

АКАДЕМИЯ НАУК СССР
УРАЛЬСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
КОМИ НАУЧНЫЙ ЦЕНТР

М. И. ИГНАТОВ, А. Б. ПЕВНЫЙ

НАТУРАЛЬНЫЕ СПЛАЙНЫ МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ

Ответственный редактор
B. N. ПРОХОРОВ



ЛЕНИНГРАД
«НАУКА»
ЛЕНИНГРАДСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ
1991

УДК 519.6

М. И. Игнатов, А. Б. Певный. Натуральные сплайны многих переменных. Л.: Наука, 1991. 125 с.

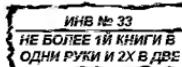
Натуральными называются сплайны, которые являются решением вариационных задач специального вида. Такие сплайны используются для аппроксимации поверхностей и тогда, когда требуется исследовать пространственную изменчивость изучаемых свойств. В работе излагаются основы теории интерполяции и сглаживания натуральными сплайнами многих переменных, а также численные методы построения сплайнов на ЭВМ. Затрагиваются вопросы оптимального восстановления функционалов. Монография рассчитана на научных работников в области прикладной математики, программистов, а также специалистов в науках о Земле — геофизиков, геологов, геодезистов и т. д. Библиогр. 57 назв. Ил. 10.

Р е ц е н з е н т ы:

д-р физ.-мат. наук Б. Г. ВАГЕР, А. А. ХОЛОПОВ

Р е д а к т о р и з д а т е л ь с т�а

М. В. ХОТИМСКАЯ



И 1602110000-518 – 243-90, I полугодие © М. И. Игнатов, А. Б. Певный, 1991
042 (02)-91

ISBN 5-02-024620-4

В В Е Д Е Н И Е

В настоящее время сплайны являются весьма популярным аппаратом приближения. Наиболее детально разработана теория сплайнов одной переменной (см. [6, 12, 14, 21, 30]). Темой данной книги являются сплайны многих переменных, в основном натуральные сплайны. Термин «натуральные» указывает на то, что рассматриваемые сплайны являются решением вариационных задач специального вида.

Типичной является задача § 5. В пространстве \mathbb{R}^n даны m произвольно расположенных точек X_i , $i \in 1 : m$, в которых заданы значения функции $z_i = f(X_i)$, $i \in 1 : m$. Требуется построить наиболее плавную функцию $S(X)$, такую, что

$$S(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m.$$

В § 5 «наиболее плавной» считается функция, доставляющая минимум в следующей задаче:

$$\sum_{|\alpha|=r} \frac{r!}{\alpha!} \int_{\mathbb{R}^n} (D^\alpha g)^2 dX \rightarrow \min_{\substack{g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) \\ g(X_i) = z_i, i \in 1 : m}}, \quad (*)$$

где $D^\alpha g$ — частная производная порядка r от функции g (см. список основных обозначений). Минимум (при четном n) достигается на функции

$$S(X) = Q_{r-1}(X) + \sum_{i=1}^m d_i G(X - X_i), \quad (**)$$

где Q_{r-1} — полином степени $\leq r-1$, $G(X) = \|X\|^{2r-n} \ln \|X\|$. Необходимый подготовительный материал для доказательства этого результата изложен в § 4.

Задача (*) является многомерным аналогом следующей одномерной задачи: минимизировать интеграл от квадрата r -й производной

$$\int_a^b [f^{(r)}(x)]^2 dx$$

при ограничениях $f(x_i) = z_i$, $i \in 1 : m$, где x_1, \dots, x_m — фиксированные точки отрезка $[a, b]$. Минимум достигается на хорошо известных натуральных сплайнах степени $2r - 1$ (см., например, книги В. А. Василенко [3] и В. Н. Малоземова, А. Б. Певного [21]).

В приложениях многомерных сплайнов наиболее распространенным является случай $n = r = 2$. Тогда минимизируемый функционал записывается в виде

$$\int_{\mathbb{R}^2} (\Delta g)^2 dX,$$

где Δ — оператор Лапласа. Сплайны ($**$) при $r = n = 2$ используются в геологии для аппроксимации поверхностей месторождений (см. [8, 16]), в гидрологии и метеорологии — для черчения карт на ЭВМ, для определения формы упругих пластин с точечными опорами и во многих других случаях, когда требуется аппроксимировать поверхности или исследовать пространственную изменчивость изучаемых свойств. Практические примеры приведены в § 7, 10, 11.

Задача § 5 развивается в нескольких направлениях. В случае, когда значения $z_i = f(X_i)$ задаются с погрешностями, целесообразно рассматривать сглаживающие сплайны (§ 6). Интересны также задачи, в которых в некоторых точках X_i задаются наклоны поверхности, т. е. производные $df(X_i)/dv_i$ по некоторым направлениям v_i (§ 8). Иногда вместо неопределенного указания о погрешностях известно, что значение z_i должно находиться в диапазоне $\alpha_i \leq z_i \leq \beta_i$, $i \in m + 1 : N$. Такая задача с двусторонними ограничениями рассматривается в § 9, 10. Указанный круг задач рассматривался в работах новосибирских математиков В. А. Василенко и А. В. Ковалкова [3, 4].

В случае большого количества данных построение интерполяционных и сглаживающих сплайнов можно осуществлять по отдельным группам данных (§ 11). Для работы графопостроителей целесообразно вычислять значения сплайна $S(X)$ в узлах регулярной (прямоугольной) сетки и использовать бикубические сплайны в качестве промежуточного аппарата приближения. С бикубическими сплайнами можно познакомиться по книге Ю. С. Завьялова, Б. И. Квасова, В. Л. Мирошниченко [14].

Натуральные сплайны можно рассматривать не только на всей плоскости, но и в ограниченной области. Тогда приходится ставить граничные условия. Простейшая задача с граничными условиями рассмотрена в § 14, где в качестве модели взята пластина с защемленными краями и точечными опорами. В § 16 рассматриваются натуральные сплайны, заданные на сфере. Они имеют отношение к задаче аппроксимации гравитационного потенциала Земли.

Натуральные сплайны имеют еще одно важное достоинство. В ряде задач оптимального восстановления функционалов сплайновый алгоритм является оптимальным. Сплайновый алгоритм

заключается в том, что функция интерполируется натуральным сплайном и затем к сплайну применяется восстанавливаемый функционал. Этим вопросам посвящены § 2, 3, в которых рассматриваются задачи оптимального восстановления как линейных функционалов, так и нелинейного функционала

$$L(f) = \max_{x \in \Omega} f(X),$$

где Ω — фиксированный компакт в \mathbb{R}^n (см. § 5, п. 3, 4).

В книге приводятся собственные результаты авторов и излагается современное состояние основ теории натуральных сплайнов многих переменных.

Г л а в а 1

НАТУРАЛЬНЫЕ СПЛАЙНЫ И СПЛАЙНОВЫЕ АЛГОРИТМЫ

§ 1. Общая задача о натуральных сплайнах

В настоящее время распространен такой подход к сплайнам, при котором сплайнами называются решения вариационных задач специального вида. Общая теория таких задач разработана французскими математиками М. Аттиа, Ф. М. Анселоном, П.-Ж. Лораном в 1965—1968 гг. и изложена в монографиях П.-Ж. Лорана [20] и В. А. Василенко [3]. Рассмотрим элементы этой теории и укажем приложения к теории оптимальных алгоритмов.

1. Теорема характеристизации. Даны линейное пространство \mathcal{X} и вещественное гильбертово пространство H . В пространстве \mathcal{X} определены операция сложения элементов (векторов) и операция умножения элементов на вещественные числа. В пространстве H кроме этого определены скалярное произведение элементов $\langle h_1, h_2 \rangle$ и норма $\| h \| = \sqrt{\langle h, h \rangle}$. Пусть даны линейный оператор $T : \mathcal{X} \rightarrow H$ и линейные функционалы L_i , $i \in 1 : m$, заданные на \mathcal{X} . Рассмотрим задачу минимизации

$$Tf \mapsto \min_{L_i(f) = z_i, i \in 1 : m}, \quad (1.1)$$

где z_i — фиксированные числа и минимум берется по всем элементам $f \in \mathcal{X}$, таким, что $L_i(f) = z_i$, $i \in 1 : m$. Решение σ задачи (1.1), если оно существует, называется натуральным сплайном или просто сплайном. Термин «натуральный» используется для того, чтобы подчеркнуть, что σ является решением задачи (1.1). Все сплайны, рассматриваемые в дальнейшем, являются натуральными, т. е. являются решениями некоторых задач вида (1.1).

Введем m -мерный вектор $I f = (L_1(f), L_2(f), \dots, L_m(f))$. Он задает информацию об элементе f . Пусть множество

$$M = \{f \in \mathcal{X} : L_i(f) = z_i, i \in 1 : m\}$$

непусто. Рассмотрим в \mathcal{X} подпространство

$$N(I) = \{h \in \mathcal{X} : I h = 0\}.$$

Равенство $I h = 0$ означает, что $L_i(h) = 0$ для всех $i \in 1 : m$. Возьмем фиксированный элемент $f_0 \in M$. Тогда

$$M = \{f = f_0 + h | h \in N(I)\}$$

и задача (1.1) переписывается в виде

$$\|Tf_0 + Th\|^2 \rightarrow \min_{h \in N(I)} \quad (1.2)$$

Задачу (1.2) можно рассматривать как задачу нахождения расстояния от элемента Tf_0 до $TN(I)$ — образа $N(I)$ при отображении T . $TN(I)$ является линейным множеством в H . Если это множество замкнуто в H , то хорошо известно [32, с. 60], что решение задачи (1.2) существует.

Установим теорему характеристики решения задачи (1.1).

Теорема 1.1. Пусть $\sigma \in M$. Для того чтобы элемент σ был решением задачи (1.1), необходимо и достаточно выполнение условия ортогональности

$$\langle T\sigma, Th \rangle = 0 \quad \forall h \in N(I). \quad (1.3)$$

Доказательство. Необходимость. Пусть σ — решение, $h \in N(I)$. Очевидно, $\sigma + \alpha h \in M$ для любого α , поэтому функция $\varphi(\alpha) := \|T\sigma + \alpha Th\|^2$ достигает минимума при $\alpha = 0$. Отсюда

$$\varphi'(0) = 2\langle T\sigma, Th \rangle = 0.$$

Достаточность. Возьмем произвольный элемент $f \in M$. Его можно представить в виде $f = \sigma + h$, где $h \in N(I)$. В силу (1.3)

$$\|Tf\|^2 = \|T\sigma + Th\|^2 = \|T\sigma\|^2 + \|Th\|^2 \geq \|T\sigma\|^2.$$

Отсюда следует, что σ является решением задачи (1.1). Теорема доказана.

Положим $N(T) = \{h \in H : Th = 0\}$.

Следствие 1.1. Если

$$N(T) \cap N(I) = \{0\},$$

то решение задачи (1.1) единственное.

Доказательство. Пусть есть два решения, σ_1 и σ_2 . Тогда $L_i(\sigma_1) = L_i(\sigma_2) = z_i$, $i \in 1:m$, и $h := \sigma_1 - \sigma_2 \in N(I)$. В силу необходимого условия оптимальности (1.3)

$$\langle T\sigma_1, Th \rangle = 0, \quad \langle T\sigma_2, Th \rangle = 0.$$

Вычитая из первого равенства второе, получаем $\langle Th, Th \rangle = 0$, откуда $h \in N(T)$. По условию $h = 0$, и единственность доказана. Утверждения о характеристики и единственности сплайна будут в дальнейшем неоднократно использоваться. В качестве первого применения покажем, что каждый сплайн является линейной комбинацией фундаментальных сплайнов $\sigma_1, \dots, \sigma_m$. Сплайн σ_k определяется как решение задачи

$$\|Tf\|^2 \rightarrow \min_{L_i(f) = \delta_{ik}, i \in 1:m},$$

где $\delta_{ik} = 0$ при $i \neq k$ и $\delta_{kk} = 1$. По теореме 1.1,

$$\langle T\sigma_k, Th \rangle = 0 \quad \forall h \in N(I).$$

Элемент

$$\sigma = \sum_{k=1}^m z_k \sigma_k$$

удовлетворяет условию ортогональности (1.3) и ограничениям

$$L_i(\sigma) = \sum_{k=1}^m z_k \delta_{ik} = z_i, \quad i \in 1 : m.$$

Поэтому σ является решением задачи (1.1).

2. Сплайны в выпуклом множестве. Предположим, что \mathcal{X} — вещественное гильбертово пространство со скалярным произведением (x_1, x_2) , а T — линейный непрерывный оператор из \mathcal{X} в гильбертово пространство H . Зафиксируем $y \in H$. Тогда $\langle Tx, y \rangle$ есть линейный непрерывный функционал от x . По теореме Рисса, существует единственный элемент $w \in \mathcal{X}$, такой, что

$$\langle Tx, y \rangle = (x, w) \quad \forall x \in \mathcal{X}.$$

Элемент w есть функция от $y : w = T^*y$. Оператор $T^* : H \rightarrow \mathcal{X}$ линеен, непрерывен и называется сопряженным к T .

Рассмотрим задачу

$$\Phi(x) := \frac{1}{2} \|Tx\|^2 \rightarrow \min_{x \in \Omega}, \quad (1.4)$$

где Ω — выпуклое множество в \mathcal{X} .

Теорема 1.2. Для того чтобы элемент $\sigma \in \Omega$ был решением задачи (1.4), необходимо и достаточно, чтобы выполнялось условие

$$(T^*T\sigma, \sigma) = \min_{x \in \Omega} (T^*T\sigma, x). \quad (1.5)$$

Доказательство. Имеем:

$$\Phi(x + h) = \Phi(x) + (T^*Tx, h) + \frac{1}{2}(T^*Th, h).$$

Пусть $\sigma \in \Omega$ — решение (1.4), $v = T^*T\sigma$, $x \in \Omega$ — произвольный элемент, $h = x - \sigma$. Тогда

$$\Phi(\sigma + th) = \Phi(\sigma) + t(v, h) + \frac{t^2}{2}(T^*Th, h) \geq \Phi(\sigma) \quad \forall t \in [0, 1].$$

Отсюда $(v, h) \geq 0$, $(v, x) \geq (v, \sigma)$, т. е. выполнено (1.5). Если выполнено (1.5), то, рассуждая в обратном порядке, получим, что σ — решение (1.4). Теорема доказана.

Для дальнейшего потребуются некоторые сведения о выпуклых конусах \mathcal{X} . Множество $\Gamma \subset \mathcal{X}$ называется конусом, если вместе с вектором x оно содержит векторы λx , $\lambda \geq 0$. Введем понятие сопряженного конуса:

$$\Gamma^+ = \{w \in \mathcal{X} \mid (w, x) \geq 0 \quad \forall x \in \Gamma\}.$$

Лемма 1.1. Если Γ — замкнутый выпуклый конус в гильбертовом пространстве \mathcal{X} , то

$$\Gamma^{++} = \Gamma. \quad (1.6)$$

Доказательство проводится так же, как и в [13, с. 309—314].

Рассмотрим конус Γ , заданный конечной системой линейных неравенств,

$$\Gamma = \{h \in \mathcal{X} \mid (l_i, h) \geq 0, \quad i \in 1 : m\},$$

где $l_i \in \mathcal{X}$.

Лемма 1.2 (теорема Фаркаша). Сопряженный конус имеет вид

$$\Gamma^+ = \left\{ w \mid w = \sum_{i=1}^m \lambda_i l_i, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i \in 1 : m \right\}. \quad (1.7)$$

Доказательство. Обозначим W множество в правой части (1.7). Нетрудно показать, что

$$W^+ = \Gamma. \quad (1.8)$$

Множество W является замкнутым выпуклым конусом (доказательство проводится по той же схеме, что и в [13, с. 318—319]). По лемме 1.1, $W^{++} = W$. Из (1.8) получаем $\Gamma^+ = W^{++} = W$. Лемма доказана.

Рассмотрим теперь задачу (1.4) в случае, когда Ω задано конечным числом линейных неравенств:

$$\Omega = \{x \in \mathcal{X} \mid (l_i, x) \geq b_i, \quad i \in 1 : m\}.$$

Теорема 1.3. Пусть $\sigma \in \Omega$. Для того чтобы элемент σ минимизировал функционал $\|Tx\|^2$ в Ω , необходимо и достаточно, чтобы нашлись числа $\lambda_i \geq 0$, такие, что

$$T^*T\sigma = \sum_{i=1}^m \lambda_i l_i, \quad (1.9)$$

$$\lambda_i [(l_i, \sigma) - b_i] = 0, \quad i \in 1 : m. \quad (1.10)$$

Доказательство. Достаточность. Пусть выполнено (1.9)—(1.10). Для произвольных $x \in \Omega$, $v = T^*T\sigma$ имеем:

$$\begin{aligned} (v, x - \sigma) &= \sum_{i=1}^m \lambda_i (l_i, x - \sigma) = \sum_{i=1}^m \lambda_i [(l_i, x) - b_i + b_i - (l_i, \sigma)] = \\ &= \sum_{i=1}^m \lambda_i [(l_i, x) - b_i] \geq 0. \end{aligned}$$

Значит, выполнено (1.5) и σ — точка минимума.

Необходимость. Пусть σ — сплайн в Ω . Тогда, по теореме 1.2, σ является решением задачи

$$(v, x) \rightarrow \min_{x \in \Omega}.$$

Рассмотрим множества

$$R(\sigma) = \{i \in 1 : m \mid (l_i, \sigma) = b_i\}, \quad \Gamma(\sigma) = \{h \in \mathcal{X} \mid (l_i, h) \geq 0, \quad i \in R(\sigma)\}.$$

Для любого $h \in \Gamma(\sigma)$ вектор $\sigma + th \in \Omega$ при малых $t > 0$. Отсюда $(v, \sigma + th) \geq (v, \sigma)$, т. е. $(v, h) \geq 0$ для любого $h \in \Gamma(\sigma)$. Значит, $v \in \Gamma^+(\sigma)$. По лемме 1.2,

$$v = \sum_{i \in R(\sigma)} \lambda_i l_i, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i \in R(\sigma).$$

Положим $\lambda_i = 0$ для $i \notin R(\sigma)$. Тогда выполнено (1.9), (1.10). Теорема доказана.

В качестве следствия получим теорему характеристизации в терминах множителей Лагранжа λ_i для задачи (1.1). Пусть L_i — линейные непрерывные функционалы на \mathcal{X} . По теореме Рисса, $L_i(x) = (l_i, x)$, где l_i — некоторый элемент из \mathcal{X} .

Следствие 1.2. Элемент σ является решением задачи

$$\frac{1}{2} \|Tx\|^2 \rightarrow \min_{(l_i, x) = z_i, i \in 1 : m} \quad (1.11)$$

тогда и только тогда, когда найдутся $\lambda_i \in (-\infty, \infty)$, такие, что

$$T^*T\sigma = \sum_{i=1}^m \lambda_i l_i. \quad (1.12)$$

Доказательство. Множество планов в задаче (1.11) можно записать в виде

$$\Omega = \{x \in \mathcal{X} \mid (l_i, x) \geq z_i, \quad (-l_i, x) \geq -z_i, \quad i \in 1 : m\}.$$

По теореме 1.3, σ является решением тогда и только тогда, когда при некоторых $\lambda'_i \geq 0$, $\lambda''_i \geq 0$ выполняется равенство

$$T^*T\sigma = \sum_{i=1}^m (\lambda'_i l_i - \lambda''_i l_i).$$

Полагая $\lambda_i = \lambda'_i - \lambda''_i$, получим (1.12). Следствие доказано.

Окончание параграфа посвятим подробному рассмотрению задачи с двусторонними ограничениями:

$$\frac{1}{2} \|Tx\|^2 \rightarrow \min_{x \in \Omega}. \quad (1.13)$$

где

$$\Omega = \{x \in \mathcal{X} \mid (l_i, x) = b_i, \quad i \in 1 : m; \quad \alpha_i \leq (l_i, x) \leq \beta_i, \quad i \in m+1 : N\}. \quad (1.14)$$

Предполагается, что $\alpha_i < \beta_i$, но не исключается случай, когда некоторые $\alpha_i = -\infty$ или некоторые $\beta_i = +\infty$. Фактически это общая задача с конечным числом линейных ограничений, только ограничения-равенства выделены. Из теоремы 1.3 легко получить следующее утверждение.

Теорема 1.4. Для того чтобы σ был сплайном в Ω , необходимо и достаточно, чтобы нашлись числа λ_i , $i \in 1 : N$, такие, что

$$T^*T\sigma = \sum_{i=1}^N \lambda_i l_i.$$

причем для $\lambda_{m+1}, \dots, \lambda_N$ выполнены следующие знаковые правила:

$$\begin{aligned}\lambda_i &\geq 0, \text{ если } (l_i, \sigma) = \alpha_i, \\ \lambda_i &= 0, \text{ если } \alpha_i < (l_i, \sigma) < \beta_i, \\ \lambda_i &\leq 0, \text{ если } (l_i, \sigma) = \beta_i.\end{aligned}$$

Рассуждая, как в [4, с. 61], покажем, что задача (1.13)—(1.14) сводится к конечномерной задаче квадратичного программирования. Предположим, что для любого набора чисел $z = (z_1, \dots, z_N)$ множество

$$\Omega_z = \{x \in \mathcal{X} \mid (l_i, x) = z_i, i \in 1 : N\}$$

не пусто. В частности, не пусто подпространство Ω_0 . Предположим также, что множество $T\Omega_0$ замкнуто в H . Тогда, как установлено в п. 1, для любого z разрешима задача

$$\|Tx\|^2 \rightarrow \min_{x \in \Omega_z}. \quad (1.15)$$

Решение $\sigma = \sigma_z$ этой задачи в п. 1 было названо сплайном. Обозначим через $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ фундаментальные сплайны (сплайн σ_k удовлетворяет ограничениям $(l_i, \sigma_k) = \delta_{ik}$, $i \in 1 : N$). Тогда решение задачи (1.15) запишется в виде

$$\sigma = \sum_{k=1}^N z_k \sigma_k. \quad (1.16)$$

Покажем, что решением задачи (1.13)—(1.14) является некоторый сплайн σ . Подставим (1.16) в (1.13)—(1.14) вместо x . Получим (с учетом равенства $(l_i, \sigma) = z_i$) следующую задачу:

$$F(z) = \left\| \sum_{k=1}^N z_k T \sigma_k \right\|^2 = \sum_{k, j=1}^N \langle T \sigma_k, T \sigma_j \rangle z_k z_j \rightarrow \min$$

при ограничениях

$$z_i = b_i, \quad i \in 1 : m; \quad \alpha_i \leq z_i \leq \beta_i, \quad i \in m+1 : N.$$

В результате имеем задачу квадратичного программирования с двусторонними ограничениями. Поскольку целевая функция $F(z)$ ограничена снизу и множество планов непусто, то [9] существует решение $z^* = (z_1^*, \dots, z_N^*)$.

Теорема 1.5. Сплайн

$$\sigma^* = \sum_{k=1}^N z_k^* \sigma_k$$

является решением задачи (1.13)—(1.14).

Доказательство. По следствию из теоремы 1.3 находятся числа $\lambda_i \in (-\infty, \infty)$, такие, что

$$T^* T \sigma^* = \sum_{i=1}^N \lambda_i l_i. \quad (1.17)$$

Введем множества

$$\begin{aligned} M_1 &= \{i \in m+1 : N_i^* | z_i^* = \alpha_i\}, \\ M_2 &= \{i \in m+1 : N_i^* | z_i^* = \beta_i\}, \\ M_3 &= \{i \in m+1 : N_i^* | \alpha_i < z_i^* \leq \beta_i\}. \end{aligned}$$

Воспользуемся теперь теоремой характеристизации 1.4. По этой теореме σ^* будет решением (1.13)–(1.14), если удастся установить соотношения

$$\lambda_i \geq 0, \quad i \in M_1; \quad \lambda_i \leq 0, \quad i \in M_2; \quad \lambda_i = 0, \quad i \in M_3. \quad (1.18)$$

Зафиксируем $i \in M_1$ и рассмотрим орт e_i . Вектор $z = z^* + t e_i$ удовлетворяет ограничениям (1.14) при малых $t > 0$ (при $t < \beta_i - \alpha_i$). Поэтому

$$F(z^* + t e_i) = \|T\sigma^* + t T\sigma_i\|^2 = F(z^*) + 2t(T^* T\sigma^*, \sigma_i) + t^2 \|T\sigma_i\|^2. \quad (1.19)$$

В силу (1.17) и определения фундаментального сплайна σ_i

$$(T^* T\sigma^*, \sigma_i) = \left(\sum_{k=1}^N \lambda_k l_k, \sigma_i \right) = \lambda_i.$$

Отсюда и из (1.19) получаем:

$$F(z^*) + 2t\lambda_i + t^2 \|T\sigma_i\|^2 \geq F(z^*) \quad (1.20)$$

при малых $t > 0$. Отсюда $\lambda_i \geq 0$.

При $i \in M_2$ неравенство (1.20) выполняется для малых $t < 0$, откуда $\lambda_i \leq 0$. Наконец, при $i \in M_3$ неравенство (1.20) выполняется для $t \in (-t_0, t_0)$, $t_0 > 0$, поэтому $\lambda_i = 0$. Условия (1.18) установлены и теорема доказана.

Теорема 1.5 является одновременно теоремой существования решения задачи (1.13)–(1.14). Решение существует, если для любого z множество Ω_z не пусто и множество $T\Omega_0$ замкнуто в H . В книге Лорана [20] доказано (неконструктивно) существование решения при других условиях: множество (1.14) не пусто и множество $T\mathcal{X}$ замкнуто в H .

§ 2. Задача оптимального восстановления функционала на классе элементов

Будем рассматривать задачи оптимального восстановления только линейных функционалов по «линейной» информации. Даны линейные функционалы L, L_1, \dots, L_m на линейном пространстве \mathcal{X} и выпуклое центрально-симметричное множество $W \subset \mathcal{X}$. Напомним, что выпуклое центрально-симметричное множество W вместе с элементами $f, g \in W$ содержит элементы $-f$ и $\alpha f + (1 - \alpha)g$ при всех $\alpha \in [0, 1]$.

Требуется восстановить $L(f)$ по информации $If = (L_1(f), \dots, L_m(f))$. Методы восстановления будут определяться функциями m переменных $\Phi(y_1, \dots, y_m)$ (считаем, что $L(f) \approx \Phi(L_1(f), \dots, L_m(f)) = \Phi(If)$). Следуя [31], функции Φ будем называть аль-

г о р и т м а м и , ибо задание Φ определяет алгоритм восстановления $L(f)$: по информации If вычисляем значение $\Phi(If)$ и считаем его приближенным значением для $L(f)$.

Задача состоит в нахождении алгоритма, имеющего наименьшую погрешность R на классе W :

$$R = \inf_{\Phi} \sup_{f \in W} |L(f) - \Phi(f)|.$$

Алгоритм Φ_0 , на котором достигается инфимум, называется оптимальным. Заранее мы никак не ограничиваем класс алгоритмов, допуская, в частности, нелинейные функции Φ . Однако оказывается, что для линейных L, L_1, \dots, L_m обязательно найдется линейный оптимальный алгоритм. Это было установлено в диссертации С. А. Смоляка (1966 г.). Сформулируем и докажем лемму С. А. Смоляка.

Л е м м а 2.1. *Существует оптимальный линейный алгоритм, т. е. найдутся коэффициенты $a_1^*, a_2^*, \dots, a_m^*$, такие, что*

$$R = \sup_{f \in W} \left| L(f) - \sum_{i=1}^m a_i^* L_i(f) \right|.$$

При этом справедливо соотношение двойственности

$$R = \sup_{f \in W \cap N(I)} |L(f)|,$$

где $N(I) = \{f \in \mathcal{X} : If = 0\}$.

Доказательство. Рассмотрим множество \mathcal{D} в пространстве \mathbb{R}^{m+1} (см. рис. 1):

$$\mathcal{D} = \{Y = (y_0, y_1, \dots, y_m) : y_0 = L(f), y_i = L_i(f), i \in 1 : m, f \in W\}.$$

Очевидно, что \mathcal{D} выпукло и центрально-симметрично. Положим

$$y^* = \sup_{(y_0, 0, \dots, 0) \in \mathcal{D}} y_0.$$

Нетрудно понять, что

$$y^* = \sup_{(y_0, 0, \dots, 0) \in \mathcal{D}} |y_0| = \sup_{\substack{f \in W \\ L_i(f)=0, i \in 1 : m}} |L(f)|.$$

Для любого алгоритма $\Phi : \mathbb{R}^m \rightarrow \mathbb{R}$ имеем:

$$\begin{aligned} & \sup_{f \in W} |L(f) - \Phi(L_1(f), \dots, L_m(f))| \geq \\ & \geq \sup_{(y_0, 0, \dots, 0) \in \mathcal{D}} \max \{|y_0 - \Phi(0)|, |-y_0 - \Phi(0)|\} \geq \\ & \geq \sup_{(y_0, 0, \dots, 0) \in \mathcal{D}} |y_0| = y^*. \end{aligned}$$

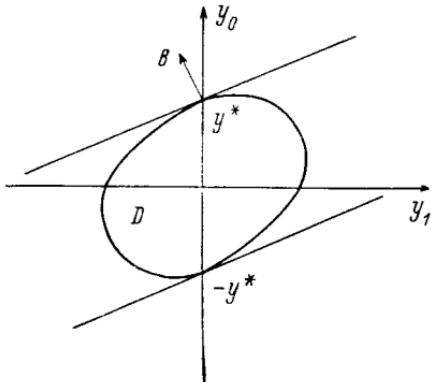


Рис. 1. Множество D .

Отсюда $R \geq y^*$.

Отметим, что в случае $y^* = \infty$ для любого метода Φ будет

$$\sup_{f \in W} |L(f) - \Phi(L_1(f), \dots, L_m(f))| = \infty,$$

значит, любой метод является оптимальным, и формально лемма справедлива.

Пусть не все L_1, \dots, L_m тождественно равны нулю на W . Тогда из $\{L_1, \dots, L_m\}$ можно выделить линейно независимую систему на W , скажем, $\{L_1, \dots, L_k\}$, так, что L_{k+1}, \dots, L_m линейно выражаются через L_1, \dots, L_k .

Рассмотрим множество Ω в пространстве \mathbb{R}^{k+1} :

$$\Omega = \{Y = (y_0, \dots, y_k) : y_0 = L(f), y_i = L_i(f), i \in 1:k, f \in W\}.$$

Нетрудно понять, что для ранее введенной величины y^* справедливо равенство

$$y^* = \sup_{(y_0, 0, \dots, 0) \in \Omega} y_0.$$

Точка $Y^* = (y^*, 0, \dots, 0)$ является граничной точкой Ω . Проведем через нее опорную гиперплоскость (см. рис. 1 для случая $k = m$, $\Omega = D$). Из геометрических соображений (по теореме отделимости) с учетом центральной симметрии Ω найдется ненулевой вектор $B = (b_0, b_1, \dots, b_k)$, такой, что

$$|(B, Y)| \leq (B, Y^*) \quad \forall Y \in \Omega,$$

или, в равносильной форме,

$$\left| b_0 L(f) + \sum_{i=1}^k b_i L_i(f) \right| \leq b_0 y^* \quad \forall f \in W.$$

В силу линейной независимости L_1, \dots, L_k на W коэффициент b_0 отличен от нуля. Разделим неравенство на $|b_0|$. Получим

$$R \leq \sup_{f \in W} \left| L(f) - \sum_{i=1}^n a_i^* L_i(f) \right| \leq y^*,$$

где $a_i^* = -b_i/b_0$, $i \in 1:k$, $a_i^* = 0$, $i \in k+1:m$. Неравенство $R \geq y^*$ уже было доказано, значит, $R = y^*$, и лемма доказана.

§ 3. Сплайновые алгоритмы, их оптимальность и центральность

1. В этом параграфе рассматривается важный частный случай задачи § 2 об оптимальном восстановлении линейного функционала $L(f)$ по значениям m линейных функционалов $L_i(f)$ на множестве $W \subset \mathcal{X}$. Предполагается, что множество W задано в виде

$$W = \{f \in \mathcal{X} : \|Tf\|^2 \leq M^2\}, \tag{3.1}$$

где T — некоторый линейный оператор, действующий из \mathcal{X} в гильбертово пространство H .

По информации $If = (L_1(f), \dots, L_m(f))$ можно построить сплайн $\sigma(f)$, который является решением задачи

$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min_{\{g \in \mathcal{X} : L_i(g) = L_i(f), i \in 1 : m\}}. \quad (3.2)$$

Как и в § 1, используем обозначения

$$N(I) = \{f \in \mathcal{X} : If = 0\}, \quad N(T) = \{f \in \mathcal{X} : Tf = 0\}.$$

Будем предполагать, что $TN(I)$ замкнуто в H и $N(T) \cap N(I) = \{\emptyset\}$. Тогда, как показано в § 1, решение $\sigma(f)$ задачи (3.2) существует и единственno для любого $f \in \mathcal{X}$.

Сплайновым алгоритмом называется алгоритм

$$\Phi_0(If) = L(\sigma(f)).$$

Сплайновый алгоритм заключается в том, что по информации If строится натуральный сплайн $\sigma(f)$ (удовлетворяющий условиям $L_i(\sigma(f)) = L_i(f)$, $i \in 1 : m$), а затем к сплайну применяется функционал L .

Лемма 3.1. Сплайновый алгоритм является линейным, т. е. может быть представлен в виде

$$L(\sigma(f)) = \sum_{k=1}^m a_k^* L_k(f), \quad f \in \mathcal{X}, \quad (3.3)$$

где a_k^* — некоторые коэффициенты.

Доказательство. Введем фундаментальные сплайны σ_k , являющиеся решением задачи

$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min_{\{g \in \mathcal{X} : L_i(g) = \delta_{ik}, i \in 1 : m\}},$$

где $\delta_{ik} = 0$ при $i \neq k$ и $\delta_{kk} = 1$. По теореме 1.1,

$$\langle T\sigma_k, Th \rangle = 0 \quad \forall h \in N(I). \quad (3.4)$$

Элемент $\sigma = \sum_{k=1}^m L_k(f) \sigma_k$ удовлетворяет ограничениям

$$L_i(\sigma) = \sum_{k=1}^m L_k(f) \delta_{ik} = L_i(f), \quad i \in 1 : m,$$

и в силу (3.4) — соотношению ортогональности

$$\langle T\sigma, Th \rangle = 0 \quad \forall h \in N(I).$$

По теореме 1.1, σ является решением задачи (1.1), т. е. совпадает с

$$\sigma(f) = \sum_{k=1}^m L_k(f) \sigma_k.$$

Применим к обеим частям этого равенства линейный функционал L и положим $a_k^* = L(\sigma_k)$. Тогда получим равенство (3.3). Лемма доказана.

2. В § 2 введено понятие оптимального алгоритма. Справедлива следующая теорема.

Теорема 3.1. *Сплайновый алгоритм оптимален.*

Доказательство. Нетрудно проверить, что множество (3.1) выпукло и центрально-симметрично. По лемме Смоляка 2.1, для погрешности оптимального восстановления справедливо равенство

$$R = \sup_{f \in W \cap N(I)} |L(f)|. \quad (3.5)$$

Нужно показать, что погрешность сплайнового алгоритма не больше R , т. е.

$$\sup_{f \in W} |L(f) - L(\sigma(f))| \leq R. \quad (3.6)$$

Возьмем произвольный элемент $f \in W$ и положим $h = f - \sigma(f)$. Поскольку $I\sigma(f) = If$, то $Ih = 0$. По необходимому условию оптимальности $\langle T\sigma(f), Th \rangle = 0$. Поэтому

$$M^2 \geq \|Tf\|^2 = \|T\sigma(f) + Th\|^2 = \|T\sigma(f)\|^2 + \|Th\|^2.$$

Отсюда $\|Th\|^2 \leq M^2$. Итак, $h \in W \cap N(I)$. В силу (3.5)

$$|L(f) - L(\sigma(f))| = |L(h)| \leq R,$$

откуда следует (3.6). Теорема доказана.

3. Понятие оптимального алгоритма связано с множеством W , мы рассчитываем на «самый худший» элемент $f \in W$, т. е. минимизируем максимальную погрешность алгоритмов на множестве W .

Введем понятие центрального алгоритма. Центральный алгоритм наилучшим образом восстанавливает функционал $L(f)$ по информации If при каждом $f \in W$. Введем множество на числовой оси

$$U(f) = \{y = L(g) : g \in W, Ig = If\},$$

это все возможные значения функционала L при данной информации If . В случае выпуклого множества W множество $U(f)$ также выпукло, т. е. представляет собой промежуток на вещественной оси. Действительно, если $y_k = L(g_k) \in U(f)$, $g_k \in W$, $Ig_k = If$, $k = 0, 1$, то $\alpha y_0 + (1 - \alpha) y_1 = L(\alpha g_0 + (1 - \alpha) g_1) \in U(f)$, ибо $\alpha g_0 + (1 - \alpha) g_1 \in W$, $I(\alpha g_0 + (1 - \alpha) g_1) = If$ при всех $\alpha \in [0, 1]$.

Центральным называется алгоритм Φ_0 , который информации If ставит в соответствие центр промежутка $U(f)$, т. е.

$$\Phi_0(IF) = \frac{1}{2} (\sup U(f) + \inf U(f))$$

(если $U(f) = (-\infty, \infty)$, то в качестве центра можно взять любую точку). В общем случае центральный алгоритм не обязан быть линейным, но интуитивно ясно, что он всегда является оптимальным.

Лемма 3.2. *Центральный алгоритм является оптимальным.*

Доказательство. Обозначим $\text{rad } U(f)$ половину длины промежутка $U(f)$, т. е.

$$\text{rad } U(f) = \frac{1}{2} (\sup U(f) - \inf U(f)).$$

Не исключено, что радиус равен $+\infty$. Для погрешности центрального алгоритма Φ_0 на множестве W имеем:

$$\begin{aligned} e(\Phi_0) &:= \sup_{f \in W} |L(f) - \Phi_0(If)| = \sup_{f \in W} \sup_{\substack{g \in W \\ Ig=If}} |L(g) - \Phi_0(Ig)| = \\ &= \sup_{f \in W} \sup_{y \in U(f)} |y - \Phi_0(If)| = \sup_{f \in W} \text{rad } U(f). \end{aligned}$$

Аналогично для произвольного алгоритма Φ

$$e(\Phi) = \sup_{f \in W} \sup_{y \in U(f)} |y - \Phi(If)| \geq \sup_{f \in W} \text{rad } U(f).$$

Значит, $e(\Phi) \geq e(\Phi_0)$ и оптимальность Φ_0 доказана. Лемма доказана.

Вернемся к случаю, когда множество W задано в виде (3.1) и выполнены предположения, при которых определен сплайновый алгоритм $\Phi_0(If) = L(\sigma(f))$. Довольно неожиданно, что этот алгоритм является центральным.

Теорема 3.2. Сплайновый алгоритм Φ_0 является центральным.

Доказательство. При фиксированном $f \in W$ рассмотрим множество

$$V(f) = \{g \in W : Ig = If\}.$$

Очевидно, что

$$\text{rad } U(f) = \inf_y \sup_{g \in V(f)} |L(g) - y| \quad (3.7)$$

и то число y_0 , на котором достигается инфимум, является центром $U(f)$.

Если $g \in V(f)$, то вектор $h = g - \sigma(f)$ принадлежит $N(I)$. По необходимому условию оптимальности (см. теорему 1.1)

$$\langle T\sigma(f), Th \rangle = 0.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} M^2 &\geq \|Tg\|^2 = \|T\sigma(f) + Th\|^2 = \|T\sigma(f)\|^2 + \|Th\|^2, \\ \|Th\|^2 &\leq M^2 - \|T\sigma(f)\|^2. \end{aligned} \quad (3.8)$$

Обратно, если $h \in N(I)$ и выполнено (3.8), то $g = \sigma(f) + h \in V(f)$. Итак,

$$V(f) = \{g = \sigma(f) + h : h \in N(I), \|Th\|^2 \leq M^2 - \|T\sigma(f)\|^2\}. \quad (3.9)$$

Отсюда в силу (3.7) и (3.9)

$$\begin{aligned} \text{rad } U(f) &\leq \sup_{g \in V(f)} |L(g) - L(\sigma(f))| = \\ &= \sup \{|L(h)| : h \in N(I), \|Th\| \leq \sqrt{M^2 - \|T\sigma(f)\|^2}\} = \\ &= \sup \{|L(h)| : h \in N(I), \|Th\| \leq M\} \sqrt{1 - \frac{\|T\sigma(f)\|^2}{M^2}}. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Неравенство $\| Th \| \leq M$ равносильно включению $h \in W$. Поэтому последний супремум есть знакомая нам величина R (см. лемму 2.1):

$$R = \sup_{h \in N(I) \cap W} |L(h)|.$$

Окончательно получим, что

$$\text{rad } U(f) \leq R \sqrt{1 - \frac{\|T\sigma(f)\|^2}{M^2}}.$$

С другой стороны, для любого вещественного y и числа $y_1 = L(\sigma(f)) - y$ имеем с учетом (3.9):

$$\sup_{g \in V(f)} |L(g) - y| = \sup \{|L(h) + y_1| : h \in N(I), \|Th\| \leq \sqrt{M^2 - \|T\sigma(f)\|^2}\}.$$

Рассматривая элементы h и $-h$, получим:

$$\max \{|L(h) + y_1|, |L(-h) + y_1|\} \geq |L(h)|.$$

Поэтому для любого y

$$\begin{aligned} \sup_{g \in V(f)} |L(g) - y| &\geq \sup \{|L(h)| : h \in N(I), \|Th\| \leq \sqrt{M^2 - \|T\sigma(f)\|^2}\} = \\ &= R \sqrt{1 - \frac{\|T\sigma(f)\|^2}{M^2}}. \end{aligned}$$

В силу (3.7)

$$\text{rad } U(f) \geq R \sqrt{1 - \frac{\|T\sigma(f)\|^2}{M^2}}.$$

Значит, в (3.10) имеет место равенство, т. е.

$$\text{rad } U(f) = \sup_{g \in V(f)} |L(g) - L(\sigma(f))|.$$

Другими словами, инфимум (3.7) достигается в точке $L(\sigma(f))$, отсюда $L(\sigma(f))$ является центром $U(f)$. Теорема доказана.

З а м е ч а н и е 3.1. Полутно вычислен радиус $U(f)$:

$$\text{rad } U(f) = R \sqrt{1 - \frac{\|T\sigma(f)\|^2}{M^2}}, \quad f \in W, \quad (3.11)$$

где R — погрешность алгоритма Φ_0 на всем W (см. § 1). Если не стремиться доказывать соотношение (3.11), то при доказательстве теоремы 3.2 можно обойтись без леммы Смоляка 2.1.

Теорема 3.1 является обобщением одной теоремы Шенберга (см. [55]). Теорему 3.2 получили Голомб и Вайнбергер (см. [42]).

Г л а в а 2

НАТУРАЛЬНЫЕ СПЛАЙНЫ, ЗАДАННЫЕ НА ВСЕМ ПРОСТРАНСТВЕ

§ 4. Фундаментальное решение полигармонического уравнения и теорема С. Л. Соболева о плотности финитных функций

Зафиксируем целые числа r и n , $2r > n \geq 1$. Фундаментальным решением полигармонического уравнения называем функцию G , заданную на \mathbb{R}^n , для которой

$$\Delta^r G(X) = \delta(X), \quad (4.1)$$

где Δ — оператор Лапласа, δ — дельта-функция. Равенство (4.1) означает, что

$$\int_{\mathbb{R}^n} G(X) \Delta^r \varphi(X) dX = \varphi(0) \quad (4.2)$$

для любой $\varphi \in C_0^\infty$ (C_0^∞ — класс бесконечно дифференцируемых финитных функций). Известно (см. книгу С. Л. Соболева [29]), что при n нечетном $G(X) = c_{rn} \|X\|^{2r-n}$, а при n четном $G(X) = c_{rn} \|X\|^{2r-n} \ln \|X\|$, где c_{rn} — некоторые константы, а $\|X\| = (x_1^2 + \dots + x_n^2)^{1/2}$.

Обозначим $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ класс функций, заданных на \mathbb{R}^n , у которых существуют все обобщенные производные r -го порядка, суммируемые с квадратом на \mathbb{R}^n . Введем оператор T , который функции $f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ ставит в соответствие набор производных r -го порядка

$$Tf = \left\{ \sqrt{\frac{r!}{\alpha!}} D^\alpha f \mid |\alpha| = r \right\}.$$

Здесь $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$, α_i — целые числа ≥ 0 , $D^\alpha f = \partial^\alpha f / \partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}$, $|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$. Значения Tf принадлежат пространству

$$H = L_2(\mathbb{R}^n) \times L_2(\mathbb{R}^n) \times \dots \times L_2(\mathbb{R}^n),$$

где число сомножителей равно числу мультииндексов α , таких, что $|\alpha| = r$. В частности,

$$\langle Tf, Tg \rangle = \sum_{|\alpha|=r} \frac{r!}{\alpha!} \int_{\mathbb{R}^n} D^\alpha f \cdot D^\alpha g dX. \quad (4.3)$$

Пусть \mathcal{P}_{r-1} — класс полиномов на \mathbb{R}^n степени $\leq r-1$. Факторпространство $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) / \mathcal{P}_{r-1}$ со скалярным произведением $\langle Tf, Tg \rangle$ является гильбертовым пространством. Следуя [43], можно избежать рассмотрения факторпространств.

