

## ИНТЕРПОЛЯЦИЯ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ДАННЫХ ПРИ ОТСУТСТВИИ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ МОДЕЛИ

А. Д. Букин\*

*Институт ядерной физики им. Г. И. Будкера  
Сибирского отделения Российской академии наук  
630090, Новосибирск, Россия*

Поступила в редакцию 26 января 1999 г.

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 являются достаточно точная оценка статистических ошибок экспериментальных данных (предполагается, что результаты подчиняются гауссову распределению в соответствии с полученными среднеквадратичными 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 счета и неточности из-за ошибок округления.

PACS: 02.60.Ed

### 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. В одной из последних работ [3] в этом направлении основной идеей является выбор в качестве сглаживающей функции линейной комбинации кубических  $B$ -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  $\chi^2$  не станет удовлетворительным. В настоящей работе предлагается использовать при аппроксимации экспериментальных данных обобщенный критерий гладкости, изменяя

---

\*E-mail: bukin@inp.nsk.su

степень гладкости кривой до тех пор, пока согласие теории и эксперимента не станет удовлетворительным.

## 2. ВЫБОР АППРОКСИМИРУЮЩЕЙ ФУНКЦИИ

Пусть требуется найти гладкую функцию  $f(x)$ , проходящую через  $n$  экспериментальных значений  $y_i$  с ошибками  $\sigma_i$  (предполагается гауссово распределение) в точках  $x_i$ . Стандартный подход в подобных задачах — минимизация логарифмической функции правдоподобия (или  $\chi^2$ )

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

В отличие от стандартного подхода здесь нет еще 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:

$$\tilde{L} = L + wI_S, \quad (3)$$

где  $w$  — некоторый положительный весовой фактор. Именно этот прием объединения функции правдоподобия и критерия гладкости в одну целевую функцию применялся в [4] при решении задачи сглаживания экспериментальных данных сплайнами второго и третьего порядков. Однако в [4] не приводятся обоснования, почему именно полиномиальные сплайны наилучшим образом аппроксимируют экспериментальные данные. 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  $\chi^2$  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 экспериментальных величин  $x$  изменения для искомой функции нет ограничений на значение функции, следовательно, нет 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 приему вариационного исчисления, введем малую произвольную функцию  $\delta f(x)$  и найдем 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

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

и

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

Здесь использовано, что

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

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

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

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  $x_i$  и  $x_{i+1}$  производная  $f''''(x)$  тождественно равна нулю, 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 будет

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

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

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  $S_i, D_i$ :

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

Следовательно, для кубических сплайнов дефекта 1 (наиболее распространенных) для коэффициентов  $D_i$  должны выполняться условия непрерывности второй производной:

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

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

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

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  $\bar{L}$  по  $D_i$  (фактически, минимизировать  $I_S$ ). Используя выражение для сплайна через  $S_i, D_i$ , легко получить формулу для  $I_S$ :

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

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  $\bar{L}$  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 прием 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.

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

$$f(x) = \sum_{i=0}^{n+1} \beta_i B_i(x), \quad (18)$$

где

$$B_i(x) \equiv 0 \text{ при } x \leq x_{i-2} \text{ или } x \geq x_{i+2},$$

$$B_i(x_{i-2}) = B'_i(x_{i-2}) = B''_i(x_{i-2}) = 0,$$

$$B_i(x_{i+2}) = B'_i(x_{i+2}) = B''_i(x_{i+2}) = 0.$$

Подробнее о технических деталях реализации данного алгоритма можно прочитать в [7].

Сплайн, определенный в (18), при всех свободных параметрах  $\beta_i$  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, у которых  $f''(x_1) = f''(x_n) = 0$ . Эти условия легко удовлетворяются соответствующим выбором коэффициентов  $\beta_0$  и  $\beta_{n+1}$ , что эквивалентно модификации  $B$ -сплайнов вблизи крайних узлов, так что

$$\tilde{B}_i''(x_1) = \tilde{B}_i''(x_n) = 0.$$

Теперь нужные нам сплайны на интервале  $(x_1, x_n)$  представляются в виде

$$f(x) = \sum_{i=1}^n \beta_i \tilde{B}_i(x), \quad (19)$$

где  $\beta_i$  могут принимать любые значения.

