ПРИБЛИЖЕНИЕ СПЛАЙНАМИ
(Вычислительные системы)
1984 год Выпуск 106

УДК 519.651.519.653

ВАРИАЦИОННАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ АЛГОРИТМА ЛОКАЛЬНОГО СГЛАЖИВАНИЯ

Н.Н. Павлов

На практике все более широкое применение получают формулы локальной аппроксимации, позволяющие строить аппроксимационные сплайны с помощью локальных процедур (т.е. не решая систем большой размерности). Некоторые из этих формул обладают сглаживающими свойствами. Изучению таких формул и посвящается настоящая статья.

В общем случае локальный аппроксимационный сплайн имеет вид

$$S(x) = \sum_i b_i(z)B_i(x), \qquad (1)$$

где $B_i(x)$ - B-сплайны (ниже будут рассматриваться кубические B-сплайны), $b_i(z)$ - некоторые линейные функционалы, $z=(z_1, \ldots , z_N)^T$, z_i - приближаемые значения. Простейшие формулы локальной аппроксимации, когда $b_i(z)=z_i$, были рассмотрены И.Шенбергом [1] еще в 1946 году. Им же было показано, что в случае равномерной сетки они точны на многочленах первой степени. При специальном выборе $b_i(z)$ формула (1) точна на многочленах третьей степени. При этом она может быть записана в виде [2]

$$S(x) = \sum_{i=0}^{N+1}(b_i^{(-1)}z_{i-1}+b_i^{(0)}z_i+b_i^{(1)}z_{i+1})B_i(x), \qquad (2)$$

где $b_i^{(-1)}=-h_i\lambda_i/3h_{i-1}$, $b_i^{(1)}= -h_{i-1}\mu_i/3h_i$, $b_i^{(0)} = 1 - b_i^{(-1)}-b_i^{(1)}$, $\mu_i = h_{i-1}(h_{i-1}+ h_i)^{-1}$, $\lambda_i=1- \mu_i$, $h_i=x_{i+1}-x_i$, x_i - узлы сетки Δ.

Пусть теперь z_i - значения некоторой функции $f(x)$, заданные с погрешностью. Процедура локального сглаживания состоит в многократном, последовательном применении формул (1) в узлах сетки. При этом в случае (2) значения z_j^I на I-й итерации вычисляются при помощи соотношений

$$z_j = \sum_{i=j-1}^{j+1} (b_i^{(-1)} z_{i-1} + b_i^{(0)} z_i + b_i^{(1)} z_{i+1}) B_i(x_j). \qquad (3)$$

Здесь и дальше под итерацией понимается вычисление вектора z^I; вычисление очередной его компоненты z_j^I будем называть шагом процесса.

Итерации обычно прекращают после того, как величины уклонений сплайна от исходных точек достигают допустимых значений, либо после того, как сплайн приобретает требуемые свойства (выпуклости, монотонности, плавности и т.п.).

Возможны два следующих варианта локального сглаживания при помощи формул (3). Первый - когда величины z_i, фигурирующие в правых частях упомянутых формул, принадлежат (I-1)-й итерации, второй, рассматриваемый ниже, предполагает, что $z_i = z_i^{I-1}$ при $i \geq j$, $z_i = z_i^I$, при $i < j$. В этом случае для равномерной сетки и периодического сплайна формулы (3) могут быть преобразованы к виду

$$z_j^I = z_j^{I-1} - \frac{1}{36}(z_{j-2}^I - 4z_{j-1}^I + 6z_j^{I-1} - 4z_{j+1}^{I-1} + z_{j+2}^{I-1}). \qquad (4)$$

I. Покажем, что рассматриваемый процесс соответствует минимизации методом покоординатного спуска квадратичного неотрицательного функционала $F(z) = z^T A z$, где $z = (z_1, \dots, z_{N-1})^T$, A - квадратная матрица порядка $N-1$ вида

$$A = \begin{pmatrix} 6 & -4 & I & \dots & I & -4 \\ -4 & 6 & -4 & I & \dots & I \\ I & -4 & 6 & -4 & I & \dots \\ & & & \ddots & & \\ & & I & -4 & 6 & -4 & I \\ I & \dots & & I & -4 & 6 & -4 \\ -4 & I & \dots & & I & -4 & 6 \end{pmatrix}. \qquad (5)$$

Легко видеть, что $A = B^2$, где

$$B = \begin{pmatrix} 2 & -I & 0 & \dots & -I \\ -I & 2 & -I & & \\ & & \ddots & & \\ & & -I & 2 & -I \\ -I & \dots & 0 & -I & 2 \end{pmatrix}, \qquad (6)$$

следовательно, матрица A положительно полуопределена.

