; x_1, x_2) &= q_2(x_2; x_1, x_2) = q_2'(x_1; x_1, x_2) = 0 \\ p_1(x_1; x_1, x_2) &= p_2(x_2; x_1, x_2) = q_1'(x_1; x_1, x_2) = q_2'(x_2; x_1, x_2) = 1 \end{aligned} \quad (12)$$

что и позволяет использовать их в виде (10) для параметризации произвольного кубического сплайна дефекта 2. Особенно удобна такая параметризация для сплайнов в многомерном пространстве (использовалась автором, например, в [6]). Вторая производная справа и слева от x_i выражается через коэффициенты S_i, D_i :

$$\begin{aligned} f''(x_i - 0) &= \frac{2(D_{i-1} + 2D_i)}{x_i - x_{i-1}} + \frac{6(S_{i-1} - S_i)}{(x_i - x_{i-1})^2} \\ f''(x_i + 0) &= -\frac{2(D_{i+1} + 2D_i)}{x_{i+1} - x_i} + \frac{6(S_{i+1} - S_i)}{(x_{i+1} - x_i)^2} \end{aligned} \quad (13)$$

Для кубических сплайнов дефекта 1 (наиболее распространённых) для коэффициентов D_i , следовательно, должны выполняться условия непрерывности второй производной:

$$\begin{aligned} \left. \frac{d^2 f}{dx^2} \right|_{x=x_i} = C_i &= \frac{2(D_{i-1}+2D_i)}{x_i-x_{i-1}} + \frac{6(S_{i-1}-S_i)}{(x_i-x_{i-1})^2} = \\ &= -\frac{2(D_{i+1}+2D_i)}{x_{i+1}-x_i} + \frac{6(S_{i+1}-S_i)}{(x_{i+1}-x_i)^2} \end{aligned} \quad (14)$$

Для сплайнов дефекта 1 можно было бы использовать для определения сплайна набор коэффициентов S_i, C_i , тогда коэффициенты D_i (и условие непрерывности первой производной) можно было бы записать так:

$$\begin{aligned} \left. \frac{df}{dx} \right|_{x=x_i} = D_i &= \frac{S_{i+1}-S_i}{x_{i+1}-x_i} - \frac{x_{i+1}-x_i}{6} (2C_i + C_{i+1}) = \\ &= \frac{S_i-S_{i-1}}{x_i-x_{i-1}} + \frac{x_i-x_{i-1}}{6} (2C_i + C_{i-1}) \end{aligned} \quad (15)$$

Для краткости далее будем обозначать расстояния между соседними узлами как

$$h_i = x_{i+1} - x_i \quad (16)$$

3. Минимизация среднеквадратичного параметра гладкости I_S

Рассматривая задачу минимизации целевой функции (3) для случая сплайнов дефекта 2, можно заметить, что L не зависит от параметров D_i . Поэтому можно на первом этапе минимизировать функцию \tilde{L} по D_i (фактически, минимизировать I_S). Используя выражение для сплайна через S_i, D_i , легко получить формулу для I_S :

$$I_S = \sum_{i=1}^{n-1} \left\{ \frac{1}{h_i} [D_{i+1} - D_i]^2 + \frac{3}{h_i^3} [h_i \cdot (D_{i+1} + D_i) + 2(S_i - S_{i+1})]^2 \right\} \quad (17)$$

Если записать систему уравнений, определяющую условие минимума I_S по D_i , то окажется, что она эквивалентна условию непрерывности второй производной во всех промежуточных узлах и равенства нулю второй производной в крайних узлах. Получается, что кубический сплайн дефекта 2 "не хочет" воспользоваться дополнительной свободой и для обеспечения минимальности I_S превращается в сплайн дефекта 1. Поэтому далее мы не будем каждый раз указывать эту характеристику сплайна, имея в виду только кубические сплайны дефекта 1. Для сплайна дефекта

1 минимум I_S достигается при $C_1 = C_n = 0$. Этот результат известен и используется при проведении сплайна через точки с заданными значениями S_i [4]. 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 работе [3].

4. Представление сплайна в виде линейной комбинации B -сплайнов

B -сплайны являются кубическими сплайнами специального вида [4]. 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 [4], определим B -сплайны следующим образом:

$$B_i(x) = \begin{cases} 0, & x \leq x_{i-2}, \\ a_{i1} \cdot (x - x_{i-2})^3, & x_{i-2} \leq x \leq x_{i-1}, \\ a_{i1} \cdot (x - x_{i-2})^3 + a_{i2} \cdot (x - x_{i-1})^3, & x_{i-1} \leq x \leq x_i, \\ a_{i1} \cdot (x - x_{i-2})^3 + a_{i2} \cdot (x - x_{i-1})^3 + \\ + a_{i3} \cdot (x - x_i)^3, & x_i \leq x \leq x_{i+1}, \\ a_{i1} \cdot (x - x_{i-2})^3 + a_{i2} \cdot (x - x_{i-1})^3 + \\ + a_{i3} \cdot (x - x_i)^3 + a_{i4} \cdot (x - x_{i+1})^3, & x_{i+1} \leq x \leq x_{i+2}, \\ 0, & x \geq x_{i+2} \end{cases} \quad (18)$$

Очевидно, что в узлах $x_{i-2}, x_{i-1}, x_i, x_{i+1}$ при таком определении B -сплайна автоматически обеспечивается непрерывность самого сплайна и первых

