МЕТОДЫ СПЛАЙН-ФУНКЦИЙ В ЧИСЛЕННОМ АНАЛИЗЕ
(Вычислительные системы)
1983 год Выпуск 98

УДК 519.651

О ПРИБЛИЖЕНИИ ПРОИЗВОДНЫХ С ПОМОЩЬЮ СГЛАЖИВАЮЩИХ СПЛАЙНОВ

В.В.Вершинин, Н.Н.Павлов

Как известно, сглаживающий сплайн является функций из $W_2^2[a, b]$, минимизирующей функционал

$$I(f) = \int_a^b (f''(x))^2 dx + \sum_{i=0}^{N} \rho_i^{-1}(f(x_i) - z_i^0)^2 .$$

В случае, когда $\rho_0 = \rho_1 = \ldots = \rho_N = \rho$, число ρ называется параметром сглаживания. Сглаживающие сплайны применяются, чтобы погасить осцилляции, возникающие при интерполяции данных с погрешностью [1]. Это означает, что, как правило, сглаживание улучшает аппроксимацию производных функции производными сплайна. Поэтому возникает вопрос об оценке приближения производных для такой аппроксимации. В §1 мы получаем оценку приближения первых производных в узлах сетки. Следствием этой оценки являются некоторые ориентировочные рекомендации по выбору параметра сглаживания. Численные примеры обсуждаются в §2.

§1. Оценка приближения первых производных в узлах сетки

Для простоты мы ограничимся случаем периодических граничных условий и равномерной сетки. Характеристическими уравнениями для сглаживающего сплайна являются $S_i + \rho_i D_i = z_i^0$, $i = 1,\ldots,N$, где $D_i = S'''(x_i+) - S'''(x_i-)$. Получим систему линейных алгебраических уравнений, связывающих значения сглаживающего сплайна S_i и его первые производные в узлах сетки m_i. Выразим характеристические уравнения сначала через моменты M_i:

$$S_i + \rho_i \frac{M_{i+1} - 2M_i + M_{i-1}}{h} = z_i^0, \quad i = 1,\ldots,N .$$

Но

$$M_k = \frac{2m_{k-1}}{h} + \frac{4m_k}{h} - 6\frac{z_k - z_{k-1}}{h^2} = -\frac{4m_k}{h} - \frac{2m_{k+1}}{h} + 6\frac{z_{k+1}-z_k}{h^2}.$$

Отсюда записываем характеристические уравнения через m_i:

$$S_i + \rho_i \frac{1}{h^2}\left(-\frac{12S_{i-1}}{h} + \frac{24S_i}{h} - \frac{12S_{i+1}}{h} - 6m_{i-1} + 6m_{i+1}\right) = z_i^0,$$

$$i = 1,\ldots,N; \quad m_0 = m_N,\ m_1 = m_{N+1}. \qquad (1)$$

Вспомним, что система уравнений для интерполяционного сплайна имеет вид:

$$m_{i-1} + 4m_i + m_{i+1} = 3\frac{S_{i+1} - S_{i-1}}{h},$$

$$i = 1,\ldots,N; \quad m_0 = m_N,\quad m_1 = m_{N+1}. \qquad (2)$$

Из уравнений (I) и (2) получаем систему для нахождения значений первых производных m_i сглаживающего сплайна, i-е уравнение которой имеет вид:

$$\frac{6\rho_{i-1}}{h^3}\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_i + \rho_{i+1})\right)m_{i-2} + \left[\left(1 - \frac{24\rho_{i-1} + 6\rho_i}{h^3}\right) \times\right.$$

$$\times\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_i + \rho_{i+1})\right) + \frac{6\rho_i}{h^3}\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_{i-1} + \rho_i)\right)\Big]m_{i-1} +$$

$$+ 2\left[\left(1+\frac{24}{h^3}(\rho_i+\rho_{i+1})\right)\left(1+\frac{9}{h^3}\rho_{i-1}\right) + \left(1 + \frac{9\rho_{i+1}}{h^3}\right)\left(1+\frac{24(\rho_{i-1}+\rho_i)}{h^3}\right)\right]m_i +$$

