КОМП'ЮТЕРНІ ЗАСОБИ, МЕРЕЖІ ТА СИСТЕМИ

A. Kalenchuk-Porkhanova, L. Vakal

FUNCTION APPROXIMATIONS PACKAGE

It is proposed a package developed in the Institute of cybernetics for function approximations by different methods. A description of bundled software for best uniform approximations is given. A review and comparison characteristics of analogous software are given.

Пропонується пакет програм апроксимації функцій за різними способами наближення, розроблений в Інституті кібернетики імені В.М. Глушкова. Надається опис програмного комплексу найкращої рівномірної апроксимації як складової пакета. Наводиться огляд та порівняльні характеристики аналогічних програмних засобів.

Предлагается разработанный в Институте кибернетики имени В.М. Глушкова пакет программ аппроксимации функций различными способами приближения. Приводится описание программного комплекса наилучшей равномерной аппроксимации как составляющей этого пакета. Даётся обзор и сравнительные характеристики аналогичных программных средств.

УДК 004.428.4:519.651

А.А. КАЛЕНЧУК-ПОРХАНОВА, Л.П. ВАКАЛ

ПАКЕТ ПРОГРАММ АППРОКСИМАЦИИ ФУНКЦИЙ

Введение. Получаемые в результате проведения экспериментов данные являются, как правило, дискретным представлением функциональных зависимостей, характеризующих изучаемые объекты и процессы. Такая форма представления зависимостей существенно затрудняет их использование в задачах математического моделирования и др. Необходимость и принципиальная важность аналитического представления экспериментальных данных, особенно для обеспечения высокой точности такого представления, определяют особую актуальность разработки соответствующих методов, алгоритмов и программных средств его получения.

Для решения указанных проблем используются различные способы приближения (аппроксимации), такие как интерполяционный, среднеквадратический и равномерный. Главным преимуществом равномерного (чебышевского) способа приближения по сравнению с интерполяционным и среднеквадратическим является обеспечение желаемой *гарантированной точности* замены экспериментальных данных аналитическим выражением на всем интервале их задания.

Для решения задач аппроксимации известен ряд универсальных пакетов программ, таких как Mathcad, Maple, MATLAB, Mathematica и др. Все они, как правило, выполняют полиномиальную, рациональную и сплайн-интерполяцию, а также среднеквадратическую аппроксимацию, в частности, приближение по методу наименьших квадратов. Ни один из перечисленных универсальных пакетов не позволяет найти приближение *дискретно заданных* функций в равномерной метрике. Для *аналитически заданных* функций находятся равномерные приближения полиномами, дробно-рациональными выражениями и рациональными сплайнами в пакетах Maple (мини-пакеты numapprox и ratappr) и Mathematica (приложение NumericalMath) [1–3].

Равномерные приближения дискретно заданных функций выполняются в некоторых специализированных библиотеках и пакетах программ. Например, библиотека MATHLIB Международного института ядерной физики (ЦЕРН) в Дубне позволяет находить наилучшие равномерные приближения обобщенными многочленами по системе базисных функций. Однако при её использовании необходимо провести предварительные вычисления по формированию матрицы значений базисных функций [4]. В представленной Университетом Теннесси (США) библиотеке NETLIB для функций, заданных на сетке, имеется возможность получения равномерных приближений только дробно-рациональными выражениями. Кроме того, использование программ требует выполнения большого объёма подготовительной работы [5]. Библиотека численного анализа НИВЦ МГУ (Россия) предоставляет возможность получать наилучшие равномерные приближения дискретно заданных функций алгебраическими полиномами с помощью итерационного R-алгоритма Малозёмова [6]. Недостатком этого алгоритма является то, что для его работы пользователю необходимо дополнительно задавать начальное приближение [7]. Разработанный в ЦММ ИППММ НАН Украины (Львов) пакет программ даёт возможность получать равномерные приближения различными аналитическими зависимостями [8]. Авторы применяют подход с использованием метода Ремеза [9] в упрощенном варианте, что не позволяет оптимизировать алгоритмы и программы по точности и быстродействию. Кроме этого, накладываются ограничения на степени аппроксимантов и на типы весовых функций.

