

ЭКСТРЕМАЛЬНОЕ СВОЙСТВО КУБИЧЕСКИХ МНОГОЗВЕННИКОВ
 И ЗАДАЧА СГЛАЖИВАНИЯ

Ю.С.Завьялов

Эта статья посвящена применению кубических многозвенников к сглаживанию экспериментальных данных, несущих случайные ошибки. Изучение задачи сглаживания тесно связано с экстремальным свойством кубических многозвенников, поэтому оно включается в обзор работ по рассматриваемой проблеме [1-7].

Экстремальное свойство кубических многозвенников было открыто Холади [1]. Оно состоит в том, что в классе функций $C^2[a, b]$ многозвенник $y = S(x)$ с условием $S'(a) = S'(b) = 0$ дает минимум функционалу $\mathcal{F}[f] = \int_a^b |f''(x)|^2 dx$. Это свойство является аналогом принципа минимуме потенциальной энергии упругого стержня в равновесии [8]. В дальнейшем оно было полностью изучено в работах Уолла, Альберга и Нильсона [2, 3] для более широкого класса функций, чем в [1], и его подклассов. Результаты этих работ с добавлением еще одного случая граничных условий излагаются в § 1.

Идея использования кубических многозвенников для целей сглаживания высказал Шенберг [4], который сформулировал её как задачу минимизации функционала

$$\mathcal{J}[f] = \varepsilon [f] + \sum_{i=0}^N (f(x_i) - y_i^0)^2, \quad \varepsilon > 0.$$

Такой подход является своеобразным видоизменением метода сглаживания Уиттекера [5]. Шёнберг показал, что решением является кубический многозвенник $y = S(x)$ при условиях $S''(a) = S''(b) = 0$. В [6] для этой задачи с дополнительным ограничением предложен алгоритм, правда, без анализа его корректности. Случай многозвенников высших нечетных степеней изучался в работе [7].

В ряде задач, в частности, проектирования форм деталей и агрегатов [8], требуется уметь строить сглаживающий кубический многозвенник с более разнообразными граничными условиями, чем в [4]. Поэтому нами были предприняты исследования и в других случаях. В результате удалось получить решения задачи при условии фиксирования первой производной на одном или обоих концах отрезка, а также в подклассе периодических функций. Таково содержание § 2.

В § 3 излагается алгоритм решения задачи сглаживания. Она во всех вариантах сводится к линейной алгебраической системе с пятидиагональной матрицей. Система решается методом прогонки, для которого выяснены условия устойчивости в виде ограничений на коэффициенты системы. Если эти ограничения не выполняются, то решение можно получить итерационным методом.

§ 1. Экстремальное свойство интерполяционных кубических многозвенников

I. Множестве допустимых функций II. На отрезке вещественной оси $[a, b]$ рассматривается класс функций $\mathcal{H}^2(a, b)$, имеющих абсолютно непрерывную первую производную и суммируемую с квадратом вторую производную.

Пусть отрезок $[a, b]$ разделен на промежутки множеством точек

$$\Delta: a = x_0 < x_1 < \dots < x_i < \dots < x_N = b.$$

Будем рассматривать связанные с таким делением кубические многозвенники $y = S(x)$. Они определяются значениями в точках множества Δ и двумя граничными условиями, которые мы разде-

лили на четыре типа I-IV [9]. И если ранее это деление не диктовалось особой необходимостью, то здесь оно будет вполне оправдано.

В классе функций $\mathcal{H}^2(a, b)$ выделяем подклассы. Функция $f(x)$ есть типа I', если её первые производные обращаются в нуль в точках $x = a$ и $x = b$. Две функции принадлежат одному и тому же подклассу типа I, если их разность типа I'. Аналогично определяются подклассы типа II [3]. Кроме того, мы добавим в рассмотрение подклассы типа I₁, объединяющие функции с заданными значениями первой производной только на одном конце отрезка. Если функция из I₁ имеет на другом конце равное нулю значение второй производной, то она есть типа I - II'. Все периодические функции с периодом $\pi = b - a$ образуют подкласс $\mathcal{H}_\pi^2(a, b)$.

