УДК 517.972.5+519.65

Об алгоритме сглаживания сплайном с двусторонними ограничениями*

А.И. Роженко[1], Е.А. Федоров[2]

[1]Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

[2]ООО "Дата Ист", просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 2/2, Новосибирск, 630090

E-mails: rozhenko@oapmg.sscc.ru (Роженко А.И.), egor.a.fedorov@gmail.com (Федоров Е.А.)

Роженко А.И., Федоров Е.А. Об алгоритме сглаживания сплайном с двусторонними ограничениями // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2016. — Т. 19, № 3. — С. 331–342.

В работе исследуется задача построения сплайна σ в гильбертовом пространстве, удовлетворяющего двусторонним ограничениям $z^- \le A\sigma \le z^+$ с линейным оператором A и минимизирующего функционал квадрата гильбертовой полунормы. Решение этой задачи можно получить итерационными методами выпуклого программирования, в частности методом проекции градиента. Предложена модификация метода проекции градиента, позволяющая выявить множество активных ограничений решения за меньшее число итераций. Показана эффективность предложенной модификации в задаче приближения псевдолинейным сплайном двух переменных.

DOI: 10.15372/SJNM20160307

Ключевые слова: *сглаживание, сплайн, гильбертово пространство, выпуклое программирование, воспроизводящее отображение, радиальная базисная функция.*

Rozhenko A.I., Fedorov E.A. On an algorithm of bilateral restrictions smoothing with spline // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2016. — Vol. 19, № 3. — P. 331–342.

In this paper, the problem of constructing a spline σ in the Hilbert space satisfying bilateral restrictions $z^- \le A\sigma \le z^+$ with a linear operator A and minimizing a squared Hilbert seminorm is studied. A solution to this problem could be obtained with the convex programming iterative methods, in particular, with the gradient projection method. A modification of the gradient projection method allowing one to reveal a set of active restrictions in a smaller number of iterations is offered. The efficiency of the modification proposed is shown on the problem of approximation with a pseudo-linear bivariate spline.

Keywords: *smoothing, spline, Hilbert space, convex programming, reproducing mapping, radial basis function.*

1. Постановка задачи

Рассмотрим операторное уравнение

$$Ax = z, \tag{1}$$

где $A : X \to Z$ — линейный ограниченный оператор, X — вещественное гильбертово пространство, $Z = \mathbb{R}^N$, а значит оператор A составлен из N ограниченных линейных функционалов, т. е. $A = \zeta_1 \oplus \ldots \oplus \zeta_N$, $\zeta_i \in X^*$, $i = 1, \ldots, N$.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-07-07530).

Будем предполагать, что функционалы ζ_i линейно независимы (образ $\mathcal{R}(A) = AX$ оператора A совпадает с Z), а ядро $\mathcal{N}(A)$ оператора A нетривиально, следовательно уравнение (1) имеет много решений при любом векторе $z \in Z$.

Обычно «наилучшее» решение уравнения (1) выбирают из условия минимизации квадрата полунормы на аффинном подпространстве $A^{-1}(z) = \{x \in X : \; Ax = z\}$ всех возможных решений:

$$\sigma = \arg \min_{x \in A^{-1}(z)} \|Tx\|_Y^2, \tag{2}$$

где $T : X \to Y$ — линейный ограниченный оператор, Y — вещественное гильбертово пространство. Например, если $Y = X$ и T — тождественный оператор, то вектор σ будет нормальным решением уравнения (1). Еще пример: $X = W_2^2[a,b]$ — пространство Соболева дважды дифференцируемых функций на отрезке со второй производной, принадлежащей $Y = L_2(a,b)$, $T = D^2$ — оператор двукратного дифференцирования, $Ax = (x(t_1), \ldots, x(t_N))^\top$ — оператор проектирования функции $x \in W_2^2[a,b]$ на сетку из N различных узлов $t_i \in [a,b]$. В этом случае σ — интерполяционный кубический натуральный сплайн.

Хорошо известно (см., например, [1]), что решение (2) будет единственно при выполнении следующих условий:

- образ $\mathcal{R}(T)$ оператора T замкнут,
- ядро $\mathcal{N}(T)$ оператора T конечномерно,
- $\mathcal{N}(A) \cap \mathcal{N}(T) = \{0\}$.

Нас интересует случай, когда вектор z задан с известной погрешностью $\varepsilon > 0$. При этом приходим к задаче минимизации квадратичного функционала в выпуклом множестве:

$$\sigma^{(\varepsilon)} = \arg \min_{x \in M_\varepsilon(z)} \|Tx\|_Y^2, \tag{3}$$

где $M_\varepsilon(z) = \{x \in X : \; \|Ax - z\|_Z \le \varepsilon\}$.

Алгоритм решения задачи (3) хорошо разработан для случая, когда пространство Z снабжено евклидовой l_2-нормой. При этом задача (3) сводится к эквивалентной задаче выбора параметра сглаживающего сплайна [2], который можно найти итерационным методом, требующим решения нескольких (двух в случае метода Ньютона) задач с одним параметром сглаживания на каждом шаге (см., например, [3, 4]). В [5] предложен новый алгоритм поиска параметра сглаживания, позволяющий за счет решения бо́льшего числа задач сглаживания на шаге итерационного процесса получить более высокую (наперед заданную) скорость сходимости итераций. В [6] этот алгоритм доведен до численной реализации и доработан.

