МЕТОДЫ СПЛАЙН-ФУНКЦИЙ
(Вычислительные системы)
1981 год Выпуск 87

УДК 519.651

О ГРАНИЧНЫХ УСЛОВИЯХ В ЗАДАЧЕ СГЛАЖИВАНИЯ КУБИЧЕСКИМИ СПЛАЙНАМИ

Н.Н. Павлов

Задача построения сглаживающего сплайна замыкается заданием граничных условий, причем поведение сплайна существенно зависит от выбора этих условий. Ввиду того что в большинстве случаев граничные условия неизвестны (обычно в практических задачах задается последовательность точек, вблизи которых должен пройти сглаживающий сплайн и величины допустимых отклонений, но почти никогда - касательные на концах), прибегают к тем или иным способам их задания. Применение известных методов далеко не всегда приводит к удовлетворительным результатам. Так, задание граничных условий, при которых отсутствуют разрывы третьей производной во втором и предпоследнем узлах сплайна, часто ведет к тому, что характер изменения второй производной сплайна в окрестностях этих узлов становится неплавным.

Задание так называемых "естественных" граничных условий, при которых вторые производные сплайна на концах полагаются равными нулю, правомерно лишь в тех случаях, когда известно, что вторые производные приближаемой функции на концах интервала ее задания близки к нулю.

В настоящей статье описывается один способ определения граничных условий в задаче сглаживания кубическими сплайнами, применение которого позволяет строить сглаживающие сплайны с плавным изменением дифференциальных характеристик высокого порядка.

Рассмотрим вначале задачу построения кубического сплайна $\sigma(x) \in C^2[a,b]$ на сетке Δ: $a = x_1 < \ldots < x_N = b$ такого, что $\sigma(x_i) = Y_i$, $i = 1,\ldots,N$, где $\{Y_i\}$ - набор из N вещественных чисел.

Граничные условия возьмем в виде $\sigma'(a) = t_a$, $\sigma'(b) = t_b$, где t_a и t_b – некоторые числа.

Известно [I], что сформулированная задача разрешима для любых t_a и t_b. Таким образом, возникает двупараметрическое семейство сплайн-функций $\{\sigma(x; t_a, t_b)\}$. Варьируя t_a и t_b, можно получать сплайны с самыми различными свойствами, например, чтобы искомый сплайн доставлял минимум функционалу

$$\Phi = \int_a^b (\sigma''')^2 dx \tag{I}$$

или

$$\Phi = \sum_{i=1}^{N} [\sigma''']_i^2 , \tag{2}$$

здесь символ $[\dots]_i$ означает величину разрыва функции в точке x_i.

Обращаясь к механической аналогии сплайна [2], можно сказать, что случай (2) будет соответствовать такому положению рейки, при котором сумма квадратов реакций опор будет минимальной.

Все дальнейшие рассуждения будем проводить для функционала вида (I). Они сохраняют силу и для функционала (2).

Покажем, что сплайн с указанным свойством существует и единствен. Запишем выражение для него в терминах фундаментальных сплайнов

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^{N} F_i(x) Y_i + F_a(x) t_a + F_b(x) t_b ,$$

где F_i, F_a, F_b – базисные функции со следующими свойствами:

$$F_i(x_L) = \delta_i^L, \quad F_i'(a) = F_i'(b) = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

$$F_a(x_L) = F_b(x_L) = 0, \quad L = 1, \dots, N,$$

$$F_a'(a) = 1, \quad F_b'(b) = 1, \quad F_a'(b) = F_b'(a) = 0.$$

Подставив это представление в функционал Φ и записав необходимые условия его минимума по переменным t_a и t_b, получаем линейную систему относительно t_a и t_b :

$$\left.\begin{aligned} t_a \sum_{i=1}^{N-1} (B_i^a)^2 + t_b \sum_{i=1}^{N-1} B_i^a B_i^b &= \sum_{i=1}^{N} Y_i \sum_{j=1}^{N-1} B_j^i B_j^a , \\ t_a \sum_{i=1}^{N-1} B_i^a B_i^b + t_b \sum_{i=1}^{N-1} (B_i^b)^2 &= \sum_{i=1}^{N} Y_i \sum_{j=1}^{N-1} B_j^i B_j^b , \end{aligned}\right\} \qquad (3)$$