$$+ \left[\left(1 - \frac{24\rho_{i+1}+6\rho_i}{h^3}\right)\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_i + \rho_{i-1})\right) +\right.$$

$$\left.+ \frac{6\rho_i}{h^3}\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_{i+1}+\rho_i)\right)\right]m_{i+1} + \frac{6\rho_{i+1}}{h^3}\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_{i-1}+\rho_i)\right)\cdot m_{i+2} =$$

$$= \frac{3}{h}\left[(z_i^0 - z_{i-1}^0)\left(1+\frac{24}{h^3}(\rho_i+\rho_{i+1})\right) + (z_{i+1}^0 - z_i^0)\left(1 + \frac{24}{h^3}(\rho_{i-1}+\rho_i)\right)\right].$$

При $\rho_0 = \ldots = \rho_N = \rho$ вид системы существенно упрощается:

$$\frac{6\rho}{h^3} m_{i-2} + \left(1 - \frac{24}{h^3}\rho\right) m_{i-1} + 4\left(1 + \frac{9}{h^3}\rho\right) m_i +$$

$$+ \left(1 - \frac{24}{h^3}\rho\right) m_{i+1} + \frac{6\rho}{h^3} m_{i+2} = \frac{3}{h}(z^0_{i+1} - z^0_{i-1}), \quad i=0,\dots,N.$$

Матрица этой системы имеет диагональное преобладание, когда $4\left(1 + \frac{9}{h^3}\rho\right) - \frac{12}{h^3}\rho - 2\left|1 - \frac{24}{h^3}\rho\right| > 0$, т.е. при $\rho < h^3/4$. Заметим, что матрица аналогичной системы для моментов M_i также имеет диагональное преобладание при $\rho < h^3/4$.

Будем обозначать матрицу полученной системы через A, вектор значений производных через m и правую часть через $d(z^0, h) = d$. Тогда система принимает вид

$$A\,m = d. \tag{3}$$

Пусть значения функции $f(x)$ заданы с ошибками $f(x_i) = z_i = z^0_i + \delta_i$. Вычитая из левой и правой частей равенства (3) вектор $A\,z'$, где z' есть вектор производных функции $f(x)$ в узлах x_i, получаем $A(m-z') = d(z^0, h) - Az'$. Но $d(z^0, h) = d(z, h) + \varphi(\delta, h)$, где $\varphi(\delta, h) = -\frac{3}{h}(\delta_{i+1} - \delta_{i-1})$. Поэтому получаем $A(m-z') = d(z, h) - Az' + \varphi(\delta, h)$. Имеем $\|\varphi(\delta, h)\| \le \frac{6}{h}\|\delta\|$. Оценим теперь $d(z,h) - Az'$. Предположим, что $f(x) \in W^5_\infty[a, b]$. Разложим функцию $f(x)$ по формуле Тейлора с остаточным членом в интегральной форме

$$z_{i+j} = z_i + jhz'_i + \frac{h^2 z''_i}{2} + \frac{jh^3 z'''_i}{6} + \frac{h^4 z^{IV}_i}{24} +$$

$$+ \frac{1}{24}\int_{x_i}^{x_{i+j}} (x_{i+j} - v)^4 f^V(v)\,dv, \qquad j = -1, 1;$$

$$z'_{i+j} = z'_i + jhz''_i + \frac{(jh)^2 z'''_i}{2} + \frac{(jh)^3 z^{IV}_i}{6} + \frac{1}{6}\int_{x_i}^{x_{i+j}} (x_{i+j} - v)^3 f^V(v)\,dv,$$

$$j = -2, -1, 1, 2,$$

где $z^n_k = f^{(n)}(x_k)$. Тогда имеем

$$d(z,h) = 6z_i'+h^2z_i''' +\frac{1}{8h}\left(\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1}-v)^4 f^V(v)dv+\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} (x_{i-1}-v)^4 f^V(v)dv\right).$$

$$(Az')_i= 4z_i' + \frac{36}{h^3}\rho z_i' + \left(1 - \frac{24}{h^3}\rho\right)(2z_i' + h^2z_i''' +$$

$$+\frac{1}{6}\left(\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} (x_{i+1}-v)^3 f^V(v)dv + \int\limits_{x_{i-1}}^{x_i} (v - x_{i-1})^3 f^V(v)dv\right) +$$

$$+\frac{6\rho}{h^3}(2z_i'+4h^2z_i''' +\frac{1}{6}\left(\int\limits_{x_i}^{x_{i+2}} (x_{i+2}-v)^3 f^V(v)dv + \int\limits_{x_{i-2}}^{x_i} (v-x_{i-2})^3 f^V(v)dv\right)).$$

