Реализация алгоритма выбора параметра сглаживания с адаптивной регулировкой скорости сходимости

Студент: Павел Мокшин

Научный руководитель: А.И. Роженко

Сплайн-аппроксимация

- **Задача аппроксимации** – построение приближения неизвестной функции по некоторым известным значениях в узлах сетки
- **Сплайн-аппроксимация** – аппроксимация при помощи сплайнов
- **Кубический сплайн** – кусочно-кубическая функция, гладко подклеенная в узлах сетки
- **Интерполяционный сплайн** – точно проходит через заданные точки
- **Сглаживающий сплайн** – может несколько отклоняться от значений в узлах сетки

Постановка задачи сглаживания

- **Сглаживающий кубический сплайн**:

$$\sigma_\alpha = \operatorname*{argmin}_{x \in W_2^2} \left\{ \alpha \|x''\|^2_{L_2[a,b]} + \sum_{i=1}^{N} |x(t_i) - z_i|^2 \right\} \quad (1),$$

где $z = (z_1, \dots, z_N)$ - заданные значения на сетке,

- α > 0 – **параметр сглаживания**

- $\varphi(\alpha) \coloneqq \sqrt{\sum_{i=1}^{N} |\sigma_\alpha(t_i) - z_i|^2}$ – **невязка**

Общая постановка задачи сглаживания

- **Общая постановка**:

$$\sigma_\alpha = \operatorname*{argmin}_{x \in \mathbb{X}} \left\{ \alpha \|Tx\|_{\mathbb{Y}}^2 + \|Ax - z\|_{\mathbb{Z}}^2 \right\} \quad (2),$$

где $\mathbb{X}$, $\mathbb{Y}$, $\mathbb{Z}$ - вещественные гильбертовы пространства,

T: $\mathbb{X} \to \mathbb{Y}$ и A: $\mathbb{X} \to \mathbb{Z}$ - ограниченные линейные операторы,

z ∈ $\mathbb{Z}$ - заданный вектор и α > 0 – параметр сглаживания

- **Принцип невязки:**

$$\varphi(\alpha) \coloneqq \|A\sigma_\alpha - z\| = \varepsilon \quad (3)$$

Метод Ньютона

- Требует нескольких итераций
- Каждая итерация эквивалентна по сложности построению интерполяционного сплайна
- На каждой итерации производится сборка и декомпозиция матрицы $\sim O(n^3)$ и решение системы уравнений с двумя правыми частями $\sim O(n^2)$, где n – количество узлов сетки
- Если начальное приближение мало, то используется дробно-рациональное приближение

- Идея: на каждой итерации решать систему со многими правыми частями, но за счет этого получить меньшее количество итераций

Цели работы

- Доработка существующего алгоритма выбора параметра сглаживания, использующего разложение невязки в ряд
- Доработка модификации алгоритма, использующей несколько приближений невязки

Выполненные задачи

- Изучение теории сплайн-аппроксимации
- Реализация и доработка существующей версии алгоритма выбора параметра сглаживания
- Разработка и реализация модификации алгоритма выбора параметра сглаживания
- Встраивание данных алгоритмов в библиотеку SDM.NET

Асимптотическое разложение невязки

- **Оператор невязки**:

$$R_\alpha z \coloneqq z - A\sigma_\alpha \quad \varphi(\alpha) = \|R_\alpha z\|$$

- **Разложение в ряд:**

$$z - A\sigma_\alpha = z - \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\alpha_0 - \alpha}{\alpha_0}\right)^k R_{\alpha_0}^k A\sigma_{\alpha_0}$$

где $\alpha_0 > 0$, ряд сходится абсолютно на отрезке $[0, 2\alpha_0]$

Двустороннее приближение

- **Замена:** $\gamma := \frac{\alpha_0 - \alpha}{\alpha_0}, \quad R(\gamma) := R_\alpha$
- **Двустороннее приближение**:

$$R_n^-(\gamma) := (1-\gamma)\sum_{k=0}^{n-1} \gamma^k R_{\alpha_0}^{k+1}$$

$$R_n^+(\gamma) := R_{\alpha_0} - \sum_{k=1}^{n-1} \gamma^k R_{\alpha_0}^k (I - R_{\alpha_0})$$