Непериодические кубические многозвенники в классе $\mathcal{H}^2(a, b)$ зависят от $N+3$ параметров, в подклассах типа I₁ от $N+2$, а в подклассах I и II от $N+1$ параметра. Периодические многозвенники зависят от N параметров.

Будем рассматривать функционал

$$\mathcal{J}[f] = \int_a^b |f''(x)|^2 dx, \quad (I.I)$$

где интеграл берется в смысле Лебега ([10], 4.6-15).

ТЕОРЕМА I.I. Пусть на Δ заданы значения y_i . Тогда среди функций $f(x) \in \mathcal{H}^2(a, b)$, интерполирующих множество y_i , кубический многозвенник $S(x)$ типа II минимизирует функционал $\mathcal{J}[f]$ (I.I).

Если функции $f(x)$ принадлежат одному из подклассов: а) типа I, б) типа I₁ или в) $\mathcal{H}_\pi^2(a, b)$, то минимум функционалу дает кубический многозвенник из того же подкласса, причем в случае б) он типа I - II'.

Функция, дающая минимум, единственна в допустимом множестве.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО. Из вида функционала ясно, что он ограничен снизу нулем и, следовательно, существует точная нижняя его граница в условиях теоремы. Покажем, что она достигается в клас-

се $\mathcal{H}^2(a, b)$. Для этого используем прием, часто применяемый при исследовании квадратичных функционалов ([II], гл. 5).

Так как $f(x)$ и $S(x)$ принадлежит классу $\mathcal{H}^2(a, b)$, то можно записать

$$\mathcal{J}[f-S] = \mathcal{J}[f] - \mathcal{J}[S] - 2\mathcal{J}, \quad (I.2)$$

где

$$\mathcal{J} = \int_a^b [f'(x) - S'(x)] S''(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} [f'(x) - S'(x)] S''(x) dx.$$

Интегрируя по частям, получаем

$$\mathcal{J} = \sum_{i=0}^{N-1} \left\{ [f'(x_i) - S'(x_i)] S''(x_i) - S'''(x_{i+1}) [f(x_{i+1}) - S(x_{i+1})] \right\} \Big|_{x_i}^{x_{i+1}},$$

ибо $S'''(x_{i+1})$ — постоянная величина на промежутке $[x_i, x_{i+1}]$. Так как $f(x_i) = S(x_i) + y_i$, а $[f'(x) - S'(x)] S''(x)$ — непрерывная на $[a, b]$ функция, то

$$\mathcal{J} = [f'(x) - S'(x)] S''(x) \Big|_a^b. \quad (I.3)$$

В первой части теоремы $S(x)$ есть типа P' , т.е. $S'(a) = S'(b) = 0$, и потому $\mathcal{J} = 0$. Но тогда из (I.2) имеем, что

$$\mathcal{J}[f] = \mathcal{J}[S] + \mathcal{J}[f-S]. \quad (I.4)$$

Величина $\mathcal{J}[f-S] > 0$, если $f'(x) \neq S'(x)$ на $[a, b]$. Следовательно, минимальное значение функционала достигается при $f'(x) = S'(x)$. Функция $S(x)$, дающая минимум, единственна, так как всякая другая может отличаться от нее линейными членами $f(x) = S(x) + Ax + B$. Но постоянные A и B равны нулю, ибо $f(x_i) = S(x_i)$ ($i = 0, 1, \dots, N$). Первая часть теоремы доказана.

Во второй части множества допустимых функций являются подклассом. Ее утверждения снова следуют из (I.2). Величина \mathcal{J} (I.3) в случаях а) и б) обращается в нуль, так как на концах отрезка либо $f'(x) = S'(x)$, либо $S''(x) = 0$. В периодическом случае $\mathcal{J} = 0$ за счет того, что $[f'(x) - S'(x)] S''(x)$ имеет на концах равные значения. Следовательно, снова приходим к соотношению (I.4), откуда и вытекает утверждения теоремы.

