При аппроксимации решений дифференциальных уравнений, а также во многих других ситуациях, оказывается желательным, чтобы аппроксимирующие функции были по крайней мере дважды непрерывно дифференцируемыми. Этого нельзя добиться с помощью кусочно-квадратичных полиномов, за исключением случая, когда данные таковы, что их можно аппроксимировать одним квадратичным полиномом на всем интервале. Таким образом, приходим к рассмотрению кусочно-кубического полинома C(x), обладающего следующими свойствами:

$$C(x)$$
 — дважды непрерывно дифференцируемая функция; (5.2.8)

на каждом отрезке 
$$I_i = [x_i, x_{i+1}], i = 1, \dots, n-1,$$
 функция  $C(x)$  является кубическим полиномом. (5.2.9)

Такая функция называется кубическим сплайном. Это название происходит от гибкой деревянной рейки, используемой чертежниками для проведения кривых.

На каждом отрезке  $I_i$  функция C(x) представляется в виде

$$C(x) = C_i(x) = a_{i3}x^3 + a_{i2}x^2 + a_{i1}x + a_{i0}, \ x \in I_i.$$
 (5.2.10)

Условие (5.2.8), разумеется, влечет за собой непрерывность функций C и C' на всем отрезке I. Следовательно, должны выполняться 3n-6 условий

$$C_{i-1}(x_i) = C_i(x_i), \ C'_{i-1}(x_i) = C'_i(x_i),$$

$$C''_{i-1}(x_i) = C''_i(x_i), \quad i = 2, \dots, n-1.$$
(5.2.11)

Так как для построения функции C надо определить 4n-4 коэффициента  $a_{ij}$  в (5.2.10), то нам нужно еще n+2 дополнительных условия. В случае задачи интерполяции или аппроксимации мы потребуем, чтобы функция C принимала в узлах заданные значения

$$C(x_i) = y_i, \quad i = 1, ..., n,$$
 (5.2.12)

что дает n дополнительных соотношений. Нам нужно еще два условия, и их можно выбрать из самых разных соображений. Так называемый естест-

венный кубический сплайн удовлетворяет дополнительным условиям

$$C''(x_1) = C''(x_n) = 0. (5.2.13)$$

Сплайн C можно было бы построить, решив линейную систему уравнений (5.2.11)-(5.2.13) относительно неизвестных коэффициентов  $a_{ij}$ . Существует, однако, другой подход, приводящий к простой трехдиагональной системе уравнений, в которой неизвестными являются значения вторых производных C в узлах сетки. Саму функцию C мы можем затем определить с помощью интегрирования. Чтобы прийти к этой трехдиагональной системе, нужно выполнить целый ряд преобразований, к которым мы теперь и приступаем.

Во-первых, заметим, что так как  $C_i$  — кубический полином, то  $C_i''$  — линейная функция. Поэтому из формулы линейной интерполяции следует

$$C_i''(x) = C_i''(x_i) + \frac{(x - x_i)}{h_i} \left[ C_i''(x_{i+1}) - C_i''(x_i) \right], \tag{5.2.15}$$

где  $h_i = x_{i+1} - x_i$  (i = 1, ..., n-1). Проинтегрировав это выражение дважды, приходим к формуле для C(x):

$$C'_{i}(x) = C'_{i}(x_{i}) + \int_{x_{i}}^{x} C''_{i}(t) dt =$$

$$= C'_{i}(x_{i}) + C''_{i}(x_{i})(x - x_{i}) + \frac{\left[C''_{i}(x_{i+1}) - C''_{i}(x_{i})\right]}{2h_{i}} (x - x_{i})^{2},$$

$$C_{i}(x) = C_{i}(x_{i}) + \int_{x_{i}}^{x} C'_{i}(t) dt = C_{i}(x_{i}) + C'_{i}(x_{i})(x - x_{i}) +$$

$$+ C''_{i}(x_{i}) \frac{(x - x_{i})^{2}}{2} + \frac{\left[C''_{i}(x_{i+1}) - C''_{i}(x_{i})\right]}{6h_{i}} (x - x_{i})^{3}.$$
(5.2.17)