двух производных. Для обеспечения этого же в узле x_{i+2} необходимо выполнить равенства:

$$\begin{aligned}
& a_{i1} \cdot (x_{i+2} - x_{i-2})^3 + a_{i2} \cdot (x_{i+2} - x_{i-1})^3 + \\
& \quad + a_{i3} \cdot (x_{i+2} - x_i)^3 + a_{i4} \cdot (x_{i+2} - x_{i+1})^3 = 0 \\
& 3a_{i1} \cdot (x_{i+2} - x_{i-2})^2 + 3a_{i2} \cdot (x_{i+2} - x_{i-1})^2 + \\
& \quad + 3a_{i3} \cdot (x_{i+2} - x_i)^2 + 3a_{i4} \cdot (x_{i+2} - x_{i+1})^2 = 0 \quad (19) \\
& 6a_{i1} \cdot (x_{i+2} - x_{i-2}) + 6a_{i2} \cdot (x_{i+2} - x_{i-1}) + \\
& \quad + 6a_{i3} \cdot (x_{i+2} - x_i) + 6a_{i4} \cdot (x_{i+2} - x_{i+1}) = 0
\end{aligned}$$

Введём ещё одно условие: $B_i(x_i) = 1$, и после этого все необходимые коэффициенты становятся однозначно определёнными:

$$\begin{aligned}
a_{i1} &= \frac{(x_{i+2} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_{i-1})}{\rho_i \cdot (x_i - x_{i-2})h_{i-2}} \\
a_{i2} &= -\frac{(x_{i+2} - x_{i-2})(x_{i+1} - x_{i-2})}{\rho_i \cdot h_{i-1}h_{i-2}} \\
a_{i3} &= -a_{i1}a_{i2} \frac{\rho_i h_{i-2}^2}{(x_{i+2} - x_i)h_i} \\
a_{i4} &= -\frac{(x_{i+2} - x_{i-2})(x_{i+2} - x_{i-1})}{\rho_i \cdot h_i h_{i+1}}
\end{aligned} \quad (20)$$

где

$$\begin{aligned}
\rho_i &= 2h_{i-1}h_i \cdot (x_{i+2} - x_{i-2}) + \\
& \quad + h_{i-1}h_{i+1} \cdot (x_i - x_{i-2}) + h_i h_{i-2} \cdot (x_{i+2} - x_i)
\end{aligned}$$

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

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n+1} \beta_i B_i(x) \quad (21)$$

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

узлов:

$$\begin{aligned}
x_0 &= 2x_1 - x_2, & x_{n+1} &= 2x_n - x_{n-1} \\
x_{-1} &= 2x_1 - x_3, & x_{n+2} &= 2x_n - x_{n-2}, \\
x_{-2} &= 2x_1 - x_4, & x_{n+3} &= 2x_n - x_{n-3}.
\end{aligned} \tag{22}$$

Сплайн, определённый в (21), при всех свободных параметрах β_i , может иметь произвольное значение второй производной в крайних узлах. В то же время для обеспечения минимальности I_S и непрерывности второй производной нам необходимо использовать сплайны с $f''(x_1) = f''(x_n) = 0$. Эти условия легко удовлетворяются соответствующим выбором коэффициентов β_0 и β_{n+1} :

$$\begin{aligned}
\beta_0 &= -\frac{\beta_1 B_1''(x_1) + \beta_2 B_2''(x_1)}{B_0''(x_1)} \\
\beta_{n+1} &= -\frac{\beta_{n-1} B_{n-1}''(x_n) + \beta_n B_n''(x_n)}{B_{n+1}''(x_n)}
\end{aligned} \tag{23}$$

Это позволяет модифицировать определение B -сплайнов так, чтобы нужные нам сплайны на интервале (x_1, x_n) представлялись в виде

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \beta_i \tilde{B}_i(x) \tag{24}$$

где β_i могут принимать любые значения, а

$$\tilde{B}_i(x) = \begin{cases} B_1(x) - \frac{B_1''(x_1)}{B_0''(x_1)} B_0(x), & i = 1 \\ B_2(x) - \frac{B_2''(x_1)}{B_0''(x_1)} B_0(x), & i = 2 \\ B_i(x), & 3 \leq i \leq n-2 \\ B_{n-1}(x) - \frac{B_{n-1}''(x_n)}{B_n''(x_n)} B_n(x), & i = n-1 \\ B_n(x) - \frac{B_n''(x_n)}{B_n''(x_n)} B_n(x), & i = n \end{cases} \tag{25}$$

В этих обозначениях функция правдоподобия представляется в виде

$$L = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} \beta_i \beta_j - 2 \sum_{i=1}^n P_i \beta_i + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}, \tag{26}$$

где

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\tilde{B}_i(x_k)\tilde{B}_j(x_k)}{\sigma_k^2}; \quad P_i = \sum_{k=1}^n \frac{y_k \tilde{B}_i(x_k)}{\sigma_k^2} \quad (27)$$

Если ввести матрицу \mathbf{B} и вектор \mathbf{Y} :

$$B_{ij} = \tilde{B}_i(x_j); \quad Y_i = \frac{y_i}{\sigma_i^2} \quad (28)$$

то выражения для L и P можно переписать в следующем виде

$$L = \beta^T \mathbf{A} \beta - 2\mathbf{P}^T \beta + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}; \quad \mathbf{P} = \mathbf{B} \mathbf{Y} \quad (29)$$

где индекс T означает транспонирование.