Пусть X_1, \dots, X_p — фиксированные точки из \mathbb{R}^n , $p = \dim \mathcal{P}_{r-1}$. Предположим, что на системе X_1, \dots, X_p однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов степени $\leq r-1$, т. е. если $Q \in \mathcal{P}_{r-1}$, $Q(X_i) = 0$, $i \in 1:p$, то $Q \equiv 0$. Тогда в $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ можно ввести скалярное произведение и норму

$$\begin{aligned}[f, g]_r &= \langle Tf, Tg \rangle + \sum_{i=1}^p f(X_i)g(X_i), \\ \|f\|_r &= [f, f]_r^{1/2},\end{aligned}\tag{4.4}$$

с которыми $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ становится гильбертовым пространством.

Сформулируем теорему вложения для пространств $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ в формулировке из [43].

Теорема 4.1. Пусть $2r > n$, $[n/2]$ — целая часть $n/2$. Тогда элементы $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ принадлежат $C^{r-[n/2]-1}(\mathbb{R}^n)$, и если $\|f_v\|_r \rightarrow 0$ при $v \rightarrow \infty$, то $f_v \rightarrow 0$ в $C^{r-[n/2]-1}(\mathbb{R}^n)$, т. е. $D^\alpha f_v \rightarrow 0$ равномерно на компактных подмножествах при $|\alpha| \leq r - [n/2] - 1$.

Следующая теорема установлена С. Л. Соболевым [29] в предположении $2r > n$. Интересное ее доказательство приведено в [43].

Теорема 4.2. Прямая сумма $C_0^\infty + \mathcal{P}_{r-1}$ плотна в $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, т. е. для любой $f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ найдутся $\Phi_v \in C_0^\infty$ и $Q_v \in \mathcal{P}_{r-1}$, такие, что $\|f - (\Phi_v + Q_v)\|_r \rightarrow 0$ при $v \rightarrow \infty$.

§ 5. Натуральные сплайны, заданные на всем пространстве

1. Экстремальное свойство натуральных сплайнов. Зафиксируем целые числа r и n , $2r > n \geq 1$. Натуральные сплайны n переменных вводятся по аналогии с натуральными сплайнами одной переменной. В одномерном случае фиксируются узлы $x_1 < \dots < x_m$ и натуральный сплайн степени $2r-1$ может быть записан в виде

$$S(x) = Q_0(x) + \sum_{i=1}^m d_i |x - x_i|^{2r-1},\tag{5.1}$$

где $Q_0 \in \mathcal{P}_{r-1}$, а коэффициенты d_i удовлетворяют условиям

$$\sum_{i=1}^m d_i Q(x_i) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_{r-1}.\tag{5.2}$$

При $r = 1$ (случай ломаных) функция $|x|$ использовалась для записи сплайна еще С. Н. Бернштейном в 1905 г., а условие (5.2) можно найти в [37, 43]. Обозначим D^{2r} производную порядка $2r$ и отметим, что $D^{2r} |x|^{2r-1} = 2(2r-1)! \delta(x)$, где $\delta(x)$ — дельта-функция.

В случае n переменных $X = (x_1, \dots, x_n)$ натуральным сплайном называется функция вида

$$S(X) = Q_0(X) + \sum_{i=1}^m d_i G(X - X_i), \quad (5.3)$$

где $Q_0 \in \mathcal{P}_{r-1}$, а коэффициенты d_i удовлетворяют условиям

$$\sum_{i=1}^m d_i Q(X_i) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_{r-1}. \quad (5.4)$$

Функция G — это решение уравнения $\Delta^r G(X) = \delta(X)$, где Δ — оператор Лапласа (см. § 4).

Лемма 5.1. Любой натуральный сплайн (5.3)–(5.4) принадлежит пространству $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$.

Доказательство. Пусть $|\alpha| = r$. Нужно показать, что производная

$$D^\alpha S(X) = \sum_{i=1}^m d_i D^\alpha G(X - X_i)$$

суммируема с квадратом на \mathbb{R}^n . Для производных функции G порядка $|\beta| = k = 0, 1, 2, \dots$ справедливо представление

$$D^\beta G(X) = P_{2r-n-k}(X) \ln \rho + \frac{Q_{2r-n+k}(X)}{\rho^{2k}} \quad \text{при } n \text{ четном}, \quad (5.5)$$

$$D^\beta G(X) = Q_k(X) \rho^{2r-n-2k} \quad \text{при } n \text{ нечетном}, \quad (5.6)$$

где $\rho = \|X\|$, а P_i и Q_i — некоторые однородные полиномы степени i :

$$P_i(X) = \sum_{|\alpha|=i} p_\alpha X^\alpha, \quad Q_i(X) = \sum_{|\alpha|=i} q_\alpha X^\alpha,$$

причем $P_i \equiv 0$ при $i < 0$. Это легко доказывается индукцией по k . Поэтому при $\rho \rightarrow 0$ и n четном

$$D^\alpha G(X) = O(\rho^{r-n} \ln \rho),$$

а при n нечетном

$$D^\alpha G(X) = Q_r(X) \rho^{-n} = O(\rho^{r-n}).$$

Отсюда следует, что $D^\alpha S$ суммируема с квадратом в окрестности каждой точки X_i и значит — в любой конечной области.

Покажем, что $(D^\alpha S)^2$ суммируема на всем пространстве \mathbb{R}^n . Введем функцию $v(X) = D^\alpha G(X)$, $\Phi(t) = v(X - tX_i)$. По формуле Тэйлора,

$$\Phi(t) = \sum_{k=0}^{r-1} \frac{\Phi^{(k)}(0)}{k!} + \frac{1}{(r-1)!} \int_0^1 (1-t)^{r-1} \Phi^{(r)}(t) dt.$$

Отсюда

$$D^\alpha G(X - X_i) = Q(X; X_i) + \omega(X; X_i), \quad (5.7)$$

где

$$Q(X; X_i) = \sum_{|\beta| \leq r-1} q_\beta(X) X_i^\beta$$

— полином степени $\leq r-1$ от X_i , а

$$\omega(X; X_i) = \frac{1}{(r-1)!} \int_0^1 (1-t)^{r-1} \Phi^{(r)}(t) dt.$$

Производная $\Phi^{(r)}(t)$ выражается через производные порядка $2r$ от функции G , поэтому из (5.5) и (5.6) следует, что

$$\omega(X; X_i) = O(\rho^{-n}) \text{ при } \rho = \|X\| \rightarrow \infty.$$

Умножим (5.7) на d_i , просуммируем по $i \in 1 : m$ и учтем соотношение (5.4). Получим, что

$$D^\alpha S(X) = \sum_{i=1}^m d_i \omega(X; X_i) = O(\rho^{-n}) \text{ при } \rho \rightarrow \infty.$$

Отсюда следует, что $D^\alpha S \in L_2(\mathbb{R}^n)$. Лемма доказана. Другим способом лемма доказана в [44].

Предположим, что $m \geq p := \dim \mathcal{P}_{r-1}$ и на первых p точках X_1, \dots, X_p однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов степени $\leq r-1$. Тогда в $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ можно ввести норму:

$$\|f\|_r^2 = \langle Tf, Tf \rangle + \sum_{i=1}^p f^2(X_i),$$

где $\langle Tf, Tg \rangle$ определено формулой (4.3).

Установим теперь ключевое тождество.

Теорема 5.1. Для любого натурального сплайна S и любой функции $g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ справедливо тождество

$$\langle TS, Tg \rangle = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i g(X_i). \quad (5.8)$$

Доказательство. Возьмем произвольную функцию $g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$. По теореме 4.2 найдутся $Q_h \in \mathcal{P}_{r-1}$ и $\varphi_h \in C_0^\infty$, такие, что $\|g - Q_h - \varphi_h\|_r \rightarrow 0$ при $h \rightarrow 0$. Отсюда $\langle TS, T\varphi_h \rangle \rightarrow \langle TS, Tg \rangle$ и, по теореме 4.1,

$$Q_h(X_i) + \varphi_h(X_i) \rightarrow g(X_i), \quad i \in 1 : m.$$

Имеем:

$$\begin{aligned} \langle TS, T\varphi_h \rangle &= \sum_{|\alpha|=r} \frac{r!}{\alpha!} \int_{\mathbb{R}^n} D^\alpha S \cdot D^\alpha \varphi_h dX = \\ &= \sum_{i=1}^m d_i \sum_{|\alpha|=r} \frac{r!}{\alpha!} \int_{\mathbb{R}^n} D^\alpha G(X - X_i) \cdot D^\alpha \varphi_h(X) = \end{aligned}$$

$$= (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i \int_{\mathbb{R}^n} G(X - X_i) \cdot \Delta^r \varphi_k(X) dX = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i \varphi_k(X_i).$$

Здесь учтено соотношение (4.2). Учтем теперь соотношение (5.4). Тогда получим:

$$\langle TS, T\varphi_k \rangle = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i [Q_k(X_i) + \varphi_k(X_i)].$$

При $k \rightarrow \infty$ получим (5.8). Теорема доказана.

Из доказанного ключевого тождества (5.8) следуют основные утверждения о натуральных сплайнах.

Рассмотрим задачу интерполяции некоторой функции f натуральными сплайнами. Требуется найти сплайн S , такой, что

$$S(X_i) = f(X_i), \quad i \in 1 : m. \quad (5.9)$$

Формально к уравнениям (5.9) нужно добавить уравнения

$$\sum_{i=1}^m d_i Q_k(X_i) = 0, \quad k \in 1 : p, \quad (5.10)$$

где полиномы Q_1, \dots, Q_p образуют базис в \mathcal{P}_{r-1} , $p := \dim \mathcal{P}_{r-1}$. Тогда получим систему $m + p$ уравнений с $m + p$ неизвестными d_i и неизвестными коэффициентами полинома Q_0 в (5.3).

Теорема 5.2. *Интерполяционный натуральный сплайн существует и единственен.*

Доказательство. Достаточно доказать, что если натуральный сплайн (5.3) удовлетворяет соотношениям

$$S(X_i) = 0, \quad i \in 1 : m,$$

то $d_i = 0$, $i \in 1 : m$, и $Q_0 \equiv 0$. Положив в (5.8) $g = S$, получим:

$$\langle TS, TS \rangle = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i S(X_i) = 0.$$

Поэтому все обобщенные производные от S порядка r эквивалентны нулю и, значит, $S \in \mathcal{P}_{r-1}$.

Возьмем от S какую-нибудь производную порядка $2r$, скажем, производную D_1^{2r} по переменной x_1 . Тогда

$$D_1^{2r} S(X) = \sum_{i=1}^m d_i D_1^{2r} G(X - X_i) = 0 \quad \forall X \in \mathbb{R}^n \setminus \{X_1, \dots, X_m\}.$$

Из (5.5) и (5.6) легко следует, что

$$\lim_{X \rightarrow X_i} |D_1^{2r}(X - X_i)| = \infty.$$

Отсюда получаем, что $d_i = 0$, $i \in 1 : m$. Теперь имеем

$$S(X_i) = Q_0(X_i) = 0, \quad i \in 1 : p.$$

По сделанному предположению, интерполяционная задача на точках X_1, \dots, X_p однозначно разрешима. Отсюда $Q_0 \equiv 0$. Теорема доказана.

Единственный интерполяционный натуральный сплайн в дальнейшем обозначаем $S(f)$.

Теперь можно установить основное экстремальное свойство натуральных сплайнов.

Теорема 5.3. Сплайн $S(f)$ является единственным решением задачи

$$\|Tg\|^2 := \sum_{|\alpha|=r} \frac{r!}{\alpha!} \int_{\mathbb{R}^n} (D^\alpha g)^2 dX \rightarrow \min_{\substack{g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) \\ g(X_i) = f(X_i), i \in 1:m}} . \quad (5.11)$$

Доказательство. По теореме 1.1, нужно проверить условие ортогональности

$$\langle TS(f), Th \rangle = 0 \quad \forall h \in N(I), \quad (5.12)$$

где $N(I) = \{h \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) \mid h(X_i) = 0, i \in 1:m\}$. Условие (5.12) выполняется в силу ключевого тождества (5.8):

$$\langle TS(f), Th \rangle = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i h(X_i) = 0.$$

Единственность решения следует из соотношений

$$N(T) \cap N(I) = \mathcal{P}_{r-1} \cap N(I) = \{\emptyset\}.$$

Теорема доказана.

Замечание 5.1. Теорему 5.3 впервые доказал Ж. Дюшон [36, 37]. Позднее к ней возвращались в [3, 4, 43—46].

Замечание 5.2. При r четном функционал (5.11) может быть записан в другом виде. Справедливо равенство

$$\|Tg\|^2 = \int_{\mathbb{R}^n} (\Delta^{r/2} g)^2 dX \quad \forall g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n), \quad (5.13)$$

где Δ — оператор Лапласа. Для доказательства равенства (5.13) нужно воспользоваться теоремой 4.2 и аппроксимировать $g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ последовательностью функций $\varphi_k + Q_k$, где $\varphi_k \in C_0^\infty$, $Q_k \in \mathcal{P}_{r-1}$. Например, при $n = r = 2$ имеем:

$$\begin{aligned} \int (g_{xy})^2 dX &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int g_{xy} \cdot \varphi_{kxy} dX = - \lim_{k \rightarrow \infty} \int g_x \cdot \varphi_{kxyy} dX = \\ &= \lim_{k \rightarrow \infty} \int g_{xx} \cdot \varphi_{kyy} dX = \int g_{xx} \cdot g_{yy} dX. \end{aligned}$$

Отсюда

$$\|Tg\|^2 := \int [(g_{xx})^2 + 2(g_{xy})^2 + (g_{yy})^2] dX = \int (\Delta g)^2 dX \quad \forall g \in L_2^{(2)}(\mathbb{R}^2).$$

Экстремальная задача с функционалом $\int (\Delta g)^2 dX$ изучалась в [23, 27]. Наконец, при $n = r = 2$ минимизируемый функционал может быть записан в виде

$$\begin{aligned} v \|Tg\|^2 + (1-v) \int (\Delta g)^2 dX &= \int [(g_{xx})^2 + 2v(g_{xy})^2 + (g_{yy})^2 + \\ &+ 2(1-v)g_{xx} \cdot g_{yy}] dX, \end{aligned}$$

где v — произвольное число. В такой форме записывается потенциальная энергия изогнутой пластины. Роль v играет коэффициент Пуассона для материала пластины.

Таким образом, задача (5.11) обобщает задачу минимизации потенциальной энергии пластины.

2. Другой подход к построению натуральных сплайнов. В п. 2 снова рассмотрим задачу (5.11), которую запишем теперь в виде

$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min_{g \in \Omega}, \quad (5.14)$$

где $\Omega = \{g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) \mid g(X_i) = z_i, i \in 1 : m\}$, z_1, \dots, z_m — фиксированные числа. Для решения задачи (5.14) используем подход Ж. Мейнгуэта [45]. Этот подход приводит также к новой вычислительной схеме построения натуральных сплайнов. Как и ранее, предполагаем, что $m > p$ и на первых p точках X_1, \dots, X_p однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов из \mathcal{P}_{r-1} . Рассмотрим фундаментальные полиномы $q_i \in \mathcal{P}_{r-1}$, удовлетворяющие условиям

$$q_i(X_j) = \delta_{ij}, \quad i, j \in 1 : p.$$

Для любой функции $g \in \Omega$ интерполяционный полином $Q^* \in \mathcal{P}_{r-1}$ записывается в виде

$$Q^*(X) = \sum_{i=1}^p z_i q_i(X).$$

Он удовлетворяет соотношениям $Q^*(X_j) = g(X_j) = z_j, j \in 1 : p$. Рассмотрим функцию $w = g - Q^*$. Для нее имеем:

$$\begin{aligned} w(X_j) &= 0, \quad j \in 1 : p, \\ w(X_i) &= z_i - Q^*(X_i) = z'_i, \quad i \in p+1 : m, \\ \|Tw\|^2 &= \|Tg\|^2. \end{aligned}$$

Поэтому задача (5.14) равносильна задаче

$$\|Tw\|^2 \rightarrow \min_{\substack{w \in \mathcal{X}_0 \\ w(X_i) = z'_i, i \in p+1 : m}}, \quad (5.15)$$

где $\mathcal{X}_0 = \{w \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) \mid w(X_i) = 0, i \in 1 : p\}$.

Покажем, что \mathcal{X}_0 является гильбертовым пространством с воспроизводящим ядром. \mathcal{X}_0 — гильбертово пространство, ибо \mathcal{X}_0 является замкнутым подпространством пространства $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$. Поскольку $w(X_j) = 0, j \in 1 : p$, то скалярное произведение (4.4) на \mathcal{X}_0 принимает вид

$$[v, w]_r = \langle T v, T w \rangle \quad \forall v, w \in \mathcal{X}_0.$$

Для построения воспроизводящего ядра зафиксируем точку $X \in \mathbb{R}^n$. Нужно построить функцию $K_X \in \mathcal{X}_0$, такую, что

$$\langle T K_X, T w \rangle = w(X) \quad \forall w \in \mathcal{X}_0. \quad (5.16)$$

Сначала рассмотрим функцию

$$H_X(Y) = (-1)^r \left[G(Y - X) - \sum_{j=1}^p q_j(X) G(Y - X_j) \right]. \quad (5.17)$$

Выражение в квадратных скобках является сплайном с узлами X, X_1, \dots, X_p и коэффициентами $1, -q_1(X), \dots, -q_p(X)$, причем выполнено соотношение

$$Q(X) - \sum_{j=1}^p q_j(X) Q(X_j) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_{r-1}$$

(интерполяционный полином для Q совпадает с Q). Поэтому H_X является натуральным сплайном (если X совпадает с одной из точек X_1, \dots, X_p , то H_X все равно является натуральным сплайном). По лемме 5.1, $H_X \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, а в силу ключевого тождества (5.8)

$$\langle TH_X, Tw \rangle = w(X) - \sum_{j=1}^p q_j(X) w(X_j) = w(X) \quad \forall w \in \mathcal{W}_0. \quad (5.18)$$

Положим теперь

$$K_X(Y) = H_X(Y) - \sum_{i=1}^p H_X(X_i) q_i(Y). \quad (5.19)$$

Очевидно, $K_X(X_j) = 0$, $j \in 1 : p$, и поскольку $TK_X = TH_X$, то $K_X \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ и из (5.18) следует (5.16). Воспроизводящее ядро построено. Отметим, что $K_X(Y)$ зависит только от первых p точек X_1, \dots, X_p .

По теореме 1.1, функция w^* , удовлетворяющая ограничениям задачи (5.15), является решением задачи (5.15) тогда и только тогда, когда выполнено условие ортогональности

$$\langle Tw^*, Th \rangle = 0 \quad \forall h \in N(I), \quad (5.20)$$

где

$$N(I) = \{h \in \mathcal{W}_0 \mid h(X_i) = 0, i \in p+1 : m\}.$$

Положив в (5.16) $X = X_i$, $w = h$, получим:

$$N(I) = \{h \in \mathcal{W}_0 \mid \langle TK_{X_i}, Th \rangle = 0, i \in p+1 : m\}. \quad (5.21)$$

Соотношение (5.20) показывает, что w^* принадлежит ортогональному дополнению к $N(I)$ в \mathcal{W}_0 . В силу (5.21) это ортогональное дополнение состоит из всевозможных линейных комбинаций элементов K_{X_i} , $i \in p+1 : m$. Поэтому

$$w^*(X) = \sum_{i=p+1}^m c_i K_{X_i}(X).$$

Коэффициенты c_i находятся из уравнений

$$w^*(X_k) = \sum_{i=p+1}^m c_i K_{X_i}(X_k) = z'_k, \quad k \in p+1 : m. \quad (5.22)$$

Ввиду соотношения (5.16)

$$K_{X_i}(X_k) = \langle T K_{X_k}, T K_{X_i} \rangle =: A_{ki}, \quad i, k \in p+1 : m.$$

Матрица с элементами A_{ki} положительно определена, так как она является матрицей Грама системы линейно независимых элементов K_{X_i} из \mathcal{H}_0 .

Система (5.22) имеет единственное решение. Решением исходной задачи (5.14) является функция

$$S(X) = w^*(X) + \sum_{i=1}^p z_i q_i(X).$$

Покажем, что $S(X)$ является натуральным сплайном. Достаточно установить, что w^* — натуральный сплайн. По формуле (5.19),

$$w^*(X) = \sum_{i=p+1}^m c_i K_{X_i}(X) = Q_0(X) + \sum_{i=p+1}^m c_i H_{X_i}(X),$$

где $Q_0 \in \mathcal{P}_{r-1}$. В силу (5.17)

$$\begin{aligned} w^*(X) &= Q_0(X) + (-1)^r \sum_{i=p+1}^m \xi_i \left[G(X - X_i) - \sum_{j=1}^p q_j(X_i) G(X - X_j) \right] = \\ &= Q_0(X) + (-1)^r \left\{ - \sum_{j=1}^p \sum_{i=p+1}^m c_i q_j(X_i) G(X - X_j) + \sum_{i=p+1}^m c_i G(X - X_i) \right\}. \end{aligned}$$

Нужно проверить выполнение соотношения

$$- \sum_{j=1}^p \sum_{i=p+1}^m c_i q_j(X_i) Q(X_j) + \sum_{i=p+1}^m c_i Q(X_i) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_{r-1}.$$

Оно выполнено, ибо

$$\sum_{j=1}^p q_j(X_i) Q(X_j) = Q(X_i), \quad i \in p+1 : m.$$

Таким образом, мы вторично получили, что решение задачи (5.14) является натуральным сплайном. В подходе Ж. Мейнгуэта [45—47] для нахождения этого сплайна нужно построить фундаментальные полиномы q_i , $i \in 1 : p$, и решить систему (5.22) порядка $m - p$ с положительно определенной матрицей A .

В [45—47] для решения системы (5.22) рекомендуется применять метод Холецкого, в котором матрица A представляется в виде

$$A = L \cdot L^\tau,$$

где L — нижняя треугольная матрица, L^τ — транспонированная матрица L , причем диагональные элементы $l_{kk} > 0$.

Кроме свойств устойчивости по отношению к ошибкам округления метод Холецкого обладает следующим достоинством. Добавим точку X_{m+1} и значение z_{m+1} . Требуется построить натуральный сплайн S с узлами X_1, \dots, X_{m+1} , удовлетворяющий условиям

$$\bar{S}(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m+1.$$

Для этого нужно решить систему типа (5.22) с положительной определенной матрицей

$$\bar{A} = \left[\begin{array}{c|c} A & b \\ \hline b^T & A_{m+1, m+1} \end{array} \right], \quad b = \begin{bmatrix} A_{p+1, m+1} \\ \vdots \\ A_{m, m+1} \end{bmatrix}.$$

В разложении $\bar{A} = \bar{L} \cdot \bar{L}^T$ треугольный множитель \bar{L} ищем в виде

$$\bar{L} = \left[\begin{array}{c|c} L & 0 \\ \hline v^T & l_{m+1, m+1} \end{array} \right].$$

Из условия $\bar{L} \cdot \bar{L}^T = \bar{A}$ получаем:

$$Lv = b, \quad A_{m+1, m+1} = v^T v + l_{m+1, m+1}^2.$$

Решая систему $Lv = b$, получаем v , а затем находим

$$l_{m+1, m+1} = \sqrt{A_{m+1, m+1} - v^T v}.$$

(Можно показать, что в силу положительной определенности матрицы \bar{A} подкоренное выражение положительно).

Таким образом, при решении задачи интерполяции на $m + 1$ точках можно существенно использовать результаты вычислений для m точек.

3. Приложения к задачам оптимального восстановления функционалов. Полученное в этом параграфе решение $S(f)$ задачи (5.11) используем для построения оптимальных алгоритмов в некоторых задачах оптимального восстановления (см. § 3). Роль линейного пространства \mathcal{X} играет $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, оператор T и пространство H — такие же, как в § 4. Класс W задается в виде

$$W = \{f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) : \|Tf\|^2 \leq M^2\}, \quad (5.23)$$

где M — фиксированное число. Информация If о функции $f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ — это значения функции в m фиксированных точках $X_1, \dots, X_m \in \mathbb{R}^n$:

$$If = (f(X_1), \dots, f(X_m)),$$

причем точки X_i удовлетворяют предположениям, сделанным перед теоремой 5.1. Рассмотрим линейный функционал

$$L(f) = f(X_0), \quad (5.24)$$

где $X_0 \in \mathbb{R}^n$ — фиксированная точка, или функционал

$$L(f) = \int_{\Omega} f(X) dX, \quad (5.25)$$

где $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ — фиксированный компакт.

По теоремам 3.1 и 5.3, оптимальными методами восстановления функционалов (5.24) и (5.25) на классе W являются сплайновые методы

$$f(X_0) \approx S(f; X_0), \quad (5.26)$$

$$\int_{\Omega} f(X) dX \approx \int_{\Omega} S(f; X) dX. \quad (5.27)$$

Рассмотрим теперь нелинейный функционал

$$L(f) = \max_{x \in \Omega} f(x), \quad (5.28)$$

где Ω — фиксированный компакт в \mathbb{R}^n . Методы восстановления будут определяться функциями $\Phi(y_1, \dots, y_m)$ (считаем, что $L(f) \approx \Phi(f(X_1), \dots, f(X_m))$). В отличие от § 2 на функции Φ наложим ограничение $\Phi(0, \dots, 0) = 0$, в остальном функции Φ произвольны (их будем называть алгоритмами).

Задача состоит в нахождении алгоритма, имеющего наименьшую погрешность R на классе W :

$$R = \inf_{\Phi} \sup_{f \in W} |L(f) - \Phi(f(X_1), \dots, f(X_m))|,$$

где инфимум берется по всем алгоритмам Φ , удовлетворяющим условию $\Phi(\emptyset) = 0$.

Следующая теорема установлена в [24], там же можно найти ссылки на одномерный вариант задачи.

Теорема 5.4. *Оптимальным методом восстановления функционала (5.28) на классе W является метод*

$$L(f) \approx \max_{x \in \Omega} S(f; X).$$

Доказательство. Положим $I f = (f(X_1), \dots, f(X_m))$. Оценим величину R снизу, используя условие $\Phi(\emptyset) = 0$:

$$R \geq \inf_{\Phi} \sup_{\substack{f \in W \\ I f = \emptyset}} |L(f) - \Phi(\emptyset)| = \sup_{\substack{f \in W \\ I f = \emptyset}} |\max_{x \in \Omega} f(x)| = \sup_{\substack{f \in W \\ I f = \emptyset}} \max_{x \in \Omega} |f(x)|. \quad (5.29)$$

В то же время справедлива оценка сверху:

$$R \leq \sup_{f \in W} \left| \max_{x \in \Omega} f(x) - \max_{x \in \Omega} S(f; X) \right| \leq \sup_{f \in W} \max_{x \in \Omega} |f(x) - S(f; X)|. \quad (5.30)$$

Обозначим $h = f - S(f)$. Очевидно, $h(X_i) = 0$, $i \in 1 : m$, т.е. $Ih = \emptyset$. В силу ключевого тождества (5.8)

$$\langle TS(f), Th \rangle = 0.$$

Отсюда для любого $f \in W$

$$\|Th\|^2 + \|TS(f)\|^2 = \|Tf\|^2 \leq M^2.$$

Значит, $\|Th\|^2 \leq M^2$, т.е. $h \in W$. Продолжим цепочку неравенств (5.30):

$$R \leq \sup_{\substack{h \in W \\ Th=0}} \max_{x \in \Omega} |h(x)|. \quad (5.31)$$

Сравнивая (5.29) и (5.31), заключаем, что в (5.30) и (5.31) имеют место равенства. В частности,

$$\sup_{f \in W} |L(f) - \max_{x \in \Omega} S(f; X)| = R.$$

Теорема доказана.

Взятие максимума от интерполяционного сплайна $S(f; X)$ является оптимальным методом и в одномерном случае ($\Omega = [a, b]$). Тогда $S(f; x)$ — обычный натуральный сплайн степени $2r - 1$. В [12, с. 74] утверждалось, что метод

$$L(f) \approx \max_{x \in [a, b]} S(f; x)$$

оптimalен по порядку. В нашей постановке задачи он оптimalен.

Результат теоремы 5.4 имеет только теоретический интерес, ибо нахождение максимума сплайна не проще нахождения максимума исходной функции f .

4. Оптимальное нахождение максимума без предположения $\Phi(0) = 0$. Рассмотрим снова задачу оптимального восстановления функционала (5.28) на классе (5.23). Требуется найти

$$R_* = \inf_{\Phi} \sup_{f \in W} |L(f) - \Phi(I_f)|,$$

где инфимум берется по всем алгоритмам Φ (без всяких дополнительных условий). Здесь

$$I_f = (f(X_1), \dots, f(X_m)),$$

где X_i — фиксированные точки компакта Ω .

Введем обозначение для погрешности алгоритма Φ на классе W

$$e(\Phi) := \sup_{f \in W} |L(f) - \Phi(I_f)|.$$

Следуя [31], рассмотрим диаметр информации I

$$d(I, W) = \sup_{\{f_1, f_2 \in W \mid I f_1 = I f_2\}} |L(f_1) - L(f_2)|.$$

В [31, с. 21—22] показано, что половина диаметра служит оценкой снизу погрешности любого алгоритма Φ :

$$e(\Phi) \geq \frac{1}{2} d(I, W). \quad (5.32)$$

Теорема 5.5. Пусть $r \geq 3$, $2r > n$, Ω — выпуклый компакт в \mathbb{R}^n . Тогда оптимальным алгоритмом восстановления функционала (5.28) на классе (5.23) является сплайновый алгоритм

$$L(f) \approx \max_{x \in \Omega} S(f; X) \equiv L(S(f)).$$

Для доказательства потребуются две леммы.

Будем писать $f \in C^2(\Omega)$, если функция f дважды непрерывно дифференцируема на некотором открытом множестве, содержащем Ω .

Лемма 5.2. Пусть Ω — выпуклый компакт в \mathbb{R}^n , $f \in C^2(\Omega)$, $L(f) = f(X_0)$, $X_0 \in \Omega$. Тогда найдется квадратичная функция $z_f(X)$, такая, что

$$L(z_f \pm f) = (z_f \pm f)(X_0).$$

Доказательство. По необходимому условию максимума f на выпуклом компакте Ω , справедливо соотношение (см. [9])

$$(f'(X_0), X - X_0) \leq 0 \quad \forall X \in \Omega. \quad (5.33)$$

В качестве $z_f(X)$ возьмем

$$z_f(X) = f(X_0) + (f'(X_0), X - X_0) - A \|X - X_0\|^2,$$

где $A = \max_{X \in \Omega} \|f''(X)\|$. В силу (5.33) $z_f(X) \leq z_f(X_0)$ для всех $X \in \Omega$. Отсюда $L(z_f + f) = (z_f + f)(X_0)$. Кроме того, по построению, $z_f(X) \leq f(X)$ для всех $X \in \Omega$. Поэтому

$$L(z_f - f) = 0 = (z_f - f)(X_0).$$

Лемма доказана. При $n = 1$ лемма установлена в [26].

Введем вспомогательный класс $W_0 = W \cap C^2(\Omega)$, где W задается формулой (5.23).

Лемма 5.3. Пусть $r \geq 3$, Ω — выпуклый компакт в \mathbb{R}^n . Тогда

$$d(I, W_0) \geq 2 \sup_{f \in W_0 \cap N(I)} \|f\|_{C(\Omega)}. \quad (5.34)$$

Доказательство. Возьмем произвольную функцию $f \in W_0 \cap N(I)$. Пусть

$$\|f\|_{C(\Omega)} := \max_{X \in \Omega} |f(X)| = |f(X_0)|, \quad X_0 \in \Omega.$$

Можно считать, что $f(X_0) \geq 0$ (в противном случае заменить f на $-f$). Тогда $L(f) = f(X_0)$. Применим лемму 5.2 и положим $f_1 = z_f - f$, $f_2 = z_f + f$. Поскольку $Tz_f = 0$ при $r \geq 3$, то $\|Tf_1\| = \|Tf_2\| = \|Tf\| \leq M$ и, значит, $f_1, f_2 \in W_0$. Поскольку $If = 0$, то $If_1 = If_2$. Поэтому

$$\begin{aligned} d(I, W_0) &\geq L(z_f + f) - L(z_f - f) = z_f(X_0) + f(X_0) - z_f(X_0) + f(X_0) = \\ &= 2f(X_0) = 2\|f\|_{C(\Omega)}. \end{aligned}$$

В силу произвольности f выполнено утверждение леммы. Лемма доказана.

Для класса $W_0 = W'_\infty [-1, 1]$, $r \geq 3$, аналогичное утверждение см. в [26].

Доказательство теоремы 5.5. Справедливы соотношения

$$d(I, W) \geq d(I, W_0) \geq 2 \sup_{f \in W_0 \cap N(I)} \|f\|_{C(\Omega)} = 2 \sup_{f \in W \cap N(I)} \|f\|_{C(\Omega)}. \quad (5.35)$$

Первое неравенство очевидно, второе установлено в лемме 5.5.
Докажем последнее равенство.

Возьмем произвольное $\varepsilon > 0$. Рассмотрим любую $f \in W \cap N(I)$ и аппроксимируем ее средними функциями $f_v \in C^\infty(\mathbb{R}^n)$ так, чтобы $\|Tf_v - Tf\| \rightarrow 0$, $\|f_v - f\|_{C(\Omega)} \rightarrow 0$ при $v \rightarrow \infty$. В частности,

$$f_v(X_i) \rightarrow f(X_i) = 0, \quad i \in 1 : m. \quad (5.36)$$

Найдутся бесконечно дифференцируемые финитные функции u_1, \dots, u_m , такие, что $u_i(X_j) = \delta_{ij}$, где δ_{ij} — символ Кронекера. Рассмотрим интерполирующую функцию

$$P(f_v; X) = \sum_{i=1}^m f_v(X_i) u_i(X).$$

В силу (5.36) $\|TP(f_v)\| \rightarrow 0$ при $v \rightarrow \infty$. Возможны два случая.

1. $\|Tf\| < M$. Положим $\varphi_v = f_v - P(f_v)$. Очевидно, $\varphi_v(X_j) = 0$, $j \in 1 : m$, т. е. $\varphi_v \in N(I)$. При больших v $\|T\varphi_v\| < M$, следовательно, $\varphi_v \in W_0 \cap N(I)$. Кроме того, $\|\varphi_v - f\|_{C(\Omega)} \rightarrow 0$ и при больших v

$$\|f\|_{C(\Omega)} \leq \|\varphi_v\|_{C(\Omega)} + \varepsilon \leq \sup_{\varphi \in W_0 \cap N(I)} \|\varphi\| + \varepsilon. \quad (5.37)$$

2. $\|Tf\| = M$. Тогда $\|Tf_v\| \rightarrow M$. Рассмотрим функции $P(f_v)$ и

$$\varphi_v = \frac{M}{\|Tf_v - TP(f_v)\|} (f_v - P(f_v)).$$

Тогда $\varphi_v \in W_0 \cap N(I)$ и при больших v выполнено (5.37).

В силу произвольности $\varepsilon > 0$ и $f \in W \cap N(I)$ из (5.37) следует равенство

$$\sup_{f \in W \cap N(I)} \|f\|_{C(\Omega)} = \sup_{\varphi \in W_0 \cap N(I)} \|\varphi\|_{C(\Omega)},$$

тем самым последнее равенство в (5.35) доказано. Из (5.32) и (5.35) получаем оценку снизу погрешности любого алгоритма Φ :

$$e(\Phi) \geq \sup_{f \in W \cap N(I)} \|f\|_{C(\Omega)}. \quad (5.38)$$

Оценим теперь погрешность сплайнового алгоритма $\Phi_*(If) = L(S(f))$:

$$e(\Phi_*) := \sup_{f \in W} |L(f) - L(S(f))| \leq \sup_{f \in W} \|f - S(f)\|_{C(\Omega)}. \quad (5.39)$$

Обозначим $h = f - S(f)$. Очевидно, $Ih = 0$. В силу условия ортогональности $\langle TS(f), Th \rangle = 0$. Отсюда

$$\|Th\|^2 + \|TS(f)\|^2 = \|Tf\|^2 \leq M^2.$$

Значит, $\|Th\|^2 \leq M^2$, т. е. $h \in W$. Теперь из (5.39) получаем:

$$e(\Phi_*) \leq \sup_{h \in W \cap N(I)} \|h\|_{C(\Omega)}. \quad (5.40)$$

Из (5.38) и (5.40) следует, что алгоритм Φ_* оптимален. Теорема 5.5 доказана.

З а м е ч а н и е 5.3. Теорему 5.5 можно установить для более общего класса W и более общей информации I .

Пусть \mathcal{X} — линейное пространство и $\mathcal{X} \subset C(\Omega)$ (пространство \mathcal{X} может состоять из функций, заданных на более широком множестве $\mathcal{D} \supset \Omega$, но сужение каждой функции $f \in \mathcal{X}$ принадлежит $C(\Omega)$). На \mathcal{X} заданы линейный оператор T со значениями в гильбертовом пространстве H и линейные функционалы $L_i(f)$, $i \in 1 : m$. Положим $If = (L_1(f), \dots, L_m(f))$. Решение задачи

$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min_{\{g \in \mathcal{X} \mid Ig = If\}} \quad (5.41)$$

будем называть интерполяционным сплайном и обозначим $\sigma(f)$. Как обычно, положим

$$N(T) = \{g \in \mathcal{X} \mid Tg = 0\}, \quad N(I) = \{h \in \mathcal{X} \mid Ih = 0\}.$$

Сделаем следующие предположения:

1) решение $\sigma(f)$ задачи (5.41) существует и единствено при любом $f \in \mathcal{X}$;

2) множество P_2 полиномов от n переменных степени ≤ 2 содержится в $N(T)$;

3) множество $C^\infty(\mathcal{D})$ бесконечно дифференцируемых функций абсолютно в \mathcal{X} в следующем смысле: для любой $f \in \mathcal{X}$ найдутся $f_v \in C^\infty(\mathcal{D}) \cap \mathcal{X}$, такие, что $\|Tf_v - Tf\| \rightarrow 0$, $\|f_v - f\|_{C(\Omega)} \rightarrow 0$, $v \rightarrow \infty$;

4) если $f_v \in \mathcal{X}$ и $\|f_v - f\|_{C(\Omega)} \rightarrow 0$, то $L_i(f_v) \rightarrow L_i(f)$, $i \in 1 : m$, при $v \rightarrow \infty$;

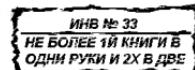
5) существуют функции $u_1, \dots, u_m \in C^\infty(\mathcal{D})$, такие, что

$$L_i(u_k) = \delta_{ik}, \quad i, k \in 1 : m.$$

В предположениях, при которых справедлива теорема 5.5, условия 1)—3) выполнены для $\mathcal{X} = L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, а условия 4)—5) — для функционалов $L_i(f) = f(X_i)$.

Если выполнены предположения 1)—5), то оптимальным методом восстановления функционала

$$L(f) = \max_{X \in \Omega} f(X)$$



на классе $W = \{f \in \mathcal{X} \mid \|Tf\| \leq M\}$ является сплайновый метод $L(f) \approx L(\sigma(f))$.

З а м е ч а н и е 5.4. Теорема 5.5 справедлива при $r \geq 3$. При $r = 1, 2$ сплайновый метод уже не будет оптимальным. Покажем это для случая $r = n = 1$, $\Omega = [a, b]$, $a = x_1 < x_2 < \dots < x_n = b$. $If = (f(x_1), \dots, f(x_m))$,

$V = \left\{ f \mid f \text{ — абсолютно непрерывна на } [a, b] \text{ и } \int_a^b |f'(t)|^2 dt \leq M^2 \right\}$. Справедлива простая оценка

БИБЛИОТЕКА
КОЛОХЗА
ОСКОРКА

$$d(I, W) \geq \sup_{f \in W \cap N(I)} \|f\|_{C[a, b]}^*$$

Пусть $h_j = x_{j+1} - x_j$, h_i — наибольшее из h_1, \dots, h_{m-1} . Рассмотрим функцию

$$f_0(x) = \begin{cases} C(x - x_i), & x_i \leq x \leq x_i + \frac{h_i}{2}, \\ C(x_{i+1} - x), & x_i + \frac{h_i}{2} \leq x \leq x_{i+1}, \\ 0 & \text{вне } [x_i, x_{i+1}], \end{cases}$$

где $C = M/\sqrt{h_i}$. Тогда $f_0 \in W \cap N(I)$ и

$$d(I, W) \geq L(f_0) = C \frac{h_i}{2} = \frac{M \sqrt{h_i}}{2} = \frac{M}{2} \max \{\sqrt{h_1}, \dots, \sqrt{h_{m-1}}\}.$$

Укажем теперь метод Φ_* , погрешность которого не превосходит половины диаметра $d(I, W)$. Покажем, что для любой $f \in W$ справедливы неравенства

$$\max_{i \in 1:m} f(x_i) \leq L(f) \leq \max_{i \in 1:m} f(x_i) + \frac{M}{2} \max \{\sqrt{h_1}, \dots, \sqrt{h_{m-1}}\}.$$

Левое неравенство очевидно. Пусть $L(f) = f(x_*)$ и $x_* \in [x_j, x_{j+1}]$. Тогда

$$f(x_*) - f(x_{j+1}) = \int_{x_{j+1}}^{x_*} f'(t) dt \leq \int_{x_*}^{x_{j+1}} |f'(t)| dt,$$

$$(f(x_*) - f(x_{j+1})) + (f(x_*) - f(x_j)) \leq \int_x^{x_{j+1}} |f'(t)| dt \leq M \sqrt{h_j}.$$

Отсюда

$$L(f) = f(x_*) \leq \max_{i \in 1:m} f(x_i) + \frac{M}{2} \max \{\sqrt{h_1}, \dots, \sqrt{h_{m-1}}\}.$$

Теперь для метода

$$\Phi_*(If) = \max_{i \in 1:m} f(x_i) + \frac{M}{4} \max \{\sqrt{h_1}, \dots, \sqrt{h_{m-1}}\}$$

погрешность не превосходит половины диаметра!

$$|L(f) - \Phi_*(If)| \leq \frac{M}{4} \max \{\sqrt{h_1}, \dots, \sqrt{h_{m-1}}\} \leq \frac{1}{2} d(I, W);$$

значит, метод Φ_* оптимальен.

З а м е ч а н и е 5.5. В литературе рассматривается также случай адаптивной информации вида

$$I^a f = (L_1(f), L_2(f; y_1), \dots, L_n(f; y_1, \dots, y_{n-1})),$$

где $y_i = L_i(f; y_1, \dots, y_{i-1})$, L_i — линейны по f , $i \in 1:n$. Зададим теперь неадаптивную информацию

$$If = (L_1(f), L_2(f; 0), \dots, L_n(f; 0, \dots, 0))$$

Для выпуклого центрально-симметричного класса W в [26] установлено неравенство

$$d(I^a, W) \geq \frac{1}{2} d(I, W).$$

Это значит, что адаптивная информация не может существенно помочь в задаче нахождения максимума.

§ 6. Сглаживание данных при помощи натуральных сплайнов

1. Интерполяционная задача $S(X_i) = z_i$, $i \in 1 : m$, может возникнуть при обработке результатов эксперимента. При этом величины z_i могут измеряться с погрешностями. В этом случае неподходящим будет проводить интерполирующую поверхность $S(X)$ точно через точки z_i .

Пусть задана среднеквадратическая погрешность ε измерений величин z_i . Рассмотрим задачу о сглаживании

$$\|Tf\|^2 \rightarrow \min, \quad (6.1)$$

где минимум берется по всем функциям f , таким, что

$$\sum_{i=1}^m \left[\frac{f(X_i) - z_i}{w_i} \right]^2 \leq \varepsilon^2, \quad f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n).$$

Здесь $\|Tf\|^2 = \langle Tf, Tf \rangle$, где скалярное произведение определено формулой (4.3), $w_i > 0$ — фиксированные веса. Задача (6.1) является многомерным аналогом одномерной задачи о сглаживании, рассмотренной в [51—53] (см. также [30, гл. V и комментарии к ней]).

Пусть по-прежнему \mathcal{P}_{r-1} обозначает множество полиномов степени не выше $r-1$ от n переменных, $p := \dim \mathcal{P}_{r-1}$. Предположим, что $m \geq p$ и на первых p точках однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов из \mathcal{P}_{r-1} .

2. При $m = p$ решением независимо от ε будет интерполяционный полином $P \in \mathcal{P}_{r-1}$, удовлетворяющий условиям $P(X_i) = z_i$, $i \in 1 : p$. В дальнейшем считаем, что $m > p$.

При $\varepsilon = 0$ оптимальным является интерполяционный натуральный сплайн. Имеется еще одно критическое значение ε , определяемое равенством

$$\varepsilon_*^2 = \min_{P \in \mathcal{P}_{r-1}} \sum_{i=1}^m \left[\frac{P(X_i) - z_i}{w_i} \right]^2. \quad (6.2)$$

Поскольку $\|TP\| = 0$, то при $\varepsilon \geq \varepsilon_*$ решением задачи (6.1) будет полином, на котором достигается минимум в (6.2).