В данной работе исследуется случай, когда пространство Z снабжено равномерной l_∞-нормой. При этом получается задача квадратичного программирования с ограничениями типа неравенств, которую можно решать как на всем множестве ограничений, так и используя итерационный алгоритм поиска подмножества активных ограничений [7], который был предложен и впервые реализован А.В. Ковалковым для случая одной переменной [8], а также М.И. Игнатовым — для случая двух переменных [9].

В [7] на каждом шаге алгоритма решалась задача поиска оптимального решения на подсетке узлов с помощью итерационного алгоритма, в котором для каждого узла подсетки строился фундаментальный интерполяционный сплайн, равный нулю во всех узлах подсетки кроме заданного, и выполнялась локальная оптимизация с использованием построенного сплайна в качестве направления спуска. В [10] был предложен более эффективный алгоритм оптимизации с использованием проекции градиента в качестве направления спуска. Этот алгоритм описан в данной работе и предлагается его модификация, позволяющая с помощью коррекции направления спуска уменьшить число итераций поиска оптимального решения.

2. Равномерное приближение сплайном

Запишем задачу (3) в эквивалентной постановке:

$$\sigma^* = \arg \min_{x \in M(z^-,z^+)} \|Tx\|_Y^2, \tag{4}$$

где $M(z^-, z^+) = \{x \in X\colon z^- \le Ax \le z^+\} = \{x \in X\colon z_i^- \le \zeta_i(x) \le z_i^+,\ i = 1, \ldots, N\}$.

В данной постановке можно ослабить ограничения, например, предполагая, что некоторые из них отсутствуют, т. е. $z_i^- = -\infty$ при некоторых i и $z_i^+ = \infty$ при некоторых других i. Естественно, для каждого i должны быть выполнены неравенства $z_i^- \le z_i^+$.

При выполнении условий однозначной разрешимости задачи (2), приведенных в п. 1, решение задачи (4) всегда существует, но его единственность не гарантируется. Известно [10], что множество всех решений задачи (4) представляет замкнутый выпуклый многогранник в X, причем, если σ_1 и σ_2 — решения задачи (4), то $\sigma_1 - \sigma_2 \in \mathcal{N}(T)$, т. е. все решения отличаются друг друга на компоненту ядра оператора T. Если $N = \dim Z \gg \dim \mathcal{N}(T)$, то решение обычно единственно. На практике не существенно, какое решение будет получено в случае его неединственности. Важно построить алгоритм, сходящийся к одному из решений задачи (4).

Формула (4) представляет собой задачу квадратичного программирования с линейными ограничениями типа неравенств. Общая идея ее решения состоит в применении метода проекции градиента (см., например, [11]). В общих чертах алгоритм одного шага выглядит следующим образом.

- Очередное приближение $\tilde{\sigma}$ к решению σ^* на шаге итерационного процесса является решением задачи (2) для некоторого вектора $\tilde{z}$, удовлетворяющего ограничениям $z^- \le \tilde{z} \le z^+$.
- Ищем вектор $g \in X$, в направлении которого функционал $\|T(\tilde{\sigma} + \tau g)\|_Y^2$ убывает наиболее быстро при $\tau > 0$. Этот вектор параллелен вектору градиента функционала $\|Tx\|_Y^2$ в точке $\tilde{\sigma}$.
- Поскольку, двигаясь в этом направлении, можно выйти из множества ограничений $M(z^-, z^+)$, мы должны спроектировать вектор градиента на гиперплоскости ограничений, нарушаемых при бесконечно малом сдвиге. В результате, мы получаем направление сдвига, обозначаемое далее $\hat{\sigma}$, которое не выводит вектор $\tilde{\sigma} + \tau\hat{\sigma}$ из ограничений при достаточно малых $\tau > 0$.
- Далее выполняем оптимизацию по параметру τ и находим $\tau^* > 0$, доставляющее минимум функционалу $\|T(\tilde{\sigma} + \tau\hat{\sigma})\|_Y^2$.
- Наконец полагаем $\hat{\tau} = \tau^*$ и проверяем, что $\tilde{\sigma} + \hat{\tau}\hat{\sigma}$ удовлетворяет каждому ограничению из $M(z^-, z^+)$, уменьшая, если необходимо, $\hat{\tau}$ так, чтобы проверяемое ограничение не нарушалось. Вектор $\tilde{\sigma} + \hat{\tau}\hat{\sigma}$ с полученным $\hat{\tau}$ будет следующим приближением к решению, а вектор $\tilde{z} + \hat{\tau}A\hat{\sigma}$ будет следующим приближением правой части системы (1).

Описанный алгоритм гарантирует, что «энергия» приближения $\|T\tilde{\sigma}\|_Y^2$ уменьшается на каждом шаге, тем самым мы приближаемся к оптимальному решению σ^*.

Данный алгоритм выглядит существенно сложнее, чем алгоритм решения задачи (3) в случае евклидовой нормы. Однако реализацию этого алгоритма можно сделать достаточно эффективной, если процесс решения одной задачи (2) при заданном z можно разбить на два этапа: однократную подготовку к решению задачи и собственно получение решения, причем второй этап выполняется на порядки быстрее, чем первый. Такая ситуация имеет место в задачах сплайн-аппроксимации функции многих переменных, когда подготовка (факторизация) системы линейных уравнений для решения задачи сплайн-интерполяции (2) требует $O(N^3)$ операций, а получение одного решения факторизованной системы уравнений по вектору правой части требует $O(N^2)$ операций, а значит $O(N)$ шагов итерационного процесса, на каждом из которых требуется получить решение задачи (2) для одной правой части, будет эквивалентно по числу операций одному шагу итерационного процесса для случая евклидовой нормы в Z.