5. Алгоритм выбора весового множителя

Модифицированная функция правдоподобия теперь может быть записана так:

$$\tilde{L} = \beta^T \mathbf{A} \beta - 2\mathbf{P}^T \beta + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} + w\beta^T \mathbf{R} \beta \quad (30)$$

где симметричная матрица

$$R_{ij} = \int_{x_1}^{x_n} B_i''(x) B_j''(x) dx \quad (31)$$

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 \mathbf{A} найдётся преобразование поворота \mathbf{T}_1 , приводящее матрицу к диагональному виду:

$$\mathbf{u} = \mathbf{T}_1 \beta; \quad \mathbf{T}_1 \mathbf{A} \mathbf{T}_1^T = \mathbf{G}; \quad G_{ij} = \delta_{ij} g_i; \quad g_i > 0 \quad (32)$$

Теперь преобразованием

$$\mathbf{u} = \mathbf{G}^{-1/2} \mathbf{v}; \quad \mathbf{Q} = \mathbf{G}^{-1/2} \mathbf{T}_1 \mathbf{P}; \quad \mathbf{F} = \mathbf{G}^{-1/2} \mathbf{T}_1 \mathbf{R} \mathbf{T}_1^T \mathbf{G}^{-1/2} \quad (33)$$

можно привести \tilde{L} к виду:

$$\tilde{L} = \mathbf{v}^T \mathbf{v} - 2\mathbf{Q}^T \mathbf{v} + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} + w \cdot \mathbf{v}^T \mathbf{F} \mathbf{v} \quad (34)$$

Наконец, найдётся преобразование поворота \mathbf{T}_2 , приводящее к диагональному виду матрицу \mathbf{F} :

$$\mathbf{z} = \mathbf{T}_2 \mathbf{v}; \quad \mathbf{E} = \mathbf{T}_2 \mathbf{Q}; \quad \mathbf{T}_2 \mathbf{F} \mathbf{T}_2^T = \mathbf{\Lambda}; \quad \Lambda_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i; \quad \lambda_i \geq 0 \quad (35)$$

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

Обе функции правдоподобия теперь могут быть записаны в виде:

$$L = \mathbf{z}^T \mathbf{z} - 2\mathbf{E}^T \mathbf{z} + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}; \quad \tilde{L} = L + w \cdot \mathbf{z}^T \mathbf{\Lambda} \mathbf{z} \quad (36)$$

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

$$\frac{1}{2} \cdot \frac{\partial \tilde{L}}{\partial z_i} = z_i - E_i + w \lambda_i z_i = 0, \quad (37)$$

имеющие решения

$$z_i = \frac{E_i}{1 + \lambda_i w}, \quad i = 1, \dots, n \quad (38)$$

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

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^n \frac{E_i^2 \cdot (1 + 2\lambda_i w)}{(1 + \lambda_i w)^2} \quad (39)$$

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

$$\sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^n E_i^2 \quad (40)$$

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

С учётом последнего формула для L превращается в

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{(E_i \lambda_i w)^2}{(1 + \lambda_i w)^2} \quad (41)$$

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

$$L = L_0 = n - 2 \quad (42)$$

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 итерационного цикла. Максимально возможное значение L получается при интерполяции экспериментальных данных прямой линией, при этом

$$\max L = L_{max} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - y_0)^2 - a_1^2 \cdot (x_i - x_0)^2}{\sigma_i^2}, \quad (43)$$

где

$$\begin{aligned} a_0 &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}, & x_0 &= \frac{1}{a_0} \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2}, \\ y_0 &= \frac{1}{a_0} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2}, & a_2 &= \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)^2}{\sigma_i^2}, \\ a_1 &= \frac{1}{a_2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)(y_i - y_0)}{\sigma_i^2}. \end{aligned} \quad (44)$$

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

$$\mathbf{S} = \mathbf{B}^T \boldsymbol{\beta}; \quad D_i = \sum_{j=1}^n \beta_j \tilde{B}_j'(x_i) \quad (45)$$

В случае, когда сплайн вырождается в прямую линию, выражения для S_i , D_i упрощаются:

$$S_i = y_0 + a_1 \cdot (x_i - x_0); \quad D_i = a_1 \quad (46)$$

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:

$$\begin{aligned}
 \sigma^2(x) &= p_1^2 (\langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2) + p_2^2 (\langle S_{i+1}^2 \rangle - \langle S_{i+1} \rangle^2) + \\
 &+ q_1^2 (\langle D_i^2 \rangle - \langle D_i \rangle^2) + q_2^2 (\langle D_{i+1}^2 \rangle - \langle D_{i+1} \rangle^2) + \\
 &+ 2p_1 p_2 (\langle S_i S_{i+1} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 &+ 2q_1 q_2 (\langle D_i D_{i+1} \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\
 &+ 2p_1 q_1 (\langle S_i D_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_i \rangle) + \\
 &+ 2p_1 q_2 (\langle S_i D_{i+1} \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\
 &+ 2q_1 p_2 (\langle D_i S_{i+1} \rangle - \langle D_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\
 &+ 2q_2 p_2 (\langle D_{i+1} S_{i+1} \rangle - \langle D_{i+1} \rangle \langle S_{i+1} \rangle)
 \end{aligned} \tag{47}$$

где для краткости стандартные полиномы из (11) обозначены

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

При $x < x_1$ сплайн переходит в прямую линию $f(x) = S_1 + D_1 \cdot (x - x_1)$, поэтому

$$\begin{aligned}
 \sigma^2(x)|_{x < x_1} &= (\langle S_1^2 \rangle - \langle S_1 \rangle^2) + \\
 &+ (x - x_1)^2 (\langle D_1^2 \rangle - \langle D_1 \rangle^2) + \\
 &+ 2(x - x_1) (\langle S_1 D_1 \rangle - \langle S_1 \rangle \langle D_1 \rangle)
 \end{aligned} \tag{48}$$