Задачу (6.2) можно переписать в следующем виде. Обозначим V и W следующие матрицы:

$$V = \begin{bmatrix} x_1^{\beta_1} & x_1^{\beta_2} & \dots & x_1^{\beta_p} \\ x_2^{\beta_1} & x_2^{\beta_2} & \dots & x_2^{\beta_p} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_m^{\beta_1} & x_m^{\beta_2} & \dots & x_m^{\beta_p} \end{bmatrix}, \quad W = \begin{bmatrix} w_1 & & & \\ & w_2 & & \\ & & \ddots & \\ & 0 & & \ddots \\ & & & w_m \end{bmatrix},$$

где β_1, \dots, β_p — всевозможные мультииндексы, такие, что $|\beta| \leq r - 1$.

Полином $P \in \mathcal{P}_{r-1}$ можно записать в виде

$$P(X) = \sum_{i=1}^p c_i X^{\beta_i},$$

а задачу (6.2) — в виде

$$q(c) := (Dc - W^{-1}z, Dc - W^{-1}z) \rightarrow \min_{c \in \mathbb{R}^p},$$

где $D = W^{-1}V$, $c = (c_1, \dots, c_p)$, $z = (z_1, \dots, z_m)$. Точка минимума c находится из системы

$$D^T D c = D^T W^{-1} z,$$

где D^T — транспонированная матрица D . Имеем

$$\begin{aligned} \varepsilon_*^2 &= (D^T D c^*, c^*) - 2(D^T W^{-1} z, c^*) + (W^{-1} z, W^{-1} z) = \\ &= (W^{-1} z, W^{-1} z) - (D^T W^{-1} z, c^*) = (W^{-1} z, \Pi W^{-1} z), \end{aligned}$$

где

$$\Pi = E - D(D^T D)^{-1} D^T.$$

Очевидно, что Π — симметричная матрица и $\Pi^2 = \Pi$. Отсюда получаем

$$\varepsilon_*^2 = \| \Pi W^{-1} z \|_2^2 = \| b \|_2^2, \quad (6.1)$$

где вектор $b = \Pi W^{-1} z$ вычисляется по формуле

$$b = W^{-1} z - D c^*. \quad (6.2)$$

3. Исследуем основной случай $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$. Рассмотрим вспомогательную задачу без ограничений

$$F(f) := \| T f \|_2^2 + \frac{1}{\alpha} \sum_{i=1}^m \left[\frac{f(X_i) - z_i}{w_i} \right]^2 \rightarrow \min_{f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)}. \quad (6.3)$$

Здесь $\alpha > 0$ — параметр.

Как и в одномерном случае, минимум достигается на некотором натуральном сплайне

$$S(X) = P(X) + \sum_{i=1}^m d_i G(X - X_i),$$

где $P \in \mathcal{P}_{r-1}$, G — фундаментальное решение оператора Δ^r (см. § 4), а коэффициенты d_i удовлетворяют условию (5.4).

Теорема 6.1. Существует и единственный натуральный сплайн S_α , удовлетворяющий соотношению

$$(-1)^r \alpha d_i w_i^2 + S_\alpha(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m. \quad (6.6)$$

Этот сплайн является единственным решением задачи (6.5).

Доказательство. Покажем, что одноводная система уравнений

$$(-1)^r \alpha d_i w_i^2 + S(X_i) = 0, \quad i \in 1 : m, \quad (6.7)$$

$$\sum_{i=1}^m d_i X_i^{\beta_k} = 0, \quad k \in 1 : p,$$

имеет только нулевое решение. Последние p уравнений равносильны (5.4). Этим уравнениям удовлетворяют коэффициенты d_i любого натурального сплайна.

Подставим в ключевое тождество (5.8) $g = S$. Получим с учетом (6.7):

$$0 \leq \langle TS, TS \rangle = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i S(X_i) = -\alpha \sum_{i=1}^m d_i^2 w_i^2 \leq 0.$$

Отсюда следует, что $d_1 = \dots = d_m = 0$ и $S = P \in \mathcal{P}_{r-1}$. В силу (6.7) $S(X_i) = P(X_i) = 0$, $i \in 1 : m$. Поскольку на первых p точках X_i , $i \in 1 : p$, интерполяционная задача для полиномов разрешима однозначно, то $P(X) \equiv 0$.

Обозначим S_α единственный натуральный сплайн, удовлетворяющий соотношениям (6.6). Он является единственным решением задачи (6.5). Действительно, для любого $h \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ имеем:

$$F(S_\alpha + h) = F(S_\alpha) + 2 \langle TS_\alpha, Th \rangle + \|Th\|^2 +$$

$$+ \frac{2}{\alpha} \sum_{i=1}^m \frac{(S_\alpha(X_i) - z_i) h(X_i)}{w_i^2} + \sum_{i=1}^m \left(\frac{h(X_i)}{w_i} \right)^2.$$

Скалярное произведение $\langle TS_\alpha, Th \rangle$ вычислим с помощью ключевого тождества (5.8):

$$\langle TS_\alpha, Th \rangle = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i h(X_i).$$

Получим:

$$F(S_\alpha + h) - F(S_\alpha) = \frac{2}{\alpha} \sum_{i=1}^m \left[(-1)^r \alpha d_i + \frac{S_\alpha(X_i) - z_i}{w_i^2} \right] h(X_i) + \\ + \|Th\|^2 + \sum_{i=1}^m \left(\frac{h(X_i)}{w_i} \right)^2.$$

В силу (6.6) первая сумма исчезает, и можно сделать вывод, что $F(S_\alpha + h) - F(S_\alpha) \geq 0$ для любого $h \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, т. е. S_α — решение задачи (6.5).

Для доказательства единственности решения заметим, что если $F(S_\alpha + h) = F(S_\alpha)$, то $\|Th\|^2 = 0$ и $h(X_i) = 0$, $i \in 1 : m$. Отсюда $h \equiv 0$. Теорема доказана.

Сплайн S_α называется сглаживающим. Покажем, что при соответствующем выборе параметра α он будет единственным решением задачи (6.1). Введем вектор $g = (S_\alpha(X_1), \dots, S_\alpha(X_m))$. Тогда (6.6) примет вид

$$(-1)^r \alpha W^2 d + g = z. \quad (6.8)$$

Введем также функцию

$$\varphi^2(\alpha) = \sum_{i=1}^m \left[\frac{S_\alpha(X_i) - z_i}{\|w_i\|} \right]^2 = \|W^{-1}(g - z)\|^2 = \alpha^2 \|Wd\|^2. \quad (6.9)$$

Справедлива следующая теорема (см. [51]).

Теорема 6.2. Если параметр α удовлетворяет уравнению $\varphi^2(\alpha) = \varepsilon^2$, то соответствующий сплайн S_α является единственным решением задачи (6.1).

Доказательство. Возьмем произвольную функцию $f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, удовлетворяющую ограничениям задачи (6.1), и допустим, что $\|Tf\|^2 \leq \|TS_\alpha\|^2$. Тогда

$$F(f) \leq \|Tf\|^2 + \frac{1}{\alpha} \varepsilon^2 \leq \|TS_\alpha\|^2 + \frac{1}{\alpha} \varphi^2(\alpha) = F(S_\alpha).$$

Поскольку единственным решением задачи (6.5) является S_α , то $f \equiv S_\alpha$. Таким образом, при $f \neq S_\alpha$ выполняется неравенство $\|Tf\|^2 > \|TS_\alpha\|^2$. Теорема доказана.

Установим теперь, что при $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$ уравнение $\varphi^2(\alpha) = \varepsilon^2$ имеет единственное положительное решение. Для этого найдем явный вид $\varphi(\alpha)$. Сплайн S_α запишем в виде

$$S_\alpha(X) = \sum_{j=1}^m d_j G(X - X_j) + \sum_{k=1}^p c_k X^{\beta_k},$$

где коэффициенты d_j , c_k зависят от α . Вектор $g = (S_\alpha(X_1), \dots, S_\alpha(X_m))$ вычисляется по формуле

$$g = Gd + Vc,$$

где G — матрица с элементами $G_{ij} = G(X_i - X_j)$, $i, j \in 1 : m$. Подставив g в (6.8), получим систему для определения d, c :

$$(G + (-1)^r \alpha W^2) d + Vc = z, \quad (6.10)$$

$$V^T d = 0.$$

Умножим (6.10) слева на матрицу $(-1)^r \Pi W^{-1}$. С учетом соотношения $\Pi W^{-1}V = \Pi D = 0$ получим:

$$(-1)^r \Pi W^{-1} G d + \alpha \Pi W d = (-1)^r \Pi W^{-1} z. \quad (6.11)$$

Легко проверить, что $\Pi W d = W d$, если $V^T d = 0$ (учесть, что $D^T W d = V^T d = 0$). Отсюда $d = W^{-1} \Pi W d$ и

$$(-1)^r \Pi W^{-1} G W^{-1} \Pi W d + \alpha W d = (-1)^r \Pi W^{-1} z.$$

Полагая $Q = (-1)^r \Pi W^{-1} G W^{-1} \Pi$ и вводя новую переменную $x = W d$, приходим к уравнению

$$(Q + \alpha E) x = (-1)^r \Pi W^{-1} z. \quad (6.12)$$

Лемма 6.1. *Матрица Q симметрична и неотрицательно определена, $\lambda = 0$ является ее собственным числом кратности p .*

Доказательство. Сначала покажем, что матрица $(-1)^r G$ положительно определена на подпространстве

$$L = \{d \in \mathbb{R}^m \mid V^T d = 0\}.$$

Возьмем $d \in L$, $d \neq 0$. Функция

$$S(X) = \sum_{j=1}^m d_j G(X - X_j)$$

является натуральным сплайном. Согласно ключевому соотношению (5.8), при $g = S$ имеем:

$$\|TS\|^2 = (-1)^r \sum_{i=1}^m d_i S(X_i) = (-1)^r \sum_{i, j=1}^m d_i d_j G(X_i - X_j) = (-1)^r (Gd, d).$$

Значит, $(-1)^r (Gd, d) \geq 0$.

Для любого $x \in \mathbb{R}^m$ имеем $W^{-1} \Pi x \in L$, ибо $V^T W^{-1} \Pi x = D^T \Pi x = 0$. Следовательно,

$$(Qx, x) = (-1)^r (GW^{-1} \Pi x, W^{-1} \Pi x) \geq 0.$$

Мы получили, что матрица Q неотрицательно определена.

Далее, $QD = 0$, поскольку $\Pi D = 0$. Значит, столбцы D_0, \dots, D_{p-1} матрицы D удовлетворяют однородной системе

$$Qx = 0. \quad (6.13)$$

С другой стороны, любое решение x_0 этой системы допускает представление $x_0 = Dc_0$. Действительно, так как

$$0 = (Qx_0, x_0) = (-1)^r (GW^{-1} \Pi x_0, W^{-1} \Pi x_0),$$

то $W^{-1} \Pi x_0 = 0$ и $\Pi x_0 = 0$, т. е.

$$[E - D(D^T D)^{-1} D^T] x_0 = 0.$$

Положив $c_0 = (D^T D)^{-1} D^T x_0$, получим $x_0 = Dc_0$.

Мы показали, что D_0, \dots, D_{p-1} образуют базис подпространства, определяемого системой (6.13). Значит, собственное число $\lambda = 0$ матрицы Q имеет кратность p . Лемма доказана.

Пусть $0 = \lambda_1 = \dots = \lambda_p < \lambda_{p+1} \leq \dots \leq \lambda_m$ — собственные числа, q_1, \dots, q_m — собственные векторы матрицы Q . Обозначим Q_1 матрицу со столбцами q_1, \dots, q_m . Тогда

$$Q_1^T Q_1 = E, \quad Q_1 Q_1^T = E, \quad Q = Q_1 \Lambda Q_1^T,$$

где $\Lambda = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_m)$. Перепишем (6.12) в виде

$$Q_1 (\Lambda + \alpha E) Q_1^T x = (-1)^r \Pi W^{-1} z.$$

Отсюда $x = (-1)^r Q_1 (\Lambda + \alpha E)^{-1} a$, где $a = Q_1^T \Pi W^{-1} z$. Тогда

$$\|Wd\|^2 = \|x\|^2 = \|(\Lambda + \alpha E)^{-1} a\|^2 = \sum_{k=1}^m \frac{a_k^2}{(\lambda_k + \alpha)^2}.$$

Имеем: $Qq_k = 0$, $k \in 1 : p$. Как отмечалось, отсюда следуют равенства $\Pi q_k = 0$, $k \in 1 : p$. Значит,

$$a_k = (q_k, \Pi W^{-1} z) = (\Pi q_k, W^{-1} z) = 0, \quad k \in 1 : p.$$

Отсюда и из (6.9) получаем

$$\varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \sum_{k=p+1}^m \frac{a_k^2}{(\lambda_k + \alpha)^2} = \sum_{k=p+1}^m \frac{a_k^2}{(1 + \lambda_k/\alpha)^2}. \quad (6.14)$$

Л е м м а 6.2. Функция $\varphi(\alpha)$ непрерывна и строго возрастает на промежутке $[0, +\infty)$. При этом

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} \varphi^2(\alpha) = 0, \quad \lim_{\alpha \rightarrow +\infty} \varphi^2(\alpha) = \varepsilon_*^2.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Нетривиальным является только последнее предельное соотношение. Оно следует из равенств

$$\sum_{k=p+1}^m a_k^2 = \sum_{k=1}^m a_k^2 = \|\Pi W^{-1} z\|^2$$

и формулы (6.3). Лемма доказана. Тем самым установлено, что уравнение $\varphi^2(\alpha) = \varepsilon^2$ при $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$ имеет решение и это решение единственное.

4. Остановимся теперь на теоретических основах численного метода нахождения сглаживающего сплайна S_α при фиксированном $\alpha > 0$. Найдем решение x^* системы (6.12), положим $d^* = W^{-1} x^*$. Нужно показать, что d^* будет вектором коэффициентов сплайна S_α .

Л е м м а 6.3. Вектор $d^* = W^{-1} x^*$ удовлетворяет условию $V^T d^* = 0$, и существует единственный вектор c^* , такой, что

$$(G + (-1)^r \alpha W^2) d^* + V c^* = z.$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Покажем сначала, что $V^T d^* = V^T W^{-1} x^* = D^T x^* = 0$. Рассмотрим подпространство $F = \{x \mid D^T x = 0\}$. Базис в F^\perp образуют столбцы D_0, \dots, D_{p-1}

матрицы D . Эти же столбцы, как показано при доказательстве леммы 6.1, образуют базис подпространства $\{x \mid Qx = 0\}$. Значит, $F^\perp = \{x \mid Qx = 0\}$.

Собственные векторы q_1, \dots, q_p матрицы Q образуют другой базис в F^\perp , а векторы q_{p+1}, \dots, q_m — базис в F . Вектор правой части системы (6.12) принадлежит F , ибо $D^T \Pi = 0$, поэтому

$$(-1)^r \Pi W^{-1} z = \sum_{i=p+1}^m c_i q_i.$$

Умножим обе части на $(Q + \alpha E)^{-1}$. Получим

$$x^* = \sum_{i=p+1}^m \frac{c_i}{\lambda_i + \alpha} q_i.$$

Значит, $x^* \in F$, т. е. $D^T x^* = 0$.

Положим $d^* = W^{-1} x^*$. Из вывода уравнения (6.12) легко видеть, что d^* удовлетворяет (6.11), т. е.

$$\Pi W^{-1} [G + (-1)^r \alpha W^2] d^* = \Pi W^{-1} z. \quad (6.15)$$

Рассмотрим вектор $y = W^{-1} [G + (-1)^r \alpha W^2] d^* - W^{-1} z$. Соотношение (6.15) показывает, что $\Pi y = 0$, т. е. $y \in F^\perp$. Тогда найдется единственный вектор c^* , такой, что $y = Dc^*$. Умножив обе части этого равенства на W , получим:

$$[G + (-1)^r \alpha W^2] d^* - z = WDC^* = Vc^*.$$

Лемма доказана.

Численные методы решения задачи (6.1) подробно рассмотрены в § 7.

§ 7. Численные методы решения задачи сглаживания

В этом параграфе изложим два численных метода. Первый метод [18], основанный на использовании матрицы U и обобщающий метод Райнша [44, 45] на многомерный случай, является, по нашему мнению, самым эффективным при решении задачи сглаживания. Второй метод, использующий метод сопряженных градиентов, может оказаться полезным в случае, когда нижний треугольник матрицы системы не помещается в оперативной памяти ЭВМ.

1. Первый метод. Введем матрицу $U = U [1:m-p, 1:m]$, у которой i -я строка имеет вид

$$U_i = (0, 0, \dots, u_{ii}, u_i, u_{i+1}, \dots, u_{i, i+p}, 0, \dots, 0), \quad i \in 1:m-p,$$

и для которой выполняется условие $UV = 0$, где \tilde{V} — матрица, полученная из матрицы V перестановкой некоторых строк. Удаётся построить матрицу U так, что $u_{i, i+p} = 1$, $i \in 1:m-p$. Это обеспечивает линейную независимость строк U_i .

Предлагаем следующий алгоритм построения матрицы U . Он включает в себя перестановку строк матрицы V (т. е. у двух исходных точек, X_i и X_j , меняются номера). Операцию перестановки строк i и j будем обозначать $i \leftrightarrow j$.

Для простоты проведем изложение алгоритма для случая $n = r = 2$ (на практике это самый важный случай). Тогда $p = 3$, $X_i = (x_i, y_i)$,

$$V^T = \begin{bmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_m \\ y_1 & y_2 & \dots & y_m \end{bmatrix}.$$

Мы хотим построить матрицу U , такую, что $V^T U^T = \emptyset$. Трудности возникают, если есть группы точек X_L, X_{L+1}, \dots, X_M , лежащих на одной прямой. Изложим алгоритм.

1. $i := 1; L := 0$.

2. Элементы $u^T = (u_{ii}, u_{i, i+1}, u_{i, i+2}, u_{i, i+3})^T$ находим из системы

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ x_i & x_{i+1} & x_{i+2} & x_{i+3} \\ y_i & y_{i+1} & y_{i+2} & y_{i+3} \end{bmatrix} \cdot u = \emptyset.$$

После первого шага метода Гаусса система примет вид:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & x_{i+1} - x_i & x_{i+2} - x_i & x_{i+3} - x_i \\ 0 & y_{i+1} - y_i & y_{i+2} - y_i & y_{i+3} - y_i \end{bmatrix} \cdot u = \emptyset.$$

Из двух чисел, $x_{i+1} - x_i$ и $y_{i+1} - y_i$, хотя бы одно — не нуль. Если $|y_{i+1} - y_i| > |x_{i+1} - x_i|$, то переставим вторую и третью строки.

После второго шага метода Гаусса возможны три случая:

$$2.1. \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & a & b \\ 0 & 0 & 1 & c \end{bmatrix} \cdot u = \emptyset.$$

Этот случай бывает, когда точки X_i, X_{i+1}, X_{i+2} не лежат на одной прямой. Положим $u_{i, i+3} = 1, u_{i, i+2} = -c, u_{i, i+1} = -b + ac, u_{ii} = -1 + c + b - ac; i := i + 1$; если $i \leq m - 3$, то перейти на 2, иначе — на 3.

$$2.2. \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & a & b \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot u = \emptyset.$$

В этом случае точки $X_i, X_{i+1}, X_{i+2}, X_{i+3}$ лежат на одной прямой. Положим $u_{i, i+3} = 1, u_{i, i+2} = 0, u_{i, i+1} = -b, u_{ii} = -1 + b; M := i + 3$; если $L = 0$, то $L := i; i := i + 1$; если $i \leq m - 3$, то перейти на 2, иначе — на 3.

$$2.3. \quad \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & a & b \\ 0 & 0 & 0 & c \end{bmatrix} \cdot u = \emptyset, \quad c \neq 0.$$

Если $L = 0$, то $L := i$, $M := i + 2$. В матрице V переставим строки $L + 2 \leftrightarrow i + 3$. Далее положим $i := L - 1$; если $i \leq 0$, то $i := 1$; $L := L + 3$; $M := M + 1$; если $M - L < 2$, то $L := 0$; перейти на 2.

3. Построена четырехдиагональная матрица U $[1 : m - 3, 1 : m]$, для которой $u_{i, i+3} = 1$ и $UV = \emptyset$. Здесь матрица V получена из исходной матрицы V перестановкой некоторых строк.

Пример. Рассмотрим следующую конфигурацию восьми точек:

$$\begin{array}{cccccc} 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 1. & & & & .7 \\ & & & & .8 \end{array}$$

Алгоритм выполняется так:

при $i = 1$ — случай 2.1;

при $i = 2$ — случай 2.2; $L = 2$; $M = 5$;

при $i = 3$ — случай 2.2; $M = 6$;

при $i = 4$ — случай 2.3; $4 \leftrightarrow 7$; $M = 7$; $L = 5$; $i = 1$;

далее при $i = 1, 2, 3, 4$ — случай 2.1;

при $i = 5$ — случай 2.3; $7 \leftrightarrow 8$; $M = 8$; $L = 8$; $i = 4$; поскольку $M - L < 2$, то $L = 0$;

далее при $i = 4, 5$ — случай 2.1.

Пример показывает, как алгоритм проходит области вырождения (точки 2—6, лежащие на одной прямой, и точки 6—8 в исходной нумерации).

Вернемся к общему случаю. Матрицу V с переставленными строками по-прежнему обозначаем V . В матрице U «диагональные» элементы $u_{i, i+p} = 1$. Отсюда следует, что векторы U_i линейно независимы. Эти векторы удовлетворяют соотношению $V^t U_i = \emptyset$, $i \in [1 : m - p]$, поэтому образуют базис в подпространстве $L = \{d \in \mathbb{R}^m \mid V^t d = \emptyset\}$. Следовательно, любой элемент $d \in L$ можно представить в виде $d = U^t h$.

Умножим первое уравнение системы (6.10) на $(-1)^r U$ слева. Получим:

$$((-1)^r UG + \alpha UW^2)d = (-1)^r Uz. \quad (7.1)$$

Разложим вектор $d \in L$ по базису

$$d = U^t h = \sum_{i=1}^{m-p} h_i U_i,$$

где $h = (h_1, \dots, h_{m-p})$. Подставим полученное выражение в (7.1):

$$((-1)^r UGU^t + \alpha UW^2U^t)h = (-1)^r Uz. \quad (7.2)$$

Отметим некоторые свойства матрицы системы (7.2).

Лемма 7.1. Матрицы $(-1)^r UGU^t$ и UW^2U^t симметричны и положительно определены.

Доказательство. Симметричность очевидна. Имеем:

$$(UW^2U^T h, h) = \|WU^T h\|^2 > 0 \quad \forall h \neq 0,$$

ибо $U^T h \neq 0$ в силу линейной независимости системы $\{U_i\}_{i=1}^{m-p}$. Имеем также

$$((-1)^r UGU^T h, h) = -((-1)^r GU^T h, U^T h) > 0 \quad \forall h \neq 0$$

в силу того, что ненулевой вектор $U^T h$ принадлежит подпространству L и матрица $(-1)^r G$ положительно определена на L (см. доказательство леммы 6.1). Лемма доказана.

В дополнение к лемме отметим, что матрица $UW^2U^T = UW(UW)^T$ имеет $2p+1$ ненулевых диагоналей, т. е. $(UW^2U^T)_{ij} = 0$ при $|i-j| > p$. Это позволяет хранить в памяти ЭВМ только элементы $p+1$ диагоналей. В одномерном случае ($n = 1, p = r$) матрица $H = (-1)^r UGU^T$ была $(2r-1)$ -диагональной. В общем случае ($n > 1$) этого утверждать нельзя.

Сравним систему (6.12)

$$(Q + \alpha E)x = (-1)^r UW^{-1}z$$

и систему

$$(H + \alpha UW^2U^T)h = (-1)^r Uz. \quad (7.3)$$

Матрица H положительно определена и имеет размеры $(m-p) \times (m-p)$, а матрица Q вырождена (см. лемму 6.1) и имеет размеры $m \times m$. Поэтому предпочтительнее решать систему (7.3) (особенно при малых α). В силу положительной определенности матрицы $H + \alpha UW^2U^T$ можно использовать метод Холецкого (метод квадратного корня).

После решения (7.3) нужно еще перейти к решению (6.10). Справедлива следующая лемма.

Лемма 7.2. Положим $d^* = U^T h^*$, где h^* — решение (7.3). Тогда существует единственный вектор c^* , такой, что $\{d^*, c^*\}$ является решением системы (6.10).

Доказательство. В силу (7.2) вектор $d^* = U^T h^*$ удовлетворяет соотношению

$$UGd^* + (-1)^r \alpha UW^2d^* = Uz.$$

Введем вектор $y = Gd^* + (-1)^r \alpha W^2d^*$. Тогда $U(z-y) = 0$.

Рассмотрим подпространство $M = \{y \in \mathbb{R}^m \mid Uy = 0\}$, $\dim M = m - \text{rank } U = m - (m-p) = p$. Столбцы V_j матрицы V удовлетворяют условию $UV_j = 0$, т. е. $V_j \in M$, $j \in \{1 : p\}$. Столбцы V_j линейно независимы (в силу предположения). Поэтому $\{V_1, \dots, V_p\}$ — базис в M .

Поскольку $z-y \in M$, то найдется единственный вектор $c^* = (c_1^*, \dots, c_p^*)$, такой, что

$$z-y = \sum_{j=1}^p c_j^* V_j = Vc^*$$

или $y + Vc^* = z$, что равносильно (6.10). Лемма доказана.

Приведем краткую схему метода решения задачи сглаживания, связанного с решением системы (7.3). Решаем систему

$$D^T D c = D^T W^{-1} z, \quad (7.4)$$

где $D = W^{-1}V$, находим c^* и $b = W^{-1}z - Dc^*$, полагаем $\varepsilon_* = \|b\|$. Если $\varepsilon \geq \varepsilon_*$, то решением задачи сглаживания является полином.

В основном случае $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$ решаем уравнение $\varphi(\alpha) = \varepsilon$. Для вычисления значения $\varphi(\alpha)$ при фиксированном α находим h из системы (7.3) и полагаем $d = U^T h$, $\varphi(\alpha) = \alpha \|Wd\|$ (см. формулу (6.9)). После нахождения корня α_* полагаем $y = Gd + \cdots + (-1)^r \alpha_* W^2 d$ и находим c из условия $Vc = z - y$. Умножив на $D^T W^{-1}$, получим систему $D^T D c = D^T W^{-1} (z - y)$ с той же матрицей, что и в системе (7.4), но с другой правой частью.

2. Связь между матрицей Π , введенной в §6, и матрицей U .

Лемма 7.3. *Справедливо соотношение*

$$\Pi = WU^T (UW^2U^T)^{-1} UW. \quad (7.5)$$

Доказательство. Легко проверить выполнение равенств

$$\Pi W^{-1} V = \emptyset, \quad [WU^T (UW^2U^T)^{-1} UW] W^{-1} V = \emptyset,$$

$$\Pi WU^T = WU^T, \quad [WU^T (UW^2U^T)^{-1} UW] WU^T = WU^T.$$

Если мы докажем, что p столбцов матрицы $W^{-1}V$ и $m-p$ столбцов WU^T образуют базис в \mathbb{R}^m , то из этого будет следовать, что матрицы Π и $WU^T (UW^2U^T)^{-1} UW$ совпадают на базисе. Следовательно, они будут равны.

Покажем, что соотношение

$$W^{-1}Vc + WU^Th = 0 \quad (7.6)$$

выполняется только при $c = \emptyset$ и $h = \emptyset$. В силу ортогональности слагаемых

$$(W^{-1}Vc, WU^Th) = (UVc, h) = 0$$

выполнение (7.6) равносильно выполнению двух равенств, $W^{-1}Vc = \emptyset$ и $WU^Th = \emptyset$. Последние выполняются только при $c = \emptyset$ и $h = \emptyset$. Лемма доказана.

С помощью этой леммы дадим другое доказательство разрешимости уравнения $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ при $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$.

Лемма 7.4. *Пусть $\varepsilon_* > 0$. Тогда функция $\varphi(\alpha)$ бесконечно дифференцируема и строго возрастает на $[0, \infty]$, причем*

$$\varphi(0) := \lim_{\alpha \rightarrow 0} \varphi(\alpha) = 0, \quad \varphi(\infty) := \lim_{\alpha \rightarrow \infty} \varphi(\alpha) = \varepsilon_*.$$

Доказательство. Кроме обозначения $H = (-1)^r \times \langle UGU^T \rangle$ используем обозначение $B = UW^2U^T$. По лемме 7.1 в задаче $Bv = \lambda Hv$, собственные значения $\lambda_i > 0$, $i \in 1 : m-p$, а собственные векторы v_i образуют H — ортонормированную систему.

Разложим вектор Uz по векторам Hv_1, \dots, Hv_{m-p} :

$$Uz = \sum_{i=1}^{m-p} t_i Hv_i. \quad (7.7)$$

Как уже отмечалось, $\varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \|WU^\top h\|^2$, где $h = h(\alpha)$ — решение (7.3). Отсюда

$$\varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \|WU^\top (H + \alpha B)^{-1} Uz\|^2 = \alpha^2 ((H + \alpha B)^{-1} Uz, B(H + \alpha B)^{-1} Uz)$$

Так как

$$(H + \alpha B)^{-1} Hv_i = (E + \alpha H^{-1} B)^{-1} v_i = \frac{1}{1 + \alpha \lambda_i} v_i,$$

то

$$(H + \alpha B)^{-1} Uz = \sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i}{1 + \alpha \lambda_i} v_i.$$

В силу H -ортогональности

$$\varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i^2 \lambda_i}{(1 + \alpha \lambda_i)^2} = \sum_{i=1}^{m-p} \frac{\lambda_i t_i^2}{(1/\alpha + \lambda_i)^2}. \quad (7.8)$$

Отсюда следует, что $\varphi(\alpha)$ не убывает, бесконечно дифференцируема и $\varphi(0) = 0$. Имеем:

$$\varphi^2(\infty) = \sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i^2}{\lambda_i}. \quad (7.9)$$

Для завершения доказательства теоремы нам осталось пока зать, что $\varphi(\infty) = \varepsilon_*$. Выразим $\varphi^2(\infty)$ через известные величины. Из (7.7) следует равенство

$$B^{-1} Uz = \sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i}{\lambda_i} v_i. \quad (7.10)$$

Перемножая скалярно (7.7) и (7.10), получим:

$$\varphi^2(\infty) = (B^{-1} Uz, Uz) = (U^\top B^{-1} Uz, z) = ([WU^\top B^{-1} UW] W^{-1} z, W^{-1} z).$$

По лемме 7.3 и формуле $\Pi^2 = \Pi$ имеем:

$$\varphi^2(\infty) = (\Pi W^{-1} z, W^{-1} z) = \|\Pi W^{-1} z\|^2 = \varepsilon_*^2$$

(см. формулу (6.3) для ε_*^2). Теорема доказана.

3. Численное решение уравнения $\varphi(\alpha) = \varepsilon$. При $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$, как было показано в леммах 6.2 и 7.4, корень уравнения $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ существует и единственен. В работе Райнша [52] предлагается сделать замену переменной $\alpha = 1/\beta$ и методом Ньютона решать уравнение

$$\Psi^s(\beta) = \varepsilon^s, \quad (7.11)$$

где

$$\Psi(\beta) = \varphi\left(\frac{1}{\beta}\right) = \left\{ \sum_{i=1}^{m-p} \frac{\lambda_i t_i^2}{(\beta + \lambda_i)^2} \right\}^{1/2}, \quad (7.12)$$

$s \neq 0$ — фиксированный показатель степени (в дальнейшем, следуя [52], укажем в некотором смысле оптимальное значение показателя s).

Л е м м а 7.5. *Функция $\Psi^s(\beta)$ не возрастает и выпукла на $[0, \infty)$ при $s > 0$ и не убывает и вогнута на $[0, \infty)$ при $-1 \leq s < 0$.*

Доказательство. Если все $t_i = 0$, то $\Psi(\beta) \equiv 0$. Такая ситуация имеет место, когда $Uz = \mathbb{0}$ (см. формулу (7.7)). Другими словами, тогда, когда все $z_i = P(X_i)$, $i \in 1 : m$, где $P \in \mathcal{P}_{r-1}$ — некоторый полином степени не выше $r - 1$.

Допустим, что хоть одно t_i отлично от нуля. Тогда $\Psi(\beta)$ убывает на $[0, \infty)$. Монотонность $\Psi^s(\beta)$ очевидна. Для проверки выпуклости исследуем знак второй производной функции

$$\Psi^s(\beta) = \left\{ \sum_{i=1}^{m-p} \frac{a_i}{(\beta + \lambda_i)^2} \right\}^l = \sigma^l,$$

где $a_i = \lambda_i t_i^2 \geq 0$, $l = s/2$. Имеем:

$$[\Psi^s(\beta)]'' = l(l-1)\sigma^{l-2}(\sigma')^2 + l\sigma^{l-1}\sigma'' = l\sigma^{l-2}\tau(\beta),$$

где

$$\begin{aligned} \tau(\beta) &= (l-1)(\sigma')^2 + \sigma \cdot \sigma'' = 4(l-1) \left[\sum_{i=1}^{m-p} \frac{a_i}{(\beta + \lambda_i)^3} \right]^2 + \\ &\quad + 6 \sum_{i=1}^{m-p} \frac{a_i}{(\beta + \lambda_i)^2} \sum_{j=1}^{m-p} \frac{a_j}{(\beta + \lambda_j)^4} = \\ &= \sum_{i,j=1}^{m-p} a_i a_j \left[\frac{4(l-1)}{(\beta + \lambda_i)^3 (\beta + \lambda_j)^3} + \frac{6}{(\beta + \lambda_i)^2 (\beta + \lambda_j)^4} \right]. \end{aligned}$$

При $i = j$ выражение в квадратных скобках равно

$$\frac{4(l-1)+6}{(\beta + \lambda_i)^6}.$$

Пусть $i \neq j$. Рассмотрим множитель при $a_i a_j$ в сумме слагаемых (i, j) и (j, i) :

$$\begin{aligned} &\frac{8(l-1)}{(\beta + \lambda_i)^3 (\beta + \lambda_j)^3} + \frac{6}{(\beta + \lambda_i)^2 (\beta + \lambda_j)^4} + \frac{6}{(\beta + \lambda_i)^4 (\beta + \lambda_j)^2} = \\ &= \frac{8(l-1)}{(\beta + \lambda_i)^3 (\beta + \lambda_j)^3} + 6 \frac{2\beta^2 + 2\beta(\lambda_i + \lambda_j) + \lambda_i^2 + \lambda_j^2}{(\beta + \lambda_i)^4 (\beta + \lambda_j)^4} = \\ &= \frac{8(l-1) + 12}{(\beta + \lambda_i)^3 (\beta + \lambda_j)^3} + 6 \frac{(\lambda_i - \lambda_j)^2}{(\beta + \lambda_i)^4 (\beta + \lambda_j)^4}. \end{aligned}$$

Тогда имеем

$$\begin{aligned}\tau(\beta) = & \left\{ \sum_{i=1}^{m-p} \frac{a_i^2}{(\beta + \lambda_i)^s} + 2 \sum_{i < j} \frac{a_i a_j}{(\beta + \lambda_i)^s (\beta + \lambda_j)^s} \right\} [4(l-1) + 6] + \\ & + 6 \sum_{i < j} \frac{a_i a_j (\lambda_i - \lambda_j)^2}{(\beta + \lambda_i)^4 (\beta + \lambda_j)^4} = (s+1) b(\beta) + c(\beta),\end{aligned}$$

где

$$b(\beta) = 2 \left\{ \sum_{i=1}^{m-p} \frac{a_i}{(\beta + \lambda_i)^s} \right\}^2, \quad c(\beta) = 6 \sum_{i < j} \frac{a_i a_j (\lambda_i - \lambda_j)^2}{(\beta + \lambda_i)^4 (\beta + \lambda_j)^4}.$$

Можно показать, что $b(\beta) > 0$, а $c(\beta) \geq 0$ для всех $\beta \geq 0$, причем $c(\beta)$ обращается в нуль только в случае, когда все λ_i , $i \in 1 : m-p$, равны между собой. Если последнее условие не выполнено, то $c(\beta) > 0$ для всех $\beta \geq 0$. Из этого следует, что $\tau(\beta) \geq 0$ при $s \geq -1$. Отсюда

$$\begin{aligned}[\Psi^s(\beta)]'' &= l \sigma^{l-2} \tau(\beta) > 0 \quad \text{при } l = \frac{s}{2} > 0, \\ [\Psi^s(\beta)]'' &\leq 0 \quad \text{при } -1 \leq s < 0.\end{aligned}$$

Лемма доказана.

Л е м м а 7.6. *Если $\lambda_1 = \lambda_2 = \dots = \lambda_{m-p}$, то $\Psi^s(\beta)$ выпукла и возрастает на $[0, +\infty)$ при $s < -1$. Если не все λ_i равны между собой, то для каждого большого $\beta_0 \in [0, +\infty)$ существует $s_0 < -1$, при котором $[\Psi^{s_0}(\beta)]''$ меняет знак в точке β_0 , т. е. точка β_0 является точкой перегиба функции $\Psi^{s_0}(\beta)$.*

Д о к а з а т е л ь с т в о. Если $\lambda_1 = \dots = \lambda_{m-p} = \lambda$, то тогда имеем:

$$\Psi^s(\beta) = \frac{\lambda^{s/2} \|t\|^s}{(\beta + \lambda)^s}.$$

Отсюда следует первое утверждение леммы.

Пусть не все λ_i равны между собой. Проведем исследование знака второй производной $\Psi^s(\beta)$ при $s < -1$. Для этого рассмотрим уравнение

$$\tau(s, \beta) = (s+1)b(\beta) + c(\beta) = 0.$$

Выразим s как функцию от β , получим

$$s(\beta) = -1 - \frac{c(\beta)}{b(\beta)}.$$

Если не все λ_i равны между собой, то легко показать (в силу определения $c(\beta)$ и $b(\beta)$), что прямая $s = -1$ является асимптотой кривой $\tau(s, \beta) = 0$ при $\beta \rightarrow +\infty$, так как $\lim_{\beta \rightarrow +\infty} c(\beta)/b(\beta) = 0$. В этом случае для любого большого $\beta_0 \in [0, \infty)$ существует

$$s_0 = -1 - \frac{c(\beta_0)}{b(\beta_0)} < -1,$$

такое, что выполнено равенство $\tau(s_0, \beta_0) = 0$, причем $[\Psi^{s_0}(\beta)]''$ в точке β_0 меняет знак. Этот факт иллюстрирует рис. 2. Лемма доказана.

Свойства функции $\Psi^s(\beta)$, $s \geq -1$, $s \neq 0$, установленные в лемме 7.5, гарантируют сходимость метода Ньютона при решении уравнения $\Psi^s(\beta) = \varepsilon^s$ с начальным приближением $\beta = 0$. Запишем расчетную формулу метода Ньютона для уравнения (7.11):

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \frac{\Psi^s(\beta_k) - \varepsilon^s}{s\Psi^{s-1}(\beta_k) \cdot \Psi'(\beta_k)} = \beta_k - \frac{\Psi(\beta_k)}{\Psi'(\beta_k)} \left[\frac{1 - (\varepsilon/\Psi(\beta_k))^s}{s} \right].$$

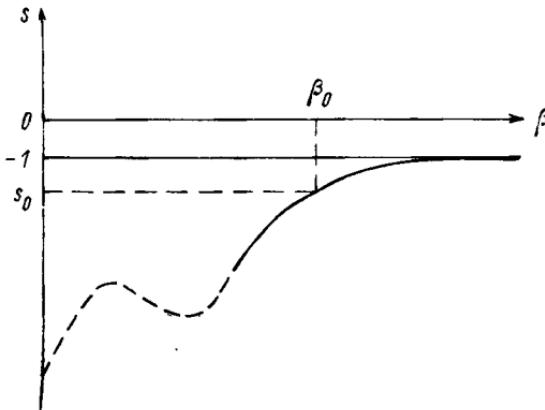


Рис. 2. Кривая, задаваемая уравнением $\tau(s\beta) = 0$.

Если в качестве начального приближения взять $\beta_0 = 0$, то при $s \geq -1$, $s \neq 0$, в силу условия $\Psi(0) > \varepsilon$ будет выполняться неравенство $\Psi(\beta_k) > \varepsilon$, $k = 1, 2, \dots$

Введем функцию

$$f(s) = \frac{1}{s} (1 - q)^s, \quad q \in (0, 1).$$

Имеем: $\lim_{s \rightarrow +\infty} f(s) = 0$, $\lim_{s \rightarrow -\infty} f(s) = +\infty$. (При $s = 0$ значение функции $f(s)$ определяем по непрерывности, $f(0) = -\ln q$). Найдем производную

$$f'(s) = \frac{1}{s^2} (-sq^s \ln q - 1 + q^s) = -\frac{q^s}{s^2} (s \ln q - 1 + e^{-s \ln q}).$$

Используя неравенство $e^{-x} \geq -x + 1$, легко показать, что $f'(s) \leq 0$ для всех s . Следовательно, функция $f(s)$ убывает с ростом s , поэтому ее максимальное значение на множестве $[-1, +\infty)$ достигается в точке $s = -1$.

Приведенный анализ позволяет сделать вывод, что для вычисления последовательных приближений β_k наиболее предпочтительным значением параметра s является $s = -1$. В этом случае функция $\Psi^s(\beta)$ при $\beta \geq 0$ еще сохраняет вогнутость, гарантирующую глобальную сходимость метода, а значение приращения на

каждом шаге будет максимальным, что обеспечит наибольшую скорость сходимости.

В случае, когда не все $\lambda_i, i \in 1 : m - p$, равны между собой, в силу леммы 7.6 нельзя гарантировать сходимость при решении уравнения $\Psi^s(\beta) = \varepsilon^s$ для $s < -1$.

Запишем в развернутом виде формулу для вычисления β_{k+1} при $s = -1$:

$$\beta_{k+1} = \beta_k + \frac{\Psi(\beta_k)}{\Psi'(\beta_k)} \left[1 - \frac{\Psi(\beta_k)}{\varepsilon} \right] = \beta_k - \frac{\Psi^2(\beta_k)}{\varepsilon} \frac{\Psi(\beta_k) - \varepsilon}{\Psi(\beta_k) \cdot \Psi'(\beta_k)}.$$

Можно дать интерпретацию описанного метода в терминах функции Ψ . Поскольку Ψ^{-1} — вогнутая функция, то при $\beta \geqslant 0$

$$\Psi^{-1}(\beta) - \Psi^{-1}(\beta_k) \leqslant -\Psi^{-2}(\beta_k) \cdot \Psi'(\beta_k) (\beta - \beta_k)$$

или

$$\Psi^{-1}(\beta) \leqslant \Psi^{-1}(\beta_k) \left[1 - \frac{\Psi'(\beta_k)}{\Psi(\beta_k)} (\beta - \beta_k) \right].$$

Возводя обе части неравенства в степень -1 , получим:

$$\Psi(\beta) \geqslant \Psi(\beta_k) \left[1 - \frac{\Psi'(\beta_k)}{\Psi(\beta_k)} (\beta - \beta_k) \right]^{-1} =: \gamma(\beta).$$

Таким образом, мы заменяем функцию $\Psi(\beta)$ гиперболой $\gamma(\beta)$, которая находится ниже $\Psi(\beta)$ и касается ее в точке $\beta = \beta_k$. Точка β_{k+1} находится как решение уравнения $\gamma(\beta) = \varepsilon$. Первым такой подход использован К. Райнш в работе [52].

Находить λ_i и использовать формулу (7.12) нецелесообразно. Можно вычислять по формулам:

$$\begin{aligned} \Psi^2(\beta) &= \varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \|Wd\|^2 = \alpha^2 \|WU^\top h\|^2, \\ \Psi(\beta) \cdot \Psi'(\beta) &= -\alpha^2 \varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha), \quad \alpha = \frac{1}{\beta}. \end{aligned} \tag{7.13}$$

Покажем, как вычислять $\varphi^2(\alpha)$ и $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha)$. Систему (7.2) перепишем в виде

$$(H + \alpha B)h = (-1)^r Uz. \tag{7.14}$$

Тогда $\varphi^2(\alpha) = \alpha^2 (Bh, h)$, а $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha) = \alpha (Bh, h) + \alpha^2 (Bh, h')$. В силу того что $h' = -(H + \alpha B)^{-1}Bh$, для $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha)$ получаем соотношение

$$\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha) = \alpha (Bh, h) - \alpha^2 (Bh, (H + \alpha B)^{-1}Bh).$$

В данной ситуации удобно применить метод Холецкого: представить матрицу $H + \alpha B$ в виде $H + \alpha B = L_0 L_0^\top$, где L_0 — нижняя треугольная матрица. Тогда для решения (7.14) нужно решить две системы, $L_0 y = (-1)^r Uz$ и $L_0^\top h = y$. Решать две системы для нахождения h' не нужно. Имеем:

$$\begin{aligned} \varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha) &= \alpha (Bh, h) - \alpha^2 (Bh, (L_0 L_0^\top)^{-1} Bh) = \\ &= \alpha (Bh, h) - \alpha^2 \|L_0^{-1} Bh\|^2 = \alpha (Bh, h) - \alpha^2 \|v\|^2, \end{aligned} \tag{7.15}$$

где v — решение уравнения $L_0 v = Bh$. Таким образом, для нахождения значений $\varphi^2(\alpha)$ и $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha)$ нужно решить три системы

линейных уравнений с треугольными матрицами — две системы с матрицей L_0 и одну систему с матрицей L_0^t — и выполнить одно умножение вектора b на матрицу B .