Асимптотическое разложение невязки

- **Замена:** $\beta \coloneqq 1/\alpha$
- **Операторы:** $\hat{R}_\beta \coloneqq R_{1/\beta}, \quad Q_\beta \coloneqq I - R_{1/\beta}$
- **Разложение в ряд:**

$$z - A\sigma_{1/\beta} = \sum_{k=0}^{\infty} \left(\frac{\beta_0 - \beta}{\beta_0}\right)^k Q_{\beta_0}^k (z - A\sigma_{1/\beta_0})$$

где $\beta_0 > 0$, ряд сходится абсолютно на отрезке $[0, 2\beta_0]$

Двустороннее приближение

- **Замена:** $\delta := \frac{\beta_0 - \beta}{\beta_0}, \quad \hat{R}(\delta) := \hat{R}_\beta$
- **Двустороннее приближение:**

$$\hat{R}_n^-(\delta) := \sum_{k=0}^{n-1} \delta^k \, Q_{\beta_0}^k \left(I - Q_{\beta_0}\right)$$

$$\hat{R}_n^+(\delta) := I - (1 - \delta) \sum_{k=0}^{n-1} \delta^k \, Q_{\beta_0}^{k+1}$$

Алгоритмы выбора параметра сглаживания

Информация об алгоритме

- Это итерационный алгоритм
- Стартуем с некоторого начального приближения $\alpha_0 > 0$ и выполняем итерации до получения требуемой точности текущего приближения α_k
- Обозначим оптимальное значение параметра сглаживания как α^*
- Возможны два случая взаимного расположения α_k и α^*. В зависимости от этого, шаг алгоритма выполняется по-разному

Информация об алгоритме

- Данный алгоритм является доработанной версией алгоритма, разработанного Е.Д. Ивановой и А.И. Роженко
- Алгоритм был распространен на случай, когда $\alpha_0 > \alpha^*$. До этого был реализован только случай $\alpha_0 < \alpha^*$
- При доработке алгоритма при проведении численных экспериментов, выяснилось что случай $\alpha_0 > \alpha^*$ имеет некоторые особенности

Особенности случая $\alpha_0 > \alpha^*$

- Приближение при помощи $\left\|\hat{R}_n^{+}(\delta)z\right\|$ гораздо менее точное, чем $\left\|\hat{R}_n^{-}(\delta)z\right\|$
- На первом шаге лучше использовать дробно-рациональное приближение
- При последующих итерациях дробно-рациональное приближение уже менее эффективно, чем приближение при помощи $\left\|\hat{R}_n^{-}(\delta)z\right\|$

Сравнение R, $\hat{R}_n^+$ и $\hat{R}_n^-$

δ	$\|\hat{R}_n^-(\delta)z\|$	$\|\hat{R}(\delta)z\|$	$\|\hat{R}_n^+(\delta)z\|$
0.0	1.921E-4	1.921E-4	1.921E-4
0.1	2.080E-4	2.081E-4	2.182E-3
0.2	2.264E-4	2.274E-4	1.735E-3
0.3	2.474E-4	2.514E-4	5.857E-2
0.4	2.710E-4	2.820E-4	0.138
0.5	2.973E-4	3.227E-4	0.271
0.6	3.263E-4	3.800E-4	0.468
0.7	**3.579E-4**	**4.681E-4**	**0.744**
0.8	**3.922E-4**	**6.265E-4**	**1.110**
0.9	**4.293E-4**	**1.029E-3**	**1.581**
0.99	**4.690E-4**	**5.617E-3**	**2.104**

$||z|| = 2.1691$

Особенности алгоритма

- Порядок сходимости равен количеству используемых невязок n
- На каждой итерации вычисляются все невязки до n -й включительно
- Но используется информация лишь о самом точном приближении невязки – n-м члене, а хотелось бы использовать информацию о нескольких приближениях невязки

Модификация метода

- Идея – использовать несколько приближений невязки, а не только самое точное, чтобы получать более точное приближение на каждой итерации

- Трудоемкость итерации практически не возрастает, но ожидается более высокая скорость сходимости