Аналогично, при $x > x_n$

$$\begin{aligned}
 \sigma^2(x)|_{x > x_n} &= (\langle S_n^2 \rangle - \langle S_n \rangle^2) + \\
 &+ (x - x_n)^2 (\langle D_n^2 \rangle - \langle D_n \rangle^2) + \\
 &+ 2(x - x_n) (\langle S_n D_n \rangle - \langle S_n \rangle \langle D_n \rangle)
 \end{aligned} \tag{49}$$

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,

$$\begin{aligned}\beta &= \mathbf{H}^T \mathbf{z}; \quad \mathbf{H} = \mathbf{T}_2 \mathbf{G}^{-1/2} \mathbf{T}_1; \\ \mathbf{S} &= \mathbf{O} \mathbf{Y}; \quad \mathbf{D} = \mathbf{N} \mathbf{Y}\end{aligned}\tag{50}$$

где

$$\begin{aligned}Y_i &= \frac{y_i}{\sigma_i^2}; \quad O_{ij} = \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n M_{km} \tilde{B}_k(x_i) \tilde{B}_m(x_j); \\ N_{ij} &= \sum_{k=1}^n \sum_{m=1}^n M_{km} \tilde{B}'_k(x_i) \tilde{B}_m(x_j); \\ M_{ij} &= \sum_{k=1}^n H_{ki} H_{kj} \frac{1}{1+\lambda_k w}\end{aligned}\tag{51}$$

Используя матрицы $O_{i\rho}$ и $N_{i\rho}$, легко получить выражения для корреляторов:

$$\begin{aligned}\langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{O_{ik} O_{jk}}{\sigma_k^2} \\ \langle S_i D_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{O_{ik} N_{jk}}{\sigma_k^2} \\ \langle D_i D_j \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_j \rangle &= \sum_{k=1}^n \frac{N_{ik} N_{jk}}{\sigma_k^2}\end{aligned}\tag{52}$$

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

$$O_{ik} = \frac{1}{a_0 \sigma_k^2} + \frac{(x_i - x_0)(x_k - x_0)}{a_2 \sigma_k^2}, \quad N_{ik} = \frac{(x_k - x_0)}{a_2 \sigma_k^2}\tag{53}$$

и отсюда выражения для корреляторов получаются:

$$\begin{aligned}
 \langle S_i S_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_j \rangle &= \frac{1}{a_0} + \frac{(x_i - x_0)(x_j - x_0)}{a_2}, \\
 \langle S_i D_j \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_j \rangle &= \frac{(x_i - x_0)}{a_2} \\
 \langle D_i D_j \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_j \rangle &= \frac{1}{a_2}
 \end{aligned}
 \tag{54}$$