ЗАМЕЧАНИЯ. I. Значение минимума функционала в условиях первой части теоремы не больше, чем во второй, ибо оно отыскивается на более широком множестве функций.

2. Пользуясь выпуклостью функционала $\mathcal{J}[f]$ в классе $\mathcal{H}^2(a, b)$,

можно было бы свести задачу об абсолютном минимуме к нахождению относительного минимума обычными методами вариационного исчисления [II] (гл. 4). Как необходимые условия экстремума можно было бы получить:

а) дифференциальные уравнения дуг экстремали (уравнения Эйлера-Пуассона):

$$\frac{d^2 f^{(i)}(x)}{dx^2} = 0 \quad (i = 0, 1, \dots, N-1);$$

б) условия непрерывности второй производной в точках x_i (условия Вейерштресса-Эрдмана);

в) условия обращения в нуль вторых производных на свободных концах как естественные краевые условия.

Это означает, что экстремальная кривая есть кубический многозвенник. Достаточные условия минимума также выполняются.

3. Теорема I.I для других типов граничных условий, например, в случае задания на концах вторых производных, не верна. Можно показать, что хотя экстремальная кривая и будет состоять из дуг кубических парабол, но непрерывность вторых производных места не имеет и, кроме того, решение не единственно.

§ 2. Задача сглаживания

I. Постановка задачи и единственность решения. В этом параграфе будет рассмотрена задача сглаживания исходной дискретной информации, поставленная в [4]. Исследуем функционал

$$\mathcal{J}_1[f] = \int_a^b |f''(x)|^2 dx + \sum_i \rho_i (f_i - y_i^0)^2, \quad (2.1)$$

где y_i^0 и $\rho_i > 0$ — заданные величины. Суммирование по i производится от 0 до N в непериодических случаях и от 0 до $N-1$ — в периодическом. В [8] нами было указано, из каких соображений можно выбрать величину параметров сглаживания $\epsilon_i = \rho_i^{-1}$. Ставится задача о нахождении минимума функционала $\mathcal{J}_1[f]$. Такой подход представляет компромисс между построением кривой, близкой к заданному множеству y_i^0 ($i = 0, 1, \dots, N$),

и требованием ее гладкости (рис. I).

ТЕОРЕМА 2.1. Пусть на Δ заданы значения y_i^0 . Тогда среди функций $f(x)$ класса $\mathcal{H}^2(a, b)$ кубический многозвенник $y = S(x)$ типа Π' минимизирует функционал $\mathcal{J}_7[f]$ (2.1).

Если функции $f(x)$ принадлежат одному из подклассов: типа I, б) типа I₁ или в) $\mathcal{H}_\Pi^2(a, b)$, то минимум функционалу дает кубический многозвенник из того же подкласса, причем в случае б) он типа I - Π' .

Функция, дающая минимум, единственна в допустимом множестве.

ДОКАЗАТЕЛЬСТВО ведем способом, аналогичным использованному в теореме 1.1. Снова запишем тождество

$$\mathcal{J}_7[f - S] = \mathcal{J}_7[f] - \mathcal{J}_7[S] - 2\mathcal{J}_7, \quad (2.2)$$

где

$$\mathcal{J}_7 = \int_a^b [f''(x) - S''(x)] S''(x) dx + \sum_i \rho_i (f_i - S_i)(S_i - y_i^0).$$

Интегрируя по частям, вместо (1.3) получаем

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_7 = & [f'(x) - S'(x)] S''(x) \Big|_a^b - \sum_{i=0}^{N-1} [f(x) - S(x)] S'''(x_i) \Big|_{x_i}^{x_{i+1}} \\ & + \sum_i \rho_i (f_i - S_i)(S_i - y_i^0). \end{aligned} \quad (2.3)$$