При применении метода Ньютона с начальным приближением $\beta_0 = 0$ нужно вычислить значение $\Psi(0) \cdot \Psi'(0)$. Способ вычисления этого значения дает следующая лемма.

Лемма 7.7. *Справедливо соотношение*

$$\Psi(0) \cdot \Psi'(0) = -(-1)^r (GW^{-1}b, W^{-1}b), \quad (7.16)$$

где вектор b определяется из (6.4).

Доказательство. Из (7.12)

$$\Psi(0) \cdot \Psi'(0) = - \sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i^2}{\lambda_i^2}.$$

В обозначениях ранее доказанной леммы 7.4 выражим $\Psi(0) \cdot \Psi'(0)$ через известные величины:

$$\begin{aligned} \Psi(0) \cdot \Psi'(0) &= - \sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i^2}{\lambda_i^2} = - \left(\sum_{i=1}^{m-p} \frac{t_i}{\lambda_i} v_i, \sum_{j=1}^{m-p} \frac{t_j}{\lambda_j} Hv_j \right) = \\ &= -(B^{-1}Uz, HB^{-1}Uz) = -(-1)^r (UGU^t B^{-1}Uz, B^{-1}Uz). \end{aligned}$$

После несложных преобразований с использованием леммы 7.3 получаем:

$$\begin{aligned} \Psi(0) \cdot \Psi'(0) &= -(-1)^r (GW^{-1} [WU^t B^{-1}UW] W^{-1}z, \\ &W^{-1} [WU^t B^{-1}UW] W^{-1}z) = -(-1)^r (GW^{-1}\Pi W^{-1}z, W^{-1}\Pi W^{-1}z) = \\ &= -(-1)^r (GW^{-1}b, W^{-1}b). \end{aligned}$$

Лемма доказана.

Можно показать, что $W^{-1}b \in L$. Это следует из соотношений $V^t W^{-1}\Pi = D^t\Pi = 0$. В силу положительной определенности $(-1)^r G$ на подпространстве L имеем $\Psi'(0) < 0$. При начальном приближении $\beta_0 = 0$ последовательность $\{\beta_k\}$ возрастает и сходится к $\beta_* = 1/\alpha_*$.

4. Описание алгоритма первого метода решения задачи сглаживания. Алгоритм решения задачи сглаживания (6.1), который приведен ниже, аналогичен подходу [51, 52] и основан на результатах, изложенных выше:

1) следуя рекомендациям [3, с. 51], выполним линейную замену переменных, переводящую точки $\{X_i, z_i\}$ в единичный куб в \mathbb{R}^{n+1} (при таком преобразовании матрица решаемой системы линейных уравнений будет лучше обусловлена);

2) вычислим $D = W^{-1}V$; найдем разложение Холецкого матрицы $D^t D$;

3) вычислим c^* из уравнения $D^t D c = D^t W^{-1}z$; найдем $b = W^{-1}z - Dc^*$ и $\epsilon_* = \|b\|$; если $\epsilon \geq \epsilon_*$, то решением задачи (6.1) является полином $P_{r-1}^*(X) = \sum_{i=1}^p c_i^* X^{\beta_i}$;

4) в основном случае $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$ сформируем матрицу U , вычислим $(-1)^r Uz$, $H = (-1)^r UGU^T$ и $B = UW^2U^T$;

5) положим $k = 0$, $\beta_0 = 0$; вычислим $\Psi(0) \cdot \Psi'(0) = -(-1)^r \times (GW^{-1}b, W^{-1}b)$ и сделаем первый шаг по методу Ньютона

$$\beta_1 = \beta_0 - \frac{\Psi^2(0)}{\varepsilon} \frac{\Psi(0) - \varepsilon}{\Psi(0) \cdot \Psi'(0)} = -\frac{\varepsilon_*^2}{\varepsilon} \frac{\varepsilon_* - \varepsilon}{\Psi(0) \cdot \Psi'(0)};$$

6) начальный шаг итерационного процесса — положим $k = k + 1$, $\alpha_k = 1/\beta_k$; вычислим разложение Холецкого матрицы $H + \alpha_k B = L_0 \cdot L_0^T$;

7) найдем вектор h из уравнения $L_0 L_0^T h = (-1)^r Uz$; вычислим Bh , $\Psi^2(\beta_k) = \varphi^2(\alpha_k) = \alpha_k^2(Bh, h)$; если $\Psi(\beta_k) - \varepsilon < \delta$, то перейдем к п. 9 (в зависимости от требуемой точности вычислений полагаем $\delta = \varepsilon/10$ или $\delta = \varepsilon/100$);

8) найдем v из уравнения $L_0 v = Bh$; вычислим $\varphi(\alpha_k) \cdot \varphi'(\alpha_k) = \alpha_k(Bh, h) - \alpha_k^2 \|v\|^2$ и, используя соотношения (7.13), сделаем шаг по методу Ньютона

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \frac{\Psi^2(\beta_k)}{\varepsilon} \frac{\Psi(\beta_k) - \varepsilon}{\Psi(\beta_k) \cdot \Psi'(\beta_k)} = \beta_k + \frac{(Bh, h)}{\varepsilon} \frac{\varphi(\alpha_k) - \varepsilon}{\{\varphi(\alpha_k) \cdot \varphi'(\alpha_k)\}};$$

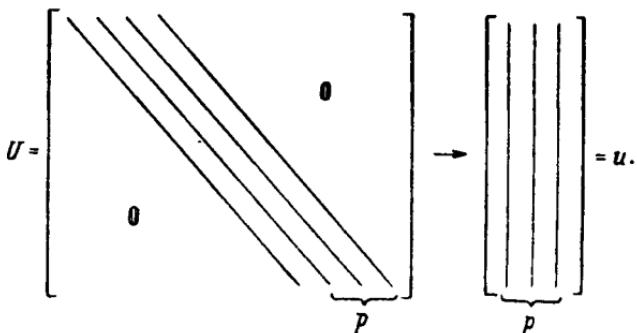
перейдем к п. 6;

9) положим $\alpha = \alpha_k$ и вычислим $d = Ut$; вычислим $y = (G + (-1)^r \alpha W^2)d$ и найдем c из уравнения $Vc = z - y$; умножая на $D^T W^{-1}$, получим соотношение

$$D^T D c = D^T W^{-1} (z - y);$$

разложение Холецкого матрицы $D^T D$ найдено в п. 2; коэффициенты d и c задают искомый сглаживающий сплайн $S_\alpha(X)$.

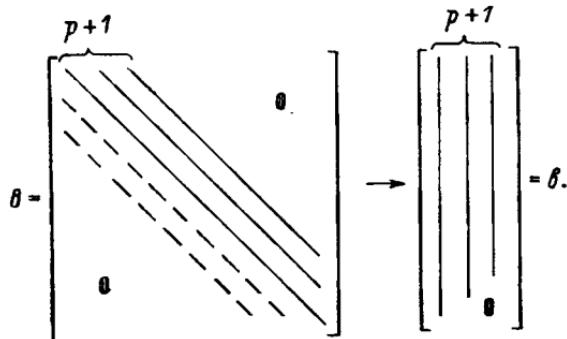
5. Описание программы. Предложенный выше алгоритм реализован в программе, написанной на языке Фортран-IV для ЭВМ



СМ-4. Структура программы ориентирована на рациональное использование оперативной памяти ЭВМ СМ-4 (или ЭВМ аналогичного класса). В связи с этим в программе в памяти ЭВМ хранится не вся ленточная матрица, а только элементы ее ненулевых диагоналей. Все элементы ненулевых диагоналей плотно упакованы в прямоугольные массивы минимальных размеров. У симметричных матриц хранится только «половина» матриц. Такой

подход позволяет свести к минимуму требуемый объем памяти для хранения двумерных массивов.

Ненулевые диагонали матрицы U , за исключением первой, упакованы в массив $u [1 : m - p, 1 : p]$. Симметричная матрица $B = UW^2U^\top$ имеет $2p + 1$ ненулевую диагональ. Элементы $p + 1$ верхних ненулевых диагоналей этой матрицы упакованы аналогичным образом в массив $b [1 : m - p, 1 : p + 1]$:



Эти элементы матрицы $B = UW^2U^\top$ могут быть вычислены за $(p + 1)(p + 4)(m - p)/2 - p(p + 1)(p + 2)/6$ операций умножения (без учета затрат на вычисление матриц U и W^2).

Элементы матрицы $A = H + \alpha B$ на диагонали и ниже хранятся в одномерном массиве $a [1 : (m - p) \cdot (m - p + 1)/2]$. Под

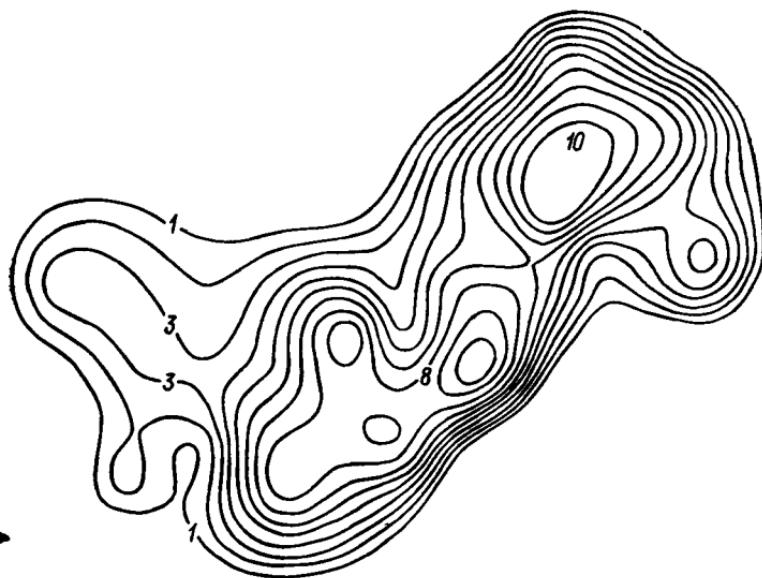


Рис. 3. Карта изогипс интерполяционного сплайна ($\epsilon = 0$).

матрицы G и $H = (-1)^r UGU^\top$ память не отводится, они хранятся на диске (при вычислении H используется рабочий массив длины m). Элементы матрицы G вычисляются по формуле $G_{ij} = \|X_i -$

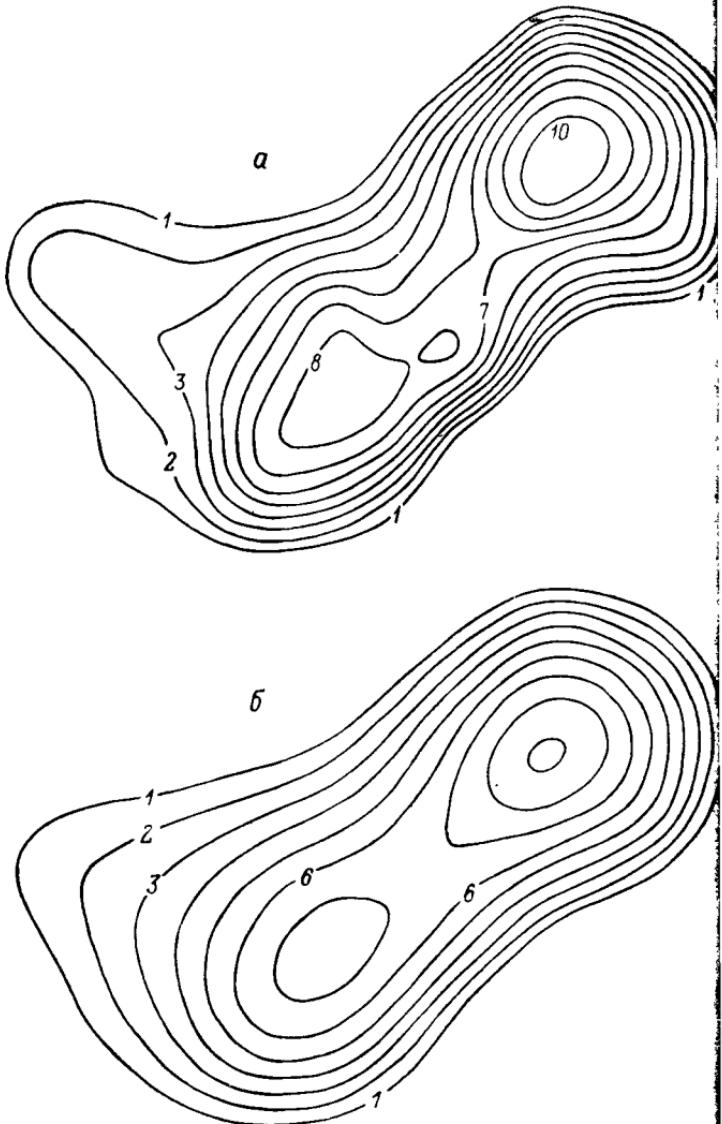
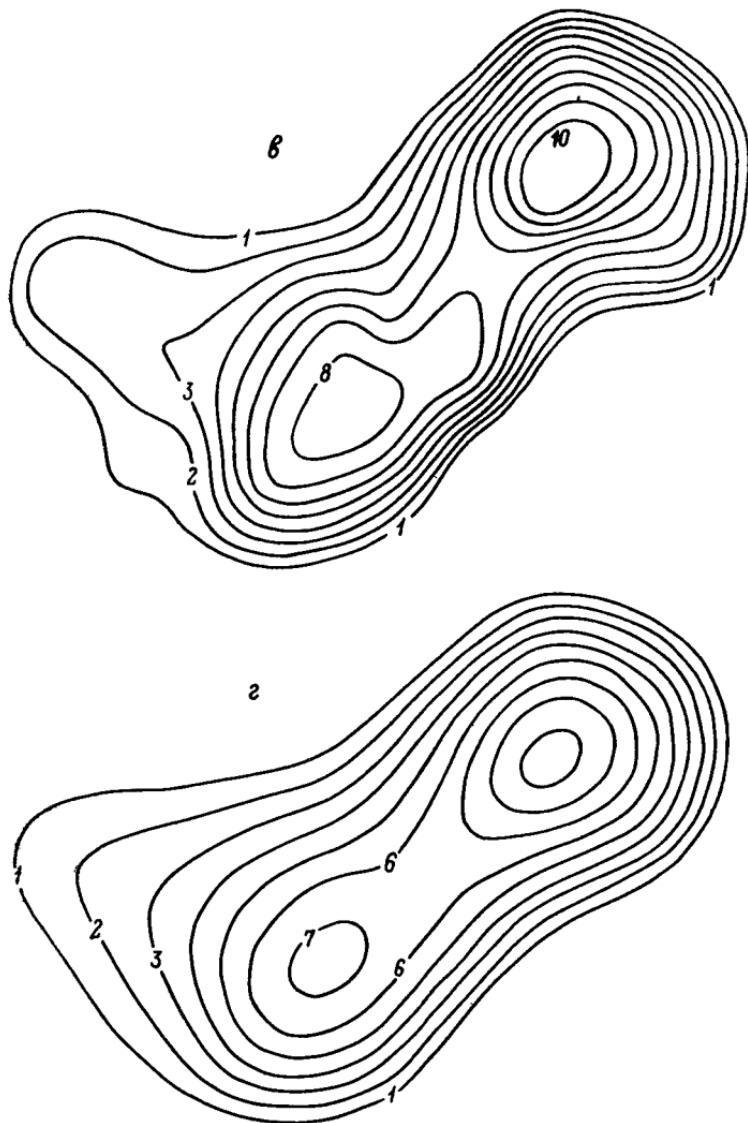


Рис. 4. Карта изог.
а — при $\varepsilon = 5, w = 1$; б — при $\varepsilon = 10, w =$

$-X_j\|^{2r-n} \ln \|X_i - X_j\|$ при n четном и $G_{ij} = \|X_i - X_j\|^{2r-n}$ при n нечетном. По мере необходимости матрицы G [$1:m, 1:m$] и H [$1:m-p, 1:m-p$] считаются с диска по одной строке.

Для нахождения треугольного разложения матрицы $A = L^0 \cdot L_0^T$ мы использовали процедуру `choldet 2` [33]. Эта процедура позволяет записывать ненулевые элементы матрицы L_0 в тот же массив a (на место элементов A). Массивы u , b , a , H , G и $D^T D$ описываются с двойной точностью.



сглаживающего сплайна.

ϵ — при $\epsilon = 5$, $w = \sqrt{2}$; γ — при $\epsilon = 10$, $w = \sqrt{2}$.

Если параметры n , p , m удовлетворяют неравенствам $n \leq 3$, $p \leq 10$, $m \leq 50$, то для программы достаточна оперативная память 64 кбайт. На ЭВМ с большей памятью размеры массивов могут быть увеличены.

Описанный выше метод и реализующий его комплекс программ были опробованы на задаче аппроксимации кровли одной из залежей Южно-Баганского месторождения нефти Тимано-Печорского нефтегазоносного района. Аппроксимация проводилась

по 11 глубинам скважин и по 48 данным сейсморазведки. При этом веса w_i выбирались по формуле

$$w_i = w'_i \sqrt{\sum_{i=1}^{59} \frac{1}{(w'_i)^2}}, \quad i \in 1 : 59,$$

где $w'_i = 1, i \in 1 : 11, w'_i = w, i \in 12 : 59$.

На рис. 3 приведена карта изогипс интерполяционного сплайна, имеющего сильно изрезанный рельеф из-за ошибок в исходных данных (глубина, м: 1 — 1987, 2 — 1982, ..., 10 — 1942). На рис. 4, а—4, г изображены карты изогипс сглаживающих сплайнов, которые аппроксимируют кровлю той же залежи нефти Южно-Баганского месторождения при различных значениях параметров ε и w . Сглаживающие сплайны задают значительно более плавные поверхности.

Покажем сходимость метода Ньютона при решении уравнения $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ для случая $\varepsilon = 5$ и $w = \sqrt{2}$ (время построения сплайна — 7 мин):

k	α	$\varphi(\alpha)$
1	0.2584	12.86
2	0.0359	7.61
3	0.0130	5.38
4	0.0109	5.01

6. Задача сглаживания в случае неизвестного ε . Пусть величины z_i измерены со случайной ошибкой

$$z_i = f(X_i) + \eta_i, \quad i \in 1 : m,$$

где $f(X)$ — неизвестная функция, которую желаем восстановить, а случайные ошибки η_i таковы, что

$$M\eta_i = 0, M\eta_i\eta_j = 0 \text{ при } i \neq j, M\eta_i^2 = w_i^2\varepsilon^2,$$

где w_i — положительные константы, в то время как величина ε^2 неизвестна. В этом случае рекомендуется применять метод перекрестной проверки (см. [56] и подробную библиографию к этой работе).

Вектор $g = (S_\alpha(X_1), \dots, S_\alpha(X_m))$ линейно зависит от $z = (z_1, \dots, z_m)$:

$$g = R(\alpha)z,$$

где $R(\alpha)$ — матрица влияния.

Вместо неизвестной функции $f(X)$ берется сглаживающий сплайн $S_\alpha(X)$, являющийся решением задачи (6.5), где α — точка минимума функции,

$$V(\alpha) = \varphi^2(\alpha) \left[\frac{1}{m} \operatorname{tr}(E - R(\alpha)) \right]^{-2},$$

где E — единичная матрица, $\operatorname{tr}(E - R(\alpha))$ — след матрицы $E - R(\alpha)$.

Покажем, как вычислять след в рамках алгоритма построения сплайна S_α , основанного на решении системы (7.2). Эту систему в дальнейшем будем записывать в виде

$$(H + \alpha B) h = (-1)^r U z.$$

В силу (6.8) и равенства $g = R(\alpha)z$ имеем:

$$(E - R(\alpha))z = z - g = (-1)^r \alpha W^2 d = (-1)^r \alpha W^2 U^\top h = \alpha W^2 U^\top (H + \alpha B)^{-1} U z.$$

Отсюда

$$E - R(\alpha) = \alpha W^2 U^\top (H + \alpha B)^{-1} U.$$

С учетом элементарного свойства следа $\text{tr}(AB) = \text{tr}(BA)$ получаем:

$$\text{tr}(E - R(\alpha)) = \text{tr}(\alpha U W^2 U^\top (H + \alpha B)^{-1}).$$

Но $U W^2 U^\top = B$, отсюда

$$\text{tr}(E - R(\alpha)) = \alpha \sum_{i=1}^{m-p} C_{ii},$$

где $C = B(H + \alpha B)^{-1}$. Покажем, как вычислить диагональный элемент C_{ii} матрицы C .

Пусть C_i — i -я строка C , B_i — i -я строка B . Тогда $C_i(H + \alpha B)^{-1} = B_i$ или, в транспонированном виде,

$$(H + \alpha B) C_i^\top = B_i^\top.$$

В процессе решения системы (7.2) находится разложение Холецкого $H + \alpha B = L_0 L_0^\top$. Поэтому нужно решить две треугольные системы. Сначала найдем v из системы $L_0 v = B_i^\top$ (можно учесть, что $B_{ij} = 0$ при $|i - j| > p$), затем — вектор C_i^\top из системы $L_0 C_i^\top = v$ (строго говоря, нужен один элемент C_{ii}).

7. Метод сопряженных градиентов для решения системы линейных уравнений, возникающих при интерполяции и сглаживании сплайнами. Метод сопряженных градиентов следует применять тогда, когда нижний треугольник матрицы $A = H + \alpha B$, возникающей в предыдущем методе, не помещается в оперативной памяти ЭВМ. В этом случае для построения натурального сплайна $S_\alpha(X)$ будем решать систему (6.12) $(Q + \alpha E)x = (-1)^r \Pi W^{-1} z$. В силу леммы 6.1 матрица $C = Q + \alpha E$ при $\alpha > 0$ положительно определена. При решении интерполяционной задачи матрица $C = Q$ неотрицательно определена, причем $\lambda = 0$ является ее собственным числом кратности p . Поэтому теоретически решение интерполяционной задачи методом сопряженных градиентов можно получить за меньшее количество итераций по сравнению с решением задачи сглаживания. Рассмотрим задачу

$$f(x) = \frac{1}{2} (Cx, x) - (-1)^r (b, x) \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^m}, \quad (7.17)$$

где $b = \Pi W^{-1} z$ (см. (6.4)). Еще в работе С. А. Смоляка [27] для решения (6.10) (в простейшем случае $n = r = 2$) предлагалось

применять метод сопряженных градиентов. Он особенно удобен для малых ЭВМ, обладающих небольшой оперативной памятью, так как элементы матрицы C (если m велико) можно не хранить в памяти ЭВМ, а считывать с магнитного носителя. При этом очень удобно, что на всех шагах метода сопряженных градиентов матрица C остается неизменной.

Столбцы D_j , $j \in 1 : p$, матрицы $D = W^{-1}V$ линейно независимы. Переайдем от $\{D_j\}_{j=1}^p$ к ортонормированной системе $\{h_j\}_{j=1}^p$ с помощью стандартного процесса ортогонализации:

$$h_1 = \gamma_1 D_1 = \beta_{11} D_1, \quad \gamma_1 = \beta_{11} = \|D_1\|^{-1},$$

$$h_k = \gamma_k (D_k - \alpha_1 h_1 - \dots - \alpha_{k-1} h_{k-1}) = \sum_{j=1}^k \beta_{kj} D_j, \quad k \in 2 : p,$$

где

$$\alpha_i = (D_k, h_i), \quad i \in 1 : k-1, \quad \gamma_k = \|D_k - \alpha_1 h_1 - \dots - \alpha_{k-1} h_{k-1}\|^{-1}.$$

Запомним коэффициенты β_{kj} в треугольной матрице

$$B_0 = \begin{bmatrix} \beta_{11} & & & \\ \beta_{21} & \beta_{22} & & 0 \\ \dots & & & \\ \beta_{p1} & \beta_{p2} & \dots & \beta_{pp} \end{bmatrix}.$$

В результате получаем матрицу $H_0 = D B_0^T$, столбцы которой $\{h_j\}_{j=1}^p$ образуют ортонормированный базис в подпространстве $L^\perp = \mathcal{L}(D_1, \dots, D_p)$ — линейной оболочке векторов D_1, \dots, D_p . Решение уравнения $D^T D c = D^T W^{-1} z$ после введения матрицы H_0 можно представить в виде

$$c^* = (D^T D)^{-1} D^T W^{-1} z = (H_0 B_0)^T W^{-1} z.$$

Обратимся к вычислению матрицы $Q = (-1)^r \Pi W^{-1} G W^{-1} \Pi$ системы (6.12). Вычислять матрицу Π в явном виде не надо по следующим причинам: во-первых, для нее требуется m^2 ячеек памяти, что неприемлемо при большом m , во-вторых, двукратное умножение на Π при вычислении Q (при наличии Π в явном виде) в этом случае потребует $2m^3$ операций умножения. Таких затрат можно избежать. В силу того что матрицу Π можно привести к виду

$$\Pi = E - H_0 H_0^T,$$

действие Π на вектор ξ представимо в виде

$$\Pi \xi = \xi - \sum_{k=1}^p (h_k, \xi) h_k, \tag{7.18}$$

где h_k — столбцы матрицы H_0 . Для вычисления $\Pi \xi$ по формуле (7.18) требуется всего $2pm$ операций умножения. В результате при вычислении матрицы Q двукратное умножение на Π (проектирование столбцов матрицы $(-1)^r W^{-1} G W^{-1}$ и проектирование строк матрицы $(-1)^r \Pi W^{-1} G W^{-1}$) в этом случае потребует всего $4pm^2$ умножений.

Опишем схему решения задачи (7.17) методом сопряженных градиентов. На каждом шаге этого метода вычисляется невязка $\xi = Cx - (-1)^r b$. Процесс заканчивается, когда $\xi = \emptyset$ (точнее, когда $\|\xi\| < \delta$, где δ — заданная точность). В качестве начального приближения берем $x_0 = \emptyset$, $p_0 = -\xi_0$, где p_0 — направление движения, а

$$\xi_0 = f'(x_0) = Cx_0 - (-1)^r b.$$

После чего последовательно выполняем следующие действия:

1) проверим, отлична ли невязка ξ_i от нуля; если $\|\xi_i\| = 0$, то процесс заканчивается, вектор $x^* = x_i$ является решением задачи (7.17);

2) определим направление движения $p_i = -\xi_i + \beta_i p_{i-1}$, где $\beta_i = \|\xi_i\|^2 / \|\xi_{i-1}\|^2$, $i \geq 1$;

3) найдем (Cp_i, p_i) и $\alpha_i = \|\xi_i\|^2 / (Cp_i, p_i)$;

4) сделаем шаг в направлении движения $x_{i+1} = x_i + \alpha_i p_i$;

5) вычислим невязку $\xi_{i+1} = Cx_{i+1} - (-1)^r b$ и перейдем к шагу 1.

На шаге 3) выполняем деление на (Cp_i, p_i) . Можно показать, что $(Cp_i, p_i) > 0$ для $i = 0, 1, 2, \dots$ Это следует из свойств векторов p_i :

a) $p_i \neq 0$, $i = 1, 2, \dots$, $(Cp_i, p_j) = 0$ при $i < j$; (свойство называется *C-ортогональностью*);

б) $\Pr_i = p_i$; это означает, что $W^{-1}p_i \in L$, так как $V^t W^{-1}p_i = D^t p_i = D^t \Pr_i = 0$.

Легко показать, что

$$(Cp_i, p_i) = ((Q + \alpha E)p_i, p_i) = (-1)^r (\Pi W^{-1}G W^{-1} \Pr_i, p_i) + \alpha \|p_i\|^2 = \\ = (-1)^r (G W^{-1}p_i, W^{-1}p_i) + \alpha \|p_i\|^2 > 0$$

в силу положительной определенности матрицы $(-1)^r G$ на подпространстве L . Из этих свойств вытекают два важных следствия.

Следствие 7.1. Все точки $d_i = W^{-1}x_i$ принадлежат L , т. е. $V^t d_i = D^t x_i = \emptyset$; $i = 1, 2, \dots$

Следствие 7.2. Векторы p_i линейно независимы.

Имеем: $W^{-1}p_i \in L$. Поскольку в подпространстве L не может быть больше, чем $m - p$ линейно независимых векторов, то при некотором $i \in 0 : m - p$ получим $\xi_i = \emptyset$, т. е. процесс заканчивается за число шагов, не превосходящее $m - p$.

Замечание 7.1. Если m велико, то через несколько десятков итераций при вычислении на ЭВМ проявляется неустойчивость — накапливается погрешность округления. Поэтому через несколько десятков итераций рекомендуется делать обновление, т. е. полагать $\beta_i = 0$, $p_i = -\xi_i$ для $i = l, 2l, 3l, \dots$ В эти моменты метод фактически будет начинаться заново.

Пусть x^* — решение системы (6.12). По лемме 6.3, вектор $d^* = W^{-1}x^*$ (см. также следствие 7.1) удовлетворяет условию $V^t d^* = \emptyset$. Нам осталось найти вектор c^* решения системы (6.10). Рассмотрим вектор $y = [G + (-1)^r \alpha W^2] d^*$. Найдем c^* из системы $Vc = z - y$. Для этого умножим систему на $D^t W^{-1}$.

Получим соотношение $D^T D c = D^T W^{-1} (z - y)$. Теперь c^* можно найти по формуле

$$c^* = (D^T D)^{-1} D^T W^{-1} (z - y) = (H_0 B_0)^T W^{-1} (z - y). \quad (7.19)$$

Векторы c^* и d^* являются решением системы (6.10) (см. лемму 6.3).

8. Численное решение уравнения $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ во втором методе. При $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$ в силу лемм 6.2 и 7.4 корень уравнения $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ существует и единствен. Следуя п. 3 и используя соотношение (6.14), положим:

$$\Psi(\beta) = \varphi\left(\frac{1}{\beta}\right) = \left\{ \sum_{k=p+1}^m \frac{a_k^2}{(1 + \lambda_k \beta)^2} \right\}^{1/2}. \quad (7.20)$$

Функция $\Psi(\beta)$ строго убывает и строго выпукла на полуоси $[0, +\infty]$, $\Psi(0) = \varepsilon_*$, $\Psi(\infty) = 0$ (см. лемму 7.5). Заменим уравнение $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ на $1/\Psi(\beta) = 1/\varepsilon$ и будем решать последнее методом Ньютона с начальным приближением $\beta_0 = 0$:

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \frac{\Psi^2(\beta_k)}{\varepsilon} \cdot \frac{\Psi(\beta_k) - \varepsilon}{\Psi(\beta_k) \cdot \Psi'(\beta_k)}, \quad k = 0, 1, 2, \dots$$

Выпуклость функции $\Psi(\beta)$ гарантирует сходимость метода Ньютона. Находить λ_i и использовать формулу (7.20) нецелесообразно, можно вычислять по формулам:

$$\begin{aligned} \Psi^2(\beta) &= \varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \|Wd\|^2, \\ \Psi(\beta) \cdot \Psi'(\beta) &= -\alpha^2 \varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha), \quad \alpha = \frac{1}{\beta}. \end{aligned} \quad (7.21)$$

Покажем, как вычислять $\varphi^2(\alpha)$ и $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha)$. Систему (6.12) запишем в виде

$$(Q + \alpha E)x = (-1)^r b. \quad (7.22)$$

Тогда $\varphi^2(\alpha) = \alpha^2 \|x\|^2$, а $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha) = \alpha \|x\|^2 + \alpha^2(x, x')$, где x' — это решение уравнения

$$(Q + \alpha E)x' = -x. \quad (7.23)$$

Таким образом, для нахождения значений $\varphi^2(\alpha)$ и $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha)$ нужно решить методом сопряженных градиентов системы (7.22) и (7.23).

При применении метода Ньютона с начальным приближением $\beta_0 = 0$ нужно вычислить $\Psi(0) \cdot \Psi'(0)$. Способ вычисления дает лемма 7.7:

$$\Psi(0) \cdot \Psi'(0) = -(-1)^r (G W^{-1} b, W^{-1} b) = -(Q W^{-1} z, W^{-1} z) \quad (7.24)$$

(вместо b подставили его выражение $b = \Pi W^{-1} z$).

9. Алгоритм второго метода решения задачи сглаживания. Алгоритм решения задачи сглаживания (6.1), который изложен ниже, основан на идеях работы [16] и теоретических результатах, приведенных в § 6 и 7.

1. Для численной устойчивости расчетов и уменьшения числа обусловленности матрицы решаемой системы линейных уравнений

выполним линейную замену переменных, переводящую точки $\{X_i, z_i\}$ в единичный куб в \mathbb{R}^{n+1} .

2. Вычислим $D = W^{-1}V$. Проведем ортогонализацию столбцов матрицы D , вычислим треугольную матрицу B_0 , найдем матрицу $H_0 = DB_0^T$.

3. Вычислим c^* из уравнения $D^T D c = D^T W^{-1} z$ по формуле $c^* = (H_0 B_0)^T W^{-1} z$. Найдем $b = W^{-1} z - D c^*$ и $\varepsilon_* = \|b\|$. Если $\varepsilon \geq \varepsilon_*$, то решением задачи (6.1) является полином

$$P^*(X) = \sum_{i=1}^p c_i^* X^{\beta_i}.$$

4. В основном случае $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$ сформируем матрицу $Q = (-1)^r \Pi W^{-1} G W^{-1} \Pi$. Для этой цели используем представление $\Pi = E - H_0 H_0^T$ (вычислять Π в явном виде не надо).

5. Положим $k = 0$, $\beta_0 = 0$. Вычислим $\Psi(0) \cdot \Psi'(0) = -(-1)^r \times (G W^{-1} b, W^{-1} b) = -(Q W^{-1} z, W^{-1} z)$ и сделаем первый шаг по методу Ньютона:

$$\beta_1 = \beta_0 - \frac{\Psi^2(0)}{\varepsilon} \frac{\Psi(0) - \varepsilon}{\Psi(0) \cdot \Psi'(0)} = -\frac{\varepsilon_*^2}{\varepsilon} \frac{\varepsilon_* - \varepsilon}{\Psi(0) \cdot \Psi'(0)}.$$

6. Начальный шаг итерационного процесса — положим $k = k + 1$, $\alpha_k = 1/\beta_k$. Вычислим $C = Q + \alpha_k E$.

7. Найдем вектор x из уравнения $Cx = (-1)^r b$. Вычислим $\Psi^2(\beta_k) = \varphi^2(\alpha_k) = \alpha_k^2 \|x\|^2$. Если $\Psi(\beta_k) - \varepsilon < \delta$, то перейдем к п. 9. (В зависимости от требуемой точности вычислений полагаем $\delta = \varepsilon/10$ или $\delta = \varepsilon/100$).

8. Найдем x' из уравнения $Cx' = -x$. Вычислим $\varphi(\alpha_k) \times \varphi'(\alpha_k) = \alpha_k \|x\|^2 + \alpha_k^2(x, x')$, сделаем шаг по методу Ньютона:

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \frac{\Psi^2(\beta_k)}{\varepsilon} \frac{\Psi(\beta_k) - \varepsilon}{\Psi(\beta_k) \cdot \Psi'(\beta_k)} = \beta_k + \frac{\|x\|^2}{\varepsilon} \frac{\varphi(\alpha_k) - \varepsilon}{\varphi(\alpha_k) \cdot \varphi'(\alpha_k)}.$$

Перейдем к п. 6.

9. Положим $\alpha = \alpha_k$ и вычислим $d = W^{-1}x$. Найдем $y = (G + (-1)^r \alpha W^2)d$, а также c из уравнения $Vc = z - y$. Умножая на $D^T W^{-1}$, получаем соотношение $D^T D c = D^T W^{-1}(z - y)$, откуда c находим по формуле

$$c = (H_0 B_0)^T W^{-1}(z - y).$$

Найденные коэффициенты d и c задают искомый сглаживающий сплайн.

Описанный выше метод и реализующий его комплекс программ были опробованы на одной из залежей Харьгинского месторождения нефти Тимано-Печорского нефтегазоносного района (глубина, м: 1 — 1620, 2 — 1610, ..., 7 — 1560). На рис. 5 приводятся линии уровня сглаживающего натурального сплайна $S_\alpha(X)$, аппроксимирующего кровлю одной из залежей. Сглаживающий сплайн $S_\alpha(X)$ строился для случая, когда среднеквадратическая погрешность измерения глубины равна 5 м. На рис. 6 изображены линии уровня натурального сплайна, который интерполирует те же исходные

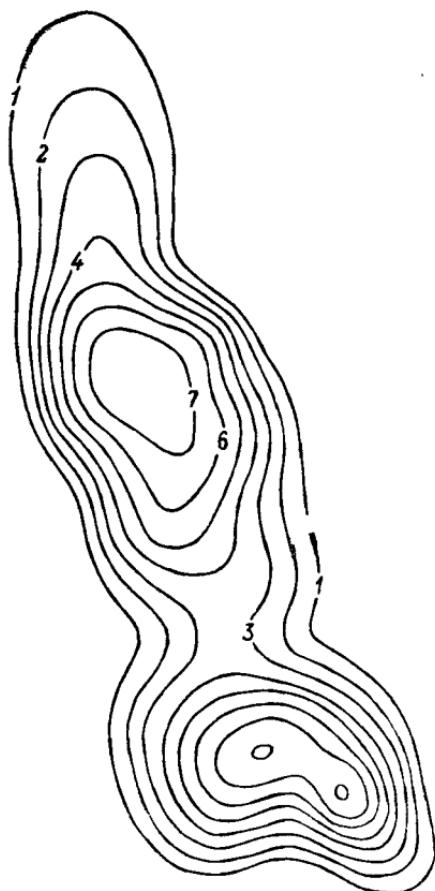


Рис. 5. Линии уровня сглаживающего сплайна ($\varepsilon = 5$).

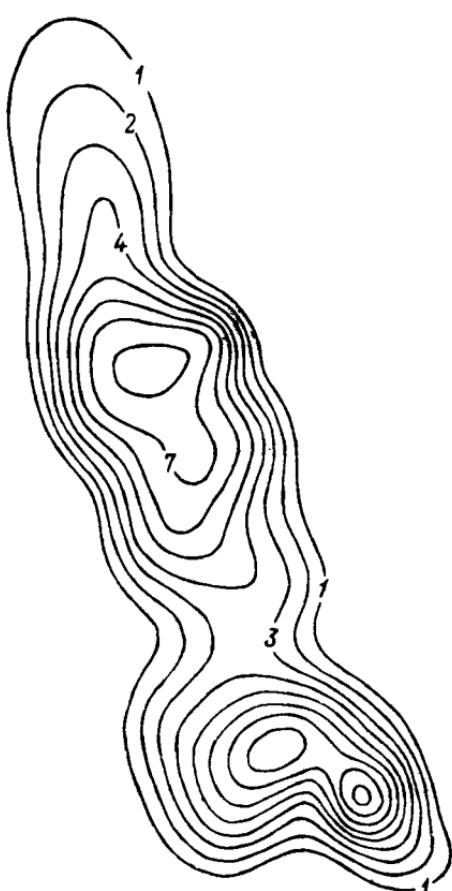


Рис. 6. Линии уровня интерполяционного сплайна ($\varepsilon = 0$).

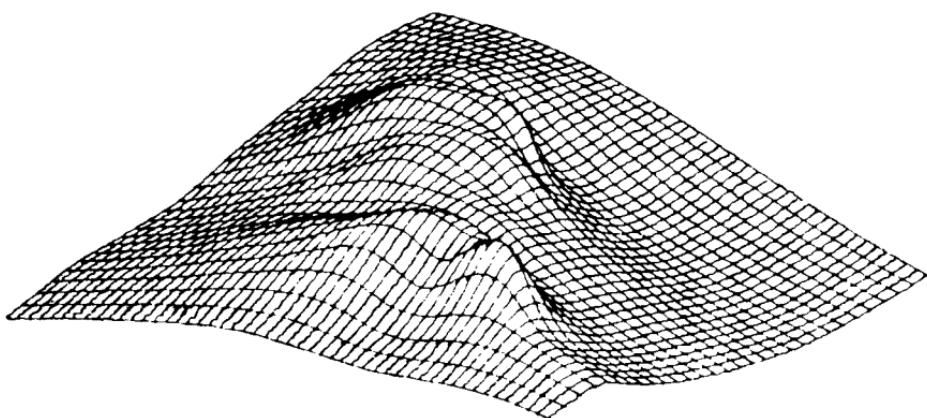


Рис. 7. Рельефное изображение сглаживающего сплайна.

данные. Сравнивая рис. 5 и 6, можно сразу заметить, что сглаживающий сплайн задает более сглаженную (плавную) поверхность. На рис. 7 приведено рельефное изображение поверхности сглаживающего сплайна, аппроксимирующего кровлю залежи нефти, полученное на графопостроителе (для наглядности вертикальный масштаб сильно увеличен).

§ 8. Задание наклонов (производных по направлениям)

Пусть в качестве информации о функции $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ используются не только значения функции, но и значения производных по направлениям. Требуется решить задачу

$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min, \quad (8.1)$$

где минимум берется по всем функциям $g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$, удовлетворяющим ограничениям

$$g(X_i) = f(X_i), \quad i \in 1:m, \quad \frac{\partial g(X_i)}{\partial v_i} = \frac{\partial f(X_i)}{\partial v_i}, \quad i \in m+1:N. \quad (8.2)$$

Сделаем некоторые предположения:

1) $2r - n - 2 > 0$ (тогда функции из $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ непрерывно дифференцируемы, см. теорему 4.1);

2) точки X_1, \dots, X_m попарно различны, и среди них найдутся p точек, на которых однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов степени $\leq r-1$ ($p = \dim \mathcal{P}_{r-1}$);

3) множества $\{X_1, \dots, X_m\}$ и $\{X_{m+1}, \dots, X_N\}$ могут пересекаться;

4) если $X_{i_1} = X_{i_2} = \dots = X_{i_k}$, где $m+1 \leq i_1 < i_2 < \dots < i_k \leq N$, то направления $v_{i_1}, v_{i_2}, \dots, v_{i_k}$ линейно независимы.

Оказывается, что решением задачи (8.1)–(8.2) является натуральный сплайн вида

$$S(X) = Q_0(X) + \sum_{i=1}^m d_i G(X - X_i) + \sum_{i=m+1}^N d_i \frac{\partial G}{\partial v_i}(X - X_i), \quad (8.3)$$

где $Q_0 \in \mathcal{P}_{r-1}$, G — фундаментальное решение полигармонического уравнения (см. § 4), а коэффициенты d_i удовлетворяют условию

$$\sum_{i=1}^m d_i Q(X_i) - \sum_{i=m+1}^N d_i \frac{\partial Q}{\partial v_i}(X_i) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_{r-1}. \quad (8.4)$$

По той же схеме, что и в § 5, доказываются следующие утверждения.

Л е м м а 8.1. *Любой натуральный сплайн (8.3)–(8.4) принадлежит пространству $L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$.*

Теорема 8.1. Для любого натурального сплайна S и любой функции $g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ справедливо ключевое тождество

$$\langle TS, Tg \rangle = (-1)^r \left\{ \sum_{i=1}^m d_i g(X_i) - \sum_{i=m+1}^N d_i \frac{\partial g}{\partial v_i}(X_i) \right\}.$$

Из этого тождества, как и в § 5, легко следуют разрешимость интерполяционной задачи и основное экстремальное свойство сплайнов (8.3)–(8.4).

Теорема 8.2. Для любой функции $f \in C^1(\mathbb{R}^n)$ существует, и притом единственный, натуральный сплайн $S(f; X)$, такой, что

$$S(f; X_i) = f(X_i), \quad i \in 1 : m, \quad \frac{\partial S(f; X_i)}{\partial v_i} = \frac{\partial f(X_i)}{\partial v_i}, \quad i \in m + 1 : N.$$

Теорема 8.3. Натуральный сплайн $S(f)$ является единственным решением задачи (8.1)–(8.2).

§ 9. Натуральные сплайны в случае двусторонних ограничений

1. Рассмотрим задачу наиболее плавной интерполяции в случае, когда в m точках известны значения функции $f(X_i)$, $i \in 1 : m$, а для $N - m$ точек известно, что значение функции находится в пределах

$$\alpha_i \leq f(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in m + 1 : N.$$

Не исключается случай, когда некоторые $\alpha_i = -\infty$ или некоторые $\beta_i = +\infty$. Рассмотрим задачу

$$\|Tg\|^2 := \langle Tg, Tg \rangle \rightarrow \min_{g \in \Omega_{\alpha, \beta}}, \quad (9.1)$$

где

$$\Omega_{\alpha, \beta} = \left\{ g \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n) \mid g(X_i) = f(X_i), \quad i \in 1 : m; \quad \alpha_i \leq g(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in m + 1 : N \right\}. \quad (9.2)$$

Для $n = 1$ аналогичную задачу исследовал М. Аттиа (см. [20, с. 437–439]), а для $n > 1$ — А. В. Ковалков [4]. Рассматривалась и более общая задача минимизации $\|Tg\|^2$ на произвольном выпуклом множестве $\Omega \subset L_2^{(r)}(\mathbb{R}^n)$ (см. [4, 20]).