Метод покоординатного спуска применительно к функционалу $F(z)$ реализуется при помощи формул

$$z_i^I = z_i^{I-1} - \alpha(z_{i-2}^I - 4z_{i-1}^I + 6z_i^{I-1} - 4z_{i+1}^{I-1} + z_{i+2}^{I-1}),$$

где $\alpha > 0$ - параметр метода. Нетрудно видеть, что процесс минимизации будет иметь место, если α выбрано таким , что $0 < \alpha < 1/3$. Действительно, обозначим $\Delta^4 z_i = z_{i-2}^I - 4z_{i-1}^I + 6z_i^{I-1} - 4z_{i+1}^{I-1} + z_{i+2}^{I-1}$, тогда на k-м шаге $z = (\ldots, z_i^{I-1} - \alpha\Delta^4 z_i, \ldots)^T = z' - \alpha\Delta^4 z_i e_i$, где $i = k - (I-1)(N-1)$, $I = \left[\frac{k-1}{N-1}\right]$, $[a]$ - целая часть числа a, e_i - i-й координатный вектор. Имеем $F(z) = z^T A z = (z' - \alpha\Delta^4 z_i e_i)^T A (z' - \alpha\Delta^4 z_i e_i) = (z')^T A z' - 2\alpha(\Delta^4 z_i')^2 + 6\alpha^2(\Delta^4 z_i')^2$, следовательно, при $0 < \alpha < 1/3$ и $|\Delta^4 z_i'| \neq 0$, $I(z) < I(z')$. В нашем случае $\alpha = \frac{1}{36} < \frac{1}{3}$.

Покажем, что в процессе локального сглаживания $\|\nabla I\|$ стремится к нулю. Действительно, если $\{z^k\}$ - последовательность точек, получаемая в результате описанного процесса, то справедливо $F(z^k) - F(z^{k+1}) \to 0$ при $k \to \infty$, так как $F(z^k) \geq F(z^{k+1})$, $F(z^k) \geq 0$ для любого k. Но $F(z^k) - F(z^{k+1}) = (11/216)(\Delta^4 z_i)^2$, отсюда $(\Delta^4 z_i)^2 \to 0$, или $\|\nabla F\| \to 0$ при $k \to \infty$.

Таким образом, показано, что процесс локального сглаживания при помощи формул локальной аппроксимации, точных на многочленах третьей степени, в случае периодических краевых условий и равномерной сетки является процессом минимизации квадратичного неотрицательного функционала $F(z) = z^T A z$, где матрица A имеет вид (5), методом покоординатного спуска.

Потребуем, чтобы на каждом шаге процесса локального сглаживания z_i принадлежало отрезку $[z_i^0 - \delta_i, z_i^0 + \delta_i]$. Если z_i, вычисленное по формуле (4), не принадлежит указанному отрезку, например, $z_i < z_i^0 - \delta_i$, то полагаем $z_i = z_i^0 - \delta_i$, в случае, когда $z_i > z_i^0 + \delta_i$, полагаем $z_i = z_i^0 + \delta_i$.

Существование решения задачи в такой постановке следует из того факта, что выпуклый функционал, каким является $F(z)$, достигает минимума на параллелепипеде G: $z_i^0 - \delta_i \leq z_i \leq z_i^0 + \delta_i$, $i=1, \ldots, N-1$. Известно также, что процесс минимизации выпуклого функционала на параллелепипеде G методом покоординатного спуска сходится к одной из точек минимума функционала. Естественно предпо -

ложить, что при достаточно малых δ_i задача имеет единственное решение.

2. Пусть на I-й итерации значения сплайна z_i^I отличаются от $f_i = f(x_i)$ на величины δ_i^I, т.е. $z_i^I = f_i + \delta_i^I$, тогда из (4) следует, что

$$\delta_i^I = \delta_i^{I-1} - \frac{1}{36}\Delta^4\delta_i - \frac{1}{36}\Delta^4 f_i. \qquad (7)$$

Но $\Delta^4 f_i = h^4\Delta^4 f_i/h^4 = h^4[f_i^{IV} + O(h^2)]$, где $f_i^{IV} = \frac{d^4}{dx^4} f(x)|_{x=x_i}$, таким образом,

$$\delta_i^I = \delta_i^{I-1} - \frac{1}{36}\Delta^4\delta_i - \frac{h^4}{36} f_i^{IV} + O(h^6) . \qquad (8)$$