7. Проверка работы алгоритма на нескольких примерах

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

```
call FITAB(n, Xi, Yi, Sigi, qLik, Si, Di, 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 $(n - 2)$, к которой "притягивается" значение χ^2 . Если этот множитель меньше нуля, то целевое значение χ^2 остается стандартным ($L \rightarrow n - 2$). Изменяя величину этого множителя, можно управлять гладкостью аппроксимирующей кривой: чем больше значение qLik, тем ближе к прямой линии становится интерполирующая кривая (выше некоторого предела для аппроксимации будет использоваться прямая линия).

real *8 Si(n) — значения сплайна в узлах,

real *8 Di(n) — значения первой производной в узлах,

real *8 Tcor(7,n) — таблица корреляторов.

Входные параметры: n , X_i , Y_i , Sig_i . Выходные: S_i , D_i , $Tcor$.

Для вычисления значения сплайна в произвольной точке x используются массивы S_i , D_i , полученные из программы FITAB:

$f = \text{VALSPL}(x, n, X_i, S_i, D_i)$

где

real *8 f, VALSPL — 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.

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

$sig = \text{ERRSPL}(x, n, X_i, Tcor)$

где

real *8 sig, ERRSPL — оценка стат. ошибки,

real *8 x — координата точки, в которой надо вычислить

integer *4 n — количество узлов сплайна,

real *8 Xi(n) — координаты узлов,

real *8 Tcor(7,n) — таблица корреляторов.

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

$\text{call EIGVAL}(iM1, iM2)$

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 \mathbf{T} такую, что $\mathbf{TAT}^T = \mathbf{\Lambda}$, $\Lambda_{ij} = \delta_{ij} \lambda_i$.

Матрицы находятся в общем блоке

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

integer *4 nMax — максимально возможное количество точек,

integer *4 na — заданное в данном счёте количество точек,

real *8 Tw1,Tw2... — рабочие матрицы.

Рассмотрим несколько простых случаев применения описанного алгоритма.

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

$$x_i = i - 1, \quad \langle y_i \rangle = \sin x_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (55)$$

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

$$\frac{dW}{dy_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp \left[-\frac{(y_i - \langle y_i \rangle)^2}{2\sigma_i^2} \right] \quad (56)$$

На рис.1 сплошной кривой нарисована синусоида $y = \sin x$ (точная теория), 10 точек с ошибками получены для $\sigma_i = 1$.

Пунктирной линией изображена кривая, полученная в соответствии с работой [3] (использована программа CSPLS1 авторов этой работы). Из-за того, что в алгоритме [3] имеется довольно большая свобода в выборе параметров обращения к программе CSPLS1, нам надо фиксировать некоторые принципы выбора этих параметров. Примем, что всегда границы аппроксимации B -сплайнами равны $XMIN = x_1$, $XMAX = x_n$, а количество I_{opt} B -сплайнов, использованных для аппроксимации, следуя рекомендации авторов, выбирается по следующему алгоритму:

1. $I_{opt} = 2$
2. Для данного значения количества B -сплайнов I_{opt} проводится аппроксимация экспериментальных данных и вычисляется χ^2

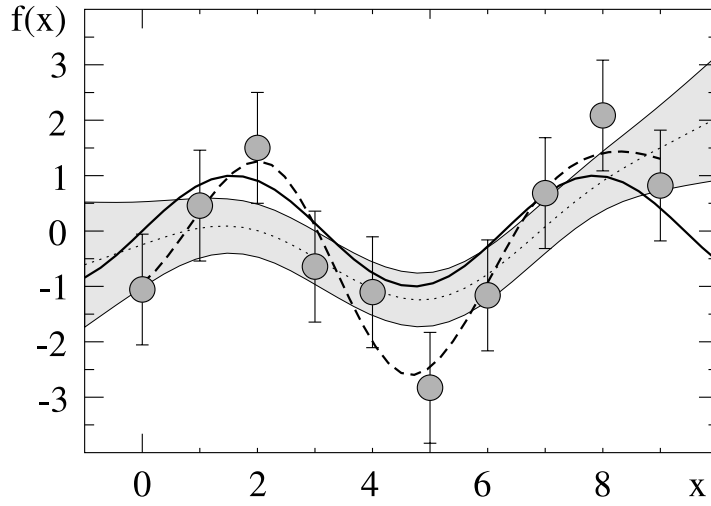


Рис. 1: Интерполяция точек, лежащих на синусоиде ($\sigma_i = 1$). Сплошная кривая — ”точная” теория, точечная кривая с полосой ошибок — данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая — интерполяция B -сплайнами [3]