Модификация метода

- **Используемые приближения:**

$$R_n^-(\gamma)z := (1-\gamma)\sum_{k=0}^{n-1}\gamma^k\, R_{\alpha_0}^k\big(R_{\alpha_0}z\big), \qquad \hat{R}_n^-(\delta)z := \sum_{k=0}^{n-1}\delta^k\, Q_{\beta_0}^k(R_{\alpha_0}z)$$

- **Приведение приближений к единому виду:**

Для $R_n^-(\gamma)z$: $P \coloneqq R_{\alpha_0}$, $\mathrm{t} \coloneqq \gamma$, $y \coloneqq (1-\gamma)R_{\alpha_0}z$

Для $\hat{R}_n^-(\delta)z$: $P \coloneqq Q_{\beta_0}$, $\mathrm{t} \coloneqq \delta$, $y \coloneqq R_{\alpha_0}z$

- **Единый вид**:

$$S_n = \left\|\sum_{k=0}^{n-1} t^k P^k y\right\|, \qquad S = \left\|\sum_{k=0}^{\infty} t^k P^k\, y\right\|$$

Модификация метода

- Предположим, что

$$S_n \approx S - cq^n, \quad \text{где } q = t\,\frac{\|P^{n-1}y\|}{\|P^{n-2}y\|}$$

- Тогда через два приближения можно получить следующую формулу для уточнения:

$$S \approx \frac{S_n - qS_{n-1}}{1-q} \quad (4)$$

- Схема алгоритма остается прежней, но на каждой итерации производится уточнение по формуле (4)

Численные эксперименты

Численные эксперименты

- **Тестируемая функция:**

$$F(x, y) = \sin x + \exp(-(x - 0.5)^2 - (y - 0.5)^2) + \cos y$$

- Нерегулярная сетка из N узлов в области [0, 1] x [0, 1]
- Приближение строилось при помощи псевдокубического сплайна Дюшона:

$$\sigma(x, y) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i \left((x - x_i)^2 + (y - y_i)^2\right)^{\frac{3}{2}} + a + bx + cy$$

Численные эксперименты

- Взвешенное уравнение невязки:

$$\tilde{\varphi}(\alpha) := \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^{N} \left(\sigma_\alpha\left(t^{(i)}\right) - z_i\right)^2 \right)^{1/2} = \varepsilon$$

- Относительная погрешность:

$$e_k = (\tilde{\varphi}(\alpha_k) - \varepsilon)/\varepsilon$$

- Критерий остановки алгоритма:

$$|e_k| \leq 10^{-6}$$

- Условные обозначения алгоритмов:
  - n – алгоритм без уточнения, использующий n невязок,
  - n+ – модифицированный алгоритм с уточнением, использующий n невязок

Результаты расчетов при $\alpha_0 = 1, \varepsilon = 0.001$

Номер итерации	Метод Ньютона	2	2+	5+	10
		$N = 100$			
1	7.15E-01	8.21E-01	7.03E-01	3.90E-01	4.99E-01
2	4.53E-02	6.68E-02	2.90E-02	-3.36E-05	8.31E-06
3	3.93E-04	1.14E-03	6.68E-05	-7.43E-15	8.21E-15
4	3.16E-08	3.84E-07	3.53E-10		
		$N = 900$			
1	3.89E-01	4.06E-01	3.26E-01	6.28E-02	8.08E-02
2	1.92E-02	2.64E-02	8.26E-03	-1.88E-08	4.40E-12
3	7.98E-05	2.08E-04	5.88E-06		
4	1.42E-09	1.36E-08	2.98E-12		