Пакет, созданный в Институте кибернетики (ИК) им. В.М. Глушкова НАН Украины, не только не имеет недостатков перечисленных пакетов и библиотек, но и обладает рядом существенных преимуществ, о которых речь пойдёт далее.

Общая характеристика пакета аппроксимации ИК. Пакет разработан как приложение системы программирования Delphi. Среда Delphi американской компании Borland – одна из ведущих систем программирования, используемых для разработки современных программных продуктов, которые могут работать в среде Windows или Linux.

При создании этого пакета одними из основных требований к программам были их надёжность и дружественность по отношению к пользователю. Надёжность подразумевает то, что программы контролируют исходные данные, проверяют возможность выполнения операций, которые по какой-либо причине могут быть не выполнены, например, операций с файлами. Дружественность предполагает хорошо спроектированные диалоговые окна, наличие справочной системы и предсказуемость поведения программ.

В состав пакета входят программные комплексы для получения равномерного, интерполяционного и среднеквадратического приближения функций. В пакет включены также программные средства, которые позволят дополнительно повысить точность приближений:

– программа определения наиболее подходящего функционального вида аппроксиманта с двумя и тремя параметрами [11];

– программа коррекции путём обнаружения, локализации и исправления возможного ошибочного значения экспериментальных данных [12].

На рис. 1 показан вид диалогового окна работы с программой коррекции.

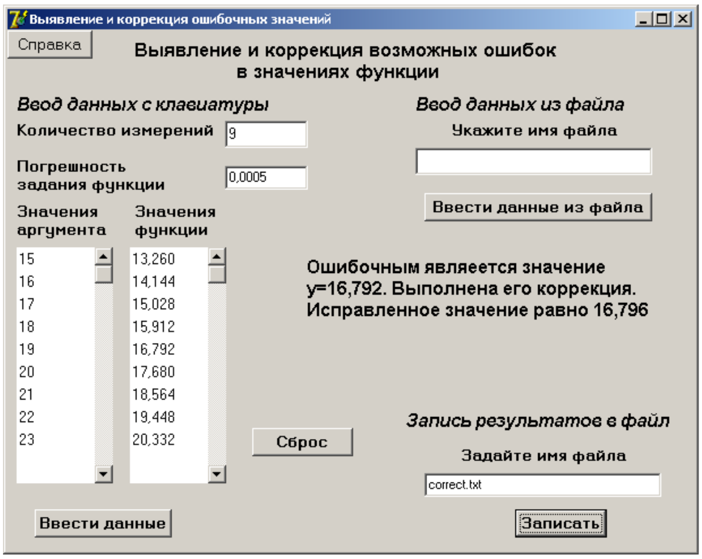

РИС. 1. Вид диалогового окна при работе с программой коррекции

В данной статье приводится подробное описание только программного комплекса наилучшей равномерной аппроксимации.

Программный комплекс наилучшей равномерной аппроксимации функций. Этот комплекс обладает рядом важных преимуществ способа равномерной аппроксимации, а именно: обеспечивается получение наилучшего равномерного аппроксиманта как аналитически, так и дискретно заданных функций одной и многих переменных с использованием аппроксимантов различных классов с произвольным весом $w(x)$. Повышение эффективности данного комплекса достигается благодаря оптимизации алгоритмов и программ по точности и быстродействию [10], что делает его предпочтительнее всех перечисленных во введении пакетов и библиотек программ.