Эффективность рассматриваемого далее алгоритма базируется на представлении решения задачи (2) с помощью воспроизводящего отображения пространства X относительно полунормы $\|T\cdot\|_Y$.

3. Воспроизводящее отображение полугильбертова пространства

Хорошо известно, что любой линейный ограниченный функционал $\zeta \in X^*$ в вещественном гильбертовом пространстве X имеет представление $\zeta(x) = (x, x_\zeta)_X$, где $x_\zeta \in X$ определяется единственным образом. Следовательно, существует единственное отображение $\zeta \mapsto x_\zeta$ из X^* на X, воспроизводящее любой функционал $\zeta \in X^*$ в виде $(\cdot, x_\zeta)_X$. Это отображение называют воспроизводящим отображением гильбертова пространства X. Оно ограничено, линейно (антилинейно в случае комплексного гильбертова пространства) и его норма равна единице.

Снабдим вещественное гильбертово пространство X дополнительным скалярным произведением $\pi(u,v)$ с возможно нетривиальным ядром P. Индуцируемую им полунорму обозначим через $\pi(\cdot)$ ($\pi(x) = [\pi(x,x)]^{1/2}$) и потребуем ее ограниченности в X ($\pi(x) \le C\|x\|_X$ при некотором $C > 0$, не зависящем от x). Потребуем также, что X — полное пространство относительно полунормы π, а значит (X,π) — полугильбертово пространство (полное пространство с гильбертовой полунормой). В нашем случае $\pi(u,v) = (Tu, Tv)_Y$, ограниченность полунормы π и полнота (X,π) следуют из ограниченности и замкнутости образа оператора T соответственно, а ядро P полунормы π совпадает с $\mathcal{N}(T)$.

Пусть $\mathcal{X}$ — некоторое векторное пространство. Линейное отображение $\gamma : X^* \to \mathcal{X}$ называется *воспроизводящим отображением полугильбертова пространства* (X,π), если выполнены следующие условия (определение введено в [12], цитируется по [10]).

- Пространство $\mathcal{X}$ содержит X как часть (также возможен случай $\mathcal{X} = X$).
- $\gamma\zeta \in X$, если функционал ζ принадлежит $P^\circ = \{\zeta \in X^* :\ \zeta(u) = 0,\ \text{если } u \in P\}$.
- Представление $\zeta(x) = \pi(x, \gamma\zeta)$ справедливо для любых $\zeta \in P^\circ$ и $x \in X$.

При $P = \{0\}$ получаем однозначно определяемое воспроизводящее отображение гильбертова пространства (X,π) относительно эквивалентной нормы π. Если же P нетривиально, то воспроизводящее отображение неединственно. Можно только гарантировать, что такое отображение существует (см., например, [12]).

Пусть γ — некоторое воспроизводящее отображение $(X, \|T\cdot\|_Y)$. Тогда решение задачи (2) можно представить в виде (см., например, [10]):

$$\sigma = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \gamma \zeta_j + p, \qquad \zeta = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \zeta_j \in \mathcal{N}(T)^\circ, \quad p \in \mathcal{N}(T). \tag{5}$$

С учетом равенств $\zeta_i(\sigma) = z_i$, $i = 1, \ldots, N$, неизвестные векторы $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_N)^\top$ и p определяются единственным образом. Более того, коэффициенты вектора λ не зависят от выбора γ [10] (не изменяются при замене одного воспроизводящего отображения на другое).

Векторы λ и p находятся с помощью решения системы линейных алгебраических уравнений:

$$\begin{pmatrix} G & U \\ U^\top & O \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \end{pmatrix}, \tag{6}$$

где G — $N \times N$-матрица с коэффициентами $g_{ij} = \zeta_i(\gamma\zeta_j)$, U — $N \times K$-матрица с коэффициентами $u_{ik} = \zeta_i(u_k)$, $K = \dim \mathcal{N}(T)$, $u_1, \ldots, u_K$ — некоторый базис $\mathcal{N}(T)$ и $p = \sum_k \mu_k u_k$. При выполнении предположений п. 1 о линейной независимости функционалов ζ_i и однозначной разрешимости задачи (2) система линейных уравнений (6) имеет единственное решение $\lambda \oplus \mu$, с помощью которого получаем решение задачи (2) в виде

$$S(\lambda, \mu) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \gamma \zeta_j + \sum_{k=1}^{K} \mu_k u_k, \qquad \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \zeta_j \in \mathcal{N}(T)^\circ. \tag{7}$$

4. Итерация поиска решения задачи (4)

Согласно [10], при заданном $\tilde\sigma = S(\tilde\lambda, \tilde\mu)$ вида (7) вектор $g \in X$ градиента функционала $\|Tx\|_Y^2$ в точке $\tilde\sigma$ также имеет вид (7) и его векторы коэффициентов удовлетворяют системе уравнений (6) с $z = -\tilde\lambda$. Таким образом, вектор g есть решение задачи (2) при условиях $\zeta_i(g) = -\tilde\lambda_i$, $i = 1, \ldots, N$.