где

$$B_i^{\xi} = (F_{\xi}''(x_{i+1}) - F_{\xi}''(x_i))/\sqrt{h_i} , \ \xi = a,b.$$

Покажем, что определитель D системы (3) всегда больше нуля. Введем обозначения $\vec{a} = (B_1^a,\ldots,B_{N-1}^a)$, $\vec{b} = (B_1^b,\ldots,B_{N-1}^b)$. Согласно неравенству Коши-Шварца, $D = \vec{a}^2\,\vec{b}^2 - (\vec{a}\cdot\vec{b})^2 \geq 0$. Как известно, в этом неравенстве равенство реализуется тогда и только тогда, когда векторы $\vec{a}$ и $\vec{b}$ линейно-зависимы. Предположим, что это так, тогда $\vec{b} = \lambda\cdot\vec{a}$. Обозначим $M_j^{\xi} = |F_{\xi}''(x_j)|$. Как следует из леммы I в [3], для этих величин имеют место следующие соотношения:

$$M_{j+1}^a < \frac{1}{2} M_j^a, \quad \frac{1}{2} M_{j+1}^b > M_j^b, \quad F_{\xi}''(x_j)\cdot F_{\xi}''(x_{j+1}) < 0, \qquad (4)$$

$$j = 1,\ldots,N-1.$$

Имеем $b_j = \lambda a_j$ или $(M_{j+1}^b + M_j^b)/\sqrt{h_j} = |\lambda|(M_{j+1}^a + M_j^a)/\sqrt{h_j}$, но, в силу (4), $|\lambda| = (M_j^b + M_{j+1}^b)/(M_j^a + M_{j+1}^a) < M_{j+1}^b/M_{j+1}^a$.

Из $b_{j+1} = \lambda a_{j+1}$ имеем

$$|\lambda| = (M_{j+1}^b + M_{j+2}^b)/(M_{j+1}^a + M_{j+2}^a) > M_{j+1}^b/M_{j+1}^a ,$$

что ведет к противоречию. Итак, система (3) имеет единственное решение, представимое в виде

$$t_{\xi} = \sum_{i=1}^{N} a_i^{\xi} Y_i , \quad \xi = a,b, \qquad (5)$$

где

$$a_i^a = \Big(\sum_{j=1}^{N-1} B_j^i \big(B_j^a \sum_{j=1}^{N-1} (B_j^b)^2 - B_j^b \sum_{j=1}^{N-1} B_j^a B_j^b\big)\Big)/D ,$$

$$a_i^b = \Big(\sum_{j=1}^{N-1} B_j^i \big(B_j^b \sum_{j=1}^{N-1} (B_j^a)^2 - B_j^a \sum_{j=1}^{N-1} B_j^a B_j^b\big)\Big)/D .$$

Таким образом, минимум функционала (I) достигается на сплайне с граничными условиями (5), и такой сплайн единствен.

Перейдем к рассмотрению задачи сглаживания, которая формулируется следующим образом. Пусть имеются два набора чисел: $\{Y_i^0\}$,

$\{\varepsilon_i\}$, $\varepsilon_i \geq 0$, $i = 1,\ldots,N$. Необходимо найти функцию $f(x) \in W_2^2[a,b]$, минимизирующую функционал $I(f) = \int_a^b (f'')^2 dx$, удовлетворяющую условиям $|f(x_i) - Y_i^0| \leq \varepsilon_i$, $i = 1,\ldots,N$, и одному из трех типов граничных условий:

а) $f''(a) = f''(b) = 0$;

б) $f'(a) = t_a$, $f'(b) = t_b$;

в) $f^{(p)}(a) = f^{(p)}(b)$, $p = 0,1,2$.

Как показано в [4], решением такой задачи является кубический сплайн.

Граничные условия типа "а" и "в" могут быть использованы соответственно в тех случаях, когда известно, что у аппроксимируемой функции вторая производная обращается в нуль на концах интервала задания или что функция периодична.