Для функции $f(x)$ наилучшим равномерным приближением с весом $w(x) \neq 0$ на множестве точек S ($S = [\alpha, \beta]$ или $S = \{x_1, x_2, \ldots, x_N\} \subset [\alpha, \beta]$, $N > n$) называется такой аппроксимант $F^*(x; A)$ из заданного класса функций

$\{F(x;A)\}$, $A=(a_0,a_1,\ldots,a_n)$, для которого выполняется условие

$$\max_{x\in S}\left|w(x)\left[f(x)-F^*(x;A)\right]\right| \equiv \rho = \min_{A}\max_{x\in S}\left|w(x)\left[f(x)-F(x;A)\right]\right| .$$

Величина ρ называется величиной наилучшего взвешенного равномерного приближения. При $w(x) = 1$ имеем наилучшее абсолютное приближение, а при $w(x) = 1 / f(x)$ – наилучшее относительное приближение.

Для функции одной переменной находятся наилучшие равномерные приближения с соответствующими весами $w(x)$ набором таких аппроксимантов:

1) алгебраический полином $P_n(x)=\sum_{i=0}^{n} a_i x^i$ с произвольным весом $w(x) \neq 0$;

2) сумма многочленов Чебышева $P_n(x)=\sum_{i=0}^{n} a_i T_i(x)$, $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$ с произвольным весом $w(x) \neq 0$;

3) обобщенный многочлен $Q_n(x)=\sum_{i=0}^{n} a_i \varphi_i(x)$ по системе линейно независимых функций $\{\varphi_0(x),\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)\}$ с весом $w(x) = 1$;

4) дробно-рациональное выражение $R_{mk}(x)=\sum_{i=0}^{m} a_i x^i \Big/ \sum_{j=0}^{k} b_j x^j$ с весом $w(x) = 1$;

5) логарифмическое выражение $\ln\left(a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n\right)$ с весом $w(x) = 1$;

6) экспоненциальное выражение $a_0 \exp\left(a_1 x + \ldots + a_n x^n\right)$ с весом $w(x) = 1 / f(x)$;

7) корень целой степени из полинома $\sqrt[l]{a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n}$ с весом $w(x) = 1 / f(x)$;

8) кусочно-полиномиальная функция.

Для функции $f(X)$ k переменных, $X = \{x_1, x_2, \ldots, x_k\}$, находятся наилучшие абсолютные аппроксиманты таких видов:

– полином двух переменных $P_n(x_1, x_2) = \sum_{0\le i+j\le n} a_{ij} x_1^i x_2^j$;

– полином трёх переменных $P_n(x_1, x_2, x_3) = \sum_{0\le i+j+k\le n} a_{ijk} x_1^i x_2^j x_3^k$;

– обобщенный многочлен $F_n(X;A)=\sum_{i=1}^{n} a_i \varphi_i(X)$ по системе базисных функций $\varphi_1(x),\ldots,\varphi_n(x)$.

Выбор аппроксиманта осуществляется в диалоговом окне (рис. 2).

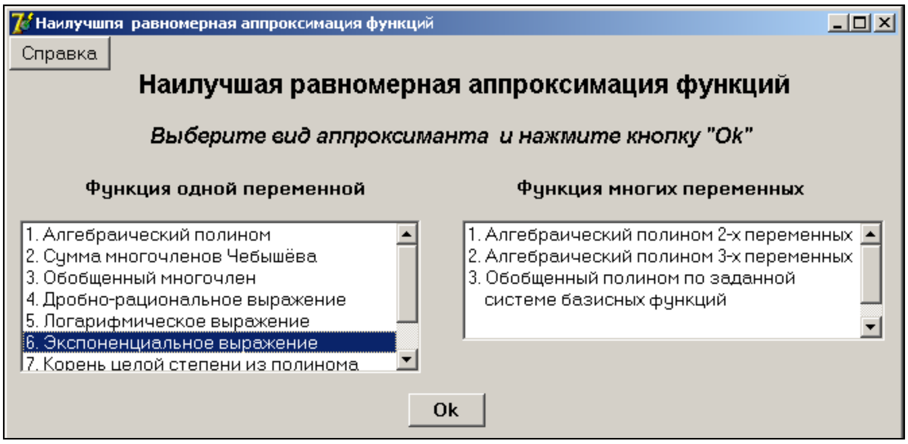

РИС. 2. Вид диалогового окна для выбора аппроксиманта

Для случая полиномиальной аппроксимации реализованы два алгоритма получения аппроксимантов № 1 и № 2 [13]. Эти алгоритмы основаны на методе последовательных чебышевских интерполяций (п.ч.и.) Ремеза [9]. Анализ полных погрешностей алгоритмов позволил сделать вывод, что преимущества алгоритма № 2 становятся ощутимыми для степеней $n>10$, для $n\le 10$ оба алгоритма равносильны по точности [10].