Для удобства в дальнейшем будем пользоваться обозначениями

$$y_{i} = C_{i}(x_{i}) = C_{i-1}(x_{i}), \ y'_{i} = C'_{i}(x_{i}) = C'_{i-1}(x_{i}),$$
  
$$y''_{i} = C''_{i}(x_{i}) = C''_{i-1}(x_{i}),$$
 (5.2.18)

в которых учтены условия (5.2.11) и (5.2.12). Заменяя теперь i на i-1 в (5.2.16) и полагая  $x=x_i$ , получим

$$y'_{i} = y'_{i-1} + (y''_{i} + y''_{i-1}) \frac{h_{i-1}}{2}$$
 (5.2.19)

Полагая затем  $x = x_{i+1}$  в (5.2.17) и разрешая это соотношение относительно  $y'_i$ , получаем

$$y'_{i} = \frac{y_{i+1} - y_{i}}{h_{i}} - y''_{i+1} \frac{h_{i}}{6} - y''_{i} \frac{h_{i}}{3}.$$
 (5.2.20)

Приравнивание правых частей (5.2.19) и (5.2.20) дает

$$y'_{i-1} + (y''_i + y''_{i-1}) \frac{h_{i-1}}{2} = \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - y''_{i+1} \frac{h_i}{6} - y''_i \frac{h_i}{3}.$$
 (5.2.21)

Теперь мы хотим исключить  $y'_{i-1}$  из (5.2.21). Заменяя для этого i на i-1 в (5.2.20) и подставляя выражение для  $y'_{i-1}$  в (5.2.21), получаем

$$\frac{y_{i} - y_{i-1}}{h_{i-1}} - y_{i}'' \frac{h_{i-1}}{6} - y_{i-1}'' \frac{h_{i-1}}{3} + (y_{i}'' + y_{i-1}'') \frac{h_{i-1}}{2} =$$

$$= \frac{y_{i+1} - y_{i}}{h_{i}} - y_{i+1}'' \frac{h_{i}}{6} - y_{i}'' \frac{h_{i}}{3} ,$$

что после перегруппировки членов дает

$$y''_{i-1}h_{i-1} + 2y''_{i}(h_{i} + h_{i-1}) + y''_{i+1}h_{i} =$$

$$= 6 \left[ \frac{y_{i+1} - y_{i}}{h_{i}} - \frac{y_{i} - y_{i-1}}{h_{i-1}} \right], \quad i = 2, \dots, n-1.$$
(5.2.22)

Это система n-2 линейных угавнений с n-2 неизвестными  $y_2'',\ldots,y_{n-1}''$ ; напомним, что  $y_1''=y_n''=0$  согласно условию (5.2.13). Если положить

$$\gamma_i = 6 \left[ \frac{y_{i+1} - y_i}{h_i} - \frac{y_i - y_{i-1}}{h_{i-1}} \right], \quad i = 2, \dots, n-1,$$
 (5.2.23)

то система (5.2.22) примет вид  $Hy = \gamma$ , где  $y = (y_2'', \dots, y_{n-1}'')$ ,  $\gamma = (\gamma_2, \dots, \gamma_{n-1})$  и

$$H = \begin{bmatrix} 2(h_1 + h_2) & h_2 & & & 0 \\ h_2 & & 2(h_2 + h_3) & h_3 & & & \\ & & & & \ddots & & \\ & & & & h_{n-2} & 2(h_{n-2} + h_{n-1}) \end{bmatrix} . \quad (5.2.24)$$

Матрица H трехдиагональная и диагонально доминирующая. (Она является также симметричной и положительно определенной.) Следовательно, система  $Hy = \gamma$  легко и эффективно решается методом гауссова исключения без каких-либо перестановок.