Отсюда легко получить способ вычисления проекции градиента. Положим

$$\hat z_i = \begin{cases} 0 & \text{при } \zeta_i(\tilde\sigma) = z_i^+ \text{ и } \tilde\lambda_i \le 0, \\ 0 & \text{при } \zeta_i(\tilde\sigma) = z_i^- \text{ и } \tilde\lambda_i \ge 0, \\ -\tilde\lambda_i & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Тогда вектор $\hat\sigma = S(\hat\lambda, \hat\mu)$ решения задачи (2) при условиях $\zeta_i(\hat\sigma) = \hat z_i$, $i = 1, \ldots, N$, будет искомой проекцией градиента.

Оптимальное значение τ^* сдвига в направлении $\hat\sigma$, доставляющее минимум функционалу $\|T(\tilde\sigma + \tau\hat\sigma)\|_Y^2$, также легко вычисляется (см. [10]): $\tau^* = (\hat z, \hat z)_2/(\hat z, \hat\lambda)_2$, причем $\tau^* > 0$ при $\hat z \ne 0$. Полагая $\hat\tau = \tau^*$ и уменьшая $\hat\tau$ так, чтобы не нарушались ограничения из $M(z^-, z^+)$, получаем вектор $\tilde\sigma + \hat\tau\hat\sigma$ следующего приближения к решению задачи (4).

Замечание 1. Ясно, что вектор $\tilde\sigma$ будет решением задачи (4), если все $\hat z_i$ нулевые. Другими словами,

- $\zeta_i(\tilde\sigma) = z_i^+ \quad \Rightarrow \quad \tilde\lambda_i \le 0,$
- $\zeta_i(\tilde\sigma) = z_i^- \quad \Rightarrow \quad \tilde\lambda_i \ge 0,$
- $\zeta_i(\tilde\sigma) \in (z_i^-, z_i^+) \quad \Rightarrow \quad \tilde\lambda_i = 0.$

Данные условия, характеризующие решение задачи (4), получены в [1, теорема 9.2.9]. В методах оптимизации такие условия называют *условиями дополнительной нежесткости.*

5. Коррекция направления спуска

Далее ограничимся случаем $-\infty < z_i^- < z_i^+ < \infty$ и обозначим $z_i = (z_i^- + z_i^+)/2$, $\varepsilon_i = z_i^+ - z_i$, $i = 1, \ldots, N$. Соотнесем с вектором $\tilde{z}$ правой части для приближения $\tilde{\sigma}$ вектор s по правилу $s_i = (\tilde{z}_i - z_i)/\varepsilon_i$, $i = 1, \ldots, N$. Вектор s будем называть *обобщенной сигнатурой* приближения $\tilde{\sigma}$. Ясно, что $\tilde{\sigma}$ однозначно восстанавливается по своей сигнатуре s.

Будем называть i-е ограничение *активным*, если $\tilde{z}_i$ совпадает с одной из границ интервала допустимых значений и выполняются соответствующие условия дополнительной нежесткости. В терминах вектора сигнатуры $|s_i| = 1$ и $s_i\tilde{\lambda}_i \le 0$. Остальные ограничения будем считать неактивными. Поскольку вычисления на компьютере выполняются с погрешностью, ограничение будем считать активным, если $|s_i| \ge 1 - \epsilon$ и $s_i\tilde{\lambda}_i \le 0$. Величину ϵ легко получить с помощью прямого анализа ошибки приближения на первой итерации. Решив систему уравнений (6), подставим $\tilde{\lambda}$, $\tilde{\mu}$ в формулу (7) и получаем

$$\epsilon = C \max_{i=1,\ldots,N} \frac{|\zeta_i(S(\tilde{\lambda}, \tilde{\mu})) - \tilde{z}_i|}{\varepsilon_i},$$

где $C > 1$ — некоторый множитель, например $C = 10$. Если величина ϵ сравнима по порядку с единицей, то решать задачу (4) не имеет смысла из-за вычислительных ошибок, сравнимых с величиной допустимых интервалов.

В итерационном процессе поиска наилучшего приближения на первых итерациях происходит стабилизация множества активных ограничений. Причем количество активных ограничений увеличивается не более чем на единицу за одну итерацию, поскольку величина сдвига вдоль вектора проекции градиента, переводящая неактивное ограничение в активное для каждого неактивного ограничения, различна с вероятностью, близкой к единице. Если начинать итерации с середин интервалов (с $s = 0$), то для выявления M активных ограничений потребуется не менее M итераций. Кроме того, некоторые итерации могут оказаться крайне неэффективными, если какое-либо ограничение уже близко к активному и на следующей итерации произойдет очень малый сдвиг, в результате которого это ограничение станет активным. Поэтому возникла идея ускорить процесс стабилизации активных ограничений за счет небольшой коррекции направления спуска так, чтобы одна итерация производила сразу несколько активных ограничений.