В дальнейшем нас будет интересовать случай "б". Величины t_a и t_b будем определять по формулам (5), но в отличие от задачи интерполяции, рассмотренной выше, где Y_i, $i=1,\ldots,N$, были постоянными, в задаче сглаживания они варьируются.

Пусть H - множество сплайнов, для которых

а) $|S(x_i) - Y_i^0| \leq \varepsilon_i$, $i = 1,\ldots,N$;

б) граничные условия определяются формулами (5).

Справедлива следующая

ТЕОРЕМА I. Задача отыскания минимума функционала $I(S) = \int_a^b (S'')^2 dx$ на множестве H имеет единственное решение, если H не содержит ни одной прямой.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $\sigma \in H$ и такое, что для любого $\tilde{\sigma} \in H$ имеет место $I(\sigma) \leq I(\tilde{\sigma})$. Требуется доказать, что это неравенство строгое. Предположим противнсе: пусть $\tilde{\sigma} \in H$ и $I(\tilde{\sigma}) = I(\sigma)$.

В силу выпуклости H (это нетрудно показать) элемент $\sigma^* = \frac{1}{2}(\sigma + \tilde{\sigma})$ принадлежит H. Имеем

$$I(\sigma^*) = \frac{1}{4}\int_a^b ((\tilde{\sigma}'')^2 + 2\tilde{\sigma}''\sigma'' + (\sigma'')^2)dx \leq \frac{1}{2}\int_a^b ((\tilde{\sigma}'')^2 + (\sigma'')^2)dx,$$

причем равенство реализуется тогда и только тогда, когда $\tilde{\sigma}'' = \sigma''$, $x \in [a,b]$, и, следовательно, функции $\tilde{\sigma}$ и σ могут отличаться только на слагаемое $Ax + B$.

Покажем, что $A, B = 0$. Предположим, что это не так, т.е. либо A, либо B, либо оба вместе отличны от нуля. Пусть $x^* = -B/A$, причем x^* может принимать значения $\pm\infty$.

Выделим два случая:

I) $x^* \notin [a,b]$;

2) $x^* \in [a,b]$.

I) Имеем $\tilde{\sigma} = \sigma + Ax + B$. Пусть, для определенности, $Ax + B > 0$, $x \in [a,b]$ (очевидно, что это предположение не умаляет общности, так как всегда можно рассмотреть $\sigma = \tilde{\sigma} - (Ax + B)$).

Рассмотрим функцию $\sigma^* = \sigma - \alpha\sigma + \frac{1}{2}(Ax + B)$. В силу ограниченности σ на $[a,b]$, существует $0 < \alpha < 1$ такое, что $0 \le -\alpha\sigma + \frac{1}{2}(Ax + B) \le \le Ax + B$. Но тогда $\sigma \le \sigma^* \le \tilde{\sigma}$, $x \in [a,b]$, и, как легко видеть, $\sigma^* \in H$.

Для σ^* имеем $I(\sigma^*) = (1-\alpha)^2 I(\sigma) < I(\sigma)$, так как $0 < \alpha < 1$, $I(\sigma) > 0$ ($I(\sigma) = 0$ в том и только том случае, когда σ – многочлен первой степени, но это противоречит условиям теоремы).

Итак, в H нашелся элемент σ^*, для которого $I(\sigma^*) < I(\sigma)$. Это противоречит предположению о том, что σ доставляет минимум функционалу I на H, и, следовательно, $A, B = 0$.

2) Пусть, для определенности, $A < 0$. Рассмотрим функцию $\sigma^* = \sigma - \alpha(\sigma - \sigma(x^*)) + \frac{1}{2}(Ax+B) = \sigma + \varphi$. В силу ограниченности σ' на $[a,b]$, существует $0 < \alpha < 1$ такое, что $0 \le \varphi \le Ax + B$, $x \in [a, x^*]$, $Ax + B \le \varphi \le 0$, $x \in [x^*, b]$. Но тогда $\sigma^* \in H$. Повторяя далее рассуждения случая I, приходим к выводу, что $A, B = 0$. Теорема доказана.