Для случая № 3 аппроксимант находится как частный случай наилучшего равномерного приближения функций многих переменных.

В случае № 4 сходимость чебышевских интерполяций в отличие от полиномиальной аппроксимации теоретически доказана только при условии близости начального приближения к наилучшему аппроксиманту. Поэтому для практического построения дробно-рациональных приближений применяется подход, объединяющий преимущества метода п.ч.и. и метода Вернера [14], а именно – высокую скорость сходимости одного и сходимость с произвольного начального приближения другого. Этот подход был реализован в комбинированном алгоритме [13], идея которого состоит в том, что для получения аппроксиманта в начале применяется метод п.ч.и. Ремеза до нарушения его сходимости. В случае нарушения сходимости в работу вступает алгоритм Вернера для получения нового начального приближения для обеспечения сходимости алгоритма Ремеза.

В случаях № 5–7 на основе обменных теорем [15] нахождение аппроксимантов может быть сведено к отысканию полиномиальных приближений для соответствующих весов и вспомогательных функций. Например, для случая № 5 приближение сводится к наилучшей относительной аппроксимации полиномом для функции $\exp\left(f\left(x\right)\right)$; для случая № 6 – к наилучшему абсолютному полиномиальному приближению для функции $\ln\left|f\left(x\right)\right|$; для случая № 7 – к наилучшей относительной аппроксимации полиномом для функции $\left[f(x)\right]^{l}$ [16].

В случае № 8 весь промежуток приближения делится узлами разбиения на несколько сегментов, и функция приближается на каждом из них полиномом. Соответствующий алгоритм состоит из двух этапов [17]. На первом этапе определяется минимальное число узлов разбиения, необходимое для приближения с заданной погрешностью, а на втором – определяются оптимальные узлы и соответствующее кусочно-полиномиальное приближение. При этом используемая в алгоритме процедура определения узлов разбиения является более эффективной, чем процедура половинного деления промежутка приближения.

В случае приближения функции многих переменных для всех видов приведенных аппроксимантов и в случае приближения функции одной переменной аппроксимантом № 3 применяется алгоритм, который заключается в том, что задача наилучшего равномерного приближения сводится к задаче линейного программирования с ведущей двойственной максимум–задачей. Данный алгоритм по сравнению с аналогичными позволяет находить наилучшие равномерные приближения с меньшей погрешностью и, как правило, за значительно меньшее количество итераций [18].

Оптимизация алгоритмов и программ описываемого комплекса достигается, прежде всего за счет того, что в используемом методе п.ч.и. Ремеза на каждом шаге реализуется на практике оптимальный вариант замены точек, на которых осуществляются чебышевские интерполяции. Это обеспечивает квадратичную скорость сходимости всего итерационного процесса и позволяет получать результат за 2–3 итерации. При этом на каждом шаге чебышевских интерполяций учитывается как *верхняя*, так и *нижняя границы* величины наилучшего приближения ρ, что позволяет получать более точную оценку погрешности алгоритма. Кроме того, для разработанного комплекса проведен анализ *всех видов погрешностей*: постановки задачи, неустранимой и вычислительной. Получены как априорные, так и апостериорные оценки полной погрешности, нахождение которых включено в вычислительные схемы алгоритмов и программ.