Для коррекции направления спуска $\hat{z}$ поступаем следующим образом. Положим

$$\tau_i = \begin{cases} \infty & \text{при } f_i = 0, \\ (1 - |s_i|)/|f_i| & \text{при } \operatorname{sgn} f_i = \operatorname{sgn} s_i, \\ (1 + |s_i|)/|f_i| & \text{в остальных случаях,} \end{cases} \qquad f_i = \frac{\hat{z}_i}{\varepsilon_i}, \qquad i = 1, \ldots, N.$$

Величина τ_i задает максимально возможный сдвиг вдоль проекции градиента, гарантирующий, что i-е ограничение не нарушается. Ясно, что $\tau_{\min} = \min_i \tau_i$ задает величину максимального сдвига без нарушения всех ограничений. Чтобы увеличить величину максимального сдвига, надо уменьшить компоненты вектора $\hat{z}$, соответствующие малым значениям τ_i. Пусть $\bar{\tau} > 0$ — требуемая величина максимального сдвига. Тогда вектор $\bar{z}$ правой части для скорректированного направления спуска вычисляем следующим образом:

$$\bar z_i = \hat z_i \min\Big\{\frac{\tau_i}{\bar\tau}, 1\Big\}, \quad i = 1, \dots, N.$$

В результате такой коррекции, все ограничения, для которых $\tau_i < \bar\tau$, станут активными, если величина оптимального сдвига τ^* вдоль вектора скорректированного направления спуска будет не меньше $\bar\tau$.

Из-за коррекции направления спуска оптимальное значение параметра сдвига вычисляется несколько иначе, чем для проекции градиента. Полагая $\bar\sigma = S(\bar\lambda, \bar\mu)$, $A\bar\sigma = \bar z$ и учитывая тождество $\|T\sigma\|_Y^2 = (\lambda, z)_2$ при $\sigma = S(\lambda, \mu)$, $z = A\sigma$ (см., например, [10]), получаем

$$\|T(\tilde\sigma + \tau\bar\sigma)\|_Y^2 = (\tilde\lambda + \tau\bar\lambda, \tilde z + \tau\bar z)_2 = (\tilde\lambda, \tilde z)_2 + 2\tau(\tilde\lambda, \bar z)_2 + \tau^2(\bar\lambda, \bar z)_2.$$

Здесь использовалось тождество $(\tilde\lambda, \bar z)_2 = (\bar\lambda, \tilde z)_2$ [10, с. 145]. Отсюда

$$\tau^* = -\frac{(\tilde\lambda, \bar z)_2}{(\bar\lambda, \bar z)_2} = \frac{(\hat z, \bar z)_2}{(\bar\lambda, \bar z)_2} = \frac{(\hat z, \bar z)_2}{\|T\bar\sigma\|_Y^2} > 0.$$

Числитель последней дроби, очевидно, положителен, поскольку знаки компонент векторов $\hat z$ и $\bar z$ совпадают.

Задачу выбора $\bar\tau$ можно решить, воспользовавшись величиной сдвига, полученной на предыдущей итерации, если предварительно пронормировать вектор $\hat z$. Мы используем следующую нормировку:

$$\hat z_i := \frac{\hat z_i}{\max_i |\hat z_i/\varepsilon_i|}.$$

При такой нормировке $\|f\|_\infty = 1$ и $\tau_{\min} \le 2$. Далее, пусть $q \le 1$ — управляющий параметр. На первой итерации полагаем $\bar\tau = 2q$, а на следующих итерациях вычисляем его по формуле $\bar\tau = q\hat\tau$, где $\hat\tau$ — величина сдвига, полученная на предыдущей итерации.

Замечание 2. Коррекция направления спуска существенна только на итерациях выбора активных ограничений. Когда набор активных ограничений стабилизируется, начинается игра с коэффициентами $\tilde\lambda_i$, соответствующими неактивным ограничениям. Из условий дополнительной нежесткости следует, что эти коэффициенты должны стремиться к нулю. Поскольку множество активных ограничений не изменяется, величина τ^* оптимального сдвига вдоль проекции градиента будет меньше, чем $\tau_{\min}$, и коррекция направления спуска не производится из-за малости величины результирующего сдвига $\hat\tau$. Поэтому предложенный алгоритм коррекции направления спуска будет работать тогда, когда нужно, а именно на итерациях выбора активных ограничений.

6. Численные эксперименты

Для контроля сходимости итерационного процесса можно использовать несколько критериев.

- Величина «энергии» $e_1 = \|T\tilde\sigma\|_Y^2 = (\tilde\lambda, \tilde z)_2$ должна монотонно убывать и стабилизироваться.
- Коэффициенты вектора $\tilde\lambda$, соответствующие неактивным ограничениям, должны стремится к нулю, т. е. можно контролировать малость величины

$$e_2 = \frac{\max_{i\in I_0(\tilde\sigma)} |\tilde\lambda_i/\varepsilon_i|}{\max_{i=1,\dots,N} |\tilde\lambda_i/\varepsilon_i|},$$

где $I_0(\tilde\sigma)$ — множество индексов неактивных ограничений для приближения $\tilde\sigma$.

- Величина $e_3 = \hat\tau/\tau^*$ показывает, насколько удалось приблизиться к локальному минимуму вдоль направления спуска. Она представляет интерес только на этапе стабилизации, поскольку после стабилизации равна единице.
- Величина $e_4 = \bar\tau/\tau_{\min}$ показывает, была ли коррекция направления спуска или нет. При значении, большем единицы, коррекция выполнялась.
- На этапе стабилизации ограничений важно отслеживать число активных ограничений N_a, количество добавившихся активных ограничений N_+ и количество ограничений N_-, переставших быть активными.