$S(x)$ принадлежит подклассу Π' , т.е. $S''(a) = S''(b) = 0$. В остальном же функция произвольна, и можно подчинить её еще $N+1$ непротиворечивым условиям. Потребуем, чтобы $\mathcal{J}_7 = 0$, для чего приравняем нулю коэффициенты при $(f_i - S_i)$. Это дает соотношения:

$$S'''(x_{i+1}) - S'''(x_{i-1}) = \rho_i (S_i - y_i^0), \quad (2.4)$$

где для периодического случая $i = 0, 1, \dots, N-1$. В непериодических случаях $i = 1, \dots, N-1$, но добавляются два граничных соотношения:

$$\left. \begin{aligned} S'''(x_0+) &= -\rho_0 (S_0 - y_0^0), \\ S'''(x_{N-1}+) &= \rho_N (S_N - y_N^0). \end{aligned} \right\} \quad (2.5)$$

Эти формулы заменяют условия $S_i = y_i^0$ ($i = 0, 1, \dots, N$) в интерполяционной задаче.

Из (2.2) следует равенство

$$\mathcal{J}_7[f] = \mathcal{J}_7[S] + \mathcal{J}_7[f - S], \quad (2.6)$$

аналогичное (1.4). Повторяя сделанные там рассуждения, приходим к выводу, что кубический многозвенник $y = S(x)$ с условиями (2.4) и (2.5) есть единственное решение задачи.

Для доказательства второй части теоремы на $S(x)$ снова налагаем условия (2.4) и (2.5) (в периодическом случае только (2.4)). Тогда величина \mathcal{J}_7 равняется нулю в указанных подклассах, а поэтому имеет место соотношение (2.6) и заключения теоремы.

К теореме 2.1 можно было бы добавить те же замечания, что и к теореме 1.1 предыдущего параграфа.

Задача сглаживания получила решение для сравнительно небольшого числа граничных условий. В задачах интерполирования большой набор граничных условий использовался для того, чтобы возможно лучше приблизить заданную функцию. Здесь же известны лишь значения функции в точках, причем со случайными ошибками. Поэтому можно обойтись и меньшим числом типов граничных условий.

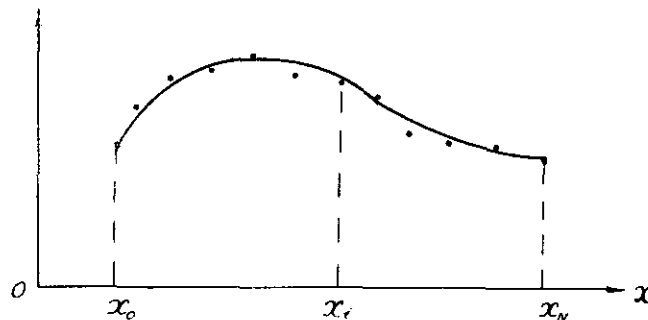


Рис. I.

2. Система уравнений и существование решения. Теореме 2.1 имеет смысл только в том случае, если в рассматриваемом допустимом множестве функ-

ний существует кубический многочлен, удовлетворяющий условиям (2.4) и (2.5). Докажем, что это так.

Уравнения звеньев кубического многочлена $y = S(x)$ мы записываем в виде:

$$P_i(x) = \sum_{\lambda=0}^3 \alpha_{\lambda}^{(i)} (x-x_i)^{\lambda} \quad (2.7)$$

В задаче интерполирования коэффициенты $\alpha_0^{(i)} = f(x_i)$ заданы. В рассматриваемой задаче они неизвестны. Поэтому условия непрерывности функции $y = S(x)$ и ее двух первых производных, выражаемые соотношениями (I.9) - (I.II) работы [9], перепишем в следующей форме:

$$\alpha_3^{(i)} = \frac{\alpha_2^{(i+1)} - \alpha_2^{(i)}}{3h_i} \quad (i=0, 1, \dots, N-1), \quad (2.8)$$