В этих обозначениях функция правдоподобия представляется в виде

$$L = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^n A_{ij} \beta_i \beta_j - 2 \sum_{i=1}^n P_i \beta_i + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}, \quad (20)$$

где

$$A_{ij} = \sum_{k=1}^n \frac{\tilde{B}_i(x_k) \tilde{B}_j(x_k)}{\sigma_k^2}, \quad P_i = \sum_{k=1}^n \frac{y_k \tilde{B}_i(x_k)}{\sigma_k^2}. \quad (21)$$

Если ввести в рассмотрение матрицу  $\mathbf{B}$  и вектор  $\mathbf{Y}$ ,

$$B_{ij} = \tilde{B}_i(x_j), \quad Y_i = y_i / \sigma_i^2, \quad (22)$$

то выражения для  $L$  и  $P$  можно переписать в следующем виде:

$$L = \beta^T \mathbf{A} \beta - 2 \mathbf{P}^T \beta + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}, \quad \mathbf{P} = \mathbf{B} \mathbf{Y}, \quad (23)$$

где индекс  $T$  означает транспонирование.

## 5. АЛГОРИТМ ВЫБОРА ВЕСОВОГО МНОЖИТЕЛЯ

Модифицированная функция правдоподобия теперь может быть записана так:

$$\tilde{L} = \beta^T \mathbf{A} \beta - 2 \mathbf{P}^T \beta + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} + w \beta^T \mathbf{R} \beta, \quad (24)$$

где  $\mathbf{R}$  — симметричная матрица,

$$R_{ij} = \int_{x_1}^{x_n} B_i''(x)B_j''(x)dx. \tag{25}$$

Хорошо известен алгоритм приведения одновременно двух симметричных матриц к диагональному виду с помощью линейного преобразования [8, 9]. Следуя этому алгоритму, можно получить обе функции правдоподобия в виде (подробнее см. в [7])

$$L = \mathbf{z}^T \mathbf{z} - 2\mathbf{E}^T \mathbf{z} + \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2}, \quad \tilde{L} = L + w \cdot \mathbf{z}^T \Lambda \mathbf{z}, \quad \Lambda_{ij} = \lambda_i \delta_{ij}. \tag{26}$$

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

$$\frac{1}{2} \frac{\partial \tilde{L}}{\partial z_i} = z_i - E_i + w \lambda_i z_i = 0, \tag{27}$$

имеющие решения

$$z_i = \frac{E_i}{1 + \lambda_i w}, \quad i = 1, \dots, n. \tag{28}$$

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

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} - \sum_{i=1}^n \frac{E_i^2 (1 + 2\lambda_i w)}{(1 + \lambda_i w)^2}. \tag{29}$$

Очевидно, что при  $w \rightarrow 0$  сплайн должен точно проходить через экспериментальные точки и  $L \rightarrow 0$ , т. е.

$$\sum_{i=1}^n \frac{y_i^2}{\sigma_i^2} = \sum_{i=1}^n E_i^2. \tag{30}$$

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

С учетом последнего формула для  $L$  превращается в

$$L = \sum_{i=1}^n \frac{(E_i \lambda_i w)^2}{(1 + \lambda_i w)^2}. \tag{31}$$

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

$$L = L_0 = n - 2 \tag{32}$$

относительно  $w$  можно найти любым численным методом, например методом деления пополам [8].

Может оказаться так, что даже при увеличении весового множителя до бесконечности значение функции  $L$  остается меньше  $L_0$ . Это условие надо проверять до начала

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

$$\max L = L_{max} = \sum_{i=1}^n \frac{(y_i - y_0)^2 - a_1^2 (x_i - x_0)^2}{\sigma_i^2}, \quad (33)$$

где

$$\begin{aligned} a_0 &= \sum_{i=1}^n \frac{1}{\sigma_i^2}, & x_0 &= \frac{1}{a_0} \sum_{i=1}^n \frac{x_i}{\sigma_i^2}, \\ y_0 &= \frac{1}{a_0} \sum_{i=1}^n \frac{y_i}{\sigma_i^2}, & a_2 &= \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)^2}{\sigma_i^2}, \\ a_1 &= \frac{1}{a_2} \sum_{i=1}^n \frac{(x_i - x_0)(y_i - y_0)}{\sigma_i^2}. \end{aligned} \quad (34)$$

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

$$\mathbf{S} = \mathbf{B}^T \boldsymbol{\beta}, \quad D_i = \sum_{j=1}^n \beta_j \tilde{B}'_j(x_i). \quad (35)$$

Когда сплайн вырождается в прямую линию, выражения для  $S_i$ ,  $D_i$  упрощаются:

$$S_i = y_0 + a_1 (x_i - x_0), \quad D_i = a_1. \quad (36)$$

## 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.

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

$$\begin{aligned} \sigma^2(x) &= p_1^2 (\langle S_i^2 \rangle - \langle S_i \rangle^2) + p_2^2 (\langle S_{i+1}^2 \rangle - \langle S_{i+1} \rangle^2) + \\ &+ q_1^2 (\langle D_i^2 \rangle - \langle D_i \rangle^2) + q_2^2 (\langle D_{i+1}^2 \rangle - \langle D_{i+1} \rangle^2) + \\ &+ 2p_1 p_2 (\langle S_i S_{i+1} \rangle - \langle S_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\ &+ 2q_1 q_2 (\langle D_i D_{i+1} \rangle - \langle D_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\ &+ 2p_1 q_1 (\langle S_i D_i \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_i \rangle) + \\ &+ 2p_1 q_2 (\langle S_i D_{i+1} \rangle - \langle S_i \rangle \langle D_{i+1} \rangle) + \\ &+ 2q_1 p_2 (\langle D_i S_{i+1} \rangle - \langle D_i \rangle \langle S_{i+1} \rangle) + \\ &+ 2q_2 p_2 (\langle D_{i+1} S_{i+1} \rangle - \langle D_{i+1} \rangle \langle S_{i+1} \rangle), \end{aligned} \quad (37)$$



где для краткости стандартные полиномы из (11) обозначены через

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

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

$$\sigma^2(x)|_{x < x_1} = (\langle S_1^2 \rangle - \langle S_1 \rangle^2) + (x - x_1)^2 (\langle D_1^2 \rangle - \langle D_1 \rangle^2) + 2(x - x_1) (\langle S_1 D_1 \rangle - \langle S_1 \rangle \langle D_1 \rangle). \quad (38)$$

Аналогично, при  $x > x_n$

$$\begin{aligned} \sigma^2(x)|_{x > x_n} &= (\langle S_n^2 \rangle - \langle S_n \rangle^2) + (x - x_n)^2 (\langle D_n^2 \rangle - \langle D_n \rangle^2) + \\ &+ 2(x - x_n) (\langle S_n D_n \rangle - \langle S_n \rangle \langle D_n \rangle). \end{aligned} \quad (39)$$

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 оценки статистической ошибки подгонки в произвольной точке  $x$ . Если множитель  $w$  считать фиксированным, то соотношения для  $S_i$  и  $D_i$  становятся линейными по  $y_j$ , и корреляторы выражаются через матричные преобразования, используемые для приведения квадратичных форм к диагональному виду (подробнее см. [7]).

## 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.

Рассмотрим несколько простых случаев применения описанного алгоритма.

### 7.1. Синусоида, большие экспериментальные ошибки

Возьмем 10 точек, лежащих около синусоиды с амплитудой 1:

$$x_i = i - 1, \quad \langle y_i \rangle = \sin x_i, \quad i = 1, 2, \dots, 10. \quad (40)$$

Точки разбросаны относительно синусоиды по гауссову закону с помощью соответствующего генератора псевдослучайных чисел:

$$\frac{dW}{dy_i} = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_i} \exp \left[ -\frac{(y_i - \langle y_i \rangle)^2}{2\sigma_i^2} \right]. \quad (41)$$

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

Штриховой 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

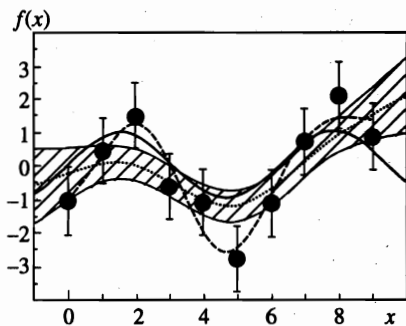


Рис. 1

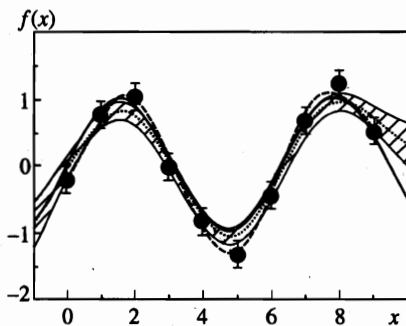


Рис. 2

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]

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]

CSPLS1, надо фиксировать некоторые принципы выбора этих параметров. Будем считать, что всегда границы аппроксимации  $B$ -сплайнами равны  $X_{min} = x_1$ ,  $X_{max} = x_n$ , а количество  $B$ -сплайнов  $I_{opt}$ , используемых для аппроксимации, согласно рекомендации авторов, выбирается по следующему алгоритму:

1)  $I_{opt} = 2$ .

2) Для данного значения количества  $B$ -сплайнов  $I_{opt}$  проводится аппроксимация экспериментальных величин и вычисляется  $\chi^2$ .

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 ко второму пункту.

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

Для того чтобы иметь некоторые количественные критерии для оценки качества аппроксимации, используем тот факт, что здесь известна точная теоретическая кривая. Введем две характеристики отклонения аппроксимирующей кривой  $f(x)$  от истинной теоретической кривой  $f_{exact}(x)$ : максимальное отклонение по абсолютной величине,

$$\Delta f_{abs} = \max_{x_1 < x < x_n} |f(x) - f_{exact}(x)|, \quad (42)$$

и среднеквадратичное отклонение,

$$\Delta f_{rms} = \left\{ \frac{1}{x_n - x_1} \int_{x_1}^{x_n} [f(x) - f_{exact}(x)]^2 dx \right\}^{1/2}. \quad (43)$$

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

Алгоритм сглаживания	$\Delta f_{abs}$	$\Delta f_{rms}$
Работа [3]	1.60	0.79
Данная работа	1.09	0.57

В данном случае предлагаемый алгоритм имеет заметно лучшие характеристики.

### 7.2. Синусоида, маленькие экспериментальные ошибки

Теперь уменьшим в пять 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 следующие:

Алгоритм сглаживания	$\Delta f_{abs}$	$\Delta f_{rms}$
Работа [3]	0.35	0.18
Данная работа	0.28	0.12

Несмотря на то что введенные нами параметры «качества аппроксимации» однозначно указывают на то, что предлагаемый алгоритм для данного примера обеспечивает более близкую к истинной кривой аппроксимацию, все 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 с помощью генератора псевдослучайных чисел, и на графике дано значение  $\Delta f_{abs}$  или  $\Delta f_{rms}$ , усредненное по нескольким выборкам.

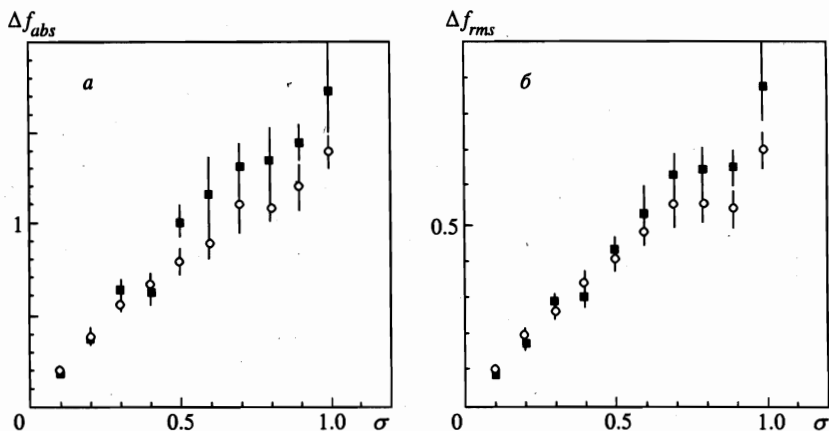


Рис. 3. Средние значения максимального  $\Delta f_{abs}$  (а) и среднеквадратичного  $\Delta f_{rms}$  (б) отклонений аппроксимирующей кривой от точной «теоретической» кривой (синусоиды) для двух алгоритмов интерполяции: B-сплайнами (■) по работе [3] и предлагаемого в данной работе (○)

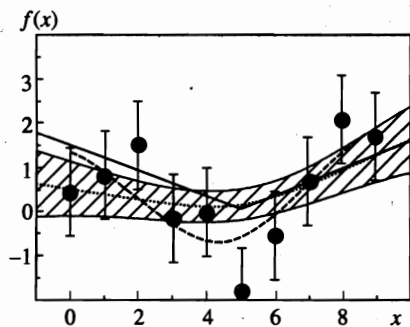


Рис. 4

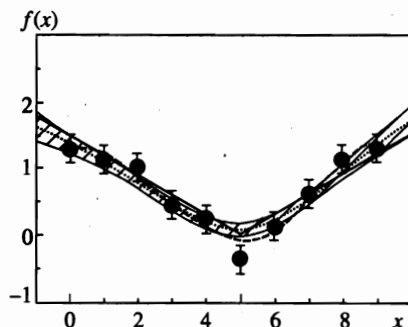


Рис. 5

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]

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]

### 7.3. Ломаная линия

Проведем теперь аналогичную операцию с ломаной линией:

$$x_i = i - 1, \quad \langle y_i \rangle = 0.3 \cdot |x_i - 5|, \quad i = 1, 2, \dots, 10. \quad (44)$$

Точно так же проведем 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 следующие:

Алгоритм сглаживания	$\Delta f_{abs}$ $\Delta f_{rms}$		$\Delta f_{abs}$ $\Delta f_{rms}$	
	$\sigma = 1$		$\sigma = 0.2$	
Работа [3]	1.02	0.61	0.27	0.15
Данная работа	0.99	0.45	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).

### 7.4. Гауссов пик на плоском фоне

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

$$x_i = 9 \frac{i-1}{n-1}, \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (45)$$

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

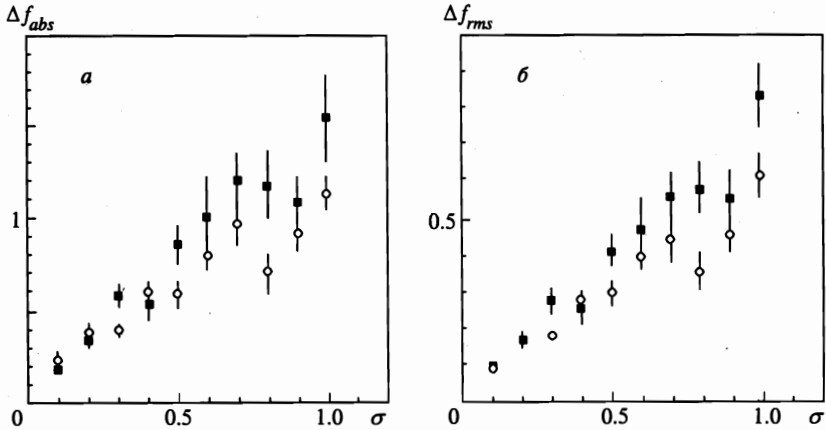


Рис. 6. Средние значения максимального  $\overline{\Delta f_{abs}}$  (а) и среднеквадратичного  $\overline{\Delta f_{rms}}$  (б) отклонений аппроксимирующей кривой от точной «теоретической» кривой (ломаной линии) для двух алгоритмов интерполяции: *B*-сплайнами (■) по работе [3] и предлагаемого в данной работе (○)

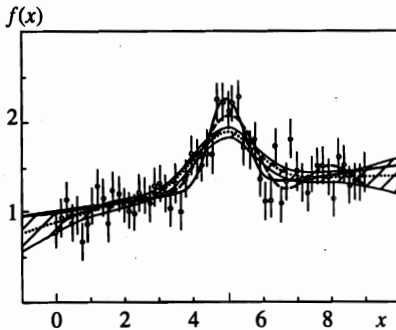


Рис. 7

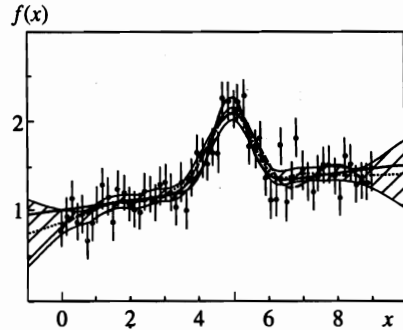


Рис. 8

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

Рис. 8. Интерполяция точек, описывающих гауссов пик на гладком фоне;  $q_L = L_0/(n-2) = 0.7$

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	$\Delta f_{abs}$	$\Delta f_{rms}$
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 ли-

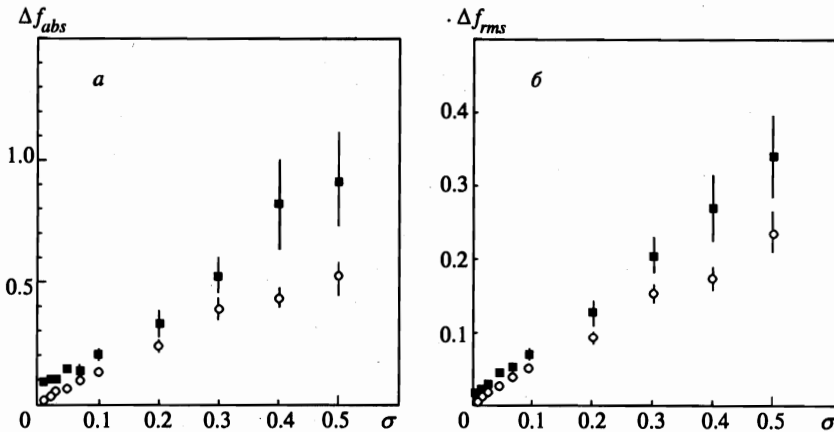


Рис. 9. Средние значения максимального  $\overline{\Delta f_{abs}}$  (а) и среднеквадратичного  $\overline{\Delta f_{rms}}$  (б) отклонений аппроксимирующей кривой от точной «теоретической» кривой (плоский фон + гауссов пик) для двух алгоритмов интерполяции:  $B$ -сплайнами (■) по работе [3] и предлагаемого в данной работе (○)

нию. Этот эффект можно ослабить, уменьшив целевое значение функции правдоподобия:  $L \rightarrow 0.7(n - 2)$  (это соответствует значению аргумента  $q_L = L_0/(n - 2) = 0.7$  в программе FITAB). На рис. 8 виден результат интерполяции при этих условиях. Здесь уже качество аппроксимации по абсолютному отклонению у предлагаемого метода выше, чем при интерполяции  $B$ -сплайнами:

Алгоритм сглаживания	$\Delta f_{abs}$	$\Delta f_{rms}$
Работа [3]	0.24	0.085
Данная работа	0.18	0.13

Характеристики качества аппроксимации как функции  $\sigma$  для этой теоретической модели приведены на рис. 9. В среднем предложенный алгоритм имеет лучшие характеристики.

Несмотря на то что с помощью аргумента  $q_L$  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, это не является достаточно эффективной мерой. По-видимому, для случаев с сильно неоднородной функцией надо или обобщать критерий гладкости 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, все 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

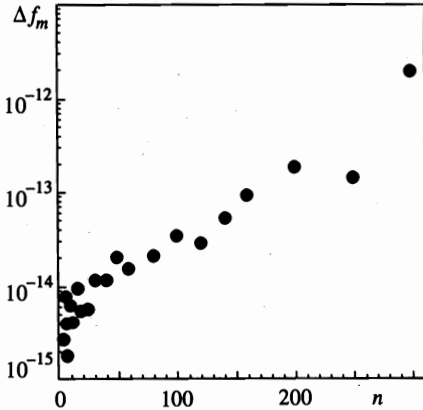


Рис. 10

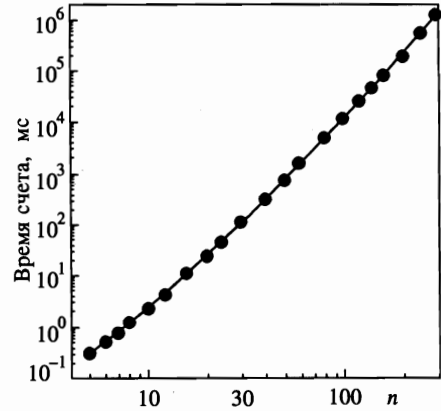


Рис. 11

Рис. 10. Максимальное отличие  $\Delta f_m$  интерполяционных функций, полученных расчетами с числами `real *8` и `real *16`, как функция числа точек  $n$

Рис. 11. Зависимость времени счета программы FITAB от числа точек  $n$  (Alpha Server 4100)

плавающей точкой вида `real *16`. Аппроксимацию, полученную этой версией программы, обозначим через  $f_e(x)$ . Далее, мерой ошибки решения можно считать

$$\Delta f_m = \max_{x_1 < x < x_n} |f(x) - f_e(x)|. \tag{46}$$

На рис. 10 приведен график зависимости ошибки решения  $\Delta f_m$  от количества экспериментальных точек (это совпадает с размерностью матриц, использующихся для промежуточных вычислений). В качестве тестовой задачи использовался последний пример (гауссов пик на плоском фоне). Вообще говоря, зависимость ошибки расчета от количества точек не должна быть гладкой, более того, ошибка зависит и от конкретного положения точек, и от уровня  $L_0$  (в данном случае  $L_0 = n - 2$ ), и от модели вычислительной машины (точнее, от формы представления чисел и правил округления). Данное исследование точности расчетов было проведено на Alpha Server 4100 (тактовая частота 400 МГц) 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 около 10–20.

Что касается времени счета (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 счета от числа точек  $n$ . Если подогнать кривую на рис. 11 полиномом пятой степени, то получим

$$t_{CPU}[\text{мс}] = \frac{n - 3.2}{21} + \left(\frac{n}{45.8}\right)^2 + \left(\frac{n}{9.37}\right)^3 + \left(\frac{n}{10.5}\right)^4 + \left(\frac{n}{22.86}\right)^5. \quad (47)$$

Указанный Alpha Server 4100 имеет достаточно высокое быстродействие. Эта же программа FITAB выполняется в 13 раз медленнее на сервере Silicon Graphics Challenge-L (такты частота 150 МГц, операционная система IRIX 6.5, компилятор MIPSpro v.7.2.1), в 30 раз медленнее на VAX Station 3600 (операционная система OpenVMS v5.5, компилятор VAX Fortran v5.5-98), в 42 раза медленнее на IBM PC 486 DX/4 (такты частота 100 МГц, компилятор Microsoft Fortran Visual Workbench версии 1.00, под операционной системой Windows-95). Сравнение проведено при  $n = 20$ . Приведенные коэффициенты позволяют использовать рис. 11 для оценки времени счета 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 обобщенный 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.

Приведен ряд практических примеров интерполяции с одновременным сравнением качества интерполяции с помощью алгоритма, предложенного в работе [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, приведет к сплайнам степени выше трех. В этом случае интерполяционная кривая будет притягиваться к полиномам степени выше первой (например, параболе), насколько позволяют экспериментальные ошибки.

В соответствии с предложенным алгоритмом написана программа интерполяции на языке Фортран-77. Исследовано влияние ошибок округления на точность расчетов и измерено время счета для данной реализации алгоритма в широком диапазоне  $n = 5-300$ .



## Литература

1. Д. Худсон, *Статистика для физиков*, Мир, Москва (1970). D. J. Hudson, *Lectures on Elementary Statistics and Probability*, CERN (1963) (CERN 63-29).
2. Л. Яноши, *Теория и практика обработки результатов измерений*, Мир, Москва (1965).
3. V. B. Anikeev, A. V. Popov, and V. P. Zhigunov, *Nucl. Instr. Meth. Phys. Res. A* **372**, 482 (1996).
4. С. Б. Стечкин, Ю. Н. Субботин, *Слайды в вычислительной математике*, Наука, Москва (1976).
5. И. М. Гельфанд, С. В. Фомин, *Вариационное исчисление*, Физматгиз, Москва (1961).
6. A. D. Bukin and N. A. Grozina, *Comp. Phys. Commun.* **78**(3), 287 (1994).
7. А. Д. Букин, Препринт ИЯФ 98-95, Новосибирск (1998).
8. Г. А. Корн, Т. М. Корн, *Справочник по математике для научных работников и инженеров. Определения, теоремы, формулы*, Наука, Москва (1968).
9. А. Г. Курош, *Курс высшей алгебры*, Физматгиз, Москва (1963).