

Provided for non-commercial research and educational use.
Not for reproduction, distribution or commercial use.

Serdica

Bulgariacae mathematicae publicationes

Сердика

Българско математическо списание

The attached copy is furnished for non-commercial research and education use only.
Authors are permitted to post this version of the article to their personal websites or
institutional repositories and to share with other researchers in the form of electronic reprints.

Other uses, including reproduction and distribution, or selling or
licensing copies, or posting to third party websites are prohibited.

For further information on
Serdica Bulgaricae Mathematicae Publicationes
and its new series Serdica Mathematical Journal
visit the website of the journal <http://www.math.bas.bg/~serdica>
or contact: Editorial Office
Serdica Mathematical Journal
Institute of Mathematics and Informatics
Bulgarian Academy of Sciences
Telephone: (+359-2)9792818, FAX:(+359-2)971-36-49
e-mail: serdica@math.bas.bg

ОБ ОДНОМ АЛГОРИТМЕ ПОСТРОЕНИЯ СПЛАЙНОВ С ДИСКРЕТНЫМИ ОГРАНИЧЕНИЯМИ ТИПА НЕРАВЕНСТВ

А. В. КОВАЛКОВ

Работа посвящена эффективному методу построения решения задачи минимизации энергии при дискретных ограничениях типа неравенств. Известно, что ее решением является интерполяционный сплайн, узлы которого определяются лишь частью ограничений, удовлетворяющих определенным характеристическим свойствам. На основе этих свойств предложен алгоритм последовательного построения сплайн-приближений на подмножествах ограничений и доказана его сходимость к решению. Приведен ряд примеров применения метода.

В работе будет изложен эффективный при некоторых предположениях алгоритм построения сплайн функции одной и нескольких переменных с дискретными ограничениями типа неравенств. Прежде чем приступить к описанию алгоритма, поясним смысл возникающей задачи на примере.

Пусть на отрезке $[a, b]$ задана сетка $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$, в узлах которой измерены значения f_1, f_2, \dots, f_n . Каждое из этих значений измерено приближенно с заданным уровнем ошибок. Другими словами, каждому узлу сетки x_i соответствует доверительный интервал $[a_i, \beta_i]$, $i = \overline{1, n}$. Рассмотрим множество функций вида $S_{a, \beta} = \{u \in W_2^2[a, b] : a_i \leq u(x_i) \leq \beta_i, i = \overline{1, n}\}$. Легко понять, что множество $S_{a, \beta}$ является выпуклым и замкнутым в $W_2^2[a, b]$. На этом множестве будем искать сплайн как точку минимума квадратичного функционала $J(u) = \int_a^b (u'')^2 dx$. При дополнительных предположениях решение задачи на минимум существует и единственно. Это решение называют „сплайном в выпуклом множестве“. Оно обладает важными свойствами. Прежде всего решение минимизационной задачи всегда является кубическим сплайном дефекта I, связанным с узлами x_1, x_2, \dots, x_n . Далее, решение „прилипает“ к ограничениям a_i или β_i только в некоторых узлах сетки. Именно в этих точках прилипания один кубический многочлен (представление сплайна в ячейке) нетривиальным образом „переходит“ в другой. Там, где „прилипания“ нет, многочлен остается неизменным. Во многих практических задачах сравнительно „плавно“ ведущая себя функция бывает измерена (но со значительными погрешностями) в большом числе узлов. В этом случае число точек прилипания существенно меньше числа точек измерения, а ведь именно прилипания являются нетривиальными узлами сплайна. Поиск точек прилипания позволяет существенно сократить количество информации, а при анализе однотипных кривых даже дать рекомендации, где функцию следует измерять в действительности, а какие измерения являются „лишними“.

Далее мы приведем общую постановку задачи, сформулируем теорему существования и единственности [1; 2], теорему характеристики [2], обсудим предлагаемый алгоритм в общей форме и на примерах.

1. Общая постановка задачи [1; 2]. Пусть Ω — некоторая область в R^n . Рассмотрим пару гильбертовых функциональных пространств $X(\Omega)$ и $Y(\Omega)$, состоящих из функций, определенных на Ω . Скалярное произведение в $X(\Omega)$ и $Y(\Omega)$ обозначим $(\cdot, \cdot)_X$, $(\cdot, \cdot)_Y$, а соответствующие нормы $\|\cdot\|_X$, $\|\cdot\|_Y$.