Перейдем к рассмотрению аппроксимационных свойств сглаживающих сплайнов с граничными условиями (5) на равномерной сетке.

В дальнейшем нам будут необходимы следующие леммы.

ЛЕММА I. *Для достаточно больших N справедливы оценки*

$$|a_i^a| \le (16)^2 i/2^i, \qquad |a_i^b| \le (16)^2(N - i + 1)/2^{N-i+1}. \qquad (6)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Обозначим

$$A_{\xi\nu} = \sum_{i=1}^{N-1} B_i^{\xi} B_i^{\nu}, \quad A_{i\nu} = \sum_{j=1}^{N-1} B_j^i B_j^{\nu}, \quad \xi,\nu = a,b, \quad i = 1,\dots,N.$$

Используя (4) и аналогичные оценки для M_j^i, которые также следуют из леммы I [3], $M_{i+1}^i < \frac{1}{2} M_j^i$ при $i > j$, $M_{j-1}^i < \frac{1}{2} M_j^i$ при $i < j$, получаем $|A_{ia}| < 16C^2 i/2^i$, $|A_{ab}|^2 < 16\,C^2 (N+1)^2/2^{N+1}$, где $C = \max_{i,j}(M_i^a, M_i^b, M_i^j)$. Непосредственно из оценок нормы обратной матрицы системы для определения моментов сплайнов $F_j(x)$ и ее правой части получаем $C = 6/h^2$.

В силу (4) и того, что для моментов сплайна $F^a(x)$ справедливы оценки $M_j^a > \frac{3}{h^2} \cdot \frac{1}{2^j}$, которые вытекают непосредственно из записи системы для их определения, получаем $|A_{\xi\xi}| > 9/h^4$.

Для a_i^a имеем $a_i^a = (A_{ib}A_{ab} - A_{ia}A_{bb})/(A_{aa}A_{bb} - A_{ab}^2)$.

Ввиду того что величины $|A_{ib}A_{ab}/A_{aa}A_{bb}|, A_{ab}^2/A_{aa}A_{bb}$ убывают с ростом N, для достаточно больших N справедливо $|a_i^a| < (|A_{ia}/A_{aa}| + |A_{ib}A_{ab}/A_{aa}A_{bb}|)/(1 - A_{ab}^2/A_{aa}A_{bb}) < 4|A_{ia}/A_{aa}|$.

Окончательно $|a_i^a| < 4|A_{ia} / A_{aa}| < (16)^2 i/2^i$. Вторая оценка получается аналогично.

ЛЕММА 2. Для коэффициентов a_i^ξ, $i = 1,\dots,N$, $\xi = a,b$, справедливы тождества

$$\sum_{i=1}^{N} a_i^\xi \equiv 0, \quad \sum_{i=1}^{N} a_i^\xi(x_i - a) \equiv 1, \quad \sum_{i=1}^{N} a_i^\xi(x_i - a)^2 \equiv 2(\xi - a). \quad (7)$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Пусть $f(x) = A(x-a)^2 + B(x-a) + C$, $Y_i^0 = f(x_i)$, $i = 1,\dots,N$. Легко видеть, что при выборе граничных условий по формулам (5) восстанавливается многочлен второй степени, поэтому

$$\sum_{i=1}^{N} a_i^\xi Y_i^0 = f'(\xi), \text{ или}$$

$$\sum_{i=1}^{N} a_i^\xi Y_i^0 = A \sum_{i=1}^{N} a_i^\xi(x_i-a)^2 + B \sum_{i=1}^{N} a_i^\xi(x_i - a) + C \sum_{i=1}^{N} a_i^\xi = B + 2A(\xi - a).$$

Отсюда непосредственно следует утверждение леммы, так как приведенное равенство справедливо для произвольных A, B и C.