3. Если $\chi^2 > n_D = n - I_{opt}$ (количество эффективных степеней свободы), то количество B -сплайнов увеличивается на 1 ($I_{opt} + 1 \Rightarrow I_{opt}$) и делается переход на пункт 2.

На этом же рисунке точечная линия с полосой ошибок представляет результат работы предлагаемого алгоритма.

Для того, чтобы иметь некоторые количественные критерии для оценки качества аппроксимации, используем тот факт, что мы здесь знаем точную теоретическую кривую. Введём две характеристики отклонения аппроксимирующей кривой $f(x)$ от истинной теоретической кривой $f_{exact}(x)$: максимальное отклонение по абсолютной величине

$$\Delta f_{abs} = \max_{x_1 < x < x_n} |f(x) - f_{exact}(x)|, \quad (57)$$

и средне-квадратичное отклонение

$$\Delta f_{rms} = \sqrt{\frac{1}{x_n - x_1} \int_{x_1}^{x_n} [f(x) - f_{exact}(x)]^2 dx} \quad (58)$$

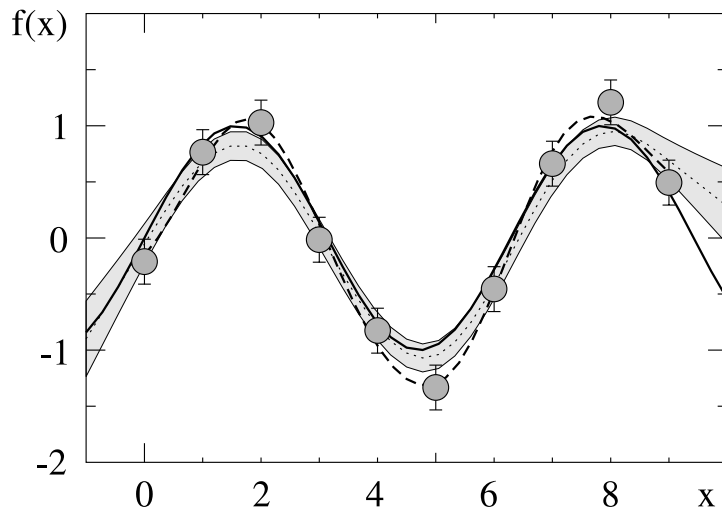


Рис. 2: Интерполяция точек, лежащих на синусоиде (маленькие ошибки). Сплошная кривая — "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок — данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая — интерполяция B -сплайнами [3]

Результаты аппроксимации на рис.1 по двум сравниваемым алгоритмам характеризуются следующими параметрами:

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

В данном случае предлагаемый алгоритм имеет заметно лучшие характеристики.

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:

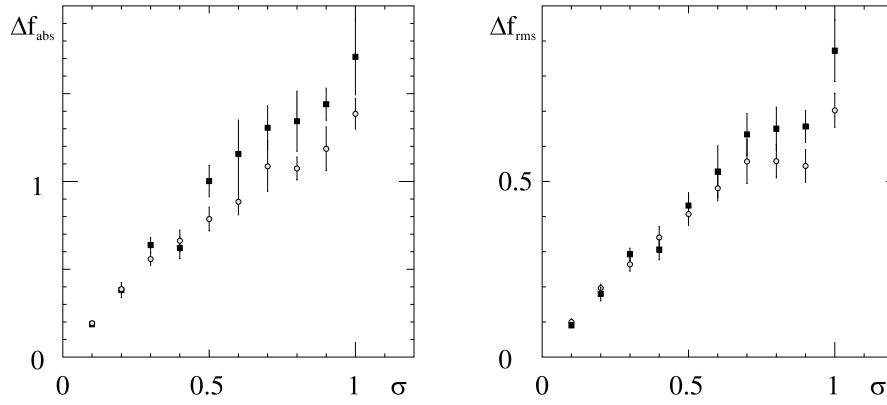


Рис. 3: Среднее значение максимального $\overline{\Delta f_{abs}}$ (слева) и среднеквадратичного $\overline{\Delta f_{rms}}$ (справа) отклонения аппроксимирующей кривой от точной "теоретической" кривой (синусоиды) для двух алгоритмов интерполяции: B-сплайнами (■) по работе [3] и предлагаемого в данной работе (●).

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

Несмотря на то, что введённые нами параметры "качества аппроксимации" однозначно указывают на то, что предлагаемый алгоритм для данного примера обеспечивает более близкую к истинной кривой аппроксимацию, всё же нельзя делать выводы на основе одной статистической выборки. На рис.3 приведены зависимости качества аппроксимации от значения ошибок в каждой экспериментальной точке. При каждом значении экспериментальной ошибки проводилась аппроксимация нескольких наборов экспериментальных точек, полученных генераторами псевдослучайных чисел, и на графике приводится значение Δf_{abs} или Δf_{rms} , усреднённое по нескольким выборкам.

Ломаная прямая. Проведём теперь аналогичную операцию с ломаной линией

$$x_i = i - 1, \quad \langle y_i \rangle = 0.3 \cdot |x_i - 5|, \quad i = 1, 2, \dots, 10 \quad (59)$$

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

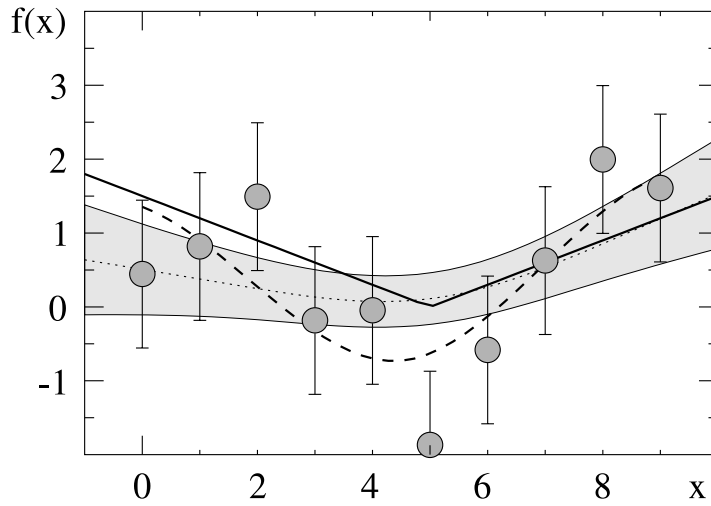


Рис. 4: Интерполяция точек, лежащих на ломаной линии (большие ошибки $\sigma_i = 1$). Сплошная кривая — "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок — данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая — интерполяция B -сплайнами [3]

случаев:

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

Опять при больших ошибках, когда неравномерность аппроксимируемой величины меньше или порядка экспериментальных ошибок, обсуждаемый алгоритм выбирает для аппроксимации прямую линию или почти прямую, а при ошибках, много меньше неоднородности — начинает приближаться к теоретической кривой.

Как и в предыдущем примере, качество аппроксимации в предлагаемом алгоритме, как правило, немного лучше, чем при интерполяции B -сплайнами (рис.6).

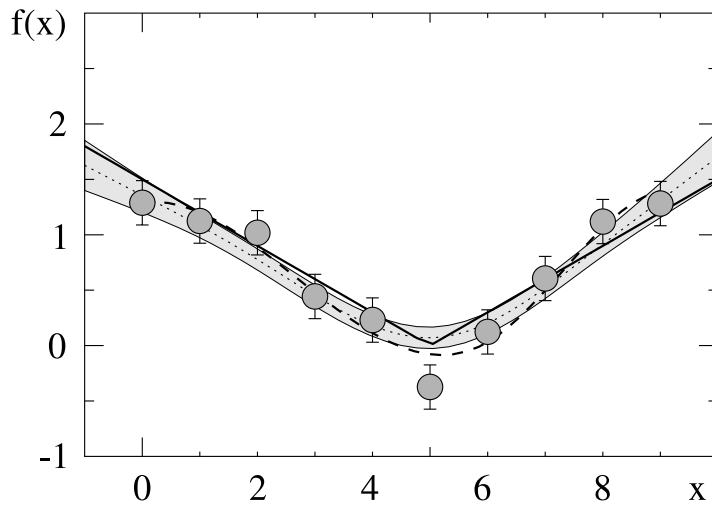