Численные эксперименты состояли в приближении функции двух переменных. Выбиралась близкая к регулярной сетка из N узлов ($N = 100, 400, 900$) в области $(0,1)\times(0,1)$. Область была разбита на $M\times M$ одинаковых квадратных ячеек ($M = \sqrt{N}$), и в каждой ячейке был выбран узел сетки с помощью счетчика псевдослучайных чисел с некоторым фиксированным стартовым значением, чтобы обеспечить повторяемость расчетов. Такой выбор сетки гарантировал хорошую обусловленность матрицы системы (6). В узлах $t^{(i)}$, $i = 1,\dots,N$, построенной сетки были заданы значения $z_i = f(t^{(i)})$ тестовой функции

$$f(x) = f(x_1,x_2) = \sin x_1 + \exp(-(x_1-0.5)^2 - (x_2-0.5)^2) + \cos x_2$$

и величины допустимых отклонений $\varepsilon_i = 0.001$. Приближение строилось с помощью сплайна Дюшона [13] в $\mathbb{R}^2$:

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i g_m(|x - t^{(i)}|) + \mu_0 + \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2,$$

где $|x - t| = \sqrt{(x_1-t_1)^2 + (x_2-t_2)^2}$ — евклидово расстояние между точками, g_m — радиальная базисная функция:

$$g_m(r) = (-1)^{\lfloor m/2\rfloor+1}\begin{cases} r^m \ln r, & m/2 \text{ — целое},\\ r^m, & \text{иначе}.\end{cases}$$

Выражение $\lfloor\cdot\rfloor$ означает целую часть числа; $m = 1,\ 2,\ 3$.

Оператор A в такой постановке задает проектирование функции на сетку:

$$A\sigma = (\sigma(t^{(1)}),\dots,\sigma(t^{(N)}))^\top.$$

Оператор T определяется полунормой естественного полугильбертова пространства, порождаемого радиальной базисной функцей g_m и линейным ядром $\mu_0 + \mu_1 x_1 + \mu_2 x_2$ (см. [13, 14]).

В качестве начального приближения правой части выбирались центры z_i интервалов $(z_i - \varepsilon_i, z_i + \varepsilon_i)$. Тесты проводились с параметром коррекции $q = 0,\ 0.5,\ 1$ ($q = 0$ означает отсутствие коррекции).

В табл. 1 сравниваются итерации поиска равномерного приближения с помощью псевдолинейного сплайна Дюшона ($m = 1$). Здесь Δe_1 — величина уменьшения энергии e_1 на итерации. Стабилизация сетки соответствует значению $e_3 = 1$, а коррекция направления спуска соответствует значению $e_4 > 1$. Коррекция направления спуска оказалась в данном случае очень эффективной при $q = 1$.

Таблица 1. Итерации поиска равномерного приближения при $m = 1$, $N = 100$

Итерация	N_a	N_+	e_1	Δe_1	e_2	e_3	e_4
$q = 0$							
1	0	0	0.7153307	4.623E−03	1.000E+0	1.476E−2	0
2	1	1	0.7107081	3.684E−04	9.080E−1	1.570E−3	0
3	2	1	0.7103398	2.302E−04	8.466E−1	1.329E−3	0
4	3	1	0.7101095	1.043E−04	8.104E−1	8.460E−4	0
95	94	1	0.7024092	6.295E−08	2.849E−2	1.975E−3	0
96	95	1	0.7024092	9.464E−06	1.657E−2	6.351E−1	0
97	96	1	0.7023997	8.593E−07	5.353E−3	1	0
98	96	0	0.7023988	5.984E−08	2.381E−3	1	0
106	96	0	0.7023988	2.220E−16	2.089E−7	1	0
$q = 0.5$							
1	0	0	0.7153307	4.623E−03	1.000E+0	1.476E−2	1.000E+0
2	1	1	0.7107081	1.277E−03	9.080E−1	8.698E−3	5.514E+0
3	4	3	0.7094316	1.628E−03	3.924E−1	1.933E−2	6.671E−1
4	5	1	0.7078037	6.875E−04	3.775E−1	8.405E−3	1.046E+1
83	94	1	0.7024092	7.003E−07	2.848E−2	2.983E−2	2.847E+1
84	95	1	0.7024085	8.823E−06	1.615E−2	6.169E−1	4.414E−2
85	96	1	0.7023997	8.667E−07	5.359E−3	1	8.105E−1
86	96	0	0.7023988	4.820E−08	2.173E−3	1	4.356E−1
95	96	0	0.7023988	6.661E−16	3.288E−8	1	2.574E−5
$q = 1$							
1	0	0	0.7153307	6.690E−03	1.000E+0	2.683E−2	2.000E+0
2	4	4	0.7086403	4.716E−03	3.859E−1	5.937E−2	1.057E+1
3	35	31	0.7039245	1.509E−03	1.342E−1	4.552E−2	8.381E+1
4	91	56	0.7024154	1.349E−05	4.438E−2	1	4.004E+2
5	91	0	0.7024019	2.790E−06	4.606E−2	1	4.865E+3
6	91	0	0.7023992	3.688E−07	4.612E−2	7.466E−2	4.184E+3
7	96	5	0.7023988	1.131E−10	2.210E−4	1	1.423E+1
8	96	0	0.7023988	8.485E−10	2.111E−4	1	1.038E−1
13	96	0	0.7023988	8.882E−16	9.740E−8	1	5.894E−5

В табл. 2 сравнивается количество итераций поиска равномерного приближения с помощью псевдолинейного сплайна Дюшона при разных N. Опять же можно отметить, что при $q = 1$ сетка активных узлов стабилизируется на порядок быстрее, чем в других сравниваемых случаях, причем общее количество итераций до стабилизации энергии также на порядок меньше.