Пусть $f(x) \in C^3[a,b]$ и имеются последовательности сеток $\{\Delta\}$ с равномерным разбиением и векторов $\{(\varepsilon_1,\dots,\varepsilon_N)\}, \{(Y_1^0 = f(x_1),\dots,Y_N^0 = f(x_N))\}$. Пусть далее $\sigma(x)$ - сглаживающий сплайн, построенный по этим данным, с граничными условиями (5), тогда имеет место

ТЕОРЕМА 2. Если $\varepsilon/h^2 \to 0$, при $N \to \infty$, где $\varepsilon = \max_i \varepsilon_i$, то

$$\|f - \sigma\|_{C^2[a,b]} = \max_{p=0,1,2} \left\{ \|f^{(p)} - \sigma^{(p)}\|_{C[a,b]} \right\} \to 0 .$$

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Покажем вначале, что $|f'(\xi) - t_\xi| = O(\varepsilon + h^{2-\delta})$, где $t_\xi = \sum_{i=1}^{N} a_i^\xi Y_i$, $0 < \delta < 1$. Пусть $\xi = a$, тогда $|f'(a) - t_a| \le$ $\le |f'(a) - t_a^0| + |t_a^0 - t_a|$, где $t_a^0 = \sum_{i=1}^{N} a_i^a Y_i^0$.

Обозначим $\Delta f = -(3f(x_1) - 4f(x_2) + f(x_3))/2h$. Имеем $|f'(a) - t_a^0| \le$ $\le |f'(a) - \Delta f| + |\Delta f - t_a^0|$.

Легко видеть, что $|f'(a) - \Delta f| = O(h^2)$.

Рассмотрим полином второй степени $P_2(x)$ такой, что $P_2(x_i) = Y_i^0$, $i = 1,2,3$. Очевидно, что $P_2'(a) = \Delta f$.

Воспользовавшись тождествами (7) и введя обозначение $\eta_i = Y_i^0 - P_2(x_i)$, запишем

$$|\Delta f - t_a^0| = \left|\sum_{i=1}^{N} a_i^a \eta_i\right| \le \left|\sum_{i=1}^{L} a_i^a \eta_i\right| + \left|\sum_{i=L+1}^{N} a_i^a \eta_i\right|,$$
$$1 \le L \le N.$$

Пусть $\tau = x - a$, $\eta(\tau) = |f(x) - P_2(x)|$; очевидно, $\eta(\tau) = O(\tau^2)$. Положим $\tau = (x_L - a) = (L-1)h$, где $L-1$ – целая часть величины $h^{-\delta/2}$. Тогда $\tau = h^{1-\delta/2}$ и

$$\left|\sum_{i=1}^{L} a_i^a \eta_i\right| \le (16)^2 C \max_{a \le x \le x_L} |\eta(\tau)| = O(\tau^2) = O(h^{2-\delta}),$$

где $C = \sum_{i=1}^{\infty} i/2^i$.

Далее, в силу (6), получаем $\left|\sum_{i=L+1}^{N} a_i^a \eta_i\right| \le (16)^2 \eta (L + C)/2^L$,

где $\eta = \max_{a \le x \le b} |\eta(\tau)|$. Очевидно, что η ограничено.

Пусть K такое, что $\eta \le K$ для любого N, тогда

$$(16)^2 \eta (L + C)/2^L \le (16)^2 K(N + C)/2^{h^{-\delta/2}} <$$
$$< (16)^2 K(C + 1 + (b-a)/h)/2^{h^{-\delta/2}}.$$

Но выражение в правой части неравенства убывает быстрее любой степени h.

Итак, $|f'(a) - t_a^0| = O(h^{2-\delta})$. Очевидно, что

$$|t_a^0 - t_a| = \left|\sum_{i=1}^{N} a_i^a (Y_i^0 - Y_i)\right| = O(\varepsilon).$$

Окончательно $|f'(a) - t_\varepsilon| = O(\varepsilon + h^{2-\delta})$.

Пусть $\sigma_f(x)$ - сплайн со следующими свойствами: $\sigma_f'(a) = f'(a)$, $\sigma_f'(b) = f'(b)$, $\sigma_f(x_i) = \sigma(x_i)$, $i = 1,\dots, N$.