Таким образом,

$$d(z,h) - Az' = \int\limits_{x_i}^{x_{i+1}}\left(\frac{1}{8h}(x_{i+1} - v)^4 f^V(v) - \frac{1}{6}(x_{i+1}-v)^3 f^V(v) +\right.$$

$$\left.+\frac{4\rho}{h^3}(x_{i+1}-v)^3 f^V(v) - \frac{\rho}{h^3}(x_{i+2}-v)f^V(v)\right)dv - \int\limits_{x_{i+1}}^{x_{i+2}}\frac{\rho}{h^3}(x_{i+2}-v)^3 f^V(v)dv+$$

$$+\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i}\left(\frac{1}{8h}(v - x_{i-1})^4 f^V(v) - \frac{1}{6}(v - x_{i-1})^3 f^V(v) +\right.$$

$$\left.+\frac{4\rho}{h^3}(v - x_{i-1})^3 f^V(v) - \frac{\rho}{h^3}(v - x_{i-2})^3 f^V(v)\right)dv -$$

$$-\int\limits_{x_{i-2}}^{x_{i-1}}\frac{\rho}{h^3}(v - x_{i-2})^3 f^V(v)dv.$$

Получаем

$$|d(z,h) - Az'| \le \| f^V\|_\infty \left(\int\limits_{x_i}^{x_{i+1}} \left|\frac{1}{8h}(x_{i+1} - v)^4 -\right.\right.$$

$$-\frac{1}{6}(x_{i+1}-v)^3+\frac{4\rho}{h^3}(x_{i+1}-v)^3-\frac{\rho}{h^3}(x_{i+2}-v)^3|dv+$$

$$+\int\limits_{x_{i+1}}^{x_{i+2}}\left|\frac{\rho}{h^3}(x_{i+2}-v)^3\right|dv+\int\limits_{x_{i-1}}^{x_i}\left|\frac{1}{8h}(v-x_{i-1})^4-\frac{1}{6}(v-x_{i-1})^3+\right.$$

$$\left.+\frac{4\rho}{h^3}(v-x_{i-1})^3-\frac{\rho}{h^3}(v-x_{i-2})^3\right|dv+\int\limits_{x_{i-2}}^{x_{i-1}}\left|\frac{\rho}{h^3}(v-x_{i-2})^3\right|dv.$$

Ввиду симметричности достаточно посчитать два последних интеграла. Делая в них замены $v = x_{i-1}+ht$ и $v = x_{i-2}+ht$ соответственно получаем, что правая часть рассматриваемого неравенства равна

$$\|f^v\|_\infty\ 2\left(\int\limits_0^1\left|\frac{h^4t^4}{8}-\frac{h^4t^3}{6}+4\rho ht^3-\rho h(t+1)^3\right|dt+\int\limits_0^1\rho ht^3dt\right).$$

Поскольку $\frac{h^4t^4}{8}-\frac{h^4t^3}{6}<0$ и $4\rho ht^3-\rho h(t+1)^3<0$, то правая часть равна

$$\|f^v\|_\infty 2\left(\int\limits_0^1\left(\frac{h^4}{6}t^3-\frac{h^4}{8}t^4+\rho h(t+1)^3-4\rho ht^3\right)dt+\int\limits_0^1\rho ht^3dt\right)=$$

$$=\|f^v\|_\infty\left(\frac{h^4}{30}+6\rho h\right).$$

В результате наших рассмотрений мы получили оценку

$$\|m-z'\|\le\frac{\left[\left(\frac{h^4}{30}+6\rho h\right)\|f^v\|+6\frac{\varepsilon}{h}\right]}{\left(4+\frac{24}{h^3}\rho-2\left|1-\frac{24}{h^3}\rho\right|\right)},\qquad(4)$$

где $\varepsilon=\|\delta\|=\max\limits_i|\delta_i|$.