Пусть $T: X(\Omega) \rightarrow Y(\Omega)$ — линейный ограниченный оператор. Рассмотрим в $X^*(\Omega)$ набор линейных непрерывных независимых функционалов $L = \{l_1, l_2, \dots, l_N\}$. Каждому функционалу l_i сопоставим тройку (l_i, α_i, β_i) , где α_i и β_i — вещественные числа, и будем называть ее i -тым ограничением. Определим множество

$$(1) \quad C_{\alpha, \beta} = \{u \in X(\Omega) : \alpha_i \leq l_i(u) \leq \beta_i, \quad i = \overline{1, N}\}.$$

Легко проверить, что это множество функций выпукло и замкнуто в $X(\Omega)$. Заметим, что если задано лишь одно α_i , либо β_i , то под ограничением будем понимать $(l_i, -\infty, \beta_i)$ или, соответственно, $(l_i, \alpha_i, +\infty)$. Поставим задачу отыскания элемента $\sigma \in X(\Omega)$ (сплайна в выпуклом множестве) из условия

$$(2) \quad \|T\sigma\|_{Y(\Omega)}^2 = \min_{u \in C_{\alpha, \beta}} \|Tu\|_{Y(\Omega)}^2.$$

Ограничимся рассмотрением частного случая, когда $X(\Omega) = W_2^m(\Omega)$, а оператор T — это оператор типа дифференцирования

$$(3) \quad T_m(\varphi) = \left[\sqrt{\frac{m!}{a!}} D^a \varphi, \quad \|a\| = m \right],$$

$a = (a_1, a_2, \dots, a_n)$ — мультииндекс, $\|a\| = a_1 + \dots + a_n$, $a! = a_1! \dots a_n!$. Тогда $Y(\Omega)$ является тензорным произведением конечного числа пространств $L_2(\Omega)$, а именно: любой элемент $y \in Y$ — это функциональный вектор вида

$$(4) \quad y = [\eta_a, \|a\| = m, \eta_a \in L_2(\Omega)].$$

В монографии [2] доказано, что решение задачи (1)–(3) существует всегда. Единственность имеет место при следующих условиях:

$$A) \quad C_{\alpha, \beta} \cap N(T) = \emptyset,$$

$$B) \quad \alpha_i < \beta_i, \quad i = \overline{1, N},$$

где $N(T)$ — ядро оператора T , т. е. пространство полиномов степени $m-1$. Если условие Б) не выполнено, то решение задачи будет единственно при условии

$$N(T) \cap \{x \in C_{\alpha, \beta} \mid l_i(x) = 0, \quad \forall i \in L_p\} = \theta_x,$$

где θ_x — нуль пространства $W_2^m(\Omega)$, а L_p — подмножество функционалов из L , для которых $\alpha_i = \beta_i$.

В монографии [2] была сформулирована двойственная задача к задаче (1)–(3) и на ее основе доказана следующая теорема характеристики решения.

Теорема. Для того чтобы элемент $\sigma \in C_{\alpha, \beta}$ был сплайном для множества $C_{\alpha, \beta}$ и отображения T , необходимо и достаточно, чтобы

$$(5) \quad T^*T(\sigma) = \sum_{i=1}^N \lambda_i l_i,$$

где

$$(I) \quad \lambda_i \leq 0, \quad \text{если } l_i(\sigma) = \beta_i,$$

$$(II) \quad \lambda_i \geq 0, \quad \text{если } l_i(\sigma) = \alpha_i,$$

$$(III) \quad \lambda_i = 0, \quad \text{если } \alpha_i < l_i(\sigma) < \beta_i,$$

и T^* — оператор, сопряженный к T .