Таблица 2. Сравнение количества итераций стабилизации I_s и полного числа итераций I при $m = 1$

q	$N = 100$, $N_a = 96$		$N = 400$, $N_a = 376$		$N = 900$, $N_a = 822$	
	I_s	I	I_s	I	I_s	I
0	97	106	377	389	823	857
0.5	85	95	316	326	708	740
1	7	13	16	31	38	87

Равномерное приближение с помощью псевдоквадратичного сплайна Дюшона ($m = 2$) дает существенно иные результаты. Во-первых, количество активных узлов после стабилизации несколько меньше, чем в псевдолинейном случае: 75, 268, 552 при $N = 100$, 400, 900 соответственно. Во-вторых, на стабилизацию сетки активных узлов уходит существенно больше итераций 174 / 124 / 243 при $N = 100$; 2596 / 2807 / 3255 при $N = 400$ и 5786 / 6323 / 9345 при $N = 900$. Здесь косой чертой разделено число итераций при $q = 0$, 0.5, 1 соответственно.

В случае псевдокубического сплайна ($m = 3$) сходимость итераций еще ухудшается. Для стабилизации энергии уже не хватает 10 000 итераций и удалось выявить только 36, 14, 6 активных узлов при $N = 100$, 400, 900 соответственно.

Был также проведен расчет на реальных данных, заданных на нерегулярной сетке из 315 узлов. Значения вектора z в узлах сетки варьировались в диапазоне 55–90, а соответствующие им значения вектора ε — в диапазоне 0.005–0.205. Равномерное приближение с помощью псевдолинейного сплайна также дало хорошие результаты: 229 активных узлов было выявлено за 358, 339, 231 итераций при $q = 0$, 0.5, 1 соответственно, причем 121 узел был найден за 21 итерацию при $q = 1$. Сходимость приближения с помощью псевдоквадратического и псевдокубического сплайнов, как и в модельном случае, оказалась крайне медленной.

Заключение

Предложенная коррекция направления спуска показала свою эффективность при равномерном приближении псевдолинейным сплайном. В случае использования более гладких радиальных базисных функций вклад от коррекции пренебрежимо мал, поскольку сходимость алгоритма проекции градиента в этом случае существенно ниже, чем в псевдолинейном случае, и коррекция выполняется редко. Радиальные базисные функции, исследованные Дюшоном, близки к базисным функциям DMM-сплайнов, предложенным в [15] и доработанным в [16]. В определении последних r заменяется на $(r^2 + c^2)^{1/2}$, т. е. радиальная функция «подглаживается» в нуле. Представляет интерес исследовать эффективность алгоритма для DMM-сплайна, соответствующего псевдолинейному сплайну Дюшона.

Вообще говоря, при решении задачи (4) описанным в данной работе методом достаточно добиться стабилизации сетки активных узлов. После этого можно остальные узлы отбросить и решить задачу интерполяции на активной сетке, которая и будет решением задачи (4) на полной сетке в силу выполнения условий дополнительной нежесткости. Тем самым, задача будет решена за $O(N^3)+O(I_sN^2)+O(N_a^3)$ арифметических операций, где I_s — число итераций, требуемых для стабилизации множества активных узлов.

Алгоритм, исследуемый в данной работе, можно также использовать на «внутренних» итерациях алгоритма поиска подсетки активных узлов [7]. В этом алгоритме на каждой «большой» итерации решается задача (4) на подсетке, затем в подсетку добавляются узлы из полной сетки, в которых ограничения нарушаются сильнее всего, и из подсетки удаляются неактивные узлы. Тем самым, на каждой итерации система линейных уравнений (6) строится и декомпозируется заново, что означает не менее $O(N_k^3)$ операций на итерацию с N_k активных узлов при приближении сплайном многих переменных. Если в результате число узлов финальной активной сетки сравнимо с N, то итерирование по подсеткам может проиграть по числу операций двухшаговому процессу итерирования на полной сетке до стабилизации сетки активных узлов и решения одной задачи интерполяции на активной сетке.