Обозначим правую часть в (4) через $\mu(\rho, f, h, \varepsilon)$. Пусть $\frac{h^3}{24}\le\rho<\frac{h^3}{4}$, тогда

$$\mu(\rho, f, h, \varepsilon) = \left(\frac{h^4}{30}\|f^V\| + 6\frac{\varepsilon}{h} + 6\rho h\|f^V\|\right)/6\left(1 - \frac{4}{h^3}\rho\right). \quad (5)$$

При этих ограничениях минимум $\mu(\rho, f, h, \varepsilon)$ по ρ достигается при $\rho = \dfrac{h^3}{24}$ и равен $\dfrac{1}{5}\left(\dfrac{17h^4}{60}\|f^V\| + 6\dfrac{\varepsilon}{h}\right)$. Пусть $0 \le \rho \le h^3/24$, тогда

$$\mu(\rho, f, h, \varepsilon) = \left(\frac{h^4}{30}\|f^V\| + 6\frac{\varepsilon}{h} + 6\rho h\|f^V\|\right)/\left(2 + \frac{72}{h^3}\rho\right). \quad (6)$$

Поскольку дробно-линейная функция монотонна, она на отрезке достигает своих экстремалей в крайних точках. В точках 0 и $h^3/24$ ее значения равны $\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{h^4}{30}\|f^V\|+6\dfrac{\varepsilon}{h}\right)$ и $\dfrac{1}{5}\left(\dfrac{h^4 \cdot 17}{60} + 6\dfrac{\varepsilon}{h}\right)$ соответственно. Неравенство $\dfrac{1}{5}\left(\dfrac{17}{60}h^4\|f^V\|+6\dfrac{\varepsilon}{h}\right) < \dfrac{1}{2}\left(\dfrac{h^4}{30}\|f^V\|+6\dfrac{\varepsilon}{h}\right)$ равносильно следующему:

$$\|f^V\| < \frac{45 \cdot \varepsilon}{h^5}. \quad (7)$$

В итоге получаем, что при $0 \le \rho < h^3/4$, если выполняется неравенство (7), то минимум оценки (4) достигается при $\rho = \dfrac{h^3}{24}$ и равен $\dfrac{1}{5}\left(\dfrac{17h^4}{60}\|f^V\|+6\dfrac{\varepsilon}{h}\right)$, а если неравенство (7) нарушено, то минимум оценки (4) достигается на интерполяционном сплайне $\rho = 0$ и равен $\dfrac{1}{2}\left(\dfrac{h^4}{30}\|f^V\|+6\dfrac{\varepsilon}{h}\right)$. Заметим, что значение $\rho = h^3/24$ дает минимум некоторой оценке, и поэтому в конкретных случаях минимум погрешности приближения первой производной может достигаться при других значениях ρ. Значение $\rho = \dfrac{h^3}{24}$ может служить лишь некоторым ориентиром при выборе параметра сглаживания.

§2. Численные примеры

I. Функция $f(x) = \sin\left(\dfrac{\pi x}{10}\right)$ рассматривалась на интервале $[0, 20]$ с шагом $h = 1$. Значения функции округлялись с точностью до $0{,}05$. Для интерполяционного ($\rho = 0$) сплайна имеем табл. I.

Таблица I

x_i	$s(x_i)$	$s'(x_i)$	$f'(x_i)$
I	0,3	0,3I6	0,297
2	0,6	0,242	0,25I
3	0,8	0,2I5	0,I83
4	I	0,096	0,096
5	I	0	0

Таблица 2

x_i	$s'(x_i)$		
	$\rho=1/48$	$\rho=1/24$	$\rho=3/16$
I	0,307	0,304	0,298
2	0,25I	0,254	0,258
3	0,208	0,204	0,I98
4	0,I0I	0,I02	0,I04
5	0	0	0

Из формул (4) и (6) получаем, что $\mu(0) \approx 3\varepsilon = 0,15$. Для сглаживающих сплайнов имеем табл. 2. Формулы (5)-(6) дают следующие значения μ: $\mu(1/48) \approx 0,09$; $\mu(1/24) \approx 0,06$; $\mu(3/16) \approx 0,20$.