$$\alpha_1^{(i)} = \frac{\alpha_0^{(i+1)} - \alpha_0^{(i)}}{h_i} - \frac{h_i}{3} (2\alpha_2^{(i)} + \alpha_2^{(i+1)}) \quad (i=0, 1, \dots, N-1), \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned} h_{i-1} \alpha_2^{(i-1)} + 2(h_{i-1} + h_i) \alpha_2^{(i)} + h_i \alpha_2^{(i+1)} &= \\ = 3 \left[\frac{\alpha_0^{(i-1)}}{h_{i-1}} - \left(\frac{1}{h_{i-1}} + \frac{1}{h_i} \right) \alpha_0^{(i)} + \frac{\alpha_0^{(i+1)}}{h_i} \right] \end{aligned} \quad (2.10)$$

В периодическом случае в (2.10) $i=0, 1, \dots, N-1$, для непериодических многочленов $i=1, 2, \dots, N-1$. Кроме того, в непериодическом случае добавляются граничные условия, одинаковые и в задаче интерполирования, и в задаче сплайвинга. Это уравнения (I.I2) с формулами (I.I4) работы [9]. Выпишем их для тех типов, для которых сформулирована задача сплайвинга:

$$P'. \quad 2\alpha_2^{(0)} = 0, \quad 2\alpha_2^{(N)} = 0; \quad (2.IIa)$$

$$\begin{cases} I. \quad 2h_0 \alpha_2^{(0)} + h_0 \alpha_2^{(1)} = 3 \left[-\frac{\alpha_0^{(0)}}{h_0} + \frac{\alpha_0^{(1)}}{h_0} \right] - 3y_0', \\ h_{N-1} \alpha_2^{(N-1)} + 2h_{N-1} \alpha_2^{(N)} = 3 \left[\frac{\alpha_0^{(N-1)}}{h_{N-1}} - \frac{\alpha_0^{(N)}}{h_{N-1}} \right] + 3y_N'. \end{cases} \quad (2.IIb)$$

Для I, берется по одному условию на каждом конце типа II' или I.

Таким образом, для непериодических многочленов имеем $N+1$ уравнений (2.I0) и (2.II). Чтобы получить задачу такой же размерности для периодических многочленов, будем предполагать, как и в задаче интерполирования, что число точек раздела увеличено на единицу. Тогда в системе (2.I0) индекс будет пробегать значения от 0 до N с циклической заменой $N+1$ на 0, -1 на N .

Для дальнейших анализов представим систему уравнений во всех четырех случаях в матричной форме

$$Q\alpha_2 = 3T\alpha_0 + b, \quad (2.I2)$$

где Q и T' - квадратные матрицы $N+1$ порядка, а b - вектор, отличный от нуля, если хотя бы на одном конце задано ненулевое условие типа I:

$$b^{(0)} = -3y_0', \quad b^{(i)} = 0 \quad (i=1, 2, \dots, N-1), \quad b^{(N)} = 3y_N',$$

и равный нулю в остальных случаях.

Вторую систему уравнений для периодического случая дают соотношения (2.4), к которым в непериодическом случае добавляются (2.5). Поскольку $S''(x_i) = 6\alpha_3^{(i)}$, то из (2.4) и (2.8) следует, что

$$2\varepsilon_i \left[\frac{\alpha_2^{(i-1)}}{h_{i-1}} - \left(\frac{1}{h_{i-1}} + \frac{1}{h_i} \right) \alpha_2^{(i)} + \frac{\alpha_2^{(i+1)}}{h_i} \right] = -(\alpha_0^{(i)} - y_i^0), \quad (2.I3)$$

где $\varepsilon_i = \rho_i^{-1}$.