После того как значения  $y_i''$  найдены, мы должны еще получить представления для полиномов  $C_1, \ldots, C_{n-1}$ . Так как величины  $y_i$  нам тоже известны, значения первых производных в узлах сетки можно определить из (5.2.20):

$$y'_{i} = C'_{i}(x_{i}) = C'_{i-1}(x_{i}) = \frac{y_{i+1} - y_{i}}{h_{i}} - y''_{i+1} \frac{h_{i}}{6} - y''_{i} \frac{h_{i}}{3}, \quad i = 1, \dots, n-1.$$
 (5.2.25)

Выражения для самих  $C_i(x)$  можно затем получить из формулы (5.2.17), переписав ее в обозначениях  $y_i$ ,  $y_i'$  и  $y_i''$ :

$$C_i(x) = y_i + y_i'(x - x_i) + y_i'' \frac{(x - x_i)^2}{2} + (y_{i+1}'' - y_i'') \frac{(x - x_i)^3}{6h_i}, \quad (5.2.26)$$

$$i = 1, \dots, n - 1.$$

Отметим, что если вы хотите вычислить C(x) при некотором конкретном

значении  $\hat{x}$ , то сначала необходимо определить отрезок  $I_i$ , в котором лежит точка  $\hat{x}$ , и затем воспользоваться выражением для соответствующего полинома  $C_i$ .

Теперь приведем простой пример построения кубического сплайна. Пусть заданы следующие узлы и соответствующие значения функции:

$$x_1 = 0$$
,  $x_2 = 1/4$ ,  $x_3 = 1/2$ ,  $x_4 = 3/4$ ,  $x_5 = 1$ ,  $y_1 = 1$ ,  $y_2 = 2$ ,  $y_3 = 1$ ,  $y_4 = 0$ ,  $y_5 = 1$ .

Здесь n=5 и все  $h_i$  равны 1/4. Матрица H в (5.2.24) и вектор  $\gamma$ , координаты которого вычисляются по формулам (5.2.23), имеют вид

$$H = \frac{1}{4} \begin{bmatrix} 4 & 1 & 0 \\ 1 & 4 & 1 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}, \qquad \qquad \gamma = \begin{bmatrix} -48 \\ 0 \\ 48 \end{bmatrix}.$$

Таким образом, величины  $y_2'', y_3''$  и  $y_4''$  находятся из системы линейных уравнений

$$4y_2'' + y_3'' = -192,$$
  

$$y_2'' + 4y_3'' + y_4'' = 0,$$
  

$$y_3'' + 4y_4'' = 192,$$

которая легко решается методом исключения. Накладывая, согласно (5.2.13), дополнительные условия  $y_1'' = y_5'' = 0$ , получаем

$$y_1'' = 0$$
,  $y_2'' = -48$ ,  $y_3'' = 0$ ,  $y_4'' = 48$ ,  $y_5'' = 0$ .

Подставляя эти значения  $y_i''$  в (5.2.25), находим значения  $y_i'$  ::

$$y_1' = 6$$
,  $y_2' = 0$ ,  $y_3' = -6$ ,  $y_4' = 0$ .

Теперь по формулам (5.2.26) составляем выражения для кубических полиномов  $C_1$ ,  $C_2$ ,  $C_3$  и  $C_4$ , определяя тем самым искомый кубический сплайн:

жилайн:
$$C_1(x) = 1 + 6x - 32x^3, \qquad 0 \le x \le \frac{1}{4},$$

$$C_2(x) = 2 - 24\left(x - \frac{1}{4}\right)^2 + 32\left(x - \frac{1}{4}\right)^3, \qquad \frac{1}{4} \le x \le \frac{1}{2},$$

$$C_3(x) = 1 - 6\left(x - \frac{1}{2}\right) + 32\left(x - \frac{1}{2}\right)^3, \qquad \frac{1}{2} \le x \le \frac{3}{4},$$

$$C_4(x) = 24\left(x - \frac{3}{4}\right)^2 - 32\left(x - \frac{3}{4}\right)^3, \qquad \frac{3}{4} \le x \le 1.$$

Если нужно вычислить значение C в некоторой точке, скажем, при x=0.35, то сначала замечаем, что  $0.35 \in [1/4, 1/2]$ , и используем для вычисления полином  $C_2$ :

$$C(0.35) = C_2(0.35) = 2 - 24(0.1)^2 + 32(0.1)^3 = 1.792.$$