Таблица 3

ρ	0	1/48	1/24	3/16
ν	0,003	0,005	0,004	0,0I7
μ	0,0I5	0,009	0,006	0,02

2. Функция $f(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{5}\right)$ рассматривалась на интервале [0, I0] с шагом $h = 1$. Значения округлялись с точностью до 0,005. Обозначим через $\nu(\rho, f, h, \varepsilon) = \nu(\rho)$ максимальную погрешность приближения первой производной, полученную из вычислений (табл.3).

3. Функция $f(x) = \sin\left(\frac{\pi x}{20}\right)$ рассматривалась на интервале [0, 40] с шагом $h = 1$. Значения округлялись с точностью до 0,05. Результаты указаны в табл. 4.

Таблица 4

x_i	$s'(x_i) - f'(x_i)$			
	$\rho = 0$	$\rho=1/48$	$\rho=1/24$	$\rho=1/6$
I	-0,027	-0,0I3	-0,008	0,002
2	0,002	0,00I	0,00I	0,002
3	0,027	0,0I8	0,0I2	0,002
4	-0,045	-0,034	-0,029	-0,020
5	-0,005	-0,0I2	-0,0I4	-0,0I2
6	0,003	0,008	0,0I0	0,0I0
7	0,042	0,037	0,034	0,023
8	0,00I	0,00I	0,00I	0,002
9	-0,037	-0,033	-0,030	-0,0I8
I0	0	0	0	0

Из формул (5) и (6) получаем $\mu(0) \approx 0{,}15$; $\mu(1/48) \approx 0{,}086$; $\mu(1/24) \approx 0{,}06$; $\mu(1/6) \approx 0{,}15$.

Таблица 5

ρ	0	1/48	1/24	1/6
ν	0,006	0,005	0,005	0,003
μ	0,015	0,009	0,006	0,015

4. Те же условия, что в примере 3, только округление с точностью до 0,005. Результаты суммированы в виде табл.5.

5. В рассмотренных примерах условие (7) выполнено. Рассмотрим теперь пример, когда это условие нарушено. Функция $f(x) = 3\cdot 10^3\cdot \sin\left(\frac{\pi x}{20}\right)$ рассматривалась на интервале [0,40] с шагом $h = 1$. Значения округлялись с точностью до 0,005. Имеем $\|f^V\| \approx 0{,}29 > 0{,}23 \approx \frac{45\,\varepsilon}{h^5}$. Следовательно, минимум оценки (4) достигается на интерполяционном сплайне и равен $\frac{1}{2}(\|f^V\|/30 + 0{,}03) \approx 0{,}020$. Результаты указаны в табл. 6.

Таблица 6

ρ	0	1/48	1/24	1/6
ν	0,006	0,010	0,015	0,048
μ	0,020	0,0215	0,0222	0,163

Таблица 7

ρ	0	1/48	1/24	1/6
ν	0,057	-0,038	0,039	0,037
μ	0,15	0,10	0,08	0,26

6. Значения той же функции, что и в предыдущем примере, на той же сетке округлялись с точностью до 0,05. Условие (7) выполнено, результаты приведены в табл. 7.

7. Те же условия, что в двух предыдущих примерах, только округление с точностью до 0,5. Получаем табл. 8.

Таблица 8

ρ	0	1/24	1/12
ν	0,50	0,40	0,61
μ	1,5	0,6	0,8

Таблица 9

ρ	0	1/24	1/12
ν	5,0	3,7	3,4
μ	15,0	6,0	7,5

8. Те же условия, что в примерах 5-7, только округление с точностью до 5. Результаты указаны в табл. 9.

При расчете численных примеров использовался алгоритм построения сглаживающего сплайна, приведенный в [2].

Нам хотелось бы выразить признательность В.Л.Мирошниченко за большую помощь, оказанную при выполнении настоящей работы.

Литература

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

2. ЗАВЬЯЛОВ Ю.С., КВАСОВ Б.И., МИРОШНИЧЕНКО В.Л. Методы сплайн-функций. -М.: Наука, 1980. - 350 с.

Поступила в ред.-изд.отд.
8 июня 1983 года