Рис. 5: Интерполяция точек, лежащих на ломаной линии (маленькие ошибки $\sigma_i = 0.2$). Сплошная кривая — "точная" теория, точечная кривая с полосой ошибок — данный алгоритм аппроксимации, штриховая кривая — интерполяция B -сплайнами [3]

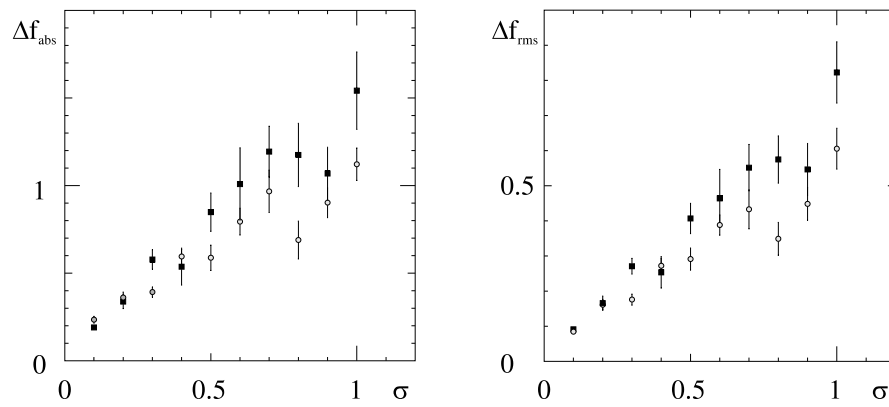


Рис. 6: Среднее значение максимального $\overline{\Delta f_{abs}}$ (слева) и среднеквадратичного $\overline{\Delta f_{rms}}$ (справа) отклонения аппроксимирующей кривой от точной "теоретической" кривой (ломаной линии) для двух алгоритмов интерполяции: B -сплайнами (■) по работе [3] и предлагаемого в данной работе (●).

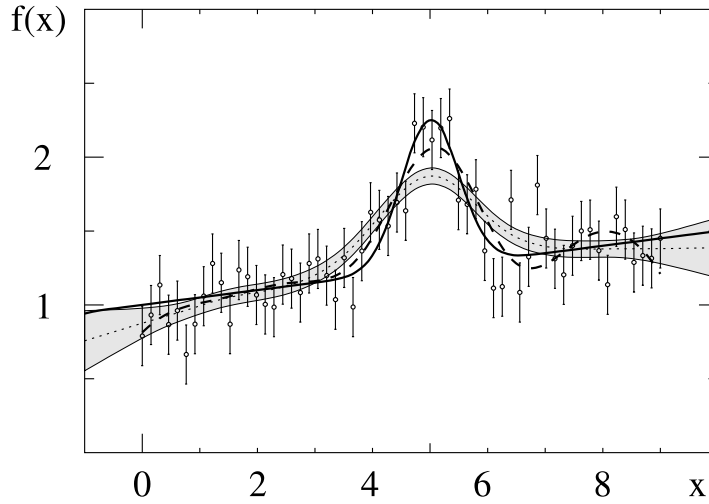


Рис. 7: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне.

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

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

$$\langle y_i \rangle = 1 + 0.05x_i + \exp \left[-2(x_i - 5)^2 \right] \quad (60)$$

На рис.7 показаны результаты подгонки таких данных при $n = 60$, $\sigma_i = 0.2$. В этом случае качество аппроксимации для двух алгоритмов получилось следующим:

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

Предлагаемый алгоритм заметно проигрывает методу интерполяции *B*-сплайнами как по таким формальным оценкам, так и при визуальной оценке качества интерполяции — в районе пика алгоритм старается ”вытянуть” сглаживающую функцию в прямую линию. Этот эффект можно ослабить, уменьшив целевое значение функции правдоподобия: $L \rightarrow$

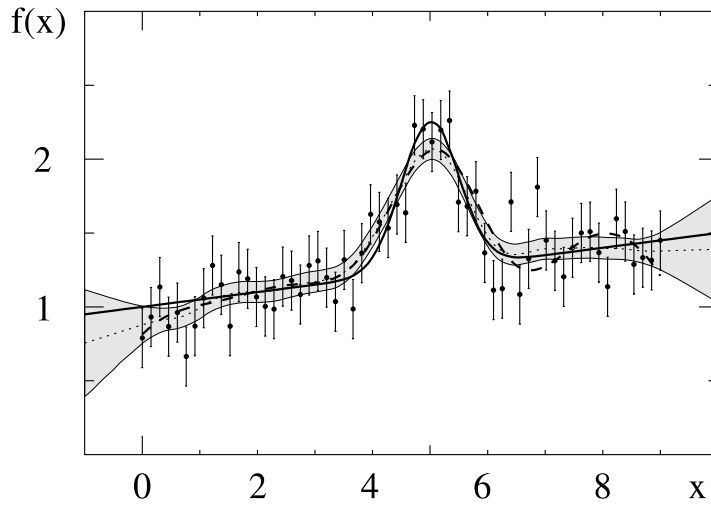


Рис. 8: Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне. $qLik = \frac{L_0}{n-2} = 0.7$

$0.7 \times (n - 2)$ (это соответствует значению аргумента $qLik = 0.7$ в программе FITAB). Рис.8 демонстрирует результат интерполяции при этих условиях. Здесь уже качество аппроксимации по абсолютному отклонению у предлагаемого метода выше, чем при интерполяции B -сплайнами:

Алгоритм сглаживания	Δf_{abs}	Δf_{rms}
Работа [3]	0.24	0.085
Данная работа	0.18	0.13

Характеристики качества аппроксимации в зависимости от σ для этой теоретической модели приведены на рис.9. В среднем, предложенный алгоритм имеет лучшие характеристики.

Несмотря на то, что с помощью аргумента $qLik$ программы FITAB можно несколько исправить дефект алгоритма, проявляющийся при аппроксимации данных на большом интервале, где есть большие почти плоские участки и участки с большой неоднородностью, однако это не является достаточно эффективной мерой. По-видимому, для случаев с сильно неоднородной функцией надо или обобщать критерий гладкости

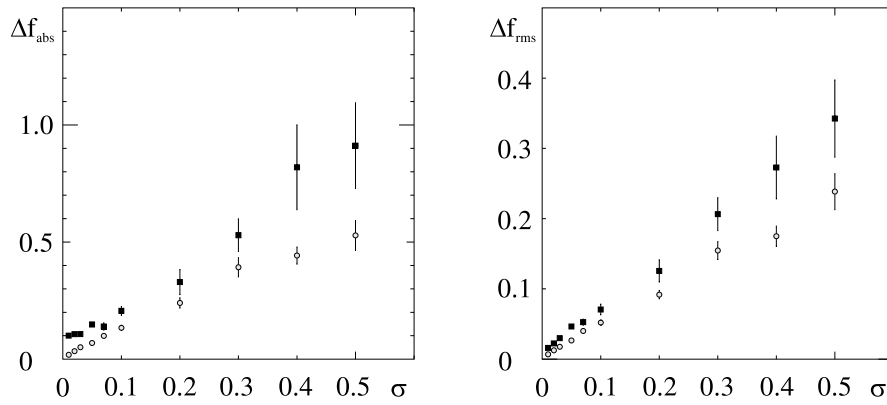


Рис. 9: Среднее значение максимального $\overline{\Delta f_{abs}}$ (слева) и среднеквадратичного $\overline{\Delta f_{rms}}$ (справа) отклонения аппроксимирующей кривой от точной "теоретической" кривой (плоский фон + Гаусс) для двух алгоритмов интерполяции: B -сплайнами (■) по работе [3] и предлагаемого в данной работе (●).

до интеграла от квадрата более высокой производной, или разрабатывать принципиально другой алгоритм.

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 FITAB 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

$$\Delta f_m = \max_{x_1 < x < x_n} |f(x) - f_e(x)| \quad (61)$$

На рис.10 приведён график зависимости ошибки решения Δf_m от количества экспериментальных точек (это совпадает с размерностью матриц, используемых для промежуточных вычислений). В качестве тестовой задачи использовался последний пример (гауссов пик на плоском фоне). Вообще говоря, зависимость ошибки расчёта от количества точек