В задаче (9.1)–(9.2) минимум достигается на натуральном сплайне того же вида, что и в § 5:

$$S(X) = Q_0(X) + \sum_{i=1}^N d_i G(X - X_i),$$

где $Q_0 \in \mathcal{P}_{r-1}$, а вектор коэффициентов $d = (d_1, \dots, d_N)$ принадлежит подпространству

$$D = \left\{ d \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{i=1}^N d_i Q(X_i) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_{r-1} \right\}.$$

Дадим сравнительно элементарное доказательство этого факта. Для $d \in D$ введем функцию

$$\Phi(d) = \frac{1}{2} \langle TS, TS \rangle.$$

Очевидно, $\Phi(d) \geq 0$. В силу ключевого тождества (5.8) и включения $d \in D$ имеем:

$$\Phi(d) = \frac{(-1)^r}{2} \sum_{i=1}^N d_i S(X_i) = \frac{(-1)^r}{2} \sum_{i, k=1}^N G(X_i - X_k) d_i d_k. \quad (9.3)$$

В дальнейшем будем предполагать, что на первых p точках X_1, \dots, X_p , где $p = \dim \mathcal{P}_{r-1}$, однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов степени $\leq r-1$. Тогда если $\Phi(d) = 0$, то, как и при доказательстве теоремы 5.2, $d = 0$. Таким образом,

$$\Phi(d) > 0 \quad \forall d \in D, d \neq 0. \quad (9.4)$$

Рассмотрим задачу (9.1)–(9.2) на натуральных сплайнах, т. е. подставим в (9.1)–(9.2) вместо g сплайн S . Получим задачу

$$\begin{aligned} \Phi(d) &\rightarrow \min, \\ S(X_i) &= f(X_i), \quad i \in 1 : m, \\ \alpha_i &\leq S(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in m+1 : N, \\ d &\in D. \end{aligned} \quad (9.5)$$

Здесь

$$S(X) = \sum_{k=1}^p c_k Q_k(X) + \sum_{j=1}^N d_j G(X - X_j),$$

где полиномы Q_1, \dots, Q_p образуют базис в \mathcal{P}_{r-1} . Неизвестными в задаче (9.5) являются векторы $c = (c_1, \dots, c_p)$ и d . По теореме 5.2, множество допустимых решений не пусто, а в силу (9.4) целевая функция Φ ограничена снизу. Поэтому (см., например, [9, с. 111]) решение задачи (9.5) существует. Если есть два решения, $\{d_1, c_1\}$ и $\{d_2, c_2\}$, то в силу (9.4) $d_1 = d_2$, но может быть $c_1 \neq c_2$. (Если $m \geq p$, то в силу предположения об однозначной разрешимости интерполяционной задачи на первых p точках будет единственность и по переменным c).

Приведем критерий оптимальности для задачи (9.5). Введем векторы из \mathbb{R}^{N+p} :

$$\begin{aligned} A_i &= (G(X_i - X_1), \dots, G(X_i - X_N), Q_1(X_i), \dots, Q_p(X_i)), \quad i \in 1 : N, \\ V_k &= (Q_k(X_1), Q_k(X_2), \dots, Q_k(X_N), 0, \dots, 0), \quad k \in 1 : p. \end{aligned}$$

Используя обозначение $h = \{d, c\}$, ограничения задачи (9.5) можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} (A_i, h) &= f(X_i), \quad i \in 1 : m, \\ (A_i, h) &\geq \alpha_i, \quad i \in m+1 : N, \\ -(A_i, h) &\geq -\beta_i, \quad i \in m+1 : N, \\ (V_k, h) &= 0, \quad k \in 1 : p. \end{aligned}$$

Здесь $(,)$ — скалярное произведение в \mathbb{R}^{N+p} . По известному критерию оптимальности (см., например, [9, с. 91]), вектор h^* , удовлетворяющий ограничениям, будет решением задачи тогда и только тогда, когда найдутся числа u_i , $i \in 1 : m$; u'_i , u''_i , $i \in m+1 : N$; λ_k , $k \in 1 : p$, такие, что

$$\Phi'(h^*) = \sum_{i=1}^m u_i A_i + \sum_{i=m+1}^N (u'_i - u''_i) A_i + \sum_{k=1}^p \lambda_k V_k, \quad (9.6)$$

$$u'_i \geq 0, u''_i \geq 0, \quad i \in m+1 : N, \quad (9.7)$$

$$u'_i [(A_i, h^*) - \alpha_i] = 0, \quad u''_i [\beta_i - (A_i, h^*)] = 0, \quad i \in m+1 : N. \quad (9.8)$$

Первые N компонент вектора $\Phi'(h^*)$ равны

$$\frac{\partial \Phi}{\partial d_k}(h^*) = (-1)^r \sum_{i=1}^N d_i^* G(X_i - X_k), \quad k \in 1 : N.$$

Последние p компонент вектора $\Phi'(h^*)$ равны нулю. Поэтому векторное равенство (9.6) будет выполнено, если выполняются равенства

$$u_i = (-1)^r d_i^*, \quad i \in 1 : m; \quad u'_i - u''_i = (-1)^r d_i^*, \quad i \in m+1 : N; \quad \lambda_k = 0, \quad k \in 1 : p$$

На основании (9.7) и (9.8) можно провести анализ знаков d_i^* и получить следующее утверждение.

Теорема 9.1. Пусть натуральный сплайн $S_*(X)$ с коэффициентами $h^* = \{d^*, c^*\}$ удовлетворяет условиям

$$S_*(X_i) = f(X_i), \quad i \in 1 : m; \quad \alpha_i \leq S_*(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in m+1 : N.$$

Для того чтобы вектор h^* был решением задачи (9.5), необходимо и достаточно, чтобы для любого $i \in m+1 : N$ выполнялись условия

$$d_i^* = 0, \text{ если } \alpha_i < S_*(X_i) < \beta_i,$$

$$(-1)^r d_i^* \geq 0, \text{ если } S_*(X_i) = \alpha_i, \quad (9.9)$$

$$(-1)^r d_i^* \leq 0, \text{ если } S_*(X_i) = \beta_i. \quad (9.10)$$

2. В случае $r = n = 2$ теореме 9.1 можно дать следующую механическую интерпретацию. Рассмотрим упругую пластину, совпадающую с графиком функции $S(X)$. Тогда функцию Φ можно истолковать как потенциальную энергию изгиба (см. конец § 5). Коэффициенты d_i^* можно истолковать как реакции опор в точках X_i . Условия (9.9)–(9.10) означают, что реакция направлена вверх (вниз), если пластина легла на нижнюю (верхнюю) опору.

3. До сих пор мы рассматривали функционал $\|Tg\|^2$ только на натуральных сплайнах. Вернемся к исходной постановке задачи (9.1). Предположим, что $m \geq p$, и если $Q(X_i) = 0$, $i \in 1 : m$; $Q \in \mathcal{P}_{r-1}$, то $Q \equiv 0$.

Теорема 9.2. Пусть h^* — решение задачи (9.5) и S_* — натуральный сплайн с коэффициентами h^* . Тогда S_* является единственным решением задачи (9.1).

Доказательство. Для любой $g \in \Omega_{\alpha, \beta}$ в силу ключевого тождества (5.8) имеем:

$$\|Tg\|^2 - \|TS_*\|^2 = \|Tg - TS_*\|^2 + 2\langle Tg, TS_* \rangle - 2\langle TS_*, TS_* \rangle = \|Tg - TS_*\|^2 + 2(-1)^r \sum_{i=1}^N d_i^* [g(X_i) - S_*(X_i)].$$

Если $i \in 1 : m$, то $g(X_i) = S_*(X_i)$. Введем множества

$$M_1 = \{i \in m+1 : N \mid S_*(X_i) = \alpha_i\}, \quad M_2 = \{i \in m+1 : N \mid S_*(X_i) = \beta_i\}.$$

Если $i \in (m+1 : N) \setminus (M_1 \cup M_2)$, то, по теореме 9.1, $d_i^* = 0$. Поэтому

$$\begin{aligned} \|Tg\|^2 - \|TS_*\|^2 &= \|Tg - TS_*\|^2 + 2(-1)^r \sum_{i \in M_1} d_i^* [g(X_i) - \alpha_i] + \\ &\quad + 2(-1)^r \sum_{i \in M_2} d_i^* [g(X_i) - \beta_i]. \end{aligned}$$

Для $i \in M_1$ $(-1)^r d_i^* \geq 0$ и $g(X_i) - \alpha_i \geq 0$, а для $i \in M_2$ знаки противоположные. Поэтому последние две суммы неотрицательны и $\|Tg\|^2 \geq \|TS_*\|^2$, т. е. S_* — решение (9.1).

Если $\|Tg\|^2 = \|TS_*\|^2$, то $\|T(g - S_*)\|^2 = 0$ и разность $g - S_*$ принадлежит \mathcal{P}_{r-1} . Поскольку $g(X_i) - S_*(X_i) = 0$, $i \in 1 : p$, то $g \equiv S_*$. Теорема доказана.

§ 10. Алгоритмы построения сплайна в случае двусторонних ограничений

1. Алгоритм. Как показано в § 9, для решения задачи (9.1) — (9.2)

$$\|Tg\|^2 := \langle Tg, Tg \rangle \rightarrow \min_{g \in \Omega_{\alpha, \beta}}$$

достаточно решить задачу квадратичного программирования (9.5)

$$\begin{aligned} \Phi(d) &= \frac{(-1)^r}{2} \sum_{l, k=1}^N G(X_l - X_k) d_l d_k \rightarrow \min, \\ S(X_i) &= z_i, \quad i \in 1 : m, \\ \alpha_i &\leq S(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in m+1 : N, \\ d &\in D. \end{aligned}$$

В настоящее время разработаны весьма эффективные методы решения таких задач. Упомянем, например, метод Вулфа — Даугавет (см. [9]). Однако знаковое правило для коэффициентов d_i^* , установленное в теореме 9.1, позволяет предложить следующий алгоритм, элементарным шагом которого является решение системы линейных уравнений.

Сначала мы подробно опишем алгоритм, после чего дадим доказательство его монотонности. На каждом шаге алгоритма будем

строить приближение к решению задачи (9.1)–(9.2) и проверять выполнение условий оптимальности.

1. Полагаем $k = 0$ и строим сплайн S_0 , интерполирующий значения z_i в первых m точках: $S_0(X_i) = z_i$, $i \in 1 : m$. Проверяем удовлетворение S_0 всем ограничениям:

$$\alpha_i \leq S_0(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in m + 1 : N. \quad (10.1)$$

Если все ограничения удовлетворены, то интерполяционный сплайн является решением задачи (9.1)–(9.2). Переходим к п. 4. В противном случае полагаем $M_0^\alpha = M_0^\beta = \emptyset$.

2. Полагаем $k = k + 1$. Обозначим N_{k-1}^α , $N_{k-1}^\beta \subset m + 1 : N$ множества индексов точек, в которых сплайн S_{k-1} не удовлетворяет ограничениям (10.1), т. е.

$$\begin{aligned} S_{k-1}(X_i) &< \alpha_i \text{ для } i \in N_{k-1}^\alpha, \\ S_{k-1}(X_i) &> \beta_i \text{ для } i \in N_{k-1}^\beta. \end{aligned} \quad (10.2)$$

Если $N_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\beta = \emptyset$, то переходим к пункту 4.

В противном случае введем ограничения с индексами $i \in N_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\beta$ в состав активных и решим интерполяционную задачу

$$\begin{aligned} S_k(X_i) &= z_i, \quad i \in 1 : m, \\ S_k(X_i) &= \alpha_i, \quad i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha, \quad S_k(X_i) = \beta_i, \quad i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta. \end{aligned} \quad (10.3)$$

Если коэффициенты сплайна S_k не удовлетворяют условиям оптимальности

$$\begin{aligned} (-1)^r d_i^k &\geq 0 \text{ для } i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha, \\ (-1)^r d_i^k &\leq 0 \text{ для } i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta, \end{aligned} \quad (10.4)$$

то переходим к п. 3.

В силу теорем 9.1 и 9.2 из выполнения условий (10.4) следует, что сплайн S_k имеет минимальную норму среди всех функций, удовлетворяющих ограничениям (9.2).

Если коэффициенты сплайна S_k удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} (-1)^r d_i^k &> 0 \text{ для } i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha, \\ (-1)^r d_i^k &< 0 \text{ для } i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta, \end{aligned}$$

то полагаем $M_k^\alpha = M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha$ и $M_k^\beta = M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta$, где M_k^α и M_k^β — множества активных ограничений для сплайна S_k , на которых сплайн S_k достигает нижней границы α_i и верхней границы β_i . В противном случае вводим множества

$$L_k^\alpha = \{i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha \mid d_i^k = 0\}, \quad L_k^\beta = \{i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta \mid d_i^k = 0\},$$

полагаем $M_k^\alpha = (M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha) \setminus L_k^\alpha$ и $M_k^\beta = (M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta) \setminus L_k^\beta$. Переходим к п. 2.

3. Если выполнены не все условия оптимальности (10.4), то введем множества индексов

$$L_k^\alpha = \{i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha \mid (-1)^r d_i^k \leq 0\},$$

$$L_k^\beta = \{i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta \mid (-1)^r d_i^k \geq 0\}.$$

Во множества L_k^α и L_k^β включены индексы тех коэффициентов, которые не удовлетворяют условиям оптимальности (10.4) или равны нулю. Выведем ограничения с такими индексами из состава активных и решим интерполяционную задачу

$$S_k(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S_k(X_i) = \alpha_i, \quad i \in (M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha) \setminus L_k^\alpha, \quad (10.5)$$

$$S_k(X_i) = \beta_i, \quad i \in (M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta) \setminus L_k^\beta.$$

Если снова для некоторых индексов i коэффициенты сплайна S_k не удовлетворяют условиям

$$(-1)^r d_i^k > 0 \text{ для } i \in (M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha) \setminus L_k^\alpha,$$

$$(-1)^r d_i^k < 0 \text{ для } i \in (M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta) \setminus L_k^\beta, \quad (10.6)$$

то еще раз выведем соответствующие ограничения из состава активных (включим эти индексы во множества L_k^α и L_k^β) и решим интерполяционную задачу (10.5). За конечное число таких повторных решений системы (10.5) условия (10.6) в конце концов будут выполнены. Положим

$$M_k^\alpha = (M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha) \setminus L_k^\alpha, \quad M_k^\beta = (M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta) \setminus L_k^\beta \quad (10.7)$$

и переходим к п. 2.

4. Положим $S_*(X) = S_k(X)$, $M^\alpha = M_k^\alpha$, $M^\beta = M_k^\beta$ и закончим работу алгоритма.

Отметим, что все сплайны S_k имеют вид

$$\sum_{i=1}^m d_i^k G(X - X_i) + \sum_{i \in M_k^\alpha \cup M_k^\beta} d_i^k G(X - X_i) + \sum_{j=1}^p c_j Q_j(X),$$

причем коэффициенты d_i^k сплайнов S_k кроме условий

$$\sum_{i=1}^m d_i^k Q_j(X_i) + \sum_{i \in M_k^\alpha \cup M_k^\beta} d_i^k Q_j(X_i) = 0, \quad j \in 1 : p$$

(здесь Q_1, \dots, Q_p — полиномы степени $\leq r - 1$, образующие базис в \mathcal{P}_{r-1}) удовлетворяют, по построению, условиям

$$(-1)^r d_i^k > 0 \text{ для } i \in M_k^\alpha,$$

$$(-1)^r d_i^k < 0 \text{ для } i \in M_k^\beta. \quad (10.8)$$

Последнее означает, что сплайны S_k не имеют нулевых коэффициентов. Такой подход (удаление нулевых коэффициентов) упрощает процесс вычислений и сокращает вычислительные затраты.

Для доказательства монотонности предложенного алгоритма

нам понадобятся вспомогательные леммы. Пусть S_0 — сплайн, коэффициенты которого находятся из системы уравнений

$$S_0(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S_0(X_i) = \alpha_i, \quad i \in M^\alpha \cup \{i_0\}, \quad S_0(X_i) = \beta_i, \quad i \in M^\beta,$$

причем коэффициент d_{i_0} сплайна S_0 не удовлетворяет условию оптимальности, т. е.

$$(-1)^r d_{i_0} < 0. \quad (10.9)$$

Выведем ограничение с индексом i_0 из состава активных. Пусть S — сплайн, коэффициенты которого находятся из системы уравнений

$$S(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S(X_i) = \alpha_i, \quad i \in M^\alpha, \quad S(X_i) = \beta_i, \quad i \in M^\beta.$$

Лемма 10.1. Из неравенства (10.9) вытекает выполнение неравенства

$$S(X_{i_0}) \geq \alpha_{i_0}. \quad (10.10)$$

Доказательство. Следуя теореме 9.2, имеем:

$$\begin{aligned} \|TS\|^2 - \|TS_0\|^2 &= \|TS - TS_0\|^2 + 2\langle TS_0, TS - TS_0 \rangle = \\ &= \|TS - TS_0\|^2 + 2(-1)^r d_{i_0} (S(X_{i_0}) - \alpha_{i_0}). \end{aligned}$$

Выполнение неравенства $S(X_{i_0}) < \alpha_{i_0}$ влечет выполнение неравенства $\|TS\| > \|TS_0\|$, чего не может быть, так как $\|TS\| \leq \|TS_0\|$ в силу того, что сплайн $S(X)$ удовлетворяет меньшему числу ограничений. Лемма доказана.

Утверждение леммы можно прокомментировать следующим образом. Если сплайн S_0 насилино притянут в некоторой точке X_{i_0} к нижней границе α_{i_0} , то при свободном поведении (такой ситуации соответствует сплайн S) сплайн S_0 отйдет от нижней границы, причем сдвинется в сторону верхней границы.

Аналогичную лемму можно доказать и для ситуации, когда сплайн S_0 насилино притянут к верхней границе β_{i_0} , если выполняется неравенство

$$(-1)^r d_{i_0} > 0. \quad (10.11)$$

Лемма 10.2. Из неравенства (10.11) вытекает выполнение неравенства

$$S(X_{i_0}) \leq \beta_{i_0}. \quad (10.12)$$

С помощью этих лемм можно доказать более общее утверждение. Пусть $S_0(X)$ — сплайн, коэффициенты которого находятся из системы уравнений

$$S_0(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S_0(X_i) = \alpha_i, \quad i \in M^\alpha, \quad S_0(X_i) = \beta_i, \quad i \in M^\beta,$$

причем некоторые коэффициенты d_i сплайна S_0 не удовлетворяют условиям оптимальности, т. е.

$$\begin{aligned} (-1)^r d_i &< 0 \quad \text{для } i \in L^\alpha \subset M^\alpha, \\ (-1)^r d_i &> 0 \quad \text{для } i \in L^\beta \subset M^\beta. \end{aligned} \quad (10.13)$$

Выведем ограничения с индексами $i \in L^\alpha \cup L^\beta$ из состава активных. Пусть S — сплайн, коэффициенты которого находятся из системы уравнений

$$\begin{aligned} S(X_i) &= z_i, \quad i \in 1 : m, \\ S(X_i) &= \alpha_i, \quad i \in M^\alpha \setminus L^\alpha, \quad S(X_i) = \beta_i, \quad i \in M^\beta \setminus L^\beta. \end{aligned}$$

Лемма 10.3. Из неравенств (10.13) вытекает выполнение неравенств

$$\begin{aligned} S(X_i) &\geq \alpha_i, \quad i \in L^\alpha, \\ S(X_i) &\leq \beta_i, \quad i \in L^\beta. \end{aligned} \quad (10.14)$$

Доказательство этой леммы можно получить, если по одному выводить ограничения с индексами $i \in L^\alpha \cup L^\beta$ из состава активных и использовать леммы 10.1 и 10.2.

Теорема 10.1. Предложенный алгоритм является монотонным в следующем смысле:

$$\|TS_k\| > \|TS_{k-1}\|, \quad k = 1, 2, \dots$$

Доказательство. Следуя теореме 9.2, имеем:

$$\begin{aligned} \|TS_k\|^2 - \|TS_{k-1}\|^2 &= \|TS_k - TS_{k-1}\|^2 + 2 \langle TS_k - TS_{k-1}, TS_k - TS_{k-1} \rangle = \\ &= \|TS_k - TS_{k-1}\|^2 + 2(-1)^r \sum_{i \in M_{k-1}^\alpha \cap L_k^\alpha} d_i^{k-1} [S_k(X_i) - \alpha_i] + \\ &\quad + 2(-1)^r \sum_{i \in M_{k-1}^\beta \cap L_k^\beta} d_i^{k-1} [S_k(X_i) - \beta_i]. \end{aligned}$$

В силу построения сплайна S_k и леммы 10.3 выполняются неравенства

$$\begin{aligned} (-1)^r d_i^{k-1} &> 0, \quad S_k(X_i) - \alpha_i \geq 0 \quad \text{для } i \in M_{k-1}^\alpha \cap L_k^\alpha, \\ (-1)^r d_i^{k-1} &< 0, \quad S_k(X_i) - \beta_i \leq 0 \quad \text{для } i \in M_{k-1}^\beta \cap L_k^\beta. \end{aligned}$$

Если $(M_{k-1}^\alpha \cap L_k^\alpha) \cup (M_{k-1}^\beta \cap L_k^\beta) \neq \emptyset$, то последние две суммы неотрицательны, в противном случае эти две суммы отсутствуют.

Мы рассматриваем ситуацию, когда на $(k-1)$ -м шаге алгоритм не заканчивается, т. е. $N_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\beta \neq \emptyset$. Покажем, что хотя бы одно из множеств $N_{k-1}^\beta \setminus L_k^\alpha$ или $N_{k-1}^\alpha \setminus L_k^\beta$ не пусто.

Допустим для определенности $N_{k-1}^\alpha \neq \emptyset$. По определению этого множества,

$$S_{k-1}(X_i) < \alpha_i \quad \text{для } i \in N_{k-1}^\alpha. \quad (10.15)$$

Рассмотрим сплайн S_k , удовлетворяющий условиям

$$S_k(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S_k(X_i) = \alpha_i, \quad i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha, \quad S_k(X_i) = \beta_i, \quad i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta.$$

Рассмотрим множества

$$L_k^\alpha = \{i \in M_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\alpha \mid (-1)^r d_i^k \leq 0\},$$

$$L_k^\beta = \{i \in M_{k-1}^\beta \cup N_{k-1}^\beta \mid (-1)^r d_i^k \geq 0\}.$$

Исключим из множеств N_{k-1}^α и N_{k-1}^β индексы, принадлежащие множествам L_k^α и L_k^β , т. е. рассмотрим интерполяционную задачу

$$S(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S(X_i) = \alpha_i, \quad i \in M_{k-1}^\alpha \cup (N_{k-1}^\alpha \setminus L_k^\alpha),$$

$$S(X_i) = \beta_i, \quad i \in M_{k-1}^\beta \cup (N_{k-1}^\beta \setminus L_k^\beta).$$

По лемме 10.3,

$$S(X_i) \geq \alpha_i, \quad i \in N_{k-1}^\alpha \cap L_k^\alpha, \quad S(X_i) \leq \beta_i, \quad i \in N_{k-1}^\beta \cap L_k^\beta. \quad (10.16)$$

Если оба множества, $N_{k-1}^\alpha \setminus L_k^\alpha$ и $N_{k-1}^\beta \setminus L_k^\beta$, пустые, то $S(X) = S_{k-1}(X)$, $N_{k-1}^\alpha \cap L_k^\alpha = N_{k-1}^\alpha$ и (10.16) противоречит (10.15). Поэтому

$$(N_{k-1}^\alpha \setminus L_k^\alpha) \cup (N_{k-1}^\beta \setminus L_k^\beta) \neq \emptyset.$$

Теперь покажем, что выполняется строгое неравенство $\|TS_k - TS_{k-1}\| > 0$. Предположим, что $\|TS_k - TS_{k-1}\| = 0$. Тогда $S_k(X) - S_{k-1}(X) = P(X)$, где $P(X)$ — полином степени не выше $r-1$, причем он удовлетворяет условиям

$$P(X_i) = 0, \quad i \in 1 : m. \quad (10.17)$$

В силу предположения об однозначной разрешимости интерполяционной задачи для полиномов на первых p точках ($m \geq p$) из (10.17) следует, что $P(X) \equiv 0$, т. е. $S_k(X) \equiv S_{k-1}(X)$. Этого не может быть в силу выполнения условий

$$S_{k-1}(X_i) < \alpha_i = S_k(X_i) \quad \text{для } i \in N_{k-1}^\alpha \setminus L_k^\alpha,$$

$$S_{k-1}(X_i) > \beta_i = S_k(X_i) \quad \text{для } i \in N_{k-1}^\beta \setminus L_k^\beta.$$

Следовательно, наше предположение неверно, выполняется строгое неравенство $\|TS_k - TS_{k-1}\| > 0$. Поэтому выполняется строгое неравенство

$$\|TS_k\| > \|TS_{k-1}\|, \quad k = 1, 2, \dots$$

Теорема доказана.

Строгая монотонность обеспечивает сходимость предложенного алгоритма, так как число ограничений конечно. Перебирая последовательно базис $\{M^\alpha, M^\beta\}$ — множество индексов активных ограничений, мы за конечное число шагов алгоритма придем к решению задачи (9.1)–(9.2). Отметим, что если выполнено

условие $\Omega_{\alpha, \beta} \cap \mathcal{P}_{r-1} = \emptyset$, то процесс сойдется к единственному решению.

Этот алгоритм оказался практически эффективным. Механическая аналогия этого алгоритма (в случае $n = r = 2$) состоит в постепенном изгиблении пластины так, чтобы она в конце концов прошла внутри всех коридоров, задаваемых α_i и β_i , $i \in m+1 : N$. В одномерном случае алгоритм со строгим возрастанием $\|TS_k\| > \|TS_{k-1}\|$ исследовал А. В. Ковалков [4].

2. Программная реализация алгоритма. М. И. Игнатовым был составлен комплекс программ, реализующий описанный выше алгоритм. В основу этих программ положены численные методы, описанные в § 7. Из-за погрешности вычислений в программах вместо выполнения условий (10.1), (10.8) проверялось выполнение условий

$$(-1)^r d_i > \delta \text{ для } i \in M^\alpha, \quad (-1)^r d_i < -\delta \text{ для } i \in M^\beta, \quad (10.18)$$

$$\alpha_i - \delta \leq S(X_i) \leq \beta_i + \delta \text{ для } i \in (m+1 : N) \setminus (M^\alpha \cup M^\beta), \quad (10.19)$$

где δ — заданная точность вычислений.

В программах предусматривается возможность вводить в базис $\{M^\alpha, M^\beta\}$ не все индексы i , для которых не выполняются ограничения (10.19) ($S(X_i) > \beta_i + \delta$ или $S(X_i) < \alpha_i - \delta$), а только часть индексов, для которых ограничения нарушаются «сильнее всего». Удовлетворение таких ограничений приводит часто к удовлетворению и других ограничений с «небольшими отклонениями». Такой подход при большом количестве ограничений позволяет уменьшить число промежуточных включений (и исключений) индексов в базис $\{M^\alpha, M^\beta\}$ во время работы программ.

В программах кроме такого частичного введения индексов в базис реализован подход с частичным выводом индексов из базиса, который позволяет программно реализовать предложенный алгоритм в более эффективном виде, поскольку при частичном выводе индексов из базиса сокращается количество решений систем линейных уравнений. Сокращение вычислительных затрат при программной реализации связано в основном с сокращением операций в п. 3 алгоритма, в котором происходит точное определение множеств L^α и L^β и вывод всех индексов $i \in L^\alpha \cup L^\beta$ из базиса. (Полное определение множеств в предложенном алгоритме нужно для обоснования его сходимости). Ниже приводим алгоритм программной реализации.

1. Положим $k = 0$. Построим сплайн $\{S_0 : S_0(X_i) = z_i, i \in 1 : m\}$. Проверим выполнение условий

$$\alpha_i - \delta \leq S_0(X_i) \leq \beta_i + \delta, \quad i \in m+1 : N.$$

Если все ограничения удовлетворены, то перейдем к п. 4. В противном случае положим $M_0^\alpha = M_0^\beta = \emptyset$, $L_0^\alpha = L_0^\beta = \emptyset$.

2. Положим $k = k + 1$. Определим множества индексов

$$\tilde{N}_{k-1}^\alpha = \{i \in m+1 : N \mid S_{k-1}(X_i) < \alpha_i - \delta\},$$

$$\tilde{N}_{k-1}^\beta = \{i \in m+1 : N \mid S_{k-1}(X_i) > \beta_i + \delta\},$$

исходя из ограничения $|\tilde{N}_{k-1}^\alpha \cup \tilde{N}_{k-1}^\beta| \leq ND$, где параметр ND задает максимальное количество индексов, которое можно вводить в базис.

Если $N_{k-1}^\alpha \cup N_{k-1}^\beta \cup \tilde{L}_{k-1}^\alpha \cup \tilde{L}_{k-1}^\beta = \emptyset$, то перейдем к п. 4. В противном случае введем ограничения с индексами $i \in \tilde{N}_{k-1}^\alpha \cup \tilde{N}_{k-1}^\beta$

в состав активных, выведем ограничения с индексами $i \in \tilde{L}_{k-1}^\alpha \cup \tilde{L}_{k-1}^\beta$ из состава активных (где \tilde{L}_{k-1}^α и \tilde{L}_{k-1}^β — множества индексов, определенные для вывода из базиса в пункте 3 на предыдущем ($k - 1$ -м шаге алгоритма) и решим интерполяционную задачу

$$S_k(X_i) = z_i, \quad i \in 1 : m,$$

$$S_k(X_i) = \alpha_i, \quad i \in M_k^\alpha,$$

$$S_k(X_i) = \beta_i, \quad i \in M_k^\beta,$$

где $M_k^\alpha = (M_{k-1}^\alpha \cup \tilde{N}_{k-1}^\alpha) \setminus \tilde{L}_{k-1}^\alpha$, $M_k^\beta = (M_{k-1}^\beta \cup \tilde{N}_{k-1}^\beta) \setminus \tilde{L}_{k-1}^\beta$.

Если коэффициенты сплайна S_k удовлетворяют условиям

$$\begin{aligned} (-1)^r d_i^k &\geq -\delta \text{ для } i \in M_k^\alpha, \\ (-1)^r d_i^k &\leq \delta \text{ для } i \in M_k^\beta, \end{aligned} \tag{10.20}$$

то сплайн S_k будем считать приближенным решением задачи (9.1)–(9.2).

3. Определим множества

$$\tilde{L}_k^\alpha = \{i \in M_k^\alpha \mid (-1)^r d_i^k \leq \delta\},$$

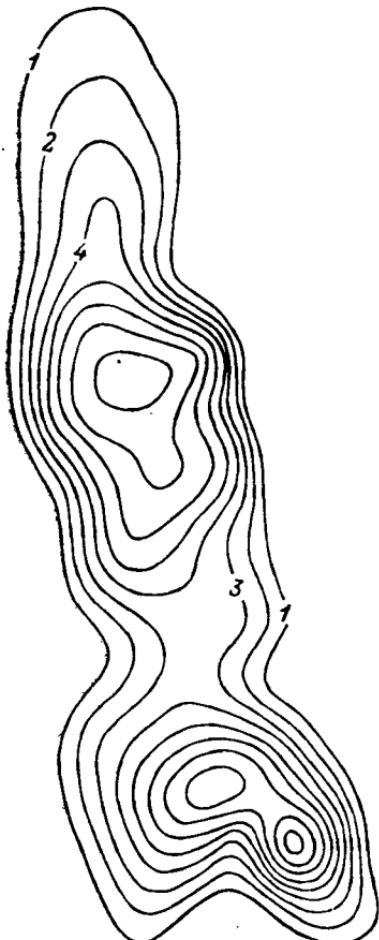
$$\tilde{L}_k^\beta = \{i \in M_k^\beta \mid (-1)^r d_i^k \geq -\delta\}$$

Рис. 8. Карта изогипс сплайна с двусторонними ограничениями.

и перейдем к п. 2. (Во множества \tilde{L}_k^α и \tilde{L}_k^β включены индексы тех коэффициентов, которые не удовлетворяют условиям оптимальности (10.20) или удовлетворяют неравенству $|d_i^k| \leq \delta$).

4. Положим $S_*(X) = S_k(X)$, $M^\alpha = M_k^\alpha$, $M^\beta = M_k^\beta$ и закончим работу алгоритма.

Отметим, что при такой программной реализации выполняется только одно решение системы линейных уравнений на каждом



итерационном шаге алгоритма, причем на очередной итерации алгоритма может возникнуть ситуация, при которой индексы только выводятся из базиса.

Для иллюстрации работы программы приведем пример расчета по данным одной из залежей Харьгинского месторождения нефти ($m = 7$, $N = 37$, $\beta_i - \alpha_i = 5$ м, $i \in 8 : 37$):

для $ND = 1$

Номер шага	1	2	...	10	11	12	...	28	:
Введено точек	1	1		1	1	1		1	
Выведено точек	—	—		—	1	—		—	
Общее число точек	8	9	...	17	17	18	...	34	

для $ND = 5$

Номер шага	1	2	3	4	5	6	7	8	:
Введено точек	5	5	5	5	5	5	4	—	
Выведено точек	—	2	1	2	—	—	1	1	
Общее число точек	12	15	19	22	27	32	35	34	

для $ND = 30$

Номер шага	1	2	3	4	5				
Введено точек	29	1	8	5	1				
Выведено точек	—	10	4	2	1				
Общее число точек	36	27	31	34	34				

Во всех трех вариантах расчета процесс имеет одно и то же решение. Полученная для этого решения карта изогипс приведена на рис. 8. Сравнивая рис. 8 с рис. 6 из § 7, можно заметить, что сплайн с двусторонними ограничениями задает более плавную поверхность по сравнению с поверхностью, задаваемой интерполяционным сплайном.

§ 11. Построение интерполяционных сплайнов и сплайнов с двусторонними ограничениями по отдельным группам данных

При большом объеме исходных данных, например $N = 300, 500, 1000, \dots$, построение решения $S(X)$ задачи (9.1) осложняется ограниченностью оперативной памяти ЭВМ и значительными погрешностями при решении больших систем линейных уравнений. Поэтому построение $S(X)$ с вычислительной точки зрения разумно заменить построением гладкой функции $F(X)$, близкой к $S(X)$, которая принимает значения z_k в точках X_k , $k \in 1 : m$, и проходит через коридоры $[\alpha_k, \beta_k]$, $k \in m + 1 : N$, но в отличие от $S(X)$ строится «локально», т. е. значение F в точке X определяется по значениям z_k и интервалам $[\alpha_k, \beta_k]$ в тех точках X_k , которые

близки к X . В случае $N = m$ получаем чистую задачу интерполяции (без двусторонних ограничений).

1. Теоретические основы алгоритма. Для простоты изложения будем рассматривать двумерный случай. Пусть даны z_k , $k \in 1 : m$, значения α_k , β_k , $k \in m + 1 : N$, и произвольно расположенные точки $X_k \in \mathbb{R}^2$, $k \in 1 : N$. Исходные точки X_k , $k \in 1 : N$, разбиваются на группы. По каждой группе точек строится натуральный сплайн, удовлетворяющий ограничениям в точках данной группы, затем эти локально построенные сплайны соединяются друг с другом при помощи весовых функций, образующих разбиение единицы на \mathbb{R}^2 . Введем необходимую систему обозначений.

Множество функций $w_{ij}(X)$, $i \in 1 : n$, $j \in 1 : l$, образует разбиение единицы, если каждая функция $w_{ij}(X) \geq 0$ и

$$\sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^l w_{ij}(X) \equiv 1.$$

Носителем весовой функции w_{ij} назовем множество

$$R_{ij} = \{X \in \mathbb{R}^2 : w_{ij}(X) > 0\}.$$

Области R_{ij} налагаются друг на друга. Пусть $I_{ij} = \{k \in 1 : N \mid X_k \in R_{ij}\}$. Построим по алгоритму § 10 натуральные сплайны S_{ij} , $i \in 1 : n$, $j \in 1 : l$, которые являются решениями задачи

$$\|Tf\|^2 \rightarrow \min_{f \in L_2^{(r)}(\mathbb{R}^2)}, \\ f(X_k) = z_k, \quad k \in I_{ij} \cap (1 : m), \\ \alpha_k \leq f(X_k) \leq \beta_k, \quad k \in I_{ij} \cap (m + 1 : N),$$

т. е. в точках $X_k \in R_{ij}$ либо $S_{ij}(X_k) = z_k$, либо $\alpha_k \leq S_{ij}(X_k) \leq \beta_k$. Функцию $F(X)$ строим в виде

$$F(X) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^l w_{ij}(X) S_{ij}(X).$$

Функция $F(X)$ обладает свойствами:

1) удовлетворяет всем ограничениям

$$F(X_k) = z_k, \quad k \in 1 : m, \quad \alpha_k \leq F(X_k) \leq \beta_k, \quad k \in m + 1 : N;$$

2) $F(X) \in C^1(\mathbb{R}^2)$, если все функции w_{ij} принадлежат классу $C^1(\mathbb{R}^2)$;

$$3) F(X) = \sum_{(i, j) \in \mathcal{J}(X)} w_{ij}(X) S_{ij}(X),$$

где $\mathcal{J}(X) = \{(i, j) \mid w_{ij}(X) > 0\}$.

Мы используем весовые функции из работы [40], при которых множество $\mathcal{J}(X)$ состоит не более чем из четырех элементов.

2. Построение весовых функций [40]. Опишем весовые функции с прямоугольными носителями, которые используются в вычислительной программе. Зафиксируем натуральные числа n , l и точки

$$\xi_0 < \xi_1 < \dots < \xi_n < \xi_{n+1}, \quad \eta_0 < \eta_1 < \dots < \eta_l < \eta_{l+1}.$$

Введем прямоугольники

$$R_{ij} = (\xi_{i-1}, \xi_{i+1}) \times (\eta_{j-1}, \eta_{j+1}), \quad i \in 1 : n, \quad j \in 1 : l.$$

Рассмотрим полином $H(t) = 1 - 3t^2 + 2t^3$ (он удовлетворяет условиям $H(0) = 1$, $H(1) = H'(0) = H'(1) = 0$). С его помощью построим непрерывно дифференцируемые функции $v_i(x)$, $i \in 1 : n$, $u_j(y)$, $j \in 1 : l$, отличные от нуля только на двух смежных интервалах. Положим

$$v_1(x) = \begin{cases} 1 & , \quad x \leq \xi_1, \\ H((x - \xi_1)/(\xi_2 - \xi_1)) & , \quad \xi_1 \leq x \leq \xi_2, \\ 0 & , \quad x \geq \xi_2, \end{cases}$$

при $i \in 2 : n - 1$

$$v_i(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x \leq \xi_{i-1} \text{ и } x \geq \xi_{i+1}, \\ 1 - v_{i-1}(x) & , \quad \xi_{i-1} \leq x \leq \xi_i, \\ H((x - \xi_i)/(\xi_{i+1} - \xi_i)) & , \quad \xi_i \leq x \leq \xi_{i+1}, \end{cases}$$

$$v_n(x) = \begin{cases} 0 & , \quad x \leq \xi_{n-1}, \\ 1 - v_{n-1}(x) & , \quad \xi_{n-1} \leq x \leq \xi_n, \\ 1 & , \quad x \geq \xi_n. \end{cases}$$

Довольно очевидно, что

$$\sum_{i=1}^n v_i(x) \equiv 1, \quad -\infty < x < \infty.$$

Функции $u_j(y)$, $j \in 1 : l$, определим аналогичным образом. Введем теперь функции

$$w_{ij}(X) = v_i(x) \cdot u_j(y), \quad i \in 1 : n, \quad j \in 1 : l.$$

Они образуют разбиение единицы на \mathbb{R}^2 и имеют в качестве носителей множества R_{ij} .

Точки сетки ξ_i и η_j могут быть заданы вместе с исходными данными, но если они не заданы, то должны определяться вычислительной программой. В этом случае нужно задать параметр NPPR (число точек в регионе). В работе [40] на основе численных экспериментов предлагается брать $NPPR = 10$. После этого программа определит точки сетки так, чтобы в каждый прямоугольник R_{ij} , $i \in 1 : n$, $j \in 1 : l$, попало в среднем $NPPR$ точек X_k . Это достигается следующим образом.

По каждому направлению берется равное число точек сетки, т. е. $n = l$. Если в прямоугольник R_{ij} должно попасть в среднем $NPPR$ точек, то в ячейку сетки $[\xi_i, \xi_{i+1}] \times [\eta_j, \eta_{j+1}]$ должно попасть в среднем $(1/4)NPPR$ точек, так как R_{ij} состоит из четырех ячеек сетки. Число n определяется из соотношения

$$N = \frac{1}{4} NPPR \cdot (n + 1)^2.$$

Точнее, в качестве n берем целое число, ближайшее к числу

$$\sqrt{\frac{4N}{NPPR}} - 1.$$

Точки сетки $\xi_i, i \in 0 : n + 1$, выбираются так, чтобы в каждый отрезок $[\xi_i, \xi_{i+1}]$ попало примерно одинаковое число первых координат x_k точек $X_k = (x_k, y_k)$. Упорядочим координаты x_1, \dots, x_N . Получим последовательность $t_1 \leq t_2 \leq \dots \leq t_N$. Рассмотрим ломаную $g(t)$, проходящую через точки $(0, t_1), (1, t_2), \dots, (N - 1, t_N)$. Разделим интервал $(0, N - 1)$ на $n + 1$ подинтервалов длиной $\Delta = (N - 1)/(n + 1)$. В качестве точек ξ_i возьмем значения $\xi_i = g(i \cdot \Delta), i \in 0 : n + 1$. Точки η_j определим аналогично. Заметим, что относительные положения сеточных величин, найденных таким образом, не изменяются при линейных перемещениях и сжатии по любой переменной, однако меняются при вращении координатной плоскости.

Для плохо распределенных точек X_k реальное количество точек в прямоугольниках R_{ij} может значительно колебаться. Однако в большинстве случаев, с которыми мы сталкивались, программа находит приемлемые точки сетки.

3. Определение прямоугольников \tilde{R}_{ij} . Для построения натурального сплайна S_{ij} нужно определить точки X_k , по которым он будет строится. В [40] предлагается строить S_{ij} по тем точкам X_k , которые попадают в расширенный прямоугольник $\tilde{R}_{ij} \supset R_{ij}$. В результате локальные сплайны лучше соединяются между собой. Для уменьшения обусловленности решаемой системы линейных уравнений преобразуем прямоугольник R_{ij} в единичный квадрат $[0, 1] \times [0, 1]$. Сплайн S_{ij} будем строить по тем точкам X_k , преобразованные координаты которых попадают в квадрат $R = [-0.1125, 1.1125] \times [-0.1125, 1.1125]$. Это приводит к использованию точек X_k из прямоугольника \tilde{R}_{ij} , площадь которого почти в 1.5 раза больше площади R_{ij} .

При определенных условиях может случиться, что \tilde{R}_{ij} будет содержать менее p необходимых точек. Тогда привлекаются дополнительные точки, ближайшие к \tilde{R}_{ij} .

4. Поворот осей координат. Мы построили весовые функции с прямоугольными носителями. Использование прямоугольных носителей с практической точки зрения дает много преимуществ как при определении числа носителей, так и при нахождении границ этих носителей. При таком построении область задания точек $X_k, k \in 1 : N$, накрывается сеткой $(\xi_i, \eta_j), i \in 0 : n + 1, j \in 1 : l + 1$, причем все точки содержатся в прямоугольнике $[\xi_0, \xi_{n+1}] \times [\eta_0, \eta_{l+1}]$. Внутри этого прямоугольника могут быть зоны, в которых нет исходных точек.

С помощью простого преобразования (поворота на некоторый угол) можно перейти к новой системе координат, в которой после построения сетки зоны, не содержащие исходных данных, имеют меньшую площадь. Опишем способ нахождения искомого угла поворота. Найдем центр инерции $X_0 = (x_0, y_0)$ исходных точек $X_k, k \in 1 : N$, по формулам

$$x_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N x_k, \quad y_0 = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N y_k.$$

Перейдем к новой системе координат с центром в точке X_0 . В этой системе координат исходные точки будут иметь координаты $X'_k = (x'_k, y'_k) = (x_k - x_0, y_k - y_0)$, $k \in 1 : N$. В новой системе координат найдем угол, поворот на который приведет к обнулению недиагональных членов матрицы (тензора инерции)

$$\begin{bmatrix} \sum_{k=1}^N (x'_k)^2 & \sum_{k=1}^N x'_k y'_k \\ \sum_{k=1}^N x'_k y'_k & \sum_{k=1}^N (y'_k)^2 \end{bmatrix}.$$

Координаты исходных точек в системе координат, возникающей после поворота, будут иметь вид

$$\tilde{X}_k = (\tilde{x}_k, \tilde{y}_k) = (x'_k \cos \varphi + y'_k \sin \varphi, -x'_k \sin \varphi + y'_k \cos \varphi), \quad k \in 1 : N.$$

Найдем искомый угол φ из соотношения

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^N \tilde{x}_k \tilde{y}_k &= \sum_{k=1}^N (x'_k \cos \varphi + y'_k \sin \varphi) (-x'_k \sin \varphi + y'_k \cos \varphi) = \\ &= \frac{1}{2} \sin 2\varphi \sum_{k=1}^N [(y'_k)^2 - (x'_k)^2] + \cos 2\varphi \sum_{k=1}^N x'_k y'_k = 0. \end{aligned}$$

Последнее соотношение выполняется при условии

$$\tan 2\varphi = 2 \frac{\sum_{k=1}^N x'_k y'_k}{\sum_{k=1}^N [(x'_k)^2 - (y'_k)^2]}.$$

В случае, когда $\sum_{k=1}^N [(x'_k)^2 - (y'_k)^2] = 0$, полагают, что $\varphi = \pi/4$.