Заметим, что представление (5) имеет место и для задачи интерполяции, когда $\alpha_i = \beta_i$, $\forall i = \overline{1, N}$, правда, при этом уже не имеют смысла условия (I)—(III). В [3, 4] показано, что ее решением является функция вида

$$(6) \quad \sigma = \sum_{i=1}^N \lambda_i \sigma_i(t) + P_{m-1}(t),$$

где λ_i — коэффициенты представления (5), $\sigma(t) = (-1)^m l_i(b_{m,n}(t-y))$. Здесь $G_{m,n}(t-y)$ — функция Грина полигармонического оператора Δ^m , точнее

$$G_{m,n}(t) = \begin{cases} \chi_{m,n} |t|^{2m-n}, & n \text{ — нечетно или } n \text{ — четно и } 2m < n, \\ \chi_{m,n} |t|^{2m-n} \ln |t|, & n \text{ — четно и } 2m \geq n, \end{cases}$$

и, соответственно, $|t| = (t_1^2 + t_2^2 + \dots + t_n^2)^{1/2}$, $\chi_{m,n}$ — некоторый коэффициент, $P_{m-1}(t)$ — полином степени $(m-1)$, являющийся элементом ядра оператора T .

Используя результаты (5) и (6), легко доказывается следующая

Лемма. Если решение задачи (1)—(3) существует и единственно, то оно имеет вид

$$(7) \quad \sigma = \sum_{i \in L_{ak}} \lambda_{i_k} \sigma_{i_k}(t) + P_{m-1}(t),$$

где L_{ak} — подмножество функционалов из L , удовлетворяющих условиям (I) и (II).

Доказательство. Пусть σ — решение задачи (1)—(3). Решим интерполяционную задачу минимизации оператора (3) для значений $r_i = l_i(\sigma)$, $i = \overline{1, N}$. Ее решение σ_* удовлетворяет неравенству $\|T\sigma_*\| \leq \|T\sigma\|$, так как оно справедливо для всех $x \in W_2^m$, удовлетворяющих интерполяционным условиям r_i . С другой стороны, справедливо неравенство $\|T\sigma\| \leq \|T\sigma_*\|$, так как $\sigma_* \in C_{\alpha, \beta}$, а σ — это минимум на множестве функции $C_{\alpha, \beta}$. Из этих неравенств и единственности решения задач (единственность решения интерполяционной задачи следует из единственности решения задачи (1)—(3) с тем же набором функционалов) следует $\sigma = \sigma_*$. Следовательно, решение задачи (1)—(3) является интерполяционным сплайном и для него справедливо представление (6). А так как коэффициенты функционалов, удовлетворяющих условию (III), равны 0, то имеет место представление (7). Лемма доказана.

Назовем пару (l_i, β_i) , удовлетворяющую условию (I) верхней, а пару (l_i, α_i) , удовлетворяющую условию (II), соответственно, нижней „точками прилипания“ для задачи (1)—(3). Из леммы следует, что решение задачи (1)—(3) совпадает с решением интерполяционной задачи, заданной точками прилипания. Таким образом, для решения задачи (1)—(3) нам достаточно найти все эти точки и построить по ним интерполяционный сплайн.

2. Метод приближения на подмножествах. В предыдущем параграфе было доказано, что решение задачи (1)—(3) принадлежит пространству сплайнов, и таким образом задача является конечномерной. В [5; 6] показана ее эквивалентность задаче квадратичного программирования вида

$$(8) \quad \min_{y \in C'} \Phi(y) = (y^0, By^0).$$

Здесь B — симметричная, положительно полуопределенная матрица с элементами (Tl_i, Tl_j) , где l_i, l_j — соответствующие базисные сплайны для

набора функционалов из \mathcal{L} , и множество $c' = [\alpha_1, \beta_1] \times [\alpha_2, \beta_2] \times \dots \times [\alpha_N, \beta_N] \subset R^N$. Решение задачи (8) и сплайн σ в задаче (1)–(3) связаны соотношениями $l_i(\sigma) = y_i^0$, $i = 1, N$. Исходя из этого, для решения задачи (1)–(3) использовались методы решения задачи квадратичного программирования. В работе [5] были представлены программные реализации большинства этих методов для построения кубического сплайна одной переменной задачи (1)–(3) и приведены таблицы сравнения времени счета на ряде функций. Использовались следующие методы: условного градиента, возможных направлений, метод декомпозиции по принципам Гаусса–Зейделя и Саутвела, а также некоторый двойственный метод и метод штрафов. И уже на этой простейшей задаче вида (1)–(3) у перечисленных методов скорость сходимости резко падала, начиная примерно с 50 ограничений. Почти все эти методы работают приблизительно по одной схеме [7, с. 173].

Рассматривается некая последовательность и приближений, удовлетворяющих всем (и это весьма существенно!) ограничениям, с уменьшением на каждом шаге энергии (2). Этим достигается сходимость к решению задачи.