Формулы (7), (8) позволяют проследить эволюцию погрешностей в процессе локального сглаживания в случае, когда $\|f^{IV}\|_{C[a,b]}$ мала. Действительно, пусть $f(x)$ совпадает с многочленом третьей степени, тогда $\Delta^4 f_i = 0$ и формула (7) приобретает вид

$$\delta_i^I = \delta_i^{I-1} - \frac{1}{36}\Delta^4\delta_i. \qquad (9)$$

Но, как было показано, в процессе локального сглаживания $(\Delta^4 z_i)^2 \to 0$ или $\|\nabla F\| \to 0$, а следовательно, исходные точки преобразуются к точкам, принадлежащим многочлену третьей степени (в случае периодических краевых условий - константе). Таким образом, формула (9) может рассматриваться как формула преобразования погрешностей от их случайного распределения в начале процесса к упорядоченному (лежат на графике многочлена нулевой степени), исходный многочлен при этом восстанавливается с точностью до константы.

Обратимся теперь к формулам локальной аппроксимации вида

$$S(x) = \sum_i z_i B_i(x) , \qquad (10)$$

точным (в случае равномерной сетки) на многочленах первой степени, и будем использовать их в целях сглаживания. Нетрудно видеть, что аналог итерационной формулы (4) в этом случае имеет вид

$$z_j^I = z_j^{I-1} + \frac{1}{6}(z_{j-1}^I - 2z_j^{I-1} + z_{j+1}^{I-1}). \qquad (11)$$

Аналогично тому, как это было сделано для случая локального сглаживания при помощи формул, точных на многочленах третьей степени, можно показать, что процесс (II) соответствует минимизации неотрицательного квадратичного функционала $J(z) = z^T B z$, где квадратная матрица B совпадает с матрицей (6), методом покоординатного спуска.

Для того, чтобы получить некоторые качественные характеристики локального сглаживания, будем рассматривать сглаживание функций, обращающихся в нуль на концах отрезка $[a,b]$, при помощи формул

$$z_j^I = z_j^{I-1} + \frac{1}{6}\left(z_{j-1}^{I-1} - 2z_j^{I-1} + z_{j+1}^{I-1}\right), \tag{12}$$

в которых, в отличие от (II), значения z_j на I-й итерации вычисляются по значениям на предыдущей итерации.

Соотношения (I2) могут быть записаны в виде $z^I = (E + \frac{1}{6}D) z^{I-1}$, где E – единичный оператор, а D – оператор порядка N-2, определяемый матрицей

$$\begin{pmatrix} -2 & I & 0 & & & \\ I & -2 & I & & & \\ & & \cdot & & & \\ & & & \cdot & & \\ & & & & \cdot & \\ & & & I & -2 & I \\ & & & 0 & I & -2 \end{pmatrix}.$$

Указанные операторы действуют в пространстве сеточных функций $z(x)$ таких, что $z(a) = 0$, $z(b) = 0$.

Известно, что собственными функциями оператора D являются функции $\mu_k(x) = \sin\left(\frac{k\pi x}{b-a}\right)$, $k=2,\dots,N-1$. Им соответствуют собственные значения $\lambda_k = 4\sin^2\left[\frac{k\pi h}{2(b-a)}\right]$, $k=2,\dots,N-1$. Пусть числа α_k такие, что

$$z^0 = \sum_{k=2}^{N-1} \alpha_k \mu_k(x),$$

тогда

$$(E + \frac{1}{6} D) z^c = \sum_{k=2}^{N-1} \alpha_k (1 - \frac{1}{6} \lambda_k) \mu_k(x),$$

Далее

$$z^I = (E + \frac{1}{6} D) z^{I-1} = \sum_{k=2}^{N-1} \alpha_k (1 - \frac{1}{6} \lambda_k)^I \mu_k(x).$$

Но величины $(1-\frac{1}{6}\lambda_k)=1-\frac{2}{3}\sin^2\left[\frac{k\pi}{2(N-1)}\right]$, $2 \le k \le N-1$, меньше единицы, причем с ростом k они убывают. Отсюда следует, что в процессе сглаживания в первую очередь затухают высокочастотные гармоники, чем и объясняется эффект сглаживания.

Литература

I. SCHOENBERG I.J. Contribution to the problem of approxi - mation of equidistant data by analytic functions.- Quart.Appl., Math.,1946,v.4,p.45-99.

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

Поступила в ред.-изд.отд.
5 сентября 1984 года