Литература

1. **Лоран П.-Ж.** Аппроксимация и оптимизация. — М.: Мир, 1975.
2. **Reinsch C.H.** Smoothing by spline functions. II // Numer. Math. — 1971. — Vol. 16, № 5. — P. 451–454.
3. **Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A.** Variational Spline Theory. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1993. — (Bull. of the Novosibirsk Computing Center, Num. Anal.; Special issue 3); Variational Theory of Splines. — Kluwer: Academic/Plenum Publishers, 2001.
4. **Rozhenko A.I.** On optimal choice of spline-smoothing parameter // Bull. of Novosibirsk Computing Center. Series Num. Anal. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1996. — Iss. 7. — P. 79–86.
5. **Rozhenko A.I.** A new method for finding the optimal smoothing parameter for the abstract smoothing spline // J. Approx. Theory. — 2010. — Vol. 162, iss. 6. — P. 1117–1127. — (doi:10.1016/j.jat.2009.08.002).
6. **Мокшин П.В., Роженко А.И.** О поиске оптимального параметра сглаживающего сплайна // Сибирский журнал индустриальной математики. — 2015. — Т. XVIII, № 2(62). — С. 63–73.
7. **Василенко В.А., Зюзин М.В., Ковалков А.В.** Сплайн-функции и цифровые фильтры. — Новосибирск: Изд-во ВЦ СО АН СССР, 1984.
8. **Ковалков А.В.** Об одном алгоритме построения сплайнов с дискретными ограничениями типа неравенств // СЕРДИКА. Българско математическо списание. — 1983. — Т. 9, № 4. — С. 417–424.
9. **Игнатов М.И., Певный А.Б.** Натуральные сплайны многих переменных. — Л.: Наука, Ленингр. отд-ние, 1991.
10. **Роженко А.И.** Теория и алгоритмы вариационной сплайн-аппроксимации / Отв. ред. А.М. Мацокин. — Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2005.
11. **Базара М., Шетти К.** Нелинейное программирование. Теория и алгоритмы. — М.: Мир, 1976.
12. **Bezhaev A.Yu.** Reproducing mappings and vector spline-functions // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 2. — P. 91–109.
13. **Duchon J.** Splines minimizing rotation-invariant seminorms in Sobolev spaces // Lect. Notes Math. — 1977. — Vol. 571. — P. 85–100.
14. **Madych W.R., Nelson S.A.** Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions II // Mathematics of Computation. — 1990. — Vol. 54. — P. 211–230.
15. **Волков Ю.С., Мирошниченко В.Л.** Построение математической модели универсальной характеристики радиально-осевой гидротурбины // Сиб. журн. индустр. матем. — 1998. — Т. 1, № 1. — С. 77–88.
16. **Bogdanov V.V., Karsten W.V., Miroshnichenko V.L., and Volkov Yu.S.** Application of splines for determining the velocity characteristic of a medium from a vertical seismic survey // Central European J. Math. — 2013. — Vol. 11, № 4. — P. 779–786.

Поступила в редакцию 22 ноября 2015 г.,
в окончательном варианте 14 февраля 2016 г.

Литература в транслитерации

1. **Loran P.-Zh.** Approksimatsiya i optimizatsiya. — M.: Mir, 1975.
2. **Reinsch C.H.** Smoothing by spline functions. II // Numer. Math. — 1971. — Vol. 16, № 5. — P. 451–454.

3. **Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A.** Variational Spline Theory. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1993. — (Bull. of the Novosibirsk Computing Center, Num. Anal.; Special issue 3); Variational Theory of Splines. — Kluwer: Academic/Plenum Publishers, 2001.
4. **Rozhenko A.I.** On optimal choice of spline-smoothing parameter // Bull. of Novosibirsk Computing Center. Series Num. Anal. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1996. — Iss. 7. — P. 79–86.
5. **Rozhenko A.I.** A new method for finding the optimal smoothing parameter for the abstract smoothing spline // J. Approx. Theory. — 2010. — Vol. 162, iss. 6. — P. 1117–1127. — (doi:10.1016/j.jat.2009.08.002).
6. **Mokshin P.V., Rozhenko A.I.** O poiske optimal'nogo parametra sglazhivayushchego splayna // Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki. — 2015. — T. XVIII, № 2(62). — C. 63–73.
7. **Vasilenko V.A., Zyuzin M.V., Kovalkov A.V.** Splayn-funktsii i tsifrovye fil'try. — Novosibirsk: Izd-vo VTs SO AN SSSR, 1984.
8. **Kovalkov A.V.** Ob odnom algoritme postroeniya splaynov s diskretnymi ogranicheniyami tipa neravenstv // SERDIKA. B"lgarsko matematichesko spisanie. — 1983. — T. 9, № 4. — S. 417–424.
9. **Ignatov M.I., Pevnyy A.B.** Natural'nye splayny mnogikh peremennykh. — L.: Nauka, Leningr. otd-nie, 1991.
10. **Rozhenko A.I.** Teoriya i algoritmy variatsionnoy splayn-approksimatsii / Otv. red. A.M. Matsokin. — Novosibirsk: Izd-vo IVMiMG SO RAN, 2005.
11. **Bazara M., Shetti K.** Nelineynoe programmirovanie. Teoriya i algoritmy. — M.: Mir, 1976.
12. **Bezhaev A.Yu.** Reproducing mappings and vector spline-functions // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 2. — P. 91–109.
13. **Duchon J.** Splines minimizing rotation-invariant seminorms in Sobolev spaces // Lect. Notes Math. — 1977. — Vol. 571. — P. 85–100.
14. **Madych W.R., Nelson S.A.** Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions II // Mathematics of Computation. — 1990. — Vol. 54. — P. 211–230.
15. **Volkov Yu.S., Miroshnichenko V.L.** Postroenie matematicheskoy modeli universal'noy kharakteristiki radial'no-osevoy gidroturbiny // Sib. zhurn. industr. matem. — 1998. — T. 1, № 1. — S. 77–88.
16. **Bogdanov V.V., Karsten W.V., Miroshnichenko V.L., and Volkov Yu.S.** Application of splines for determining the velocity characteristic of a medium from a vertical seismic survey // Central European J. Math. — 2013. — Vol. 11, № 4. — P. 779–786.