Из (2.5) с учетом (2.IIa) имеем для типа II' :

$$\left. \begin{aligned} 2\varepsilon_0 \frac{\alpha_2^{(1)}}{h_0} &= -(\alpha_0^{(0)} - y_0^0), \\ -2\varepsilon_N \frac{\alpha_2^{(N)}}{h_{N-1}} &= -(\alpha_0^{(N)} - y_N^0). \end{aligned} \right\} \quad (2.I4a)$$

Для типа I :

$$\left. \begin{aligned} 2\varepsilon_0 \left[-\frac{\alpha_2^{(0)}}{h_0} + \frac{\alpha_2^{(1)}}{h_0} \right] &= -(\alpha_0^{(0)} - y_0^0), \\ 2\varepsilon_N \left[\frac{\alpha_2^{(N-1)}}{h_{N-1}} - \frac{\alpha_2^{(N)}}{h_{N-1}} \right] &= -(\alpha_0^{(N)} - y_N^0). \end{aligned} \right\} \quad (2.I4b)$$

Уравнения (2.13) для периодических многозвенников при $i = 0, 1, \dots, N$ и в непериодическом случае при $i = 1, 2, \dots, N-1$ с двумя условиями (2.14) запишем тоже в матричном виде:

$$2\epsilon T \alpha_2 = y_0 - \alpha_0. \quad (2.15)$$

Здесь ϵ - диагональная матрица $N+1$ порядка с элементами $\epsilon_i \geq 0$, а T , как нетрудно проверить, - матрица, транспонированная с T' в (2.12).

Напомним некоторые свойства матриц ([12], §§ I, II-13). Пусть Q - симметричная матрица и $t = \{t_0, t_1, \dots, t_N\}$ - вектор-столбец. Запишем квадратичную форму матрицы в виде:

$$F = t' Q t = \sum_{i=0}^N \sum_{j=0}^N q_{ij} t_i t_j,$$

где t' - вектор-строка.

Матрица Q называется неотрицательной, если $t' Q t \geq 0$, и положительно определенной, если равенство достигается только при $t=0$. Все собственные числа положительно определенной матрицы положительны. Такая матрица всегда имеет обратную, тоже положительно определенную матрицу. С этой точки зрения матрица Q в (2.12), симметричная во всех рассматриваемых случаях, будет положительно определенной, ибо для нее выполняются условия Адамара, и все собственные числа положительны по теореме Гершгорина.

Матрица ϵ в (2.15) неотрицательная; она будет положительно определенной, если все $\epsilon_i > 0$.

Выражение векторе α_0 из (2.15) подставим в (2.12). Получается

$$(Q + 6T'\epsilon T)\alpha_2 = 3T'y_0 + 6. \quad (2.16)$$

Рассмотрим матрицу $T'\epsilon T$. Во-первых, она симметричная, т.е. совпадает со своей транспонированной. Действительно,

$$(T'\epsilon T)' = T'(T'\epsilon)' = T'\epsilon'(T)' = T'\epsilon T.$$

Во-вторых, она неотрицательна. Запишем ее квадратичную форму. Последняя, если $\tau = Tt$, равна

$$t' T' \epsilon T t = \tau' \epsilon \tau \geq 0,$$

ибо $\tau' = (Tt)' = t' T'$, а ϵ - неотрицательная матрица.

Матрица $Q + 6T'\epsilon T$ будет положительно определенной, ибо соответствующая ей сумма квадратичных форм будет положительной. Но тогда эта матрица имеет обратную, и для уравнения (2.16) всегда существует, притом единственное решение. Таким образом, доказана

ТЕОРЕМА 2.2. Существует и притом единственный кубический многозвенник с точками раздела Δ , удовлетворяющий условиям (2.4) в непериодическом случае и (2.4) - (2.5) для непериодических типов I, II' и I - II'.