Результаты расчетов при $\alpha_0 = 0.001, \varepsilon = 0.001$

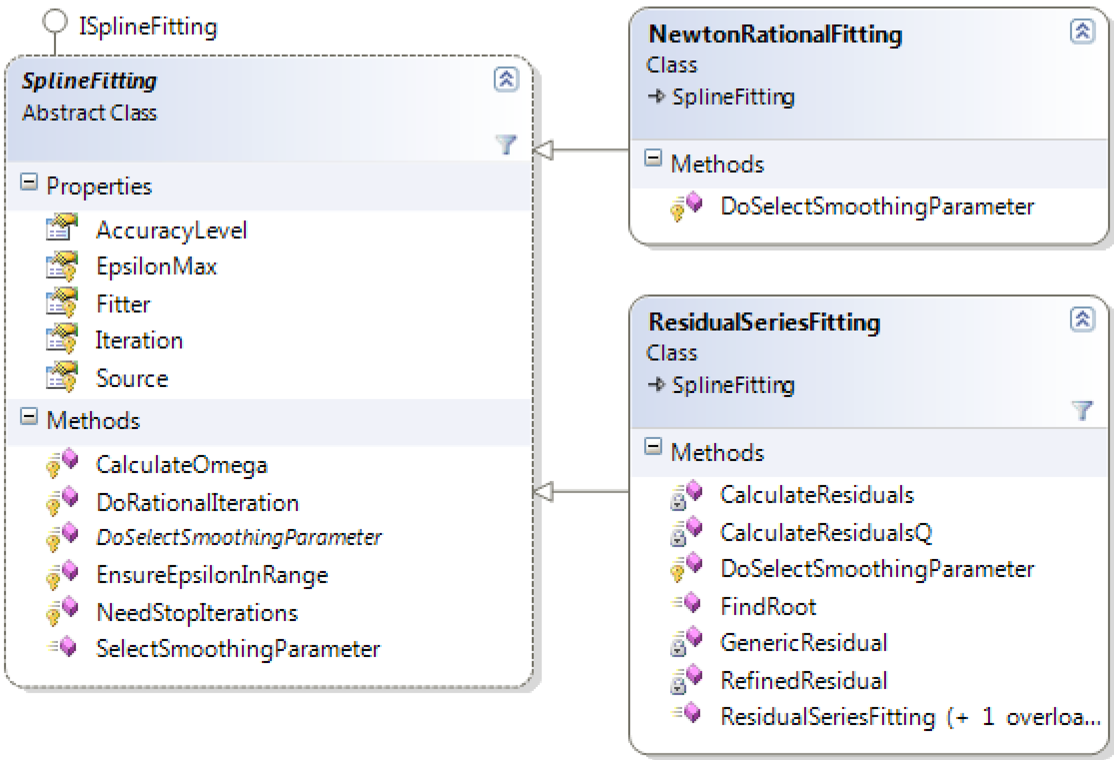
Номер итерации	Метод Ньютона	2	2+	5+	10
			$N = 100$		
2	-1.19E-02	1.40E-01	9.32E-03	-3.67E-05	3.52E-06
3	-2.59E-05	4.45E-03	6.88E-06	-6.88E-15	-1.33E-15
4	-1.21E-10	5.74E-06	3.75E-12		
5		9.62E-12			
			$N = 900$		
2	-6.70E-02	1.58E00	1.54E-01	6.33E-04	5.73E-03
3	-8.18E-04	1.44E-01	2.02E-03	-6.66E-16	2.22E-16
4	-1.18E-07	4.93E-03	3.51E-07		
5		7.58E-06			
6		1.81E-11			

Тестирование на случайных значениях

- Проводилось на той же сетке, что в предыдущем тесте
- Вместо функции использовались случайные значения из интервала (0, 1)
- Цель эксперимента – не сгладить некоторую функцию, а проверить работу алгоритма на плохом случае
- Набор алгоритмов и критерий остановки – те же самые, что в предыдущем тесте
- Результаты тестирования дали те же самые выводы, что и для предыдущего эксперимента

Программная реализация

Диаграмма классов



ISplineFitting – интерфейс для алгоритмов выбора параметра сглаживания

SplineFitting – абстрактный класс, реализующий общую логику

NewtonRationalFitting – метод Ньютона

ResidualSeriesFitting – алгоритмы, основанные на разложении невязки в ряд (без уточнения и с уточнением)

Результаты работы

- Доработан существующий алгоритм выбора параметра сглаживания, основанный на разложении невязки в ряд и использующий только самое точное приближение невязки: алгоритм работает и для случая когда $\alpha_0 < \alpha^*$
- Доработана модификация алгоритма, использующая несколько вычисленных приближений невязки
- Проведены численные расчеты, показавшие что модифицированный алгоритм сходится за меньшее количество итераций при достаточном количестве невязок
- Разработанные алгоритмы включены в библиотеку SDM

Спасибо за внимание