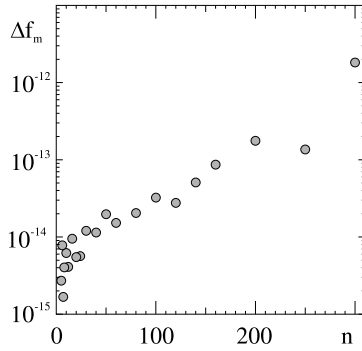


Рис. 10: Максимальное отличие Δf_m интерполяционных функций, полученных расчётами с числами *real *8* и *real *16*, в зависимости от числа точек n

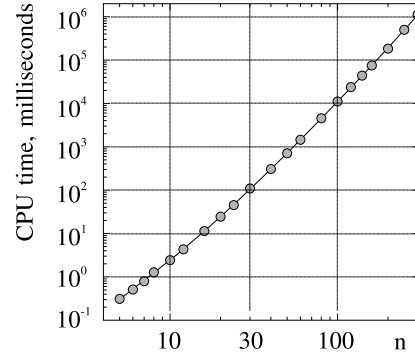


Рис. 11: Зависимость времени счёта (мсек) программы FITAB от числа точек n (Alpha Server 4100)

не должна быть гладкой, более того, ошибка зависит и от конкретного положения точек, и от уровня L_0 (в данном случае $L_0 = n - 2$), 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, в отличие от более простой параметризации сплайна по коэффициентам в узлах, когда ошибки округления делали невозможными вычисления при размерности матриц уже $\sim 10 \div 20$.

Что касается времени счёта (рис.11), 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.11 полиномом пятой степени, то получим

$$t_{CPU} = \frac{n - 3.2}{21} + \left(\frac{n}{45.8}\right)^2 + \left(\frac{n}{9.37}\right)^3 + \left(\frac{n}{10.5}\right)^4 + \left(\frac{n}{22.86}\right)^5 \text{ msec} \quad (62)$$

Указанный *Alpha Server 4100* имеет достаточно высокое быстродействие. Эта же программа FITAB выполняется в 13 раз медленнее на

сервере *Silicon Graphics Challenge-L*, в 30 раз медленнее на *VAX Station 3600*, в 42 раза медленнее на *IBM PC 486 DX/4* (измерено при $n = 20$). Приведённые коэффициенты позволяют использовать рис.11 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 кубического полиномиального сплайна 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]. Больших отличий при этом не должно быть, так как в обоих случаях используются кубические сплайны. Однако, существенным различием этих двух алгоритмов является количество и расположение узлов сплайна.

Недостатком предложенного алгоритма является то, что интерполяционная кривая стремится "вытянуться в прямую линию", 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 второй 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 степени выше трёх. В этом случае интерполяционная кривая будет притягиваться к полиномам степени выше 1 (например, параболе), насколько позволяют экспериментальные ошибки.

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 $n = 5 \div 300$.

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.
Janossy, L. Theory and Practice of the Evaluation of Measurements. Clarendon Press, 1965.
- [3] *V.B.Аникеев, А.V.Попов, 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] *С.Б.Стечкин, Ю.Н.Субботин.* Сплайны в вычислительной математике. М.: "Наука", 1976.
- [5] *M.L.Krasov, G.I.Makarenko, A.I.Kiselev.* Problems and exercises in the calculus of variations. Moscow: Mir, 1975.
И.М.Гельфанд и С.В.Фомин. Вариационное исчисление. М.: Физматгиз, 1961.
- [6] *A.D.Bukin and N.A.Grozina.* Monte Carlo simulation of fluctuations of the ionization losses of heavy charged particles. Computer Physics Communications 78, No.3 (1994) 287-290.
- [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
при отсутствии теоретической модели**

A.D. Bukin

**Interpolation of experimental data
without theoretical model**

ИЯФ 98-95

Ответственный за выпуск А.М. Кудрявцев

Работа поступила 23.12.1998 г.

Сдано в набор 24.12.1998 г.

Подписано в печать 24.12.1998 г.

Формат бумаги 60×90 1/16 Объем 2.1 печ.л., 1.7 уч.-изд.л.

Тираж 110 экз. Бесплатно. Заказ № 95

Обработано на IBM PC и отпечатано на

ротапринте ИЯФ им. Г.И. Будкера СО РАН

Новосибирск, 630090, пр. академика Лаврентьева, 11.