В заключение параграфа подготовим систему (2.16) для численного решения. Распишем векторное уравнение в координатной форме, для чего требуется произвести перемножение матриц T' , ϵ , T . Это равносильно подстановке компонент $\alpha_0^{(i)}$ из (2.13) и (2.14) в (2.10) и (2.11). Основная группа уравнений после деления на $h_{i-1} + h_i$ принимает вид:

$$\theta_{i1} \alpha_2^{(i-2)} + \alpha_i \alpha_2^{(i-1)} + r_i^0 \alpha_2^{(i)} + \beta_i \alpha_2^{(i+1)} + \theta_{i6} \alpha_2^{(i+2)} = 3y_0(x_{i-1}, x_i, x_{i+1}). \quad (2.17)$$

Коэффициенты здесь имеют сложную структуру. Обозначим:

$$\alpha_i^0 = \frac{h_{i-1}}{h_{i-1} + h_i}, \quad \beta_i^0 = \frac{h_i}{h_{i-1} + h_i}, \quad r_i^0 = 2; \quad (2.18)$$

$$\left. \begin{aligned} \theta_{i1} &= \frac{6\epsilon_{i-1}}{h_{i-2} h_{i-1} (h_{i-1} + h_i)}, & \theta_{i2} &= \frac{6\epsilon_{i-1}}{h_{i-1}^2 (h_{i-1} + h_i)}, \\ \theta_{i3} &= \frac{3\epsilon_i}{h_{i-1}^2 h_i}, & \theta_{i4} &= \frac{3\epsilon_i}{h_{i-1} h_i^2}, \\ \theta_{i5} &= \frac{6\epsilon_{i+1}}{h_i^2 (h_{i-1} + h_{i+1})}, & \theta_{i6} &= \frac{6\epsilon_{i+1}}{h_i h_{i+1} (h_{i-1} + h_{i+1})}. \end{aligned} \right\} \quad (2.19)$$

Тогда

$$\left. \begin{aligned} \alpha_i &= \alpha_i^0 - \theta_{i1} - \theta_{i2} - 2\theta_{i3}, \\ \gamma_i &= \gamma_i^0 + \theta_{i2} + 2\theta_{i3} + 2\theta_{i4} + \theta_{i5}, \\ \beta_i &= \beta_i^0 - 2\theta_{i4} - \theta_{i5} - \theta_{i6}. \end{aligned} \right\} (2.20)$$

Для периодических сплживающих многозвенников в виде (2.17) записываются все уравнения от $i=0$ до N с циклической заменой индексов.

В непериодическом случае они верны для $i=2, 3, \dots, N-2$, и с обоих концов нужно добавить по два граничных уравнения, которые имеют вид:

$$\begin{aligned} \gamma_0 \alpha_2^{(0)} + \beta_0 \alpha_2^{(1)} + \theta_{06} \alpha_2^{(2)} &= 3\gamma^0(x_{-1}; x_0; x_1), \\ \alpha_1 \alpha_2^{(0)} + \gamma_1 \alpha_2^{(1)} + \beta_1 \alpha_2^{(2)} + \theta_{16} \alpha_2^{(3)} &= 3\gamma^0(x_0; x_1; x_2), \end{aligned} (2.21)$$

$$\begin{aligned} \theta_{N-1,1} \alpha_2^{(N-3)} + \alpha_{N-1} \alpha_2^{(N-2)} + \gamma_{N-1} \alpha_2^{(N-1)} + \beta_{N-1} \alpha_2^{(N)} &= 3\gamma^0(x_{N-2}; x_{N-1}; x_N), \\ \theta_{N1} \alpha_2^{(N-2)} + \alpha_N \alpha_2^{(N-1)} + \gamma_N \alpha_2^{(N)} &= 3\gamma^0(x_{N-1}; x_N; x_{N+1}). \end{aligned}$$

Для типа I здесь:

$$\left. \begin{aligned} \beta_0^0 &= 1, \quad \theta_{02} = \theta_{03} = \theta_{11} = 0, \\ \theta_{04} &= \frac{3\epsilon_0}{h_0^3}, \quad \theta_{05} = \frac{6\epsilon_1}{h_0^3}, \quad \theta_{06} = \frac{6\epsilon_1}{h_0^2 h_1}, \\ \alpha_N^0 &= 1, \quad \theta_{N4} = \theta_{N5} = \theta_{N-1,6} = 0, \\ \theta_{N4} &= \frac{3\epsilon_{N-1}}{h_{N-2} h_{N-1}^2}, \quad \theta_{N5} = \frac{6\epsilon_{N-1}}{h_{N-1}^3}, \quad \theta_{N6} = \frac{6\epsilon_N}{h_{N-1}^3}, \end{aligned} \right\}$$