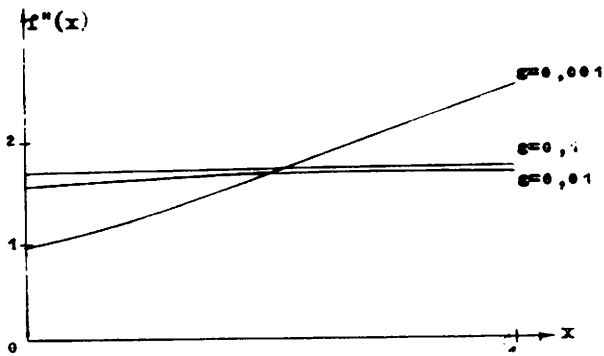
Рассмотрим $\|f-\sigma\|_{C^2[a,b]} \le \|f - \sigma_f\|_{C^2[a,b]} + \|\sigma_f - \sigma\|_{C^2[a,b]}$. Известно, что первый член имеет порядок ε/h^2. Покажем, что скорость убывания второго члена есть $O(\varepsilon/h + h^{1-\delta})$.

Пусть $AM=G$ и $AM_f = G_f$ - соответственно две системы для определения моментов сплайнов σ и σ_f [I]. Рассмотрим разность $A(M-M_f) = G - G_f$. Следовательно, $|M-M_f| \le \|A^{-1}\| \cdot |G - G_f|$, но $|G - G_f| \le (|f'(a) - t_a| + |f'(b) - t_b|)/h = O(\varepsilon/h + h^{1-\delta})$, $\|A^{-1}\| \le 1$. Отсюда непосредственно вытекает утверждение теоремы.

Отметим, что для функционала Φ вида (2) сходимость первой производной интерполяционного сплайна к производной функции на концах интервала задания имеет порядок $O(h^{3-\delta})$ в предположении, что $f(x) \in C^4[a,b]$, а не $O(h^{2-\delta})$, как это имеет место для функционала (I)

Этот результат вытекает из приведенных выше рассуждений, если положить $\eta(\tau) = |f(x) - P_3(x)|$ (здесь $P_3(x)$ - полином третьей степени, такой что $P_3(x_i) = Y_i^0$, $i = 1,2,3,4$).

Легко видеть, что сформулированная в терминах фундаментальных сплайнов задача построения сглаживающего сплайна сводится к задаче условной минимизации квадратичного функционала.



В качестве численного примера приведем результаты построения сглаживающих сплайнов, аппроксимирующих функцию $y = e^x$ на интервале $[0,1]$. Значения функции задавались на сетке с шагом $h=0,1$.

На рисунке приведены графики второй производной сглаживающих сплайнов для различных значений $\varepsilon(\varepsilon_i = \varepsilon,\ i = 1,\dots,N)$.

Кроме описанного, существует и другой подход к построению сглаживающих сплайнов [I-5]. Суть его состоит в том, что вместо $I = \int_a^b (f'')^2 dx$ рассматривается функционал $J = I + \sum_{i=1}^{N} \rho_i^{-1}(f(x_i) - Y_i^0)^2$, где $\rho_i > 0$, $i = 1,\dots,N$,- заданные числа и отыскивается сплайн, доставляющий ему минимум. Здесь также могут быть использованы граничные условия вида (5).

Литература

I. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С.,КВАСОВ Б.И.,МИРОШНИЧЕНКО В.Л. Методы сплайн-функций. -М.: Наука, 1980. - 352 с.

2. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С. Применение вычислительных систем для решения сложных задач проектирования в машиностроении. -В кн.: Вычислительные системы. Новосибирск, 1970, вып. 38, с.3-22.

3. BIRKHOFF G., BOOR C.de. Error Bounds for Spline Interpolation.-J.Math.and Mech.,1964,v.13, p.827-836.

4. ВЕРШИНИН В.В. О сглаживающих сплайнах и их производных. -Новосибирск, Б.и., 1980. - 20 с. - (Препринт/ИМ СО АН СССР).

5. ЛОРАН П.-Ж. Аппроксимация и оптимизация. - М.: Мир, 1975. - 496 с.

Поступила в ред.-изд.отд.
30 января 1981 года