Однако часто имеет место ситуация, когда в задаче (1)–(3) число точек прилипания оказывается значительно меньше общего числа ограничений. В этом случае существенно более эффективным будет следующий алгоритм. Строим последовательность приближений, каждое из которых есть решение задачи вида (1)–(3) на некотором подмножестве ограничений, причем энергия у них строго возрастает. Таким образом, вместо одной большой задачи, мы будем решать серию задач с небольшим числом ограничений, и при этом будут рассматриваться лишь ограничения „подозрительные“ на точке прилипания.

Опишем подробно этот метод решения задачи.

Пусть выполнено условие единственности решения задачи (1)–(3). Мы хотим найти ее точки прилипания. Выберем некоторое начальное подмножество функционалов $L_0 \subset L$. Ему соответствует множество

$$C_0 = \{u \in W_2^m(\Omega) : \alpha_{i_k} \leq l_{i_k}(u) \leq \beta_{i_k}, l_{i_k} \in L_0\}.$$

Пусть C_0 таково, что решение σ_0 задачи (1)–(3) для L_0, C_0 единственно. Построим его каким-либо традиционным способом (см. [5]) и тогда из представления решения (7) получим совокупность $L_{a_k}^0 \subset L_0$ и соответствующее ему выпуклое множество C_0' . Если $\sigma_0 \notin C_{a,\beta}$, т. е. не удовлетворяет всем ограничениям, то дополним $L_{a,k}^0$ хотя бы одним $l_i \in L \setminus L_0$, причем таким, для которого неравенство $\alpha_i \leq l_i(\sigma_0) \leq \beta_i$ нарушено (способы дополнения будут обсуждены далее). Получим подмножество $L_1 \subset L$ и соответствующее ему по (9) множество функций C_1 . Из $L \supset L_1 \supset L_{a,k}^0$ следует $C_{a,\beta} \subset C_1 \subset C_0'$, и так как для задач (1)–(3) с множествами $C_{a,\beta}$ и C_0' решение единственно, то оно единственно и для задачи с C_1 . Из последнего включения, кроме того, следует неравенство $\|T\sigma_0\|_{V(\Omega)} < \|T\sigma_1\|_{V(\Omega)}$, где σ_1 — решение новой задачи (1)–(3) для L_1, C_1 . То, что неравенство строгое, следует из способа пополнения $L_{a,k}^0$ до L_1 . Отметим, что в качестве начального приближения при построении σ_1 берем интерполяционный сплайн, который проходит через точки прилипания задачи (1)–(3) для L_0, C_0 (то есть интерполяционные узлы σ_0) и узлы (l_i, α_i) при $\alpha_i > l_i(\sigma_0)$, и (l_i, β_i) при $\beta_i < l_i(\sigma_0)$, соответствующие добавленным ограничениям. Если σ_1 не удовлетворяет всем ограничениям, то процедура дополнения повторяется вновь. Таким образом целиком описан алгоритм построения решения задачи (1)–(3).

Покажем, что алгоритм сходится за конечное число шагов. Мы показали, что на каждой итерации решение задачи единственно и справедливо неравенство $\|T_n\|_{V(\Omega)} < \|T_{n+1}\|_{V(\Omega)}$. Так как число ограничений конечно и энергия приближений строго возрастает, процесс сходится за конечное число шагов. На каком-то шаге будет получено решение подзадачи, удовлетворяющее всему множеству ограничений. Очевидно, что оно будет удовлетворять характеристическим свойствам решения задачи на всем множестве ограничений.

З а м е ч а н и е. Скорость приближения к решению всей задачи существенно зависит от следующих факторов:

1) от отношения числа точек прилипания к общему числу ограничений. Алгоритм тем более эффективен, чем оно меньше;

2) от способа дополнения L_{ak}^n до L_{n+1} . Общая рекомендация такова. Следует добавлять прежде всего те ограничения, которые оказались не выполнены „сильнее всего“ для последнего приближения. Причем, если не выполнено большое число ограничений (обычная картина на первых итерациях), то добавлять следует лишь несколько экстремальных среди них, так как многие после очередной итерации окажутся выполнены. Это позволит построить процесс с постепенным расширением подмножества ограничений и хорошим начальным приближением на каждом этапе.