Поворот на найденный угол φ системы координат перед построением сетки, во-первых, позволяет уменьшить зоны без исходных точек, во-вторых, точки сетки ξ_i , $i \in 1 : n$, η_j , $j \in 1 : l$, имеют более равномерное относительное расположение. Этот эффект иллюстрирует рис. 9, на котором показано, как разбиваются исходные данные на группы сеткой, построенной после поворота осей координат.

5. Вычисление функции $F(X)$ в фиксированной точке. Функция $F(X)$ задается в виде

$$F(X) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^l w_{ij}(X) S_{ij}(X),$$

но при каждом $X = (x, y)$ в сумме не более четырех ненулевых слагаемых. Индексы (i, j) этих слагаемых легко определить. Если $x \geq \xi_n$, то положим $i = n$, в остальных случаях в качестве i

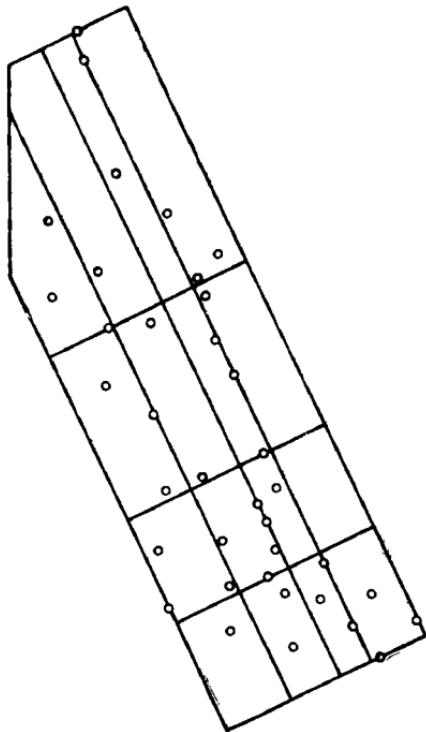


Рис. 9. Изображение сеточных линий после поворота осей координат.

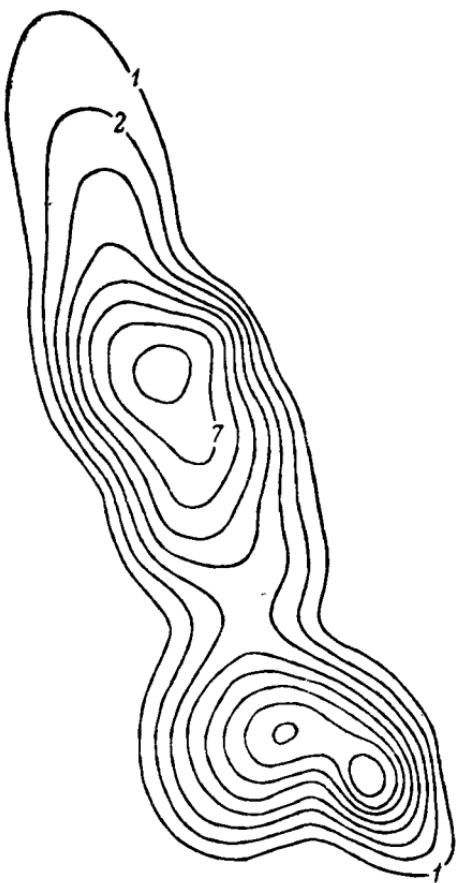


Рис. 10. Карта изогипс аппроксимирующей поверхности, построенной по отдельным группам данных.

возьмем наименьший индекс, для которого выполняется условие $x < \xi_{i+1}$. Аналогично определяется j . Тогда

$$F(X) = w_{ij}(X) S_{ij}(X) + w_{i+1,j}(X) S_{i+1,j}(X) + \\ + w_{i,j+1}(X) S_{i,j+1}(X) + w_{i+1,j+1}(X) S_{i+1,j+1}(X).$$

Если $i = 0$ ($i = n$), то в представлении отсутствуют члены с индексом i ($i + 1$), аналогично если $j = 0$ ($j = l$), то отсутствуют члены с j ($j + 1$).

Функция F принадлежит классу $C^1(\mathbb{R}^2)$. Вторые производные имеют разрывы на линиях сетки. Тем не менее полученные на графопостроителе рельефные изображения таких поверхностей являются вполне гладкими.

З а м е ч а н и е 11.1. По такому методу можно построить функцию $F(X)$, обладающую большей гладкостью, например $F \in C^2(\mathbb{R}^2)$.

З а м е ч а н и е 11.2. Все предыдущие рассуждения можно проделать для данных, расположенных в пространстве большей размерности, например \mathbb{R}^3 .

Метод построения интерполяционных функций по локальным группам данных и реализующий его комплекс программ были опробованы на одной из залежей нефти Харьгинского месторождения Тимано-Печорского нефтегазоносного бассейна. В расчетах варьировались параметр NPPR и ширина интервальных ограничений. На рис. 10 приведены изолинии функции, построенной вышеописанным методом ($NPPR = 10$). Эта функция интерполирует те же исходные данные, что и в § 7. Сравнивая рис. 10 с рис. 6 § 7, на котором изображены изолинии интерполяционного натурального сплайна, можно заметить, что в областях с густым расположением исходных точек изолинии одинаковых уровней имеют довольно близкое расположение, в областях же с редким расположением исходных точек имеются различимые отклонения.

Г л а в а 3

ДРУГИЕ ВИДЫ СПЛАЙНОВ

§ 12. Степенные сплайны

1. Разрешимость интерполяционной задачи. Напомним экстремальное свойство натуральных сплайнов одной переменной. Зафиксируем точки сетки

$$\Delta: x_1 < x_2 < \dots < x_N$$

и числа y_1, y_2, \dots, y_N . Решением задачи

$$\int_{x_1}^{x_N} \{g^{(r+1)}(x)\}^2 dx \rightarrow \min_{g(x_j) = y_j, j \in 1:N}$$

является (см., например, [3, 21]) натуральный сплайн вида

$$S(x) = \sum_{v=0}^r a_v x^v + \sum_{k=1}^N d_k |x - x_k|^{2r+1}, \quad (12.1)$$

где коэффициенты d_k удовлетворяют равенствам

$$\sum_{k=1}^N d_k x_k^v = 0, \quad v \in 0 : r, \quad (12.2)$$

и выполняются интерполяционные условия $S(x_j) = y_j, j \in 1 : N$. Условие (12.2) равносильно тому, что $S(x)$ является полиномом степени не выше r на $(-\infty, x_1)$ и (x_N, ∞) . Функцию $|x|$ использовал для записи ломаных (случай $r = 0$) еще С. Н. Бернштейн в 1905 г., а условие (12.2) можно найти в [37].

Рассмотрим аналогичные сплайны n переменных. Обозначим \mathcal{P}_r множество полиномов от $X = (x_1, \dots, x_n)$ степени не выше r . Рассмотрим функции

$$S(X) = Q_0(X) + \sum_{k=1}^N d_k \|X - X_k\|^\beta, \quad (12.3)$$

где $Q_0 \in \mathcal{P}_r$, $\|X\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}$, $\beta = 2r + \alpha$, $\alpha \in (0, 2)$, а d_k удовлетворяет условиям

$$\sum_{k=1}^N d_k Q(X_k) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_r. \quad (12.4)$$

Здесь X_k — фиксированные попарно различные точки из \mathbb{R}^n .

Функции вида (12.3) с коэффициентами d_k , удовлетворяющими (12.4), будем называть натуральными сплайнами. Сплайны (12.1)–(12.2) являются частным случаем этих сплайнов при $n = 1$, $\beta = 2r + 1$.

Рассмотрим интерполяционную задачу для натуральных сплайнов

$$S(X_j) = Q_0(X_j) + \sum_{k=1}^N d_k \|X_j - X_k\|^\beta = y_j, \quad j \in 1 : N.$$

В следующей теореме устанавливается свойство матрицы A с элементами $A_{jk} = \|X_j - X_k\|^\beta$, позволяющее легко доказать однозначную разрешимость интерполяционной задачи. Множество векторов $d = (d_1, \dots, d_N)$, удовлетворяющих (12.4), образует подпространство D_r в \mathbb{R}^N ,

$$D_r = \left\{ d \left| \sum_{k=1}^N d_k Q(X_k) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_r \right. \right\}.$$

Напомним также обозначение $(X, \xi) = x_1 \xi_1 + \dots + x_n \xi_n$ для скалярного произведения векторов $X, \xi \in \mathbb{R}^n$.

Теорема 12.1. Пусть $\beta = 2r + \alpha$, $0 < \alpha < 2$, $r = 0, 1, 2, \dots$. Для любого $d \in D_r$ справедливо равенство

$$\int_{\mathbb{R}^n} \|\xi\|^{-n-\beta} \left| \sum_{k=1}^N d_k e^{i(X_k, \xi)} \right|^2 d\xi = (-1)^{r+1} c_{\beta n} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \|X_j - X_k\|^\beta, \quad (12.5)$$

где $i = \sqrt{-1}$, $c_{\beta n}$ — положительная константа.

Доказательство. Обозначим I интеграл в (12.5). Он сходится. Действительно, в силу условия $d \in D_r$

$$\sum_{k=1}^N d_k e^{i(X_k, \xi)} = O(\|\xi\|^{r+1}) \text{ при } \xi \rightarrow 0.$$

Поэтому подынтегральная функция $F(\xi)$ в (12.5) имеет порядок $O(\|\xi\|^{-n+2-\alpha})$ при $\xi \rightarrow 0$.

Имеем

$$F(\xi) = \|\xi\|^{-n-\beta} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k e^{i(X_j - X_k, \xi)} = \|\xi\|^{-n-\beta} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \cos(X_j - X_k, \xi).$$

Поскольку $d \in D_r$, то

$$F(\xi) = \|\xi\|^{-n-\beta} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \left[\cos(X_j - X_k, \xi) - \sum_{s=0}^r \frac{(-1)^s}{(2s)!} (X_j - X_k, \xi)^{2s} \right].$$

Отсюда

$$I = \int_{\mathbb{R}^n} F(\xi) d\xi = \sum_{j, k=1}^N d_j d_k I_{jk},$$

где

$$I_{jk} = \int_{\mathbb{R}^n} \|\xi\|^{-n-\beta} f_r((X_j - X_k, \xi)) d\xi, \quad f_r(t) = \cos t - \sum_{s=0}^r \frac{(-1)^s}{(2s)!} t^{2s}.$$

Зафиксируем j, k и обозначим $a = \|X_j - X_k\|$. Сделаем в интеграле I_{jk} замену переменных $\xi = C\eta$, где C — ортогональная матрица ($C^{-1} = CT$), выбранная так, чтобы

$$C^T(X_j - X_k) = ae_1 = a(1, 0, \dots, 0)^T.$$

Тогда $\|C\eta\| = \|\eta\|$, $(X_j - X_k, C\eta) = (ae_1, \eta) = a\eta_1$ для любого вектора $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_n)$. Кроме того, модуль якобиана преобразования равен 1. Поэтому

$$\begin{aligned} I_{jk} &= \int_{\mathbb{R}^n} \|\eta\|^{-n-\beta} f_r(a\eta_1) d\eta = \int_{-\infty}^{\infty} f_r(a\eta_1) \int_{\mathbb{R}^{n-1}} \|\eta\|^{-n-\beta} d\eta_2 \dots d\eta_n d\eta_1 = \\ &= 2\omega_{n-1} \int_0^{\infty} f_r(a\eta_1) \int_0^{\infty} (\eta_1^2 + \rho^2)^{-(n+\beta)/2} \rho^{n-2} d\rho d\eta_1, \end{aligned}$$

где ω_{n-1} — площадь поверхности единичной сферы в \mathbb{R}^{n-1} . После замены $\rho = \eta_1 t$ получим, что интеграл по ρ равен $c\eta_1^{-\beta-1}$, где $c > 0$. Отсюда

$$I_{jk} = 2c\omega_{n-1} \int_0^{\infty} \eta_1^{-\beta-1} f_r(a\eta_1) d\eta_1 = 2c\omega_{n-1} a^\beta I_r. \quad (12.6)$$

Здесь I_r обозначен интеграл

$$I_r = \int_0^{\infty} t^{-\beta-1} f_r(t) dt.$$

Покажем, что

$$(-1)^{r+1} I_r > 0, \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad (12.7)$$

Доказательство основано на соотношениях

$$f_r^{(v)}(0) = 0, \quad v \in 0 : 2r; \quad f_r''(t) = -f_{r-1}(t), \quad r = 1, 2, \dots$$

При r четном из последнего соотношения получаем

$$f_r^{(2r)}(t) = (-1)^r f_0(t) = \cos t - 1 < 0 \text{ для } t \neq 2k\pi.$$

Последовательно интегрируя, имеем

$$f_r^{(v)}(t) < 0 \text{ при } t > 0, \quad v = 2r - 1, 2r - 2, \dots, 0.$$

В частности, $f_r(t) < 0$ и $I_r < 0$. При r нечетном $I_r > 0$. Из (12.6) и (12.7) следует (12.5). Теорема доказана.

З а м е ч а н и е 12.1. Приведенное доказательство оставляет скрытым идейное содержание тождества (12.5), которое связано с преобразованием Фурье.

Рассмотрим конечную меру μ на \mathbb{R}^n и ее преобразование Фурье

$$F[\mu](X) = \int_{\mathbb{R}^n} e^{i(X, \xi)} d\mu(\xi).$$

Справедливо простое тождество

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^n} \left| \sum_{k=1}^N d_k e^{i(X_k, \xi)} \right|^2 d\mu(\xi) &= \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \int_{\mathbb{R}^n} e^{i(X_k - X_j, \xi)} d\mu(\xi) = \\ &= \sum_{j, k=1}^N F[\mu](X_k - X_j) d_j d_k \end{aligned}$$

для всех вещественных коэффициентов d_1, \dots, d_N . Функция $\|X\|^\beta$, где $\beta = 2r + \alpha$, $\alpha \in (0, 2)$, с точностью до множителя является преобразованием Фурье функции $\|\xi\|^{-n-\beta}$, рассматриваемой как обобщенная функция (см. [10, с. 224]):

$$F[\|\xi\|^{-n-\beta}] = (-1)^{r+1} b_{\beta n} \|X\|^\beta,$$

где $b_{\beta n}$ — положительная постоянная. Поэтому можно предположить, что

$$\int_{\mathbb{R}^n} \left| \sum_{k=1}^N d_k e^{i(X_k, \xi)} \right|^2 \|\xi\|^{-n-\beta} d\xi = (-1)^{r+1} b_{\beta n} \sum_{j, k=1}^N \|X_k - X_j\|^\beta d_j d_k,$$

если интеграл в левой части равенства сходится. Интеграл сходится, если коэффициенты d_k удовлетворяют условиям (12.4). При доказательстве теоремы 12.1 проведено элементарное вычисление интеграла.

Обозначим $p = \dim \mathcal{P}_r = (n+r)/(n!r!)$ и предположим, что $N > p$. Выведем из теоремы два следствия.

Следствие 12.1. Если точки X_1, \dots, X_N попарно различны, то матрица A с элементами $A_{jk} = \|X_j - X_k\|^\beta$, где $\beta = 2r + \alpha$, $0 < \alpha < 2$, на подпространстве D_r удовлетворяет неравенству

$$(-1)^{r+1} (Ad, d) > 0 \quad \forall d \in D_r, d \neq \overline{0}.$$

Следствие 12.2. Возьмем произвольные числа y_1, y_2, \dots, y_N . Пусть точки X_1, \dots, X_N попарно различны и среди них найдутся r точек X_{i_1}, \dots, X_{i_p} , на которых однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов из \mathcal{P}_r . Тогда существует и единствен сплайн

$$S(X) = Q(X) + \sum_{k=1}^N d_k \|X - X_k\|^\beta, \tag{12.8}$$

где $Q \in \mathcal{P}_r$, $d \in D_r$, такой, что $S(X_j) = y_j$, $j \in 1 : N$.

Доказательство. Выберем в \mathcal{P}_r базис Q_1, \dots, Q_p .

Нужно доказать разрешимость системы

$$\sum_{i=1}^p c_i Q_i(X_j) + \sum_{k=1}^N A_{jk} d_k = y_j, \quad j \in 1 : N, \quad (12.9)$$

$$\sum_{k=1}^N Q_i(X_k) d_k = 0, \quad i \in 1 : p. \quad (12.10)$$

Пусть c_i, d_k — решение однородной системы. Умножим (12.9) (с $y_j = 0$) на d_j и просуммируем по j . С учетом (12.10) получим:

$$(Ad, d) = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N A_{jk} d_j d_k = 0.$$

По следствию 12.1, $d = 0$. Тогда из (12.9) (при $y_j = 0$) следует:

$$\sum_{i=1}^p c_i Q_i(X_{is}) = 0, \quad s \in 1 : p.$$

По сделанному предположению, $c = 0$. Поскольку однородная система имеет только нулевое решение, то (12.9)–(12.10) имеет решение, и притом единственное. Следствие 12.1 доказано.

При $\beta = 2r + 1$ сплайны (12.8) известны. В одномерном случае ($n = 1$) для представления сплайна чаще используют функции

$$(x - x_k)_+^{2r+1} = \frac{1}{2} \{ |x - x_k|^{2r+1} + (x - x_k)^{2r+1} \}.$$

С помощью (12.10) можно перейти к функциям $|x - x_k|^{2r+1}$. При $n > 1$, $\beta = 2r + 1$ следствие 12.2 установлено в [37, 43] без использования тождества (12.5). Это тождество является новым даже при $n = 1$.

Отметим частный случай следствий 12.1 и 12.2 при $r = 0$, $\beta = \alpha \in (0, 2)$.

Тогда матрица $A_{jk} = \|X_j - X_k\|^\alpha$ отрицательно определена на подпространстве

$$D_0 = \{d \in \mathbb{R}^N : d_1 + d_2 + \dots + d_N = 0\}.$$

Для сплайнов

$$S(X) = c + \sum_{k=1}^N d_k \|X - X_k\|^\alpha, \quad d \in D_0, \quad (12.11)$$

где c — константа, однозначно разрешима интерполяционная задача $S(X_j) = y_j$, $j \in 1 : N$, при любых попарно различных точках X_1, \dots, X_N , $N > 1$.

Эти утверждения неверны при $\alpha = 2$. Действительно, пусть X_1, \dots, X_N — произвольные попарно различные точки из \mathbb{R}^n , и пусть $N > n + 1$. Тогда найдутся не все равные нулю числа d_k^* , такие, что

$$\sum_{k=1}^N d_k^* X_k = 0, \quad \sum_{k=1}^N d_k^* = 0. \quad (12.12)$$

Отсюда для матрицы $A_{jk} = \|X_j - X_k\|^2$ получим:

$$(Ad^*, d^*) = \sum_{j=1}^N \sum_{k=1}^N d_j^* d_k^* (\|X_j\|^2 - 2(X_j, X_k) - \|X_k\|^2) = 0.$$

Поэтому A не является отрицательно определенной на D_0 . Для произвольного вектора $d \in D_0$

$$(Ad, d) = -2 \left(\sum_{j=1}^N d_j X_j, \sum_{k=1}^N d_k X_k \right) \leq 0.$$

Следовательно, d^* является точкой максимума функции (Ad, d) на подпространстве D_0 . По правилу множителей Лагранжа, находится число c^* , такое, что

$$C^* \mathbf{1} + Ad^* = 0, \quad \mathbf{1} = (1, 1, \dots, 1)^T. \quad (12.13)$$

Из (12.12) и (12.13) следует, что определитель

$$\begin{vmatrix} 1 & \|X_1 - X_1\|^2 & \|X_1 - X_2\|^2 & \dots & \|X_1 - X_N\|^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1 & \|X_N - X_1\|^2 & \|X_N - X_2\|^2 & \dots & \|X_N - X_N\|^2 \\ 0 & 1 & 1 & \dots & 1 \end{vmatrix}$$

равен нулю. Поэтому интерполярование сплайнами (12.11) при $\alpha = 2$ становится невозможным.

Р. Франке [40] предположил, что однозначно решается задача интерполяирования функциями вида

$$S(X) = \sum_{k=1}^N d_k [1 + \|X - X_k\|^2]^{1/2}$$

и для определителя возникающей системы уравнений справедливо соотношение

$$(-1)^{N-1} \det \{[1 + \|X_j - X_k\|^2]^{1/2}, j, k \in 1 : N\} > 0.$$

Это предположение доказал Ч. Мичелли [49].

2. Обобщение одного результата Шенберга. Пусть по-прежнему X_1, \dots, X_N — фиксированные попарно различные точки в \mathbb{R}^n и $0 < \alpha < 2$. И. Шенберг [55] (см. также [35, § 53—54]) установил тождество

$$\sum_{i, k=1}^N \|X_i - X_k\|^\alpha d_i d_k = -c(\alpha) \int_0^\infty \left\{ \sum_{i, k=1}^N e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} d_i d_k \right\} \frac{d\sigma}{\sigma^{1+\alpha}}, \quad (12.14)$$

где $c(\alpha) > 0$, d_1, \dots, d_N — произвольные числа, такие, что $d_1 + \dots + d_N = 0$.

Кроме того, в [55, 35] использовался известный факт — положительная определенность функции $e^{-\sigma^2 \|X\|^2}$ при $\sigma > 0$:

$$\sum_{i, k=1}^N e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} d_i d_k > 0 \quad (12.15)$$

для любого $d \in \mathbb{R}^N$, $d \neq 0$ (точнее, в [55, 35] использовалось нестрогое неравенство, но из приведенного там доказательства следует, что в (12.15) имеется строгое неравенство при $d \neq 0$).

Обобщим тождество (12.14) на случай $\alpha > 2$. Зафиксируем $r \geq 0$. Как и в п. 1, рассмотрим подпространство

$$D_r = \left\{ d_i \in \mathbb{R}^N \mid \sum_{k=1}^N d_k Q(X_k) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_r \right\}.$$

Теорема 12.2. Пусть $\beta = 2r + \alpha$, $0 < \alpha < 2$. Тогда для любого $d \in D_r$, $d \neq 0$, справедливо соотношение

$$(-1)^{r+1} \sum_{i, k=1}^N \|X_i - X_k\|^\beta d_i d_k = c(\beta) \int_0^\infty \left\{ \sum_{i, k=1}^N e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} d_i d_k \right\} \sigma^{-\beta-1} d\sigma,$$

где $c(\beta) > 0$.

Доказательство. Рассмотрим функции

$$f_r(x) = e^{-x} - 1 + x - \frac{x^2}{2!} + \cdots + (-1)^{r-1} \frac{x^r}{r!}, \quad r = 0, 1, 2, \dots$$

Имеем: $f_0(x) = e^{-x} - 1 < 0$ при $x > 0$, а также $f_r'(x) = -f_{r-1}(x)$, $r = 1, 2, \dots$ Отсюда

$$(-1)^{r+1} f_r(x) > 0 \quad \text{при } x > 0, \quad r = 0, 1, 2, \dots \quad (12.16)$$

Действительно,

$$(-1)^{r+1} f_r(x) = \int_0^x (-1)^r f_{r-1}(t) dt > 0 \quad \text{при } x > 0.$$

При $\beta = 2r + \alpha$, $0 < \alpha < 2$, рассмотрим интеграл

$$I_r(\beta) = \int_0^\infty f_r(s^2) s^{-\beta-1} ds.$$

Он сходится. В силу (12.16) справедливо неравенство

$$(-1)^{r+1} I_r(\beta) > 0. \quad (12.17)$$

Сделав замену $s = t\sigma$, где $t > 0$ фиксировано, получим

$$t^\beta = \frac{1}{I_r(\beta)} \int_0^\infty f_r(t^2 \sigma^2) \sigma^{-\beta-1} d\sigma. \quad (12.18)$$

Подставим сюда $t = \|X_i - X_k\|$, умножим на $d_i d_k$ и просуммируем по $i, k \in 1 : N$,

$$\begin{aligned} & \sum_{i, k=1}^N \|X_i - X_k\|^\beta d_i d_k = \\ & = \frac{1}{I_r(\beta)} \int_0^\infty \sum_{i, k=1}^N d_i d_k \left\{ e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} \sum_{l=0}^r \frac{(-1)^{l-1} \sigma^{2l} \|X_i - X_k\|^{2l}}{l!} \right\} \sigma^{-\beta-1} d\sigma. \end{aligned} \quad (12.19)$$

Пусть теперь $d \in D_r$, $d \neq 0$. Тогда

$$\sum_{i, k=1}^N d_i d_k \|X_i - X_k\|^{2l} = 0 \quad (12.20)$$

при $l \in 0:r$. При доказательстве следует учесть, что

$$\|X_i - X_k\|^{2l} = \sum_{\lambda+\mu+v=l} \frac{l!}{\lambda! \mu! v!} \|X_i\|^{2\lambda} (- (X_i, X_k))^{\mu} \|X_k\|^{2v}.$$

В каждом слагаемом степень по X_i равна $2\lambda + \mu$, а по X_k равна $\mu + 2v$, причем $\min\{2\lambda + \mu, \mu + 2v\} \leq l$.

Если $2\lambda + \mu \leq l \leq r$, то

$$\sum_{i=1}^N d_i \|X_i\|^{2\lambda} (X_i, X_k)^{\mu} = 0.$$

Если же $\mu + 2v \leq l \leq r$, то

$$\sum_{k=1}^N d_k (X_i, X_k)^{\mu} \|X_k\|^{2v} = 0.$$

Из (12.19) и (12.20) получаем:

$$\begin{aligned} & (-1)^{r+1} \sum_{i, k=1}^N \|X_i - X_k\|^{\beta} d_i d_k = \\ & = \frac{(-1)^{r+1}}{I_r(\beta)} \int_0^\infty \left\{ \sum_{i, k=1}^N d_i d_k e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} \right\} \sigma^{-\beta-1} d\sigma. \end{aligned}$$

Константа $c(\beta) = (-1)^{r+1}/I_r(\beta)$ положительна в силу (12.17). Теорема доказана.

Из теоремы очевидным образом вытекает следствие 12.1 (см. п. 1). Таким образом, следствие 12.1 может быть доказано на основе более простого интегрального тождества, установленного в теореме 12.2.

3. Разрешимость интерполяционной задачи для мультиквадрик Харди. В конце п. 1 отмечена возможность интерполирования функциями $S(X)$, которые называются мультиквадриками Харди. По схеме п. 2 докажем разрешимость интерполяционной задачи для мультиквадрик еще двух видов. Во-первых, рассмотрим функции

$$F(X) = c + \sum_{k=1}^N d_k \sqrt{1 + \|X - X_k\|^2}$$

при дополнительном условии $d_1 + \dots + d_N = 0$, т. е. $d \in D_0$.

Разрешимость интерполяционной задачи $F(X_i) = y_i$, $i \in 1:N$, следует из отрицательной определенности матрицы $A = \{\sqrt{1 + \|X_i - X_k\|^2}\}_{i, k=1}^N$ на подпространстве D_0 .

Теорема 12.3. Справедливо неравенство

$$(Ad, d) < 0 \quad \forall d \in D_0, d \neq 0. \quad (12.21)$$

Доказательство. Используем равенство (12.18) при $r = 0, \beta = 1$:

$$t = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{e^{-t^2\sigma^2} - 1}{\sigma^2} d\sigma.$$

Подставим $t = \sqrt{1 + \|X_i - X_k\|^2}$, умножим на $d_i d_k$ и сложим. Получим:

$$(Ad, d) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \sum_{i, k=1}^N d_i d_k [e^{-\sigma^2} e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} - 1] \frac{d\sigma}{\sigma^2}.$$

Для $d \in D_0$ равенство примет вид:

$$(Ad, d) = -\frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty \frac{e^{-\sigma^2}}{\sigma^2} \left[\sum_{i, k=1}^N d_i d_k e^{-\sigma^2 \|X_i - X_k\|^2} \right] d\sigma.$$

Отсюда и из (12.15) следует (12.21). Теорема доказана. Результат установлен в [48, с. 97], где рассматриваются также мультиквадрики Харди вида

$$G(X) = \sum_{k=1}^N \frac{d_k}{\sqrt{1 + \|X - X_k\|^2}}.$$

Разрешимость интерполяционной задачи $G(X_i) = y_i, i \in \{1 : N\}$, вытекает из следующего утверждения.

Теорема 12.4. Для любых попарно различных точек X_1, \dots, X_N из \mathbb{R}^n матрица

$$A = \left\{ \frac{1}{\sqrt{1 + \|X_i - X_k\|^2}} \right\}_{i, k=1}^N$$

положительно определена.

Доказательство. Справедливо равенство

$$\frac{1}{t} = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-t^2\sigma^2} d\sigma.$$

Подставим $t = \sqrt{1 + \|X_i - X_k\|^2}$, умножим на $d_i d_k$ и сложим. Получим:

$$(Ad, d) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-\sigma^2} \sum_{i, k=1}^N d_i d_k e^{-\delta^2 \|X_i - X_k\|^2} d\sigma.$$

Отсюда и из (12.15) следует, что $(Ad, d) > 0$ при $d \neq 0$. Теорема доказана. Эта теорема получена в [49, с. 19]. О численных экспериментах с мультиквадриками см. в [39].

§ 13. Логарифмические сплайны

Пусть r, n — натуральные числа. Вычислим интеграл типа (12.5) при $\beta = 2r$.

Теорема 13.1. Зафиксируем X_1, \dots, X_N — попарно различные точки из \mathbb{R}^n . Для любого $d = (d_1, \dots, d_N)$ из подпространства

$$D_r = \left\{ d \in \mathbb{R}^N : \sum_{k=1}^N d_k Q(X_k) = 0 \quad \forall Q \in \mathcal{P}_r \right\}$$

справедливо равенство

$$\begin{aligned} & \int_{\mathbb{R}^n} \|\xi\|^{-n-2r} \left| \sum_{k=1}^N d_k e^{i(X_k, \xi)} \right|^2 d\xi = \\ & = (-1)^{r+1} C_{rn} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \|X_j - X_k\|^{2r} \ln \|X_j - X_k\|, \end{aligned} \quad (13.1)$$

где C_{rn} — положительная постоянная.

Доказательство. Интеграл I в (13.1) запишем в виде:

$$I = \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \|\xi\|^{-n-2r} \cos(X_j - X_k, \xi) d\xi = \int_{\|\xi\|<1} + \int_{\|\xi\|>1} =: I^{(1)} + I^{(2)}.$$

В интеграле $I^{(2)}$ можно поменять местами суммирование и интегрирование:

$$I^{(2)} = \sum_{j, k=1}^N d_j d_k I_{jk}^{(2)}, \quad I_{jk}^{(2)} = \int_{\|\eta\|>1} \|\eta\|^{-n-2r} \cos(X_j - X_k, \eta) d\eta.$$

Сделаем в интеграле $I_{jk}^{(2)}$ замену переменных $\xi = C\eta$, такую же, как при доказательстве теоремы 12.1. Получим

$$I_{jk}^{(2)} = \int_{\|\eta\|>1} \|\eta\|^{-n-2r} \cos a\eta_1 d\eta, \quad a = \|X_j - X_k\|.$$

Перейдем к сферическим координатам $\rho, \theta, \theta_2, \dots, \theta_{n-1}$. Имеем $\eta_1 = \rho \cos \theta$, $\|\eta\| = \rho$, следовательно,

$$I_{jk}^{(2)} = c \int_1^\infty \rho^{-2r-1} \int_0^\pi \cos(a\rho \cos \theta) \sin^{n-2} \theta d\theta d\rho = ca^{2r} \int_a^\infty t^{-2r-1} \Phi(t) dt,$$

где $c > 0$, $\Phi(t) = \int_0^\pi \cos(t \cos \theta) \sin^{n-2} \theta d\theta$.

В интеграле $I^{(1)}$ по шару $\|\xi\| < 1$ добавим $r+1$ членов ряда Тэйлора для косинуса, пользуясь тем, что

$$\sum_{j, k=1}^N d_j d_k (X_j - X_k, \xi)^{2s} \equiv 0, \quad s \in 0 : r.$$

Интеграл $I^{(1)}$ примет вид

$$I^{(1)} = \int_{\|\xi\| < 1} \|\xi\|^{-n-2r} \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \left[\cos(X_j - X_k, \xi) - \right. \\ \left. - \sum_{s=0}^r \frac{(-1)^s}{(2s)!} (X_j - X_k, \xi)^{2s} \right] d\xi = \sum_{j, k=1}^N d_j d_k I_{jk}^{(1)}.$$

Интеграл $I_{jk}^{(1)}$ преобразуется к виду

$$I_{jk}^{(1)} = c \int_0^1 \rho^{-2r-1} \int_0^\pi \left[\cos(a\rho \cos \theta) - \sum_{s=0}^r \frac{(-1)^s}{(2s)!} (a\rho \cos \theta)^{2s} \right] \sin^{n-2} \theta d\theta d\rho = \\ = ca^{2r} \int_0^a t^{-2r-1} \left[\Phi(t) - \sum_{s=0}^r (-1)^s J_s t^{2s} \right] dt,$$

где

$$J_s = \frac{1}{(2s)!} \int_0^\pi \cos^{2s} \theta \sin^{n-2} \theta d\theta > 0, \quad s \in 0 : r.$$

Представим интеграл по отрезку $[0, a]$ в виде суммы интегралов по отрезкам $[0, 1]$ и $[1, a]$:

$$I_{jk}^{(1)} = c_0 a^{2r} + ca^{2r} \int_1^a t^{-2r-1} \Phi(t) dt - ca^{2r} \sum_{s=0}^r (-1)^s J_s \int_1^a t^{2s-2r-1} dt.$$

Окончательно

$$I_{jk}^{(1)} + I_{jk}^{(2)} = \sum_{s=0}^r b_s a^{2s} - c(-1)^r J_r a^{2r} \ln a, \quad (13.2)$$

где b_s — постоянные, $a = \|X_j - X_k\|$. Учтем, что

$$\sum_{j, k=1}^N d_j d_k \|X_j - X_k\|^{2t} = 0, \quad s \in 0 : r$$

(в силу условия $d \in D_r$). Отсюда и из (13.2) получим

$$I = \sum_{j, k=1}^N d_j d_k (I_{jk}^{(1)} + I_{jk}^{(2)}) = (-1)^{r+1} c J_r \sum_{j, k=1}^N d_j d_k \|X_j - X_k\|^{2r} \ln \|X_j - X_k\|.$$

Теорема доказана.

Обозначим $p = \dim \mathcal{P}_r = \frac{(n+r)!}{n! r!}$ и предположим, что $N > p$.

Следствие 13.1. Если точки X_1, \dots, X_N попарно различны, то матрица $A = \{\|X_i - X_k\|^{2r} \ln \|X_i - X_k\|\}_{j,k=1}^N$ на подпространстве D_r удовлетворяет условию

$$(-1)^{r+1} (Ad, d) > 0 \quad \forall d \in D_r, \quad d \neq 0.$$

Следствие 13.2. Пусть точки X_1, \dots, X_N попарно различны и среди них найдутся r точек X_{t_1}, \dots, X_{t_r} , на которых однозначно разрешима интерполяционная задача для полиномов из \mathcal{P}_r . Тогда для любых y_1, \dots, y_N существует и единственная функция вида

$$S(X) = Q_r(X) + \sum_{k=1}^N d_k \|X - X_k\|^{2r} \ln \|X - X_k\|, \quad (13.3)$$

где $Q_r \in \mathcal{P}_r$, $d \in D_r$, такая, что $S(X_j) = y_j$, $j \in 1 : N$.

Эти следствия доказываются так же, как следствия из теоремы 12.1. Функции, аналогичные (13.3), известны. Так, в [3, 4, 36, 37, 43] рассматривались сплайны

$$S(X) = Q_{m-1}(X) + \sum_{k=1}^N d_k \|X - X_k\|^{2m-n} \ln \|X - X_k\|, \quad d \in D_{m-1}, \quad (13.4)$$

где $X \in \mathbb{R}^n$, n — четное и $n < 2m$. При $n = m = 2$ сплайны (13.4) совпадают с (13.3) для $r = 1$ и рассматривались в [23, 27]. Если положить $2r = 2m - n$, то $m - 1 = r - 1 + n/2$. Поэтому при $n \geq 4$ в (13.3) меньше степень полинома Q , меньше условий на d . Функции (13.3) можно рассматривать и при нечетном n , даже при $n = 1$.

§ 14. Простейшие натуральные сплайны двух переменных в ограниченной области

1. Сплайны, описывающие форму упругой пластины. Простейшие натуральные сплайны одной переменной — кубические — возникают в задаче минимизации потенциальной энергии гибкой рейки. По аналогии с этим поставим задачу минимизации потенциальной энергии пластины. Рассмотрим упругую пластину, занимающую ограниченную область Ω с кусочно-гладкой границей Γ и внешней нормалью n . Пусть $f(x, y)$ — перемещение пластины в точке $X = (x, y)$, края пластины защемлены, поэтому выполняются граничные условия $f|_{\Gamma} = 0$, $\frac{\partial f}{\partial n}|_{\Gamma} = 0$. В точках $X_i \in \Omega$ пластина имеет жесткие опоры высоты z_i , поэтому $f(X_i) = z_i$, $i \in 1 : m$.

Пусть $C^1(\bar{\Omega})$ — класс функций f , непрерывно дифференцируемых в Ω , у которых производные f_x, f_y допускают непрерывное продолжение на замыкание $\bar{\Omega}$.

Введем \mathcal{X} — класс функций $f \in C^1(\bar{\Omega})$, обладающих свойствами:

1) f имеет обобщенные производные 2-го порядка, суммируемые с квадратом на Ω : $f_{xx}, f_{xy}, f_{yy} \in L_2(\Omega)$;

2) f удовлетворяет условиям $f|_{\Gamma} = 0, \frac{\partial f}{\partial n}|_{\Gamma} = 0$. Рассмотрим задачу

$$\int_{\Omega} (\Delta f)^2 dx \rightarrow \min_{\substack{f \in \mathcal{X} \\ f(X_i) = z_i, i \in 1:m}}, \quad (14.1)$$

где Δ — оператор Лапласа.

Перейдем к построению решения задачи (14.1). Будем использовать функцию $G(X) = (1/8\pi) \|X\|^2 \ln \|X\|$, где $\|X\|^2 = x^2 + y^2$. Для каждого $i \in 1:m$ решим в области Ω краевую задачу для бигармонического уравнения

$$\Delta^2 \varphi_i = 0,$$

$$\varphi_i|_{\Gamma} = -G(X - X_i), \frac{\partial \varphi_i}{\partial n}|_{\Gamma} = -\frac{\partial G}{\partial n}(X - X_i). \quad (14.2)$$

Сведем это решение к неоднородному уравнению с однородными граничными условиями (чтобы показать, что решение задачи (14.2) существует).

Пусть круги $B_e(X_i) = \{X \mid \|X - X_i\| \leq e\}$, $i \in 1:m$, содержатся в Ω . Рассмотрим бесконечно дифференцируемую функцию $\omega_e(X)$, такую, что $\omega_e(X) = 1$ при $\|X\| \geq e$, $\omega_e(X) = 0$ при $\|X\| \leq e/2$. Положим $G_e(X) = G(X) \omega_e(X)$. Функция G_e является бесконечно дифференцируемой на \mathbb{R}^2 и совпадает с G при $\|X\| \geq e$. Теперь ищем φ_i в виде

$$\varphi_i(X) = u_i(X) - C(X - X_i),$$

где u_i должна быть решением краевой задачи

$$\Delta^2 u_i = q_i(X),$$

$$u_i|_{\Gamma} = 0, \quad \frac{\partial u_i}{\partial n}|_{\Gamma} = 0,$$

с бесконечно дифференцируемой правой частью $q_i(X) = \Delta^2 G_e(X - X_i)$. Эта задача имеет единственное решение $u_i \in \mathcal{X}$ (см. [19, с. 500]), а тогда $G(X - X_i) + \varphi_i(X) = u_i(X) + G(X - X_i) - G_e(X - X_i)$ также принадлежит \mathcal{X} (функция $G(X - X_i) - G_e(X - X_i)$ непрерывно дифференцируема и обращается в нуль при $\|X - X_i\| \geq e$).

Натуральным сплайном будем называть функцию вида

$$S(X) = \sum_{i=1}^m d_i [G(X - X_i) + \varphi_i(X)].$$

По доказанному, $S \in \mathcal{X}$.

Л е м м а 14.1. Для любого натурального сплайна S и любой функции $h \in \mathcal{X}$ справедливо ключевое тождество

$$\int_{\Omega} \Delta S(X) \cdot \Delta h(X) dX = \sum_{i=1}^m d_i h(X_i). \quad (14.3)$$

Д о к а з а т е л ь с т в о. Имеем:

$$\Delta S(X) = \sum_{i=1}^m d_i [\Delta \varphi_i(X) + \Delta G(X - X_i)].$$

Умножим на Δh и рассмотрим отдельно $I_1 = \int \Delta \varphi_i \cdot \Delta h dX$ и $I_2 = \int \Delta G \cdot \Delta h dX$ (индекс i писать не будем):

$$I_1 := \int_{\Omega} \Delta \varphi \cdot \Delta h dX = \int_{\Omega} [\varphi_{xx} h_{xx} + \varphi_{yy} h_{yy} + \varphi_{xy} h_{xy} + \varphi_{yx} h_{yx}] dX = \\ = \int_{\Gamma} [-\varphi_{xxx} h_x - \varphi_{yyx} h_x - \varphi_{xxy} h_y - \varphi_{yyy} h_y] dX +$$

$$+ \int_{\Gamma} [\varphi_{xx} h_x \cos(n, x) + \varphi_{yy} h_x \cos(n, x) + \varphi_{xy} h_y \cos(n, y) + \varphi_{yx} h_y \cos(n, y)] d\Gamma.$$

Интеграл по Γ равен нулю, ибо

$$h_x \cos(n, x) + h_y \cos(n, y) = \frac{\partial h}{\partial n} = 0 \text{ на } \Gamma.$$

Интегрируя по частям дальше, получаем

$$I_1 = \int_{\Omega} [\varphi_{xxxx} + 2\varphi_{xxyy} + \varphi_{yyyy}] h dX.$$

(Внеинтегральный член исчезает ввиду условия $h|_{\Gamma} = 0$). Поскольку $\Delta \Delta \varphi = 0$ в Ω , то $I_1 = 0$.

При рассмотрении интеграла I_2 введем круг B_{ε} радиусом ε с центром в X_i и окружность S_{ε} — его границу. Имеем

$$I_{2, \varepsilon} := \int_{\Omega \setminus B_{\varepsilon}} \Delta G(X - X_i) \Delta h(X) dX = \frac{1}{2\pi} \int_{\Omega \setminus B_{\varepsilon}} (\ln r + 1) \Delta h(X) dX = \\ = \frac{1}{2\pi} \int_{S_{\varepsilon}} \left[(\ln r + 1) \frac{\partial h}{\partial n} - \frac{\partial}{\partial n} (\ln r + 1) h \right] dS_{\varepsilon}.$$

Здесь $r = \|X - X_i\|$. Учтем, что при интегрировании по частям $\Delta(\ln r + 1) = 0$ в $\Omega \setminus B_{\varepsilon}$, а интеграл по Γ обратится в нуль, как и выше. Поскольку внешняя по отношению к области $\Omega \setminus B_{\varepsilon}$ нормаль на S_{ε} направлена против радиуса, то

$$\frac{\partial}{\partial n} (\ln r + 1)|_{S_{\varepsilon}} = -\frac{1}{\varepsilon},$$

$$I_{2, \varepsilon} = \frac{\ln \varepsilon + 1}{2\pi} \int_{S_{\varepsilon}} \frac{\partial h}{\partial n} dS_{\varepsilon} + \frac{1}{2\pi \varepsilon} \int_{S_{\varepsilon}} h(X) dS_{\varepsilon}. \quad (14.4)$$

Так как $h \in C^1(\bar{\Omega})$, заключаем, что первое слагаемое в (14.4) стремится к нулю при $\varepsilon \rightarrow 0$, а второе — к $h(X_i)$. Окончательно получим $I_2 = h(X_i)$, откуда следует (14.3). Лемма доказана.

Функцией Грина, соответствующей оператору Δ^2 и рассматриваемым граничным условиям, называется функция $\mathcal{G}(X, Y)$ вида

$$\mathcal{G}(X, Y) = G(X - Y) + \Phi(X, Y), \quad X, Y \in \Omega,$$

где при фиксированном $Y \in \Omega$ функция Φ находится из условий

$$\Delta_X^2 \Phi(X, Y) = 0, \quad X \in \Omega,$$

$$\Phi(X, Y) = -G(X - Y), \quad \frac{\partial \Phi}{\partial n} = -\frac{\partial G}{\partial n}(X - Y) \quad \text{при } X \in \Gamma.$$

В этих обозначениях $G(X - X_i) + \Phi_i(X) = \mathcal{G}(X, X_i)$, а натуральный сплайн запишется в виде

$$S(X) = \sum_{j=1}^m d_j \mathcal{G}(X, X_j).$$

Теорема 14.1. Существует, и притом единственный, натуральный сплайн S_* , такой, что

$$S_*(X_i) = \sum_{j=1}^m d_j^* \mathcal{G}(X_i, X_j) = z_i, \quad i \in 1 : m. \quad (14.5)$$

Доказательство. Покажем, что матрица системы (14.5) положительно определена. Возьмем произвольный вектор (d_1, \dots, d_m) и рассмотрим сплайн $S(X) = \sum_{j=1}^m d_j \mathcal{G}(X, X_j)$. В силу (14.3) (при $h = S$) имеем:

$$\sum_{i, j=1}^m d_i d_j \mathcal{G}(X_i, X_j) = \sum_{i=1}^m d_i S(X_i) = \int_{\Omega} (\Delta S)^2 dX \geq 0.$$

Если имеет место равенство нулю, то

$$\Delta S(X) = \sum_{j=1}^m d_j [\Delta G(X - X_j) + \Delta \Phi_j(X)] = 0$$

для всех $X \in \Omega$, $X \neq X_j$, $j \in 1 : m$. Отсюда следует, что $d_1 = \dots = d_m = 0$. Действительно, если, скажем, $d_1 \neq 0$, то $\lim_{X \rightarrow X_1} \Delta S(X) = \infty$, ибо $\Delta G(X - X_j) = (1/2\pi) (\ln \|X - X_j\| + 1)$.

Теорема доказана.

Теорема 14.2. Интерполяционный натуральный сплайн S_* является единственным решением задачи (14.1).

Доказательство. По теореме 1.1, достаточно проверить выполнение условия ортогональности. Множество $N(I)$ имеет вид:

$$N(I) = \{h \in \mathcal{H} \mid h(X_i) = 0, \quad i \in 1 : m\},$$

а оператор $T = \Delta$ действует из \mathcal{X} в $H = L_2(\Omega)$. Имеем в силу (14.3)

$$\langle TS_*, Th \rangle = \int_{\Omega} \Delta S_* \cdot \Delta h \, dX = 0 \quad \forall h \in N(I).$$

Согласно общей теории, S_* является решением задачи (14.1). Решение единствено, ибо $N(\Delta) = \{f \in \mathcal{X} \mid \Delta f = 0\} = \{0\}$ в силу единственности решения задачи Дирихле. Теорема доказана.

Другие задачи в ограниченных областях рассматривались в [38].

2. Одна экстремальная задача в прямоугольной области.

Рассмотрим замкнутый прямоугольник $R = [a, b] \times [c, d]$. Обозначим $C^{1,1}(R)$ класс функций g , имеющих в R непрерывные частные производные g_x , g_y , g_{xy} . Определим оператор T равенством $Tg = g_{xy}$. Считаем, что значения оператора T лежат в гильбертовом пространстве $H = L_2(R)$ и используем обозначения

$$\langle Tg, Th \rangle = \iint_R g_{xy} h_{xy} \, dx \, dy, \quad \|Tg\|^2 = \langle Tg, Tg \rangle.$$

Пусть на границе ∂R прямоугольника R задана дважды непрерывно дифференцируемая функция f (фактически заданы функции $f(x, c)$, $f(x, d)$ класса $C^2[a, b]$ и функции $f(a, y)$, $f(b, y)$ класса $C^2[c, d]$). Требуется среди функций $g \in C^{1,1}(R)$, совпадающих с f на границе ∂R , найти ту функцию, для которой $\|Tg\|^2$ минимальна. Итак, рассматривается задача

$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min_{\substack{g \in C^{1,1}(R) \\ g|_{\partial R} = f}} \quad (14.6)$$

Эта задача вкладывается в общую схему § 1, и ее решение допускает запись в виде явной формулы:

$$\begin{aligned} S(x, y) = & \frac{d-y}{d-c} f(x, c) + \frac{c-y}{c-d} f(x, d) + \frac{b-x}{b-a} f(a, y) + \\ & + \frac{a-x}{a-b} f(b, y) - \frac{1}{(b-a)(d-c)} [(b-x)(d-y) f(a, c) - \\ & - (a-x)(d-y) f(b, c) + (a-x)(c-y) f(b, d) - (b-x)(c-y) f(a, d)]. \end{aligned} \quad (14.7)$$

Проверим, что S действительно является решением (14.6). Во-первых, легко установить, что S на ∂R совпадает с f , например, при $y = c$ имеем:

$$\begin{aligned} S(x, c) = & f(x, c) + \frac{b-x}{b-a} f(a, c) + \frac{a-x}{a-b} f(b, c) - \\ & - \frac{1}{(b-a)(d-c)} [(b-x)(d-c) f(a, c) - (a-x)(d-c) f(b, c)] = f(x, c). \end{aligned}$$

Во-вторых, проверим, что $S_{xxyy} \equiv 0$ в R . Действительно, дифференцируя два раза по y , получаем:

$$S_{yy}(x, y) = \frac{b-x}{b-a} f_{yy}(a, y) + \frac{a-x}{a-b} f_{yy}(b, y).$$

Поскольку S_{yy} является линейной функцией от x , то $S_{xxyy} \equiv 0$. Теперь можно установить основное утверждение.

Теорема 14.3. Функция S , заданная формулой (14.7), является единственным решением задачи (14.6).

Доказательство. Возьмем произвольную функцию $g \in C^{1,1}(R)$, $g|_{\partial R} = f$, и рассмотрим разность $h = g - S$.

Тогда $h|_{\partial R} = 0$, $\langle Th, TS \rangle := \int_c^d \int_a^b h_{xy} S_{xy} dx dy = \int_c^d \left\{ h_y S_{xy} \Big|_{x=a} - \right. \\ \left. - \int_a^b h_y S_{xxy} dx \right\} dy = \int_c^d [h_y(b, y) S_{xy}(b, y) - h_y(a, y) S_{xy}(a, y)] dy - \\ - \int_c^d \int_a^b h_y S_{xxy} dx dy$. Поскольку $h(b, y) \equiv h(a, y) \equiv 0$, то и $h_y(b, y) \equiv \equiv h_y(a, y) \equiv 0$. Отсюда

$$\langle Th, TS \rangle = - \int_a^b \int_c^d h_y S_{xxy} dy dx = - \int_a^b \left[h(x, d) S_{xxy}(x, d) - h(x, c) S_{xxy}(x, c) - \right. \\ \left. - \int_c^d h S_{xxyy} dy \right] dx.$$

Учитывая, что $h|_{\partial R} = 0$ и $S_{xxyy} \equiv 0$ в R , получаем:

$$\langle Th, TS \rangle = 0. \quad (14.8)$$

Оптимальность S следует теперь из теоремы 1.1, но мы дадим непосредственное доказательство:

$$\|Tg\|^2 = \|Th + TS\|^2 = \|Th\|^2 + \|TS\|^2 \geq \|TS\|^2.$$

Докажем единственность решения. Если $\|Tg\|^2 = \|TS\|^2$, то $\|Th\|^2 = 0$, т. е. $h_{xy} = 0$ в R . Для любой функции $h \in C^{1,1}(R)$ и точки $(x, y) \in R$ справедливо равенство

$$h(x, y) = h(x, c) + h(a, y) - h(a, c) + \int_c^y \int_a^x h_{xy}(u, v) du dv \quad (14.9)$$

(для доказательства нужно дважды применять формулу Ньютона—Лейбница к интегралу в (14.9)). В рассматриваемом случае $h|_{\partial R} = 0$ и $h_{xy} = 0$, поэтому $h(x, y) = 0$ в R . Теорема доказана.

Замечание 14.1. Поскольку функция $S(f; x, y)$ является решением задачи (14.6), ее можно назвать натуральным сплайном. Сплайн $S(f)$ можно использовать для приближения функции в следующей ситуации. Отрезки $[a, b]$ и $[c, d]$ разбиты на частичными точками

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_N = b, \quad c = y_0 < y_1 < \cdots < y_M = d.$$

Требуется вычислить $f(x_i, y_j)$ для всех $i \in 0 : N$ и $j \in 0 : M$, всего $(N + 1)(M + 1)$ значений. Будем считать, что $S(f; x_i, y_j)$ является приближенным значением для $f(x_i, y_j)$. Для вычисления $S(f; x_i, y_j)$ во всех точках (x_i, y_j) по формуле (14.7) требуется вычислить значения f в точках, лежащих на границе прямоугольника R :

$$f(x_i, c), f(x_i, d), i \in 0 : N; \quad f(a, y_j), f(b, y_j), j \in 1 : M - 1,$$

всего $2(N + M)$ значений, что может оказаться существенно меньше, чем $(N + 1)(M + 1)$. Например, при $N = M = 100$ нужно вычислить 400 значений f вместо 10 201.

3. Треугольная область. Задача, аналогичная (14.6), может быть также легко решена для треугольника

$$\Omega = \{(x, y) \mid x \geq 0, y \geq 0, x + y \leq 1\}.$$

Решение получено в работе [50].

На классе $C^{1,1}(\Omega)$ рассмотрим оператор $Tg = g_{xy}$ и решим задачу

$$\|Tg\|^2 := \iint_{\Omega} (g_{xy})^2 dx dy \rightarrow \min_{\substack{g \in C^{1,1}(\Omega) \\ g_{\partial\Omega} = f}} \quad (14.10)$$

Здесь f — фиксированная функция класса $C^{2,2}(\Omega)$.

В работе [50] показано, что решение $\sigma(f; x, y)$ имеет вид:

$$\begin{aligned} \sigma(f; x, y) = & (1 - y)f(x, 0) + (1 - x)f(0, y) - (1 - x - y)f(0, 0) + \\ & + y[f(x, 1 - x) - f(0, 1 - x)] + x[f(1 - y, y) - f(1 - y, 0)]. \end{aligned}$$

Проверим, что $\sigma|_{\partial\Omega} = f$. Имеем:

$$\sigma(f; x, 0) = f(x, 0) + (1 - x)f(0, 0) - (1 - x)f(0, 0) = f(x, 0),$$

$$\sigma(f; 0, y) = (1 - y)f(0, 0) + f(0, y) - (1 - y)f(0, 0) = f(0, y),$$

$$\sigma(f; x, 1 - x) = xf(x, 0) + (1 - x)f(0, 1 - x) +$$

$$+ (1 - x)[f(x, 1 - x) - f(0, 1 - x)] + x[f(x, 1 - x) - f(x, 0)] = f(x, 1 - x).$$

Легко также видеть, что $\sigma_{xx}yy \equiv 0$. Действительно,

$$\sigma_{yy} = (1 - x) \frac{\partial^2}{\partial y^2} f(0, y) + x \frac{\partial^2}{\partial y^2} [f(1 - y, y) - f(1 - y, 0)].$$

Отсюда $\sigma_{xx}yy \equiv 0$. Покажем также, что

$$\sigma_{xy}(f; x, 1 - x) = 0 \quad \forall x \in [0, 1]. \quad (14.11)$$

Действительно,

$$\begin{aligned} \sigma_y = & -f(x, 0) + (1 - x)f_y(0, y) + f(0, 0) + f(x, 1 - x) - f(0, 1 - x) + \\ & + x[-f_x(1 - y, y) + f_y(1 - y, y) + f_x(1 - y, 0)], \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \sigma_{xy} = & -f_x(x, 0) - f_y(0, y) + f_x(x, 1 - x) - f_y(x, 1 - x) + f_y(0, 1 - x) + \\ & + [-f_x(1 - y, y) + f_y(1 - y, y) + f_x(1 - y, 0)], \end{aligned}$$

$$\sigma_{xy}(f; x, 1 - x) \equiv 0.$$

Теорема 14.4. Функция $\sigma(f; x, y)$ является единственным решением задачи (14.10).

Доказательство. Возьмем произвольную функцию $g \in C^{1,1}(\Omega)$, $g|_{\partial\Omega} = f$, и рассмотрим разность $h = g - \sigma(f)$. Тогда $h|_{\partial\Omega} = 0$. Имеем:

$$\begin{aligned}\langle Th, T\sigma(f) \rangle &:= \int_{\Omega} \int h_{xy} \cdot \sigma_{xy} dx dy = \int_0^1 \int_0^{1-x} h_{xy} \cdot \sigma_{xy} dy dx = \\ &= \int_0^1 \left\{ h_x(x, 1-x) \sigma_{xy}(x, 1-x) - h_x(x, 0) \sigma_{xy}(x, 0) - \right. \\ &\quad \left. - h(x, 1-x) \sigma_{xyy}(x, 1-x) + h(x, 0) \sigma_{xyy}(x, 0) + \int_0^{1-x} h \cdot \sigma_{xxyy} dy \right\} dx.\end{aligned}$$

Поскольку $h(x, 0) \equiv 0$, то и $h_x(x, 0) \equiv 0$. Остальные слагаемые равны нулю в силу (14.11), и соотношения $\sigma_{xxyy} \equiv 0$. Итак,

$$\langle Th, T\sigma(f) \rangle = 0.$$

Отсюда, как и в теореме 14.3,

$$\|Tg\|^2 = \|Th\|^2 + \|T\sigma(f)\|^2 \geq \|T\sigma(f)\|^2.$$

Если $\|Tg\|^2 = \|T\sigma(f)\|^2$, то $h_{xy} \equiv 0$, а отсюда в силу равенства (14.9) при $a = c = 0$ получим, что $h \equiv 0$. Следовательно, $\sigma(f)$ — единственное решение задачи (14.10). Теорема доказана.

Для случая произвольного треугольника Ω на плоскости задача, аналогичная (14.10), решена в [50].

§ 15. Сплайны Кунса

1. Сплайны Кунса в единичном квадрате. Обозначим через Q квадрат $\{(x, y) | 0 \leq x \leq 1, 0 \leq y \leq 1\}$. Пусть на границе ∂Q квадрата Q заданы четырежды непрерывно дифференцируемые функции

$$f(0, y), f(1, y), f(x, 0), f(x, 1), f_x(0, y), f_x(1, y), f_y(x, 0), f_y(x, 1), \quad (15.1)$$

т. е. восемь функций класса $C^4[0, 1]$. Предположим, что в угловых точках квадрата Q выполнены следующие четыре условия согласования:

$$\frac{\partial}{\partial x} f_y(x, 0) \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial y} f_x(0, y) \Big|_{y=0} = : f_{xy}(0, 0), \quad (15.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f_y(x, 0) \Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial y} f_x(1, y) \Big|_{y=0} = : f_{xy}(1, 0), \quad (15.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f_y(x, 1) \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial y} f_x(0, y) \Big|_{y=1} = : f_{xy}(0, 1), \quad (15.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} f_y(x, 1) \Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial y} f_x(1, y) \Big|_{y=1} = : f_{xy}(1, 1). \quad (15.5)$$

Обозначим $C^{2,2}(Q)$ класс функций $g(x, y)$, имеющих в Q непрерывные частные производные $f_x, f_y, f_{xx}, f_{xy}, f_{yy}, f_{xxy}, f_{xyy}, f_{xxx}$. Определим оператор T равенством $Tg = \frac{\partial^4 g}{\partial x^2} \frac{\partial^4 g}{\partial y^2}$. Считаем, что значения оператора T лежат в гильбертовом пространстве $H = L_2(Q)$, и используем обозначения

$$\langle Tg, Th \rangle = \iint_Q \frac{\partial^4 g}{\partial x^2} \frac{\partial^4 h}{\partial y^2} dx dy, \|Tg\|^2 = \langle Tg, Tg \rangle.$$

Требуется среди функций $g \in C^{2,2}(Q)$, совпадающих на границе ∂Q с f и с ее производными по соответствующей переменной, найти ту, для которой функционал $\iint_Q \left(\frac{\partial^4 g}{\partial x^2} \frac{\partial^4 g}{\partial y^2} \right)^2 dx dy$ имеет наименьшее значение. Итак, рассматривается задача

$$\begin{aligned} \|Tg\|^2 &\rightarrow \min. \\ g \in C^{2,2}(Q), \quad g|_{\partial Q} &= f \\ g_x(0, y) = f_x(0, y), \quad g_x(1, y) = f_x(1, y), \quad y \in [0, 1] \\ g_y(x, 0) = f_y(x, 0), \quad g_y(x, 1) = f_y(x, 1), \quad x \in [0, 1] \end{aligned} \quad (15.6)$$

Эта задача вкладывается в общую схему § 1, и ее решение можно получить в виде явной формулы. Для получения решения положим:

$$\begin{aligned} g_1(x, y) &= \alpha_0(x)f(0, y) + \alpha_1(x)f(1, y) + \beta_0(x)f_x(0, y) + \beta_1(x)f_x(1, y), \\ g_2(x, y) &= \alpha_0(y)f(x, 0) + \alpha_1(y)f(x, 1) + \beta_0(y)f_y(x, 0) + \beta_1(y)f_y(x, 1), \\ g_3(x, y) &= [\alpha_0(x), \alpha_1(x), \beta_0(x), \beta_1(x)] \times \end{aligned} \quad (15.7)$$

$$\times \begin{bmatrix} f(0, 0) & f(0, 1) & f_y(0, 0) & f_y(0, 1) \\ f(1, 0) & f(1, 1) & f_y(1, 0) & f_y(1, 1) \\ f_x(0, 0) & f_x(0, 1) & f_{xy}(0, 0) & f_{xy}(0, 1) \\ f_x(1, 0) & f_x(1, 1) & f_{xy}(1, 0) & f_{xy}(1, 1) \end{bmatrix} \times \begin{bmatrix} \alpha_0(y) \\ \alpha_1(y) \\ \beta_0(y) \\ \beta_1(y) \end{bmatrix},$$

$$\sigma = g_1 + g_2 - g_3, \quad (15.8)$$

где

$$\begin{aligned} \alpha_0(x) &= 1 - 3x^2 + 2x^3, & \alpha_1(x) &= 3x^2 - 2x^3, \\ \beta_0(x) &= x - 2x^2 + x^3, & \beta_1(x) &= -x^2 + x^3 \end{aligned} \quad (15.9)$$

— простейший набор полиномиальных функций, удовлетворяющий условиям

$$\alpha_0(0) = 1, \quad \alpha_0(1) = 0, \quad \alpha_1(0) = 0, \quad \alpha_1(1) = 1, \quad (15.10)$$

$$\alpha'_0(0) = \alpha'_1(1) = \alpha'_1(0) = \alpha'_1(1) = 0, \quad (15.11)$$

$$\beta_0(0) = \beta_0(1) = \beta_1(0) = \beta_1(1) = 0, \quad (15.12)$$

$$\beta'_0(0) = 1, \quad \beta'_0(1) = 0, \quad \beta'_1(0) = 0, \quad \beta'_1(1) = 1. \quad (15.13)$$

Легко проверить, что $\sigma(x, y)$ на границе ∂Q удовлетворяет всем граничным условиям. Например, при $y = 0$

$$g_1(x, 0) = \alpha_0(x) f(0, 0) + \alpha_1(x) f(1, 0) + \beta_0(x) f_x(0, 0) + \beta_1(x) f_x(1, 0), \\ g_2(x, 0) = f(x, 0),$$

$$g_3(x, 0) = [\alpha_0(x), \alpha_1(x), \beta_0(x), \beta_1(x)] \times \begin{bmatrix} f(0, 0) \\ f(1, 0) \\ f_x(0, 0) \\ f_x(1, 0) \end{bmatrix}, \\ \sigma(x, 0) = f(x, 0), \quad x \in [0, 1],$$

$$\frac{\partial g_1}{\partial y}(x, 0) = \alpha_0(x) f_y(0, 0) + \alpha_1(x) f_y(1, 0) + \beta_0(x) f_{xy}(0, 0) + \beta_1(x) f_{xy}(1, 0),$$

$$\frac{\partial g_3}{\partial y}(x, 0) = f_y(x, 0),$$

$$\frac{\partial g_3}{\partial y}(x, 0) = [\alpha_0(x), \alpha_1(x), \beta_0(x), \beta_1(y)] \times \begin{bmatrix} f_y(0, 0) \\ f_y(1, 0) \\ f_{xy}(0, 0) \\ f_{xy}(1, 0) \end{bmatrix},$$

$$\frac{\partial \sigma}{\partial y}(x, 0) = f_y(x, 0), \quad x \in [0, 1]$$

Покажем, что $\sigma \in C^{4,4}(Q)$. Принадлежность σ к этому классу непосредственно следует из формул построения (15.7)–(15.8). Функции двух переменных g_1, g_2, g_3 заданы с помощью произведений функций одной переменной. При фиксированном x $g_1 \in C^4[0, 1]$, а $g_2, g_3 \in C^\infty[0, 1]$, так как являются полиномами от y степени ≤ 3 . С другой стороны, при фиксированном y $g_2 \in C^4[0, 1]$, а $g_1, g_3 \in C^\infty[0, 1]$, так как являются полиномами от x степени ≤ 3 . Следовательно, $\sigma \in C^{4,4}(Q)$, причем легко проверить, что $\partial^8 \sigma / \partial x^4 \partial y^4 \equiv 0$ в Q . Это следует из того, что производная $\partial^8 / \partial x^4 \partial y^4$ равна нулю для каждой из функций g_1, g_2, g_3 , так как в определении этих функций участвуют полиномы одной переменной степени ≤ 3 . Теперь можно установить основное утверждение.

Теорема 15.1. Пусть выполнены следующие условия:

а) функция f непрерывна на границе ∂Q ;

б) функции (15.1) принадлежат классу $C^4[0, 1]$;

в) удовлетворены условия согласования (15.2)–(15.5).

Тогда σ является единственным решением задачи (15.6).

Доказательство. Возьмем произвольную функцию $g \in C^{2,2}(Q)$, удовлетворяющую граничным условиям, и рассмотрим $h = g - \sigma$. Тогда $h \in C^{2,2}(Q)$, $h|_{\partial Q} = 0$, а также

$$h_x(0, y) = 0, \quad h_x(1, y) = 0, \quad y \in [0, 1], \quad (15.14)$$

$$h_y(x, 0) = 0, \quad h_y(x, 1) = 0, \quad x \in [0, 1]. \quad (15.15)$$

Имеем:

$$\begin{aligned} \langle Th, T\sigma \rangle &= \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^4 h}{\partial x^2 \partial y^2} \frac{\partial^4 \sigma}{\partial x^2 \partial y^2} dx dy = \\ &= \int_0^1 \left[\frac{\partial^3 h}{\partial x \partial y^3} (1, y) \frac{\partial^4 \sigma}{\partial x^2 \partial y^2} (1, y) - \frac{\partial^3 h}{\partial x \partial y^2} (0, y) \frac{\partial^4 \sigma}{\partial x^2 \partial y^2} (0, y) \right] dy - \\ &\quad - \int_Q^1 \int_0^1 \frac{\partial^3 h}{\partial x \partial y^2} \frac{\partial^5 \sigma}{\partial x^3 \partial y^2} dx dy. \end{aligned}$$

Поскольку в силу (15.14) $[h_x (0, y) \equiv h_x (1, y) \equiv 0]$, то $(\partial^2 / \partial y^2) h_x (0, y) \equiv (\partial^2 / \partial y^2) h_x (1, y) \equiv 0$. Далее имеем:

$$\begin{aligned} \langle Th, T\sigma \rangle &= - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^3 h}{\partial x \partial y^2} \frac{\partial^5 \sigma}{\partial x^3 \partial y^2} dy dx = \\ &= - \int_0^1 \left[\frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} (x, 1) \frac{\partial^5 \sigma}{\partial x^3 \partial y^2} (x, 1) - \frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} (x, 0) \frac{\partial^5 \sigma}{\partial x^3 \partial y^2} (x, 0) \right] dx + \\ &\quad + \int_Q^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} \frac{\partial^6 \sigma}{\partial x^3 \partial y^3} dx dy. \end{aligned}$$

Так как, из (15.15), $h_y (x, 0) \equiv h_y (x, 1) \equiv 0$, то $(\partial / \partial x) h_y (x, 0) \equiv (\partial / \partial x) h_y (x, 1) \equiv 0$. Отсюда

$$\begin{aligned} \langle Th, T\sigma \rangle &= \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial^2 h}{\partial x \partial y} \frac{\partial^6 \sigma}{\partial x^3 \partial y^3} dx dy = \\ &= \int_0^1 \left[\frac{\partial h}{\partial y} (1, y) \frac{\partial^6 \sigma}{\partial x^3 \partial y^3} (1, y) - \frac{\partial h}{\partial y} (0, y) \frac{\partial^6 \sigma}{\partial x^3 \partial y^3} (0, y) - \right. \\ &\quad \left. - \int_0^1 \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial^7 \sigma}{\partial x^4 \partial y^3} dx \right] dy = - \int_0^1 \int_0^1 \frac{\partial h}{\partial y} \frac{\partial^7 \sigma}{\partial x^4 \partial y^3} dy dx = \\ &= - \int_0^1 \left[h (x, 1) \frac{\partial^7 \sigma}{\partial x^4 \partial y^3} (x, 1) - h (x, 0) \frac{\partial^7 \sigma}{\partial x^4 \partial y^3} (x, 0) - \right. \\ &\quad \left. - \int_0^1 h \frac{\partial^8 \sigma}{\partial x^4 \partial y^4} dy \right] dx = \int_Q^1 \int_0^1 h \frac{\partial^8 \sigma}{\partial x^4 \partial y^4} dx dy = 0. \end{aligned}$$

В этих выкладках мы снова учли условия (15.14)–(15.15) и установленный ранее факт, что $\partial^3\sigma/\partial x^4\partial y^4 \equiv 0$ в Q . Итак, $\langle Th, T\sigma \rangle = 0$. Оптимальность σ следует теперь из теоремы 1.1, но можно дать непосредственное доказательство:

$$\begin{aligned} \|Tg\|^2 &= \iint_Q \left(\frac{\partial^4 g}{\partial x^2 \partial y^2} \right)^2 dx dy = \iint_Q \left[\frac{\partial^4 (\sigma + h)}{\partial x^2 \partial y^2} \right]^2 dx dy = \\ &= \iint_Q \left(\frac{\partial^4 \sigma}{\partial x^2 \partial y^2} \right)^2 dx dy + 2 \langle Th, T\sigma \rangle + \iint_Q \left(\frac{\partial^4 h}{\partial x^2 \partial y^2} \right)^2 dx dy \geqslant \\ &\geqslant \iint_Q \left(\frac{\partial^4 \sigma}{\partial x^2 \partial y^2} \right)^2 dx dy = \|T\sigma\|^2. \end{aligned}$$

Это означает, что σ — решение (15.6).

Докажем единственность решения. Допустим, что $g(x, y)$ — также решение. Тогда $\iint (\partial^4 h / \partial x^2 \partial y^2)^2 dx dy = 0$ и, следовательно, $\partial^4 h / \partial x^2 \partial y^2 \equiv 0$ в Q . Для любой функции $h \in C^{2,2}(Q)$ и точки $(x, y) \in Q$ справедливы равенства

$$h(x, y) = h(x, 0) + h(0, y) - h(0, 0) + \int_0^x \int_0^y h_{xy}(u, v) dv du, \quad (15.16)$$

$$h_{xy}(x, y) = h_{xy}(x, 0) + h_{xy}(0, y) - h_{xy}(0, 0) + \int_0^x \int_0^y h_{xxyy}(u, v) dv du \quad (15.17)$$

(для доказательства нужно дважды применить формулу Ньютона—Лейбница к интегралам в (15.16)–(15.17)).

Рассмотрим равенство (15.17). Можно показать, что

$$h_{xy}(x, 0) = \frac{\partial}{\partial x} h_y(x, 0) = 0, \quad x \in [0, 1] \text{ в силу (15.14),}$$

$$h_{xy}(0, y) = \frac{\partial}{\partial y} h_x(0, y) = 0, \quad y \in [0, 1] \quad \text{в силу (15.15).}$$

В частности, при $x = 0$ и $y = 0$ получаем: $h_{xy}(0, 0) = 0$. Мы нашли, что в (15.17) все четыре слагаемых равны нулю. Следовательно, $h_{xy}(x, y) \equiv 0$ в Q . Теперь перейдем к равенству (15.16). В рассматриваемом случае $h|_{\partial Q} = 0$ и $h_{xy}(x, y) \equiv 0$, поэтому $h(x, y) \equiv 0$ в Q . Это означает, что $g = \sigma$. Теорема доказана.

З а м е ч а н и е 15.1. Поскольку функция $\sigma(f; x, y)$ является решением задачи (15.6), то ее можно назвать натуральным сплайном. Сплайн $\sigma(f)$ можно использовать для приближения функции f внутри квадрата в случае, когда известны функции (15.1) на границе ∂Q .

Рассмотренная задача допускает обобщение в двух направлениях.

2. Векторные сплайны Кунса. Эти сплайны рассмотрены в книге Фокса и Пратта [34] без указания их экстремального

свойства. Пусть на границе квадрата ∂Q заданы четырежды непрерывно дифференцируемые вектор-функции

$$F(0, y), F(1, y), F(x, 0), F(x, 1), F_x(0, y), F_x(1, y), F_y(x, 0), F_y(x, 1). \quad (15.18)$$

Значения вектор-функции F лежат в \mathbb{R}^3 , т. е. $F = (f_1, f_2, f_3)$. Используем в \mathbb{R}^3 скалярное произведение и норму: если

$$\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3), \quad \eta = (\eta_1, \eta_2, \eta_3),$$

то

$$(\xi, \eta) = \xi_1 \eta_1 + \xi_2 \eta_2 + \xi_3 \eta_3, \quad \|\xi\|^2 = (\xi, \xi).$$

Предположим, что в угловых точках квадрата Q выполнены следующие четыре (векторных) условия согласования:

$$\frac{\partial}{\partial x} F_y(x, 0) \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial y} F_x(0, y) \Big|_{y=0} = : F_{xy}(0, 0), \quad (15.19)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} F_y(x, 0) \Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial y} F_x(1, y) \Big|_{y=0} = : F_{xy}(1, 0), \quad (15.20)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} F_y(x, 1) \Big|_{x=0} = \frac{\partial}{\partial y} F_x(0, y) \Big|_{y=1} = : F_{xy}(0, 1), \quad (15.21)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} F_y(x, 1) \Big|_{x=1} = \frac{\partial}{\partial y} F_x(1, y) \Big|_{y=1} = : F_{xy}(1, 1). \quad (15.22)$$

Обозначим $C_3^{2,2}(Q)$ класс вектор-функций $G(x, y)$, имеющих в Q непрерывные частные производные $G_x, G_y, G_{xx}, G_{xy}, G_{yy}, G_{xxy}, G_{xyy}, G_{xxx}$. Определим оператор T равенством $TG = \partial^4 G / \partial x^2 \partial y^2$. Считаем, что значения оператора лежат в гильбертовом пространстве $H = L_2(Q)$, и используем обозначения

$$\langle TG, Th \rangle = \iint_Q \left(\frac{\partial^4 G}{\partial x^2 \partial y^2}, \frac{\partial^4 h}{\partial x^2 \partial y^2} \right) dx dy, \quad \|TG\|^2 = \langle TG, TG \rangle.$$

Требуется среди вектор-функций $G \in C_3^{2,2}(Q)$, совпадающих на границе ∂Q с F и с ее производными по соответствующей переменной, найти ту функцию, для которой функционал $\|TG\|^2$ имеет наименьшее значение. Итак, рассматривается задача

$$\|TG\|^2 \rightarrow \min. \quad (15.23)$$

$$G \in C_3^{2,2}(Q), \quad G \Big|_{\partial Q} = F$$

$$G_x(0, y) = F_x(0, y), \quad G_x(1, y) = F_x(1, y), \quad y \in [0, 1]$$

$$G_y(x, 0) = F_y(x, 0), \quad G_y(x, 1) = F_y(x, 1), \quad x \in [0, 1]$$

Эта задача также вкладывается в общую схему § 1, и ее решение можно получить в виде явной формулы. Однако ввиду того что функционал задачи (15.23) имеет вид

$$\|TG\|^2 = \iint_Q \left| \frac{\partial^4 G}{\partial x^2 \partial y^2} \right|^2 dx dy = \sum_{i=1}^3 \iint_Q \left(\frac{\partial^4 g_i}{\partial x^2 \partial y^2} \right)^2 dx dy,$$

решение задачи (15.23) можно найти покомпонентно, т. е. для нахождения решения (15.23) нужно решить для каждой компоненты

в отдельности задачу, рассмотренную в п. 1 этого параграфа. Если σ_i — решение задачи

$$\|Tg_i\|^2 = \iint_Q \left(\frac{\partial^4 g_i}{\partial x^2 \partial y^2} \right) dx dy \rightarrow \min,$$

$$\begin{aligned} g_i &\in C^{2,2}(Q), \quad g_i|_{\partial Q} = f_i \\ g_{ix}(0, y) &= f_{ix}(0, y), \quad g_{ix}(1, y) = f_{ix}(1, y), \quad y \in [0, 1] \\ g_{iy}(x, 0) &= f_{iy}(x, 0), \quad g_{iy}(x, 1) = f_{iy}(x, 1), \quad x \in [0, 1] \end{aligned}$$

то $S = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ будет решением задачи (15.23), причем S будет единственным решением в силу единственности своих компонент $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$.

3. Сплайны Кунса в случае задания каркаса. Рассмотрим замкнутый прямоугольник $R = [0, M] \times [0, N]$. Сетка прямых линий, параллельных сторонам этого прямоугольника, $x = i, i \in 0 : M, y = j, j \in 0 : N$, разбивает R на NM единичных квадратов

$$Q_{ij} = \{(x, y) | i - 1 \leq x \leq i, j - 1 \leq y \leq j\}, \quad i \in 1 : M, \quad j \in 1 : N. \quad (15.24)$$

Пусть на этой сетке заданы четырежды непрерывно дифференцируемые функции

$$f(i, y), \quad f_x(i, y), \quad y \in [0, N], \quad i \in 0 : M, \quad (15.25)$$

$$f(x, j), \quad f_y(x, j), \quad x \in [0, M], \quad j \in 0 : N. \quad (15.26)$$

Предположим, что в целочисленных точках выполнены условия

$$f(i, y)|_{y=j} = f(x, j)|_{x=i} = :f(i, j), \quad i \in 0 : M, \quad j \in 0 : N, \quad (15.27)$$

и что в угловых точках каждого единичного квадрата Q_{ij} выполнены следующие четыре условия согласования:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} f_y(x, j-1) \Big|_{x=i-1} &= \frac{\partial}{\partial y} f_x(i-1, y) \Big|_{y=j-1} = :f_{xy}(i-1, j-1), \\ \frac{\partial}{\partial x} f_y(x, j-1) \Big|_{x=i} &= \frac{\partial}{\partial y} f_x(i, y) \Big|_{y=j-1} = :f_{xy}(i, j-1), \\ \frac{\partial}{\partial x} f_y(x, j) \Big|_{x=i-1} &= \frac{\partial}{\partial y} f_x(i-1, y) \Big|_{y=j} = :f_{xy}(i-1, j), \\ \frac{\partial}{\partial x} f_y(x, j) \Big|_{x=i} &= \frac{\partial}{\partial y} f_x(i, y) \Big|_{y=j} = :f_{xy}(i, j). \end{aligned}$$

Будем говорить, что функции (15.25) и (15.26) образуют каркас, который обозначим K . Обозначим $C^{2,2}(Q_{ij})$ класс функций $g(x, y)$, имеющих в Q_{ij} непрерывные частные производные $g_x, g_y, g_{xx}, g_{xy}, g_{yy}, g_{xxy}, g_{xxyy}$. Определим оператор T равенством $Tg = \frac{\partial^4 g}{\partial x^2 \partial y^2}$. Считаем, что значения оператора T лежат в гильбертовом пространстве $H = L_2(Q_{ij})$, и используем обозначения

$$\langle Tg, Th \rangle = \iint_{Q_{ij}} \frac{\partial^4 g}{\partial x^2 \partial y^2} \frac{\partial^4 h}{\partial x^2 \partial y^2} dx dy, \quad \|Tg\|^2 = \langle Tg, Tg \rangle.$$

Для каждого квадрата Q_{ij} решим задачу

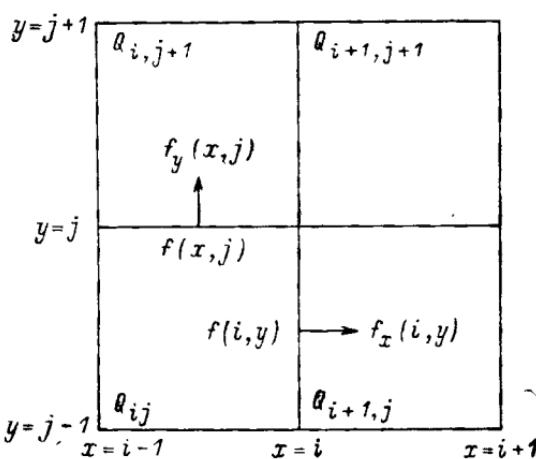
$$\|Tg\|^2 \rightarrow \min. \quad (15.28)$$

$$g \in C^{2,2}(Q_{ij}), \quad g|_{\partial Q_{ij}} = f|_{\partial Q_{ij}}$$

$$g_x(i-1, y) = f_x(i-1, y), \quad g_x(i, y) = f_x(i, y), \quad y \in [j-1, j]$$

$$g_y(x, i-1) = f_y(x, i-1), \quad g_y(x, i) = f_y(x, i), \quad x \in [i-1, i]$$

Пусть $\sigma_{ij}(x, y)$ — решение задачи (15.28). Функция σ_{ij} задает порцию поверхности, которая заполняет ячейку каркаса, соответствующую квадрату Q_{ij} . Составим из σ_{ij} , $i \in 1 : M$, $j \in 1 : N$, единую поверхность σ , определенную на всем R . Покажем, что $\sigma \in C^1(R)$. Для этого нужно проверить дифференцируемость σ на линиях сетки. Рассмотрим четыре смежных квадрата Q_{ij} :



При переходе через границу между квадратами Q_{ij} и $Q_{i,j+1}$, по построению, обеспечивается непрерывность частной производной $\sigma_y(x, y)$. Очевидно также, что

$$\frac{\partial}{\partial x} \sigma_{ij}(x, j) = \frac{\partial}{\partial x} \sigma_{i,j+1}(x, j), \quad x \in [i-1, i],$$

ибо $\sigma_{ij}(x, j) = f(x, j) = \sigma_{i,j+1}(x, j)$. При переходе через границу между квадратами Q_{ij} и $Q_{i+1,j}$, по построению, обеспечивается непрерывность частной производной $\sigma_x(x, y)$ при $x = i$. Следовательно, $\sigma \in C^1(R)$.

§ 16. Сферические натуральные сплайны

1. До сих пор натуральные сплайны рассматривались на отрезке, окружности, в плоской области и на всей плоскости. Введем в рассмотрение еще одно многообразие — сферу. Натуральные сферические сплайны рассматривались в работе В. Фридена [41]. Они имеют приложения к задаче аппроксимации гравитационного потенциала Земли.

Длину вектора $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ обозначим $|\xi| = \sqrt{\xi_1^2 + \xi_2^2 + \xi_3^2}$. Введем единичную сферу $\Omega = \{\xi : |\xi| = 1\}$. Пусть в точках $\eta_1, \dots, \eta_N \in \Omega$ заданы значения y_1, \dots, y_N . Требуется определить наиболее плавную функцию $S(\xi)$ на сфере, такую, что $S(\eta_i) = y_i, i \in 1 : N$. Конкретизируем эту задачу, введя «функционал плавности».

Вектор $x \neq 0$ представим в виде $x = \rho \xi$, где $\rho = |x|$, $\xi = x/\rho$. Положение точки $\xi \in \Omega$ определим сферическими координатами (θ, ϕ) . Оператор Лапласа в сферических координатах записываем в виде

$$\Delta = \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho^2 \frac{\partial}{\partial \rho} \right) + \frac{1}{\rho^2} \Delta_\xi,$$

где

$$\Delta_\xi = \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \phi^2}$$

— оператор Бельтрами.

В качестве «функционала плавности» возьмем интеграл

$$\mu(f) = \int_{\Omega} [(-\Delta_\xi)^r f]^2 d\omega,$$

где $d\omega$ — элемент поверхности сферы ($d\omega = \sin \theta d\theta d\phi$), $r > 0$ — фиксированное число, и рассмотрим задачу минимизации

$$\begin{aligned} \mu(f) &\rightarrow \min. \\ f &\in H^{2r}(\Omega) \\ f(\eta_i) &= y_i, \quad i \in 1 : N \end{aligned} \tag{16.1}$$

2. Перейдем к определению класса $H^{2r}(\Omega)$ и r -й степени оператора $-\Delta_\xi$. Будем использовать разложение функции $f \in L_2(\Omega)$ в ряд Фурье по сферическим функциям

$$f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{nm} S_{nm}(\xi). \tag{16.2}$$

Здесь $S_{nm}(\xi) = Y_n^m(\xi)/\|Y_n^m\|$, Y_n^m — обычные сферические функции, образующие полную ортогональную систему на сфере (см. [7, с. 383]), $\|Y_n^m\|$ — их норма в $L_2(\Omega)$. При этом справедливо уравнение замкнутости (формула Парсеваля)

$$\|f\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{nm}^2.$$

Сферические функции Y_n^m , а также S_{nm} являются собственными функциями оператора $-\Delta_\xi$, соответствующими собственному значению $\lambda_n = n(n+1)$ (см. [7, с. 385]).

Если считать f достаточно гладкой, а r — целым, то

$$(-\Delta_\xi)^r f(\xi) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \lambda_n^r a_{nm} S_{nm}(\xi). \tag{16.3}$$

Правая часть (16.3) имеет смысл и при дробных r . Введем класс функций

$$H^{2r}(\Omega) = \left\{ f \in L_2(\Omega) \mid \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \lambda_n^{2r} a_{nm}^2 < \infty \right\}. \quad (16.4)$$

Если $f \in H^{2r}(\Omega)$, то ряд (16.3) сходится в $L_2(\Omega)$ и его сумма является элементом $L_2(\Omega)$. Поэтому можно определить оператор $T = (-\Delta_{\xi})^r$ из $H^{2r}(\Omega)$ в $L_2(\Omega)$ по формуле (16.3).

Установим два свойства оператора $(-\Delta_{\xi})^r$.

Свойство 16.1. Для любой $f \in H^{2r}(\Omega)$ и $r > 1/2$ ряд Фурье (16.2) сходится на Ω равномерно, и поэтому сумма этого ряда является функцией, непрерывной на Ω .

Доказательство. Нам потребуется формула сложения для полиномов Лежандра (см. [7, с. 384—386]):

$$P_n(\xi\eta) = \frac{4\pi}{2n+1} \sum_{m=-n}^n S_{nm}(\xi) S_{nm}(\eta), \quad \xi, \eta \in \Omega, \quad (16.5)$$

где P_n — полином Лежандра, нормированный условием $P_n(1) = 1$, а $\xi\eta = \xi_1\eta_1 + \xi_2\eta_2 + \xi_3\eta_3$ — скалярное произведение векторов $\xi = (\xi_1, \xi_2, \xi_3)$ и $\eta = (\eta_1, \eta_2, \eta_3)$.

При $\eta = \xi$ из (16.5) получим:

$$\sum_{m=-n}^n S_{nm}^2(\xi) = \frac{2n+1}{4\pi} P_n(1) = \frac{2n+1}{4\pi}. \quad (16.6)$$

Теперь можно дать оценку частичных сумм ряда (16.2):

$$|a_{nm} S_{nm}(\xi)| \leq a_{nm}^2 \lambda_n^{2r} + \frac{S_{nm}^2(\xi)}{\lambda_n^{2r}},$$

где $\lambda_n = n(n+1)$, и в силу (16.6)

$$\sum_{m=-n}^n |a_{nm} S_{nm}(\xi)| \leq \sum_{m=-n}^n a_{nm}^2 \lambda_n^{2r} + \frac{2n+1}{4\pi \lambda_n^{2r}} = : A_n.$$

По определению класса (16.4) и в силу неравенства $4r - 1 > 1$ ряд $\sum_{n=1}^{\infty} A_n$ сходится, поэтому ряд (16.2) сходится равномерно на Ω .

Свойство 16.2. Если $f \in H^{2r}(\Omega)$, $r > 1/2$, и $(-\Delta_{\xi})^r f = 0$ почти всюду на Ω , то f является константой.

Действительно, в силу (16.3) и равенства Парсеваля

$$\|(-\Delta_{\xi})^r f\|^2 = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \lambda_n^{2r} a_{nm}^2 = 0.$$

Отсюда $a_{nm} = 0$ при $n > 0$ и $f \equiv a_{00} S_{00}(\xi) = a_{00}/\sqrt{4\pi}$.