а остальные коэффициенты вычисляются по общим формулам (2.18), (2.19). В правых частях (2.21)

$$\gamma^0(x_{-1}; x_0; x_1) = \frac{\gamma_1^0 - \gamma_0^0}{h_0^2} - \frac{\gamma_1^1}{h_0}, \quad \gamma^0(x_{N-1}; x_N; x_{N+1}) = \frac{\gamma_N^1}{h_{N-1}} - \frac{\gamma_N^0 - \gamma_{N-1}^0}{h_{N-1}}$$

Для типа II':

$$\beta_0 = \theta_{0V} = \theta_{11} = 0; \quad \alpha_N^0 = \theta_{NV} = \theta_{N-1,6} = 0, \quad (V=1, \dots, 6)$$

В правых частях (2.21)

$$\gamma^0(x_{-1}; x_0; x_1) = \frac{1}{2} \gamma_0'' = 0, \quad \gamma^0(x_{N-1}; x_N; x_{N+1}) = \frac{1}{2} \gamma_N'' = 0,$$

и крайние уравнения вырождаются в равенства

$$2\alpha_2^{(0)} = 0, \quad 2\alpha_2^{(N)} = 0$$

Этот факт нужно сразу учесть во втором и $(N-1)$ -м уравнениях.

Коэффициенты с индексом 0 сверху обязаны своим происхождением интерполяционной матрице Q . При $\epsilon_i = 0$ уравнения задачи переходят в уравнения для интерполяционного многозвенника ([9], § 2). После определения $\alpha_2^{(i)} (i=0, \dots, N)$ из (2.17) и (2.21) коэффициенты $\alpha_2^{(i)}$ находятся из (2.13) и (2.14).

§ 3. Алгоритм построения сплживающего кубического многозвенника

I. Метод прогонки. В этом параграфе мы предлагаем алгоритм для решения задачи сплживания, пригодный сразу как для всех типов непериодических, так и для периодических многозвенников.

Основная система уравнений (2.17) с граничными уравнениями (2.21) есть система с пятидиагональной матрицей:

$$\begin{bmatrix} \gamma_0^0 & \beta_0 & \theta_{06} & 0 & 0 & \dots & \theta_{01} & \alpha_0 \\ \alpha_1 & \gamma_1 & \beta_1 & \theta_{16} & 0 & \dots & 0 & \theta_{11} \\ \theta_{21} & \alpha_2 & \gamma_2 & \beta_2 & \theta_{26} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & \theta_{N-2,1} & \alpha_{N-2} & \gamma_{N-2} & \beta_{N-2} & \theta_{N-2,6} \\ \theta_{N-1,6} & 0 & \dots & 0 & \theta_{N-1,1} & \alpha_{N-1} & \gamma_{N-1} & \beta_{N-1} \\ \beta_N & 0 & \theta_{N6} & \dots & 0 & 0 & \theta_N & \alpha_N \quad \gamma_N \end{bmatrix} \begin{bmatrix} t_0 \\ t_1 \\ t_2 \\ \dots \\ t_{N-2} \\ t_{N-1} \\ t_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_0 \\ g_1 \\ g_2 \\ \dots \\ g_{N-2} \\ g_{N-1} \\ g_N \end{bmatrix}, \quad (3.1)$$

где обозначено $\alpha_i = \tau_i$.

Такую систему уравнений можно решать методом прогонки, как и систему задачи интерполирования, где матрица трехдиагональная [9], [13].

В системе (3.1)

$$\gamma_i > 0, \theta_{i1} > 0, \theta_{i6} > 0,$$

а α_i, β_i могут иметь любые знаки. Ради общности будем предполагать, что $\gamma_i > 0$, и наложим на коэффициенты ограничения в виде условий