Заключение. Входящий в состав пакета ИК комплекс программ наилучшей равномерной аппроксимации широко использовался на практике, что позволило убедиться в его высокой эффективности [19]. В настоящее время этот комплекс включён в состав программного обеспечения суперкомпьютера с кластерной архитектурой (СКИТ). В дальнейшем планируется внедрение в СКИТ программных комплексов интерполяционного и среднеквадратического приближений.

1. *Говорухин В., Цибулин Б.* Компьютер в математическом исследовании: Maple, MATLAB, LaTeX. – СПб.: Питер, 2001. – 619 с.
2. *Попов Б.О.* Використання комп'ютерної алгебри при побудові алгоритмів апроксимації // Математичні машини і системи. – 1999. – № 1. – С. 16–29.
3. *Function* Approximations Package. – http://reference.wolfram.com/mathematica/FunctionApproximations/guide/FunctionApproximationsPackage.html.
4. *Solution* of Overdetermined Linear System in the Chebychev Norm. – http://wwwasdoc.web.cern.ch/wwwasdoc/shortwrupsdir/e222/top.html.
5. *Netlib*. Class K2. Minimax (L-infinity) approximation. – http://gams.nist.gov/serve.cgi/Class/K2.

6. Аппроксимация рациональными функциями (равномерная). – http://www.srcc.msu.su/num_anal/lib_na/cat/cat922.htm.
7. *Вопросы* теории и элементы программного обеспечения минимаксных задач. – Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1977. – 192 с.
8. *Малачівський П.С., Монцібович Б.Р.* Програмне забезпечення задач рівномірної апроксимації дослідних даних // Математические методы в компьютерных системах. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 1996. – С. 38–43.
9. *Ремез Е.Я.* Основы численных методов чебышевского приближения. – Киев: Наук. думка, 1969. – 623 с.
10. *Каленчук-Порханова А.А.* Алгоритмы и анализ погрешности наилучшей чебышевской аппроксимации одной переменной // Теория приближения функций: Тр. Междунар. конф. по теории приближения функций, Калуга, 1975. – М., 1977. – С. 213–218.
11. *Вакал Л.П.* Про один підхід до автоматизації процесу вибору типу емпіричної формули // Интеллектуальные информационно-аналитические системы и комплексы. – Киев: Ин-т кибернетики им. В.М. Глушкова НАН Украины, 2000. – С. 53–62.
12. *Каленчук-Порханова А.О., Вакал Л.П.* Підвищення точності алгоритмів чебишовського наближення // Журнал обчисл. та прикл. математики. – 2004. – № 2 (91) – С. 93.
13. *Каленчук-Порханова А.А.* Аппроксимация функций одной и многих переменных // Численные методы для многопроцессорного вычислительного комплекса ЕС. – М.: Изд-во ВВИА им. Н.Е. Жуковского, 1987. – С. 366–395.
14. *Werner H.* Tschebysceff Approximation im Berich der Rationalen Funktionen bei Verliegen einer Guten Ausgansnäherung // Arch. Rat. Mech. Anal. – 1962. – 10, N 3. – P. 205–219.
15. *Попов Б.А.* Равномерное приближение сплайнами. – Киев: Наук. думка, 1989. – 272 с.
16. *Каленчук-Порханова А.О., Вакал Л.П.* Відтворення функціональних залежностей на основі нелінійних наближень деяких видів // Abstracts of International Conf. “Problems of decision making under uncertainties,” May 21–25, 2007. – Chernivtsi, Ukraine, 2007. – P. 135–137.
17. *Вакал Л.П.* Рівномірне кусково-поліноміальне наближення // Комп’ютерні засоби, мережі і системи. – 2006. – № 5. – С. 53–59.
18. *Каленчук-Порханова А.О., Вакал Л.П.* Побудова найкращих рівномірних наближень функцій багатьох змінних // Комп’ютерні засоби, мережі та системи. – 2007. – № 6. – С. 141–148.
19. *Вакал Л.П., Каленчук-Порханова А.О.* Аналітична обробка даних на основі чебишовської апроксимації // Математичні машини і системи. – 2006. – № 2. – С. 15–24.

Получено 09.07.2008