Предположим, что $r > 1/2$, и будем решать задачу (16.1), которую можно переписать в виде:

$$\begin{aligned} \|(-\Delta_{\xi})^r f\|^2 \rightarrow \min. \\ f \in H^{2r}(\Omega) \\ f(\eta_i) = y_i, \quad i \in 1 : N \end{aligned} \quad (16.7)$$

Эта задача включается в общую схему § 1. Роль гильбертова пространства H играет $L_2(\Omega)$, $\mathcal{H} = H^{2r}(\Omega)$, $T = (-\Delta_{\xi})^r$, а функционалы $L_i(f)$ определяются формулой $L_i(f) = f(\eta_i)$, $i \in 1 : N$.

3. Для решения задачи (16.7) нужно построить функцию Грина оператора $(-\Delta_{\xi})^{2r}$. Положим

$$G(\xi, \eta) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{1}{\lambda_n^{2r}} S_{nm}(\xi) S_{nm}(\eta). \quad (16.8)$$

В силу формулы сложения (16.5)

$$G(\xi, \eta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{\lambda_n^{2r}} P_n(\xi\eta).$$

Поскольку при выбранной нормировке полиномов Лежандра $|P_n(x)| \leq 1$ при $x \in [-1, 1]$ и $r > 1/2$, то ряд сходится равномерно на $\Omega \times \Omega$.

Покажем, что при фиксированном η функция $G(\xi, \eta)$ принадлежит классу $H^{2r}(\Omega)$. Действительно, по определению (16.8), ее коэффициенты Фурье даются формулой

$$g_{00} = 0, \quad g_{nm} = \frac{S_{nm}(\eta)}{\lambda_n^{2r}} \quad \text{при } n > 0,$$

и с учетом (16.6) имеем:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \lambda_n^{2r} g_{nm}^2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^{2r}} \sum_{m=-n}^n S_{nm}^2(\eta) \leq \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n^{2r}} \frac{2n+1}{4\pi} < \infty,$$

так как $4r - 1 > 1$.

Вычислим $(-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta)$. Согласно (16.3),

$$(-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{\lambda_n^r}{\lambda_n^{2r}} S_{nm}(\eta) S_{nm}(\xi). \quad (16.9)$$

Л е м м а 16.1. Зафиксируем $\eta \in \Omega$. Для любой функции $f \in H^{2r}(\Omega)$ справедливо представление

$$f(\eta) = \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} f(\xi) d\omega + \int_{\Omega} (-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta) (-\Delta_{\xi})^r f(\xi) d\omega(\xi). \quad (16.10)$$

Доказательство. По определению, оператор

$$(-\Delta_{\xi})^r f(\xi) = \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \lambda_n^r a_{nm} S_{nm}(\xi), \quad (16.11)$$

где a_{nm} — коэффициенты Фурье функции f (коэффициенты ряда (16.2)). Чтобы вычислить второй интеграл в (16.10), можно перемножить коэффициенты Фурье рядов (16.9) и (16.11):

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta) (-\Delta_{\xi})^r f(\xi) d\omega(\xi) &= \sum_{n=1}^{\infty} \sum_{m=-n}^n \frac{S_{nm}(\eta)}{\lambda_n^r} \lambda_n^r a_{nm} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{m=-n}^n a_{nm} S_{nm}(\eta) - a_{00} S_{00}(\eta) = f(\eta) - \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} f(\xi) d\omega(\xi). \end{aligned}$$

Здесь мы воспользовались тем, что ряд Фурье функции $f \in H^{2r}(\Omega)$ сходится к $f(\eta)$ в каждой точке η (см. свойство 16.1). Лемма доказана.

4. Натуральным сферическим сплайном будем называть функцию

$$S(\xi) = c + \sum_{k=1}^N d_k G(\xi, \eta_k)$$

при условии, что $\sum_{k=1}^N d_k = 0$.

Установим ключевое тождество.

Лемма 16.2. Для любого натурального сплайна $S(\xi)$ и любой функции $f \in H^{2r}(\Omega)$ справедливо равенство

$$\int_{\Omega} (-\Delta_{\xi})^r S(\xi) (-\Delta_{\xi})^r f(\xi) d\omega(\xi) = \sum_{k=1}^N d_k f(\eta_k). \quad (16.12)$$

Доказательство. Используя формулу (16.10), имеем:

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} (-\Delta_{\xi})^r S(\xi) (-\Delta_{\xi})^r f(\xi) d\omega(\xi) &= \\ &= \sum_{k=1}^N d_k \int_{\Omega} (-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta_k) (-\Delta_{\xi})^r f(\xi) d\omega(\xi) = \\ &= \sum_{k=1}^N d_k \left[f(\eta_k) - \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega} f(\xi) d\omega(\xi) \right] = \sum_{k=1}^N d_k f(\eta_k). \end{aligned}$$

Мы учли условие $\sum_{k=1}^N d_k = 0$, входящее в определение натурального сплайна. Лемма доказана.

Теперь можно доказать разрешимость интерполяционной задачи для натуральных сплайнов.

Теорема 16.1. Пусть точки $\eta_1, \dots, \eta_N \in \Omega$ попарно различны. Тогда интерполяционная задача

$$S(\eta_i) = y_i, \quad i \in 1 : N,$$

однозначно разрешима при любых y_i .

Доказательство. Пусть c и d_k удовлетворяют однородной системе

$$\begin{aligned} c + \sum_{k=1}^N d_k G(\eta_i, \eta_k) &= 0, \quad i \in 1 : N, \\ \sum_{k=1}^N d_k &= 0. \end{aligned} \tag{16.13}$$

Тогда $S(\eta_i) = 0$ и в силу (16.12) (подставляем вместо f сплайн S) получим

$$\int_{\Omega} [(-\Delta_{\xi})^r S(\xi)]^2 d\omega(\xi) = 0,$$

а тогда

$$(-\Delta_{\xi})^r S(\xi) = \sum_{k=1}^N d_k [(-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta_k)] = 0 \tag{16.14}$$

для почти всех $\xi \in \Omega$. По формулам (16.9) и (16.5) получим:

$$(-\Delta_{\xi})^r G(\xi, \eta) = \frac{1}{4\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{\lambda_n^r} P_n(\xi\eta).$$

Отсюда из (16.14) имеем:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{2n+1}{\lambda_n^r} \sum_{k=1}^N d_k P_n(\xi\eta_k) = 0. \tag{16.15}$$

При различных n слагаемые ряда (16.15) попарно ортогональны, поэтому каждое слагаемое равно нулю на Ω :

$$\sum_{k=1}^N d_k P_n(\xi\eta_k) = 0 \quad \text{на } \Omega, \quad n = 1, 2, \dots \tag{16.16}$$

Соотношение (16.16) выполняется и при $n = 0$. Поскольку x^n можно линейно выразить через полиномы Лежандра $P_0(x), \dots, P_n(x)$, то

$$\sum_{k=1}^N d_k (\xi\eta_k)^n = 0 \quad \text{на } \Omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Положим $\xi = \eta_1$. Тогда $\eta_1\eta_1 = 1$, $\eta_1\eta_k \leq 1$ при $k \in 2 : N$ и

$$d_1 + \sum_{k=2}^N d_k (\eta_1\eta_k)^n = 0, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Если среди скалярных произведений $\eta_1 \eta_k$ нет -1 , то при $n \rightarrow \infty$ получим, что $d_1 = 0$. Если же, скажем, $\eta_1 \eta_2 = -1$, то $|\eta_1 \eta_k| < 1$ при $k \in 3 : N$, и, переходя к пределу по n четным и нечетным, получим: $d_1 + d_2 = 0$, $d_1 - d_2 = 0$. Отсюда $d_1 = 0$.

Аналогично можно показать, что $d_2 = \dots = d_N = 0$, а тогда из (16.13) следует, что $c = 0$. Итак, однородная система (16.13) имеет нулевое решение. Теорема доказана.

Обозначим S_* натуральный сплайн, такой, что $S_*(\eta_i) = y_i$, $i \in 1 : N$.

Теорема 16.2. Единственным решением задачи (16.7) является S_* .

Доказательство. Для того чтобы S_* был решением (16.7), по теореме 1.1, достаточно выполнения условия ортогональности

$$\int_{\Omega} (-\Delta_{\xi})^r S_*(\xi) (-\Delta_{\xi})^r h(\xi) d\omega(\xi) = 0 \quad \text{для всех } h \in N(I),$$

т. е. для всех $h \in H^{2r}(\Omega)$, таких, что $h(\eta_i) = 0$, $i \in 1 : N$. Это условие выполняется в силу ключевого тождества (16.12).

Проверим условие единственности

$$N((-\Delta_{\xi})^r) \cap N(I) = \{0\}.$$

Если $(-\Delta_{\xi})^r h = 0$, $h \in H^{2r}(\Omega)$, то, по свойству 16.2, функция h постоянна, а если при этом $h \in N(I)$, то $h = 0$. Теорема доказана.

Аналог оператора Бельтрами может быть определен не только на сфере, но и на других многообразиях. По описанной в этом параграфе схеме на таких многообразиях могут быть определены натуральные сплайны.

§ 17. Сглаживание данных с помощью B -сплайновых конечных элементов

На практике часто возникает следующая задача. В точках $X_i = (x_i, y_i)$ на плоскости заданы значения z_i изучаемой функции с некоторой погрешностью. Требуется приближенно представить эту зависимость гладкой функцией $v(x, y)$. Эта задача уже рассматривалась в § 6, 7.

В данном параграфе функция $v(x, y)$ является линейной комбинацией прямоугольных конечных элементов $B_i(x) B_j(y)$. При решении задачи сглаживания возникает необходимость в вычислении интегралов от произведений B -сплайнов и их производных. Обычно такие интегралы вычислялись с использованием квадратурной формулы Гаусса. В. п. 2 предложен новый подход к вычислению таких интегралов. В п. 3 приводятся теоретические основы алгоритма решения задачи сглаживания, аналогичного алгоритму Райнша [51, 52].

1. Решение задачи сглаживания с помощью B -сплайновых конечных элементов. Пусть в прямоугольнике $\Omega = [a, b] \times [c, d]$

определенена функция u , в Ω заданы точки $X_i = (x_i, y_i)$, $i \in 1 : N$. В них измерены зашумленные значения функции $z_i = u(X_i) + e_i$, где e_i — случайные ошибки со средним 0 и дисперсией ε^2 .

Задача сглаживания заключается в минимизации функционала

$$J_m(v) = \sum_{k=0}^m C_m^k \int_{\Omega} \left(\frac{\partial^m v}{\partial x^k \partial y^{m-k}} \right)^2 dx dy \quad (17.1)$$

при ограничении

$$R(v) = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (v(X_i) - z_i)^2 \leq \varepsilon^2. \quad (17.2)$$

В случае большого N часто применяется метод конечных элементов. Для определения B -сплайновых конечных элементов введем на $[a, b]$ сетку точек $a = t_1 < t_2 < \dots < t_{p+1} = b$. Зададим степень сплайнов $r \geq m$. Как обычно [3, 21], сплайны $B_i(t)$ определим с помощью разделенных разностей:

$$B_i(x) = (t-x)_+^r [t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+r+1}] = \sum_{j=i}^{i+r+1} \frac{(t_j - x)_+^r}{\omega_i(t_j)}, \quad (17.3)$$

где $i \in 1 : p-r$, $\omega_i(t) = (t-t_i) \dots (t-t_{i+r+1})$. Хорошо известно, что $B_i(t) > 0$ при $t \in (t_i, t_{i+r+1})$ и $B_i(t) = 0$ при остальных t .

Аналогично с помощью сетки $c = \tau_1 < \tau_2 < \dots < \tau_{q+1} = b$ введем сплайны $B_j(y)$, $j \in 1 : q-r$. Функцию $B_i(x) B_j(y)$ рассматриваем как конечный элемент с прямоугольным носителем. В качестве допустимых функций v будем рассматривать функции

$$v(x, y) = \sum_{i=1}^{p-r} \sum_{j=1}^{q-r} a_{ij} B_i(x) B_j(y).$$

Конечно, $v(x, y) = 0$ на границе прямоугольника Ω , поэтому будем считать, что граница Ω отодвинута от точек X_i .

Подставим выражение $v(x, y)$ в (17.1). Получим задачу минимизации квадратичной формы

$$\sum_{i, \mu=1}^{p-r} \sum_{j, \nu=1}^{q-r} \Phi_{ij\mu\nu} a_{ij} a_{\mu\nu},$$

где

$$\Phi_{ij\mu\nu} = \sum_{k=0}^m C_m^k \int_a^b B_i^{(k)}(x) B_{\mu}^{(k)}(x) dx \int_c^d B_j^{(m-k)}(y) B_{\nu}^{(m-k)}(y) dy.$$

Такой подход предлагался в [3, 57], в нем надо уметь вычислять интегралы от произведений B -сплайнов и их производных. Необходимость этого возникает при решении многих задач математической физики методом B -сплайновых конечных элементов.

2. Вычисление интегралов от произведений B -сплайнов и их производных. Будем рассматривать B -сплайны $B_i(x)$ степени r , построенные по системе узлов $a = t_1 < t_2 < \dots < t_{p+1} = b$. Зададим $k, l \in 0 : r$. Требуется вычислить элементы матрицы $H^{k,l}$, заданные формулой

$$H^{k,l}[i,j] = \int_a^b B_i^{(k)}(x) B_j^{(l)}(x) dx, \quad i, j \in 1 : p - r.$$

Введем матрицу $U = U[1:p-r, 1:p+1]$, i -я строка которой определяется так:

$$U[i,j] = \begin{cases} r! [\omega'_i(t_j)]^{-1} & \text{при } j \in i : i+r+1, \\ 0 & \text{при остальных } j \in 1 : p+1. \end{cases}$$

Введем также матрицу $G^{(k+l)} = G^{(k+l)}[1:p+1, 1:p+1]$ с элементами

$$G^{(k+l)}[i,j] = (2r+1) 2r \dots (2r+2-k-l) (t_i - t_j)_+^{2r+1-k-l}.$$

Теорема 17.1. Для любых $k, l \in 0 : r$ справедливо равенство

$$H^{k,l} = (-1)^k \kappa U G^{(k+l)} U^\top, \quad (17.4)$$

где $\kappa = (-1)^{r+1}/(2r+1)!$, U^\top — транспонированная матрица U .

Доказательство. Для произвольной функции S , имеющей произведную порядка $r-k+1$, запишем формулу Тейлора:

$$S(t) = \sum_{v=0}^{r-k} S^{(v)}(a) \frac{(t-a)^v}{v!} + \frac{1}{(r-k)!} \int_a^b (t-x)_+^{r-k} S^{(r-k+1)}(x) dx.$$

От обеих частей этого равенства возьмем разделенную разность по узлам $t_i, t_{i+1}, \dots, t_{i+r+1}$:

$$S[t_i, \dots, t_{i+r+1}] = \frac{1}{(r-k)!} \int_a^b \sum_{j=i}^{i+r+1} [\omega'_i(t_j)]^{-1} (t_j - x)_+^{r-k} S^{(r-k+1)}(x) dx.$$

В то же время, дифференцируя (17.3), получим:

$$B_i^{(k)}(x) = (-1)^k r(r-1) \dots (r-k+1) \sum_{j=l}^{i+r+1} [\omega'_i(t_j)]^{-1} (t_j - x)_+^{r-k}.$$

Отсюда

$$S[t_i, \dots, t_{i+r+1}] = \frac{(-1)^k}{r!} \int_a^b B_i^{(k)}(x) S^{(r-k+1)}(x) dx. \quad (17.5)$$

Возьмем произвольный вектор $h = h[1:p-r]$. Положим $d = U^\top h$. Рассмотрим функцию

$$S(x) = \sum_{j=1}^{p+1} d_j (x - t_j)_+^{2r+1}.$$

Она имеет кусочно-постоянную производную порядка $2r + 1$, а $(r + 1)$ -я производная от нее имеет вид:

$$\begin{aligned} S^{(r+1)}(x) &= \frac{(2r+1)!}{r!} \sum_{j=1}^{p+1} d_j (x - t_j)_+^r = \\ &= \frac{(2r+1)!}{r!} \sum_{i=1}^{p-r} h_i \sum_{j=1}^{p+1} U[i, j] (x - t_j)_+^r = \\ &= (2r+1)! \sum_{i=1}^{p-r} h_i \sum_{j=i}^{i+r+1} [\omega'_i(t_j)]^{-1} (x - t_j)_+^r. \end{aligned}$$

По формуле $(x - t_j)_+^r = (x - t_j)^r + (-1)^{r+1} (t_j - x)_+^r$ найдем:

$$S^{(r+1)}(x) = \kappa^{-1} \sum_{i=1}^{p-r} h_i B_i(x).$$

Подставим в (17.5) вместо S производную $S^{(k+l)}$. Тогда

$$\begin{aligned} r! S^{(k+l)}[t_1, \dots, t_{i+r+1}] &= (-1)^k \int_a^b B_i^{(k)}(x) S^{(r+l+1)}(x) dx = \\ &= (-1)^k \int_a^b B_i^{(k)}(x) \left[\kappa^{-1} \sum_{j=1}^{p-r} h_j B_j^{(l)}(x) \right] dx. \end{aligned}$$

Выразим разделившую разность через значения $g_j = S^{(k+l)}(t_j)$. Тогда получим

$$r! \sum_{j=l}^{i+r+1} [\omega'_j(t_j)]^{-1} g_j = (-1)^k \kappa^{-1} \sum_{j=1}^{p-r} H^{k, l}[i, j] h_j$$

или, в векторной форме,

$$Ug = (-1)^k \kappa^{-1} H^{k, l} h. \quad (17.6)$$

Равенства $S^{(k+l)}(t_i) = g_i$, $i \in 1 : p + 1$, можно записать в виде

$$(2r+1) 2r \dots (2r+2-k-l) \sum_{j=1}^{p+1} d_j (t_i - t_j)_+^{2r+1-k-l} = g_i, \quad i \in 1 : p + 1,$$

или в виде $G^{(k+l)}d = g$. Отсюда

$$G^{(k+l)} U^T h = g, \quad U G^{(k+l)} U^T h = Ug.$$

Подставив в (17.6), имеем:

$$U G^{(k+l)} U^T h = (-1)^k \kappa^{-1} H^{k, l} h.$$

В силу произвольности вектора h получаем утверждение теоремы.

Замечание 17.1. Формулу (17.4) можно использовать для вычисления элементов матрицы $H^{k, l}$. Отметим, что матрица U имеет только $r + 2$ ненулевые диагонали, а матрица $G^{(k+l)}$ является нижней треугольной: $G^{(k+l)}[i, j] = 0$ при $j \geq i$.

В случае, когда узлы являются равноотстоящими ($t_{i+1} - t_i = h$), матрица $H^{k,k}$ является теплицевой, т. е. в ней каждая из диагоналей, параллельных главной, состоит из одинаковых элементов. $H^{k,k}$ — симметричная матрица с $2r + 1$ ненулевыми диагоналями, поэтому она полностью определяется $r + 1$ элементами первой строки $H^{k,k} [1, j]$, $j \in 1 : r + 1$.

Укажем алгоритм вычисления этих элементов, использующий целочисленные массивы U, G, UG, HK . Первая строка матрицы U , введенной ранее, имеет вид

$$\frac{(-1)^{r+1}}{(r+1) h^{r+1}} (U[1], U[2], \dots, U[r+2], 0, 0, \dots),$$

где $U[i] = (-1)^{i-1} C_{r+1}^{i-1}$, $i \in 1 : r + 2$. Матрица

$$G^{(2k)} = \frac{(2r+1)!}{(2r-2k+1)!} h^{2r-2k+1} \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ G[1] & 0 & 0 & \dots \\ G[2] & G[1] & 0 & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ G[r+1] & G[r] & G[r-1] & \dots \end{bmatrix},$$

где $G[i] = i^{2r-2k+1}$, $i \in 1 : r + 1$. Далее вычисляем

$$UG[j] = \sum_{v=j+1}^{r+2} U[v] G[v-j], \quad j \in 1 : r + 1,$$

$$HK[j] = \sum_{v=j}^{r+1} UG[v] U[v-j+1], \quad j \in 1 : r + 1.$$

Окончательно получаем, что

$$H^{k,k} [1, j] = HK[j] \frac{(-1)^{r+1+k}}{(r+1)^2 h^{2k+1} (2r-2k+1)!}, \quad j \in 1 : r + 1.$$

3. Алгоритм решения задачи сглаживания. Вернемся к задаче сглаживания (17.1)–(17.2), где v является линейной комбинацией конечных элементов $B_\mu(x) B_v(y)$, $\mu \in 1 : p - r$, $v \in 1 : q - r$. Занумеруем их от 1 до $n = (p - r)(q - r)$ и введем обозначение

$$w_i(x, y) = B_\mu(x) B_v(y), \quad \text{где } i = (\mu - 1)(q - r) + v.$$

Подставим $v = \sum_{i=1}^n a_i w_i$ в (17.1) и (17.2). Получим задачу

$$(Ba, a) \rightarrow \min, \quad (17.7)$$

$$\frac{1}{N} \|Wa - z\|^2 \leq \varepsilon^2, \quad (17.8)$$

где B, W — матрицы с элементами

$$B_{ij} = \sum_{k=0}^m C_m^k \int \frac{\partial^m w_i}{\partial x^k \partial y^{m-k}} \frac{\partial^m w_j}{\partial x^k \partial y^{m-k}} dx dy, \quad i, j \in 1 : n,$$

$$W_{ij} = w_j(X_i), \quad i \in 1 : N, \quad j \in 1 : n.$$

При вычислении интегралов используются результаты п. 2.
 Матрица B является положительно определенной. Действительно, $(Ba, a) \geq 0$ для всех $a \in \mathbb{R}^n$. Допустим, что $(Ba, a) = 0$. Тогда все производные порядка m от функции $v = \sum_{i=1}^n a_i w_i$ равны нулю, т. е. функция v является полиномом степени $\leq m - 1$, что возможно, если только $a_1 = a_2 = \dots = a_n = 0$. Значит, $(Ba, a) > 0$ для всех $a \neq 0$.

Ограничение (17.8) перепишем в виде

$$(Ha, a) - 2(a, f) + \gamma^2 \leq \varepsilon^2, \quad (17.9)$$

где

$$H = \frac{1}{N} W^T W, \quad f = \frac{1}{N} W^T z, \quad \gamma^2 = \frac{1}{N} \|z\|^2.$$

Мы хотим, чтобы матрица H была положительно определенной. Поэтому предположим, что столбцы матрицы W линейно независимы. Из этого предположения следует, что

$$n \leq N, \quad (Ha, a) = \frac{1}{N} \|Wa\|^2 > 0 \quad \forall a \neq 0.$$

Параметр ε в задаче (17.8), (17.9) имеет два критических значения. Во-первых, при $\varepsilon \geq \gamma$ решением задачи (17.8), (17.9), очевидно, является $a = 0$. Во-вторых, положим

$$\delta^2 = \min_{a \in \mathbb{R}^n} \left\{ \frac{1}{N} \|Wa - z\|^2 \right\}. \quad (17.10)$$

Это обычай задача о приближении данных z_i , $i \in 1 : N$, функциями $v = \sum_{i=1}^n a_i w_i$ по методу наименьших квадратов. Решение задачи (17.10) находится из системы $Ha = f$, т. е. $a^* = H^{-1}f$. Отсюда

$$\delta^2 = \gamma^2 - (a^*, f) = \gamma^2 - (H^{-1}f, f). \quad (17.11)$$

Если $\varepsilon < \delta$, то, очевидно, нет a , удовлетворяющих (17.8). Поэтому при $\varepsilon \leq \delta$ в качестве сглаживающей поверхности будем брать $v = \sum_{i=1}^n a_i^* w_i$.

В основном случае $\delta < \varepsilon < \gamma$ рассмотрим вспомогательную задачу с параметром $\alpha > 0$

$$L(a) := (Ha, a) - 2(a, f) + \gamma^2 + \alpha(Ba, a) \rightarrow \min_{a \in \mathbb{R}^n}$$

Решение $a = a(\alpha)$ находится из системы

$$(H + \alpha B)a = f.$$

Введем функцию

$$\varphi^2(\alpha) = \frac{1}{N} \|Wa(\alpha) - z\|^2. \quad (17.12)$$

Справедлива следующая лемма (аналогичное утверждение см. в [51]).

Л е м м а 17.1. Пусть α является корнем уравнения
 $\varphi(\alpha) = \varepsilon$.

Тогда $a(\alpha)$ является единственным решением задачи (17.7), (17.8).
Доказательство. $a(\alpha)$ удовлетворяет ограничению (17.8):

$$\frac{1}{N} \|Wa(\alpha) - z\|^2 = \varepsilon^2.$$

Допустим, что некоторый вектор a удовлетворяет неравенствам

$$(Ba, a) \leq (Ba(\alpha), a(\alpha)), \quad \frac{1}{N} \|Wa - z\|^2 \leq \varepsilon^2.$$

Тогда, очевидно,

$$L(a) \leq L(a(\alpha)).$$

Поскольку $a(\alpha)$ — единственная точка минимума функции L , то $a = a(\alpha)$. Лемма доказана.

Итак, нужно решать уравнение $\varphi(\alpha) = \varepsilon$. Нам потребуются некоторые свойства функции $\varphi(\alpha)$, для чего выведем формулу для $\varphi'(\alpha)$. Имеем:

$$\varphi^2(\alpha) = (Ha, a) - 2(a, f) + \gamma^2.$$

Здесь и в дальнейшем вместо $a(\alpha)$ пишем просто a . Как и в [3], рассмотрим обобщенную задачу на собственные значения

$$Bv_i = \lambda_i Hv_i.$$

Здесь $\lambda_i > 0$, $(Hv_i, v_j) = \delta_{ij}$, $i, j \in 1 : n$. Разложим f по векторам Hv_i :

$$f = \sum_{i=1}^n b_i Hv_i. \quad (17.13)$$

Вычислим вектор $a = (H + \alpha B)^{-1} f$:

$$a = \sum_{i=1}^n \frac{b_i}{1 + \alpha \lambda_i} v_i.$$

Тогда в силу H -ортогональности системы $\{v_i\}$

$$\begin{aligned} \varphi^2(\alpha) &= \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{(1 + \alpha \lambda_i)^2} - 2 \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{1 + \alpha \lambda_i} + \gamma^2 = \\ &= \sum_{i=1}^n b_i^2 \left[\frac{1}{1 + \alpha \lambda_i} - 1 \right]^2 - \sum_{i=1}^n b_i^2 + \gamma^2. \end{aligned}$$

Из (17.11) и (17.13) легко получаем, что

$$\delta^2 = \gamma^2 - (H^{-1}f, f) = \gamma^2 - \sum_{i=1}^n b_i^2.$$

Отсюда окончательная формула для $\varphi(\alpha)$ имеет вид:

$$\varphi^2(\alpha) = \sum_{i=1}^n b_i^2 \frac{\alpha^2 \lambda_i^2}{(1 + \alpha \lambda_i)^2} + \delta^2.$$

Мы видим, что $\varphi(\alpha)$ строго возрастает от $\varphi(0) = \delta$ до $\varphi(\infty) = \gamma$. Поэтому при $\delta < \varepsilon < \gamma$ уравнение $\varphi(\alpha) = \varepsilon$ имеет корень, и притом единственный.

Следуя рекомендациям [51], введем функцию

$$\Psi^2(\beta) = \varphi^2\left(\frac{1}{\beta}\right) = \sum_{i=1}^n \frac{b_i^2 \lambda_i^2}{(\beta + \lambda_i)^2} + \delta^2. \quad (17.14)$$

Она убывает от $\Psi(0) = \gamma$ до $\Psi(\infty) = \delta$ и является выпуклой ($\Psi''(\beta) > 0$). В [52] рекомендуется решать уравнение

$$\frac{1}{\Psi(\beta)} = \frac{1}{\varepsilon}$$

методом Ньютона, начиная с начального приближения $\beta_0 = 0$:

$$\beta_{k+1} = \beta_k - \frac{\Psi^2(\beta_k)}{\varepsilon} \frac{\Psi(\beta_k) - \varepsilon}{\Psi'(\beta_k) \cdot \Psi''(\beta_k)}, \quad k = 0, 1, \dots$$

Покажем, как вычислять $\Psi(\beta) \cdot \Psi'(\beta)$. Имеем:

$$\Psi(\beta) \cdot \Psi'(\beta) = -\alpha^2 \varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha), \quad \text{где } \alpha = \frac{1}{\beta}.$$

Дифференцируя (17.12) по α , получаем:

$$\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha) = \frac{1}{N} (Wa, Wa - z) = (a', Ha - f) = -\alpha (a', Ba).$$

Вектор a' находится из системы $(H + \alpha B) a' = -Ba$, т. е. $a' = -(H + \alpha B)^{-1} Ba$.

В данной ситуации удобно использовать метод Холецкого. При данном $\beta > 0$ положим $\alpha = 1/\beta$ и найдем разложение $H + \alpha B = L \cdot L^T$, где L — нижняя треугольная матрица. Далее получим решение системы $Lv = f$, а затем найдем a из системы $L^T a = v$. Для $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha)$ имеем формулу $\varphi(\alpha) \cdot \varphi'(\alpha) = -\alpha ((LL^T)^{-1} Ba, Ba) = \alpha \|L^{-1} Ba\|^2 = \alpha \|v\|^2$, где v — решение уравнения $Lv = Ba$. На нулевом шаге метода Ньютона $\Psi(0) = \gamma$. Из (17.13) и (17.14) следует, что

$$\begin{aligned} \Psi(0) \cdot \Psi'(0) &= -\sum_{i=1}^n \frac{b_i^2}{\lambda_i} = -\left(\sum_{i=1}^n \frac{b_i}{\lambda_i} v_i, \sum_{j=1}^n b_j Hv_j \right) = \\ &= -\left(\sum_{i=1}^n b_i B^{-1} H v_i, f \right) = -(B^{-1} f, f). \end{aligned}$$

ЛИТЕРАТУРА

1. Бернштейн С. Н. Абсолютно монотонные функции//Собр. соч. М.: Изд-во АН СССР, 1952. Т. 1. С. 5—7.
2. Вагер Б. Г., Серков Н. К. Сплайны при решении прикладных задач метеорологии и гидрологии. Л.: Гидрометеоиздат, 1987. 160 с.
3. Василенко В. А. Сплайн-функции: теория, алгоритмы, программы. Новосибирск: Наука, 1983. 216 с.
4. Василенко В. А., Зюзин М. В., Ковалков А. В. Сплайн-функции и цифровые фильтры. Новосибирск: Изд-во ВЦ СО АН СССР, 1984. 156 с.
5. Вершик А. М., Малоземов В. Н., Певный А. Б. Наилучшая кусочно-полиномиальная аппроксимация//Сиб. мат. журн. 1975. Т. 16, № 5. С. 925—938.
6. Вершинин В. В., Завьялов Ю. С., Паевов Н. Н. Экстремальные свойства сплайнов и задача сглаживания. Новосибирск: Наука, 1988. 102 с.
7. Владимиров В. С. Уравнения математической физики. М.: Наука, 1981. 512 с.
8. Волков А. М. Решение практических задач геологии на ЭВМ. М.: Недра, 1980. 224 с.
9. Гавурин М. К., Малоземов В. Н. Экстремальные задачи с линейными ограничениями. Л.: Изд-во ЛГУ, 1984. 176 с.
10. Гельфанд И. М., Шилов Г. Е. Обобщенные функции и действия над ними. М.: ГИФМЛ, 1958. 440 с.
11. Гордонова В. И., Морозов В. А. Численные алгоритмы выбора параметра в методе регуляризации//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1973. Т. 13, № 3. С. 539—545.
12. Гребенников А. И. Метод сплайнов и решение некорректных задач теории приближения. М.: Изд-во МГУ, 1983. 208 с.
13. Демянов В. Ф., Малоземов В. Н. Введение в минимакс. М.: Наука, 1972. 368 с.
14. Завьялов Ю. С., Квасов Б. И., Мирошниченко В. Л. Методы сплайн-функций. М.: Наука, 1980. 352 с.
15. Игнатов М. И. Метод построения сглаживающих сплайнов одной переменной. Сыктывкар, 1988. 19 с. (Препринт Коми научного центра УрО АН СССР. «Автоматизация научных исследований». Вып. 14).
16. Игнатов М. И., Певный А. Б. Аппроксимация геологических поверхностей сглаживающими натуральными сплайнами с учетом элементов залегания//Методы и алгоритмы подсчета запасов нефтяных месторождений: Тр. Ин-та геологии КФАН. Сыктывкар, 1986. С. 20—35.
17. Игнатов М. И., Певный А. Б. Сплайн-аппроксимация плавных поверхностей. Сыктывкар, 1986. 20 с. (Препринт Коми филиала АН СССР. Сер. «Научные доклады». Вып. 149).
18. Игнатов М. И., Певный А. Б. Решение задачи сглаживания экспериментальных данных в многомерном случае//Вопросы теории и практики создания региональных автоматизированных систем: Тр. Коми научного центра УрО АН СССР. Сыктывкар, 1988. С. 94—112.
19. Курант Р., Гильберт Д. Методы математической физики. М.; Л.: ГИТТЛ, 1945. 620 с.
20. Лоран П.-Ж. Аппроксимация и оптимизация. М.: Мир, 1975. 496 с.

21. Малоземов В. Н., Певный А. Б. Полиномиальные сплайны. Л.: Изд-во ЛГУ, 1986. 120 с.
22. Морозов В. А. Регуляризированные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987. 240 с.
23. Певный А. Б. Натуральные сплайны двух и трех переменных//Методы вычислений, вып. 14. Л.: Изд-во ЛГУ, 1985. С. 160—170.
24. Певный А. Б. Об оптимальности некоторых сплайновых алгоритмов//Изв. вузов. Математика. 1986, № 5. С. 6—12.
25. Певный А. Б. Оптимальность сплайнового алгоритма при нахождении максимума одного класса функций многих переменных//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1988. Т. 28, № 1. С. 130—134.
26. Пласкота Л. Оптимальная линейная информация в задаче восстановления глобального максимума вещественной функции//Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1986. Т. 26, № 6. С. 934—938.
27. Смоляк С. А. Оптимальное восстановление функций и связанные с ним геометрические характеристики множеств//Тр. III зимней школы по мат. программированию. М.: Изд-во ЦЭМИ АН СССР, 1971. С. 509—557.
28. Смоляк С. А. Сплайны и их применение//Экономика и мат. методы. 1971. № 2. С. 419—431.
29. Соболев С. Л. Введение в теорию кубатурных формул. М.: Наука, 1974. 808 с.
30. Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике. М.: Наука, 1976. 248 с.
31. Трауб Дж., Вожняковский Х. Общая теория оптимальных алгоритмов. М.: Мир, 1983. 382 с.
32. Треногин В. А. Функциональный анализ. М.: Наука, 1980. 496 с.
33. Уилкинсон Д., Райни К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ: Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976. 392 с.
34. Фокс А., Пратт М. Вычислительная геометрия. М.: Мир, 1982. 304 с.
35. Blumenthal L. M. Theory and application of distance geometry. Oxford: Chelse Publishing, 1953. 348 р.
36. Duchon J. Interpolation des fonctions de deux variables suivant le principe de la flexion des plaques minces//RAIRO Anal. Numer. 1976. Vol. 10, N 12. P. 5—12.
37. Duchon J. Splines minimizing rotation-invariant semi-norms in Sobolev spaces//Lect. Notes in Math. 1977. Vol. 571. P. 85—100.
38. Dyn N., Levin D. Construction of surface spline interpolants of scattered data over finite domains//RAIRO Anal. Numer. 1982. Vol. 16, N 3. P. 201—209.
39. Franke R. Scattered data interpolation: tests of some methods//Mathematics of computation. 1982. Vol. 38, N 157. P. 181—200.
40. Franke R. Smooth interpolation of scattered data by local thin plate splines//Comput. Math. Appl. 1982. Vol. 8, N 4. P. 273—281.
41. Freedman W. On spherical spline interpolation and approximation//Math. Meth. in Appl. Sci. 1981. Vol. 3, N 4. P. 551—575.
42. Golomb M., Weinberger H. Optimal approximation and error bounds//On numerical approximation. Madison, 1959. P. 117—190.
43. Goodman T. N., Lee S. L. Cardinal interpolation by D^m -splines//Proc. Roy. Soc. Edinburgh. 1983. Vol. A94, N 1—2. P. 149—161.
44. Meinguet J. An intrinsic approach to multivariate spline interpolation at arbitrary points//Polinom. a. Spline Approxim.: Proc. NATO Adv. Study Inst. Calgary, 1978; Dordrecht, 1979. P. 163—190.
45. Meinguet J. Multivariate interpolation at arbitrary points made simple//Ztschr. angew. Math. Phys. 1979. Vol. 30, N 2. P. 292—300.
46. Meinguet J. Basic mathematical aspects of surface spline interpolation//Semin. math. appl. et mèc. 1979. N 1. P. 1—10.
47. Meinguet J. Surface spline interpolation: basic theory and computational aspects//Approximation theory and spline functions. Dordrecht, 1984. P. 127—142.
48. Micchelli C. A. Algebraic aspects of interpolation//Approximation theory. Providence, 1986. P. 81—102.

49. *Micchelli C. A.* Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions//*Constr. Approximation*. 1986. Vol. 2. P. 11—22.
50. *Nielson G.* Minimum norm interpolation in triangles//*SIAM J. Numer. Anal.* 1980. Vol. 17, N 1. P. 44—62.
51. *Reinsch C. H.* Smoothing by spline functions//*Numer. Math.* 1967. Vol. 10, N 3. P. 177—183.
52. *Reinsch C. H.* Smoothing by spline functions. II//*Numer. Math.* 1971. Vol. 16, N 5. P. 451—454.
53. *Schoenberg I. J.* Metric spaces and positive definite functions//*Trans. Amer. Math. Soc.* 1938. Vol. 44, N 3. P. 522—536.
54. *Schoenberg I. J.* Spline functions and the problem of graduation//*Proc. Nat. Acad. Sci. USA.* 1964. Vol. 52, N 4. P. 947—949.
55. *Schoenberg I. J.* On best approximation of linear operators//*Indagationes Mathematicae*. 1964. Vol. 26, N 2. P. 155—163.
56. *Utreras F. I.* On generalized cross-validation for multivariate smoothing spline functions//*SIAM J. Sci. Stat. Comput.* 1987. Vol. 8, N 4. P. 630—643.
57. *Vercken C., Potier C.* Surface smoothing with finite elements//*J. Comput. Appl. Math.* 1985. Vol. 12—13. P. 505—509.

СПИСОК ОСНОВНЫХ ОБОЗНАЧЕНИЙ

$m : n$ — множество целых чисел $\{m, m+1, \dots, n\}$
:= — равно по определению

\mathbb{R}^n — n -мерное евклидово пространство векторов $X = (x_1, \dots, x_n)$

$(X, Y) = x_1y_1 + \dots + x_ny_n$ — скалярное произведение векторов X, Y

$\|X\| = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_n^2}$ — норма (длина) вектора $X \in \mathbb{R}^n$

V^T — транспонированная матрица V

$\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ — мультииндекс с неотрицательными целыми компонентами α_i

$|\alpha| = \alpha_1 + \dots + \alpha_n$

$\alpha! = \alpha_1! \alpha_2! \dots \alpha_n!$

$X^\alpha = x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \dots x_n^{\alpha_n}$

$D^\alpha f = \frac{\partial^{|\alpha|} f}{\partial x_1^{\alpha_1} \dots \partial x_n^{\alpha_n}}$ — частная производная функция f порядка $|\alpha|$

\mathcal{P}_{r-1} — множество полиномов от $X \in \mathbb{R}^n$ степени $\leq r - 1$

$\dim \mathcal{P}_{r-1} = \frac{(n+r-1)!}{n! (r-1)!}$ — размерность \mathcal{P}_{r-1}

$C^k(\mathbb{R}^n)$ — класс функций, имеющий непрерывные на \mathbb{R}^n производные до порядка k включительно

$\delta_{ij} = 0$ при $i \neq j$ и $\delta_{ii} = 1$

ОГЛАВЛЕНИЕ

	Стр.
Введение	3
Глава 1	
НАТУРАЛЬНЫЕ СПЛАЙНЫ И СПЛАЙНОВЫЕ АЛГОРИТМЫ	6
§ 1. Общая задача о натуральных сплайнах	6
§ 2. Задача оптимального восстановления функционала на классе элементов	12
§ 3. Сплайновые алгоритмы, их оптимальность и центральность	14
Глава 2	
НАТУРАЛЬНЫЕ СПЛАЙНЫ, ЗАДАННЫЕ НА ВСЕМ ПРОСТРАНСТВЕ	19
§ 4. Фундаментальное решение полигармонического уравнения и теорема С. Л. Соболева о плотности финитных функций	19
§ 5. Натуральные сплайны, заданные на всем пространстве	20
§ 6. Сглаживание данных при помощи натуральных сплайнов	35
§ 7. Численные методы решения задачи сглаживания	41
§ 8. Задание наклонов (производных по направлениям)	63
§ 9. Натуральные сплайны в случае двусторонних ограничений	64
§ 10. Алгоритм построения сплайна в случае двусторонних ограничений	67
§ 11. Построение интерполяционных сплайнов и сплайнов с двусторонними ограничениями по отдельным группам данных	75
Глава 3	
ДРУГИЕ ВИДЫ СПЛАЙНОВ	82
§ 12. Степенные сплайны	82
§ 13. Логарифмические сплайны	91
§ 14. Простейшие натуральные сплайны двух переменных в ограниченной области	93
§ 15. Сплайны Куиса	100
§ 16. Сферические натуральные сплайны	107
§ 17. Сглаживание данных с помощью B -сплайновых конечных элементов	113
Литература	121

Научное издание

**Михаил Иванович Игнатов,
Александр Борисович Певный**

**НАТУРАЛЬНЫЕ СПЛАЙНЫ
МНОГИХ ПЕРЕМЕННЫХ**

*Утверждено к печати
Коми научным центром Уральского отделения
Академии наук СССР*

Художник В. Н. Васильев
Технический редактор О. В. Иванова
Корректор У. В. Емельянова

ИБ № 44502

Сдано в набор 01.02.90. Подписано к печати 28.01.91.
Формат 60×90 $\frac{1}{16}$. Бумага типографская № 2. Гарнитура обыкновенная.
Печать высокая. Усл. печ. л. 8,00. Усл. кр.-отт. 8,24.
Уч.-изд. л. 7,87. Тираж 2950. Тип. зак. № 85. Цена 1 р. 60 к.

Ордена Трудового Красного Знамени издательство «Наука».
Ленинградское отделение.
199034, Ленинград, В-34, Менделеевская линия, 1.

Типография № 6 ордена Трудового Красного Знамени
издательства «Машиностроение»
при Государственном комитете СССР по печати.
193144, Ленинград, ул. Монсеенко, 10.

Ордена Трудового Красного Знамени Первая типография
издательства «Наука».
199034, Ленинград, В-34, 9 линия, 12.

КНИГИ ИЗДАТЕЛЬСТВА «Н А У К А»
МОЖНО ПРЕДВАРИТЕЛЬНО ЗАКАЗАТЬ
В МАГАЗИНАХ КОНТОРЫ «АКАДЕМКНИГА»,
В МЕСТНЫХ МАГАЗИНАХ КНИГОТОРГОВ
ИЛИ ПОТРЕБИТЕЛЬСКОЙ КООПЕРАЦИИ.

*Для получения книг почтой
заказы просим направлять по адресу:*

117393 Москва, ул. Академика Пилюгина, 14, корп. 2,
магазин «Книга—почтой» Центральной конторы «Академкнига»;
252208 Киев, ул. Правды, 80а, магазин «Книга—почтой»;
197345 Ленинград, Петрозаводская ул., 7,
магазин «Книга—почтой» Северо-Западной конторы «Академкнига»

*или в ближайший магазин «Академкнига»,
имеющий отдел «Книга—почтой»*

- 480091 Алма-Ата, ул. Фурманова, 91/97 («Книга—почтой»);
370001 Баку, Коммунистическая ул., 51 («Книга—почтой»);
232600 Вильнюс, ул. Университето, 4 («Книга—почтой»);
690088 Владивосток, Океанский пр., 140 («Книга—почтой»);
320093 Днепропетровск, пр. Гагарина, 24 («Книга—почтой»);
734001 Душанбе, пр. Ленина, 95 («Книга—почтой»);
375002 Ереван, ул. Туманяна, 31;
664033 Иркутск, ул. Лермонтова, 289 («Книга—почтой»);
420043 Казань, ул. Достоевского, 53 («Книга—почтой»);
252030 Киев, ул. Ленина, 42;
252142 Киев, пр. Вернадского, 79;
252025 Киев, ул. Осипенко, 17;
277012 Кишинев, пр. Ленина, 148 («Книга—почтой»);
343900 Краматорск Донецкой обл., ул. Марата, 1 («Книга—почтой»);
660049 Красноярск, пр. Мира, 84;
443002 Куйбышев, пр. Ленина, 2 («Книга—почтой»);
191104 Ленинград, Литейный пр., 57;
199034 Ленинград, Таможенный пер., 2;
194064 Ленинград, Тихорецкий пр., 4;
220012 Минск, Ленинский пр., 72 («Книга—почтой»);
103009 Москва, ул. Горького, 19а;
117312 Москва, ул. Вавилова, 55/7;