Формально оценить предложенный метод по скорости приближения к решению не представляется возможным. Однако его преимущества в сравнении с традиционными методами по затратам машинного времени будут далее продемонстрированы при решении ряда конкретных задач.

3. Примеры применения метода и его вычислительные аспекты.

Приведем ряд конкретных постановок задач типа (1)–(3) и опишем методы дополнения ограничений для них.

1. Зададим на отрезке $[a, b]$ сетку $\Delta: a = x_1, x_2, \dots, x_N = b$ и определим на ней набор функционалов $L = \{l_i(\varphi) = \varphi(x_i) | i = 1, N\}$. Заданы соответствующие им $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)$ и $\beta = (\beta_1, \dots, \beta_N)$. Требуется решить задачу (1)–(3) для оператора $T = \frac{d^m}{dx^m}$ с произвольным целым и положительным m , т. е. для сплайна степени $(2m-1)$. Решение задачи существует и единственно при $N \geq m$. Для использования предложенного метода определим следующий способ дополнения L_{ak}^n до L_{n+1} . Ограничения, не выполненным при σ_n , поставим в соответствие числа $l_i(\sigma_n) - \alpha_i$, если $l_i(\sigma_n) < \alpha_i$ и $l_i(\sigma_n) - \beta_i$, если $l_i(\sigma_n) > \beta_i$. Найдем локальные экстремумы этой последовательности и добавим соответствующие им функционалы к L_{ak}^n . В качестве начального приближения на следующем шаге возьмем интерполяционный сплайн, который проходит через интерполяционные точки сплайна σ_n и точки (x_i, α_i) при $\alpha_i > l_i(\sigma_n)$, и (x_i, β_i) при $\beta_i < l_i(\sigma_n)$, соответствующие добавленным ограничениям, см. рис. 1.

Осуществлена программная реализация алгоритма решения этой задачи на основе использования комплекта „ODD“ [8; 9] для построения интерполяционного сплайна произвольной степени на отрезке и решения задачи (1)–(3) на подмножествах ограничений методом декомпозиции по принципу Саутвела. В работе [5] приведены таблицы затрат машинного времени при решении ряда задач традиционными методами на IBM 360/67. Эти же задачи были решены предлагаемым методом на БЭСМ-6 (ЭВМ близки по классу). Приведем таблицу сравнения времени счета. Функции $F1(x) = \sin(x)$, $F2(x) = \cos(x) + 10x^2/64\pi^2$, $F3(x) = e^{-x}(x^4 - 4x^3 - 7x^2 + 10x)$ и $F4(x) = e^{-x/10} \sin(x)$ заданы на равномерных сетках на отрезке $[-\pi/2, \pi/2]$ с различным числом узлов сет-

ки N . Значение функций в точке округлялось до второго знака и в качестве α_i бралось число на 0.005 меньше, а β_i — на 0.005 больше этой величины. В колонке 1 приведено время решения задачи традиционными методами (наилучший и наихудший результат по группе методов, описанных в [5]). В

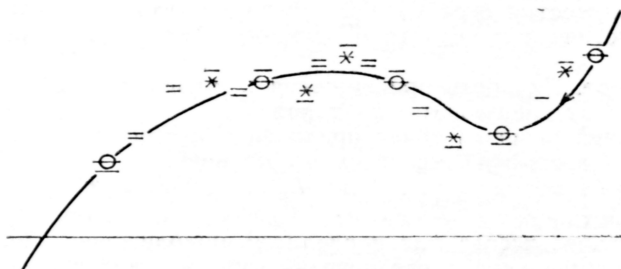


Рис. 1

о — исходные узлы, * — добавочные узлы

колонке 2 указано время решения с помощью метода приближения на подмножествах.

Из таблицы видно, что предлагаемый метод требует значительно меньших затрат машинного времени, чем традиционные методы из [5], особенно на задачах с большим числом ограничений (что более важно). Ясно, что потребность оперативной памяти также значительно меньше.

II. Пусть задана двумерная область Ω , хаотическая сетка узлов $\{p_i\}_{i=1}^N$, набор функционалов $L = \{L_i(\varphi) = \varphi(p_i), i = \overline{1, N}\}$ и соответствующие им коридоры значений $\alpha_i < \beta_i$. Решение задачи (1)–(3) существует и будем считать, что выполнено условие его единственности, зависящее от параметра m оператора T и свойств сетки $\{p_i\}_{i=1}^N$. Например, при $m=2$ у сетки должно быть три точки, не лежащие на одной прямой. Определим способ дополнения для нашего метода. Построим прямоугольник, содержащий Ω , и введем на нем прямоугольную сетку, см. рис. 2.

Пусть мы построили приближение σ_n . Если для него не выполнены все ограничения, то в каждой ячейке сетки выберем ограничение, у которого расстояние между $L_i(\sigma_n)$ и $[\alpha_i, \beta_i]$ максимально среди всех ограничений в

Таблица 1

N	F1		F2		F3		F4	
	1	2	1	2	1	2	1	2
20	1.6—13	1.2	0.5—4	0.8	0.4	—	5—12	—
40	45—185	3.7	6—200	1.5	2.3—2.9	—	73—83	—
50	7.3—167	4.3	3.9—86	3.92	9—12	—	100—*)	—
60	87—156	5.2	7—400	5.5	103—363	9.7	109—350	7.4
100	387	—	46.5—*)	—	—	—	327—*)	5.6
200	1512	7.16	310—*)	7	—	—	—	6.5
500	—	—	1287—*)	12	—	—	—	—

*) означает, что многие традиционные методы [5] потребовали значительных затрат времени, но решения с их помощью так и не получили.

степени меньше, чем у сплайна низкой, и как правило они совпадают. Исключения в основном составляют точки около границы области Ω . Таким образом, прежде чем строить сплайн высокой степени, следует построить сплайн низкой степени ($m=1$ или $m=2$) и, взяв полученные точки прилипания за начальное приближение, решить задачу (1)—(3) на этой сетке, а затем продолжить итерации по предложенному алгоритму. Численные эксперименты показали, что затраты на построение сплайна снижаются в 3—5 раз, причем мы получаем сразу несколько сплайнов различных степеней, что представляет возможность выбора для пользователя.

В. При численной реализации алгоритма на первых итерациях не надо обязательно точно решать задачу на подмножествах, достаточно лишь получить хорошее приближение решения. Это также может дать существенную экономию машинного времени.

Изложенные три приема по сути дела позволяют экономично строить начальное приближение, очень близкое к решению задачи (1)—(3), путем решения предложенным методом серии небольших и более простых задач. Это дает возможность практически решать задачу (1)—(3) в многомерном пространстве для сплайна высокой степени на хаотической сетке с большим числом ограничений (до нескольких тысяч).

В целом предлагаемый подход, в отличие от традиционных универсальных методов решения задач квадратичного программирования, отвечает естественным свойствам сплайна и учитывает их специфические особенности. Этим и объясняется его высокая эффективность в сравнении с универсальными методами.

ЛИТЕРАТУРА

1. M. Atteia, Fonctions-spline definies sur un ensemble convexe. *Numer. Math.*, **12**, 1968 192-210.
2. П. Лоран. Аппроксимация и оптимизация. М., 1975.
3. А. В. Ковалков. Функция Грина и сплайна-аппроксимация в многомерных областях. Новосибирск, 1980. (Препринт/ВЦ СО АН СССР; 70).
4. В. А. Василенко. Сплайн-функции. Теория, алгоритмы, программы. Новосибирск, 1982.
5. Etude du développement des fonctions-spline de lissage pour des données de télémessure. *Laurent p. f. — Grenoble*, 1975—1976, v. 1—3 — (contrat/Math. Appl. Univer. Scient. Med.; No 553/73/AR).
6. А. Имамов. Сплайны в выпуклых множествах. Новосибирск, 1979. (Препринт/ВЦ СО АН СССР; 65).
7. Б. Н. Пшеничный, Ю. М. Данилин. Численные методы в экстремальных задачах. М., 1975.
8. Библиотека программ „LIDA“ для аппроксимации функций и обработки данных. Вариант ФОРТРАН-IV (В. А. Василенко, А. В. Ковальков, М. В. Зюзин.—Новосибирск, 1981. (Препринт/ВЦ СО АН СССР; 300)).
9. В. А. Василенко, А. В. Ковалков, М. В. Зюзин. Библиотека программ „LIDA“ для аппроксимации функций и обработки данных. Вариант АЛГОЛ—БЭСМ-6. Новосибирск, 1981. (Препринт/ВЦ СО АН СССР; 270).

Поступила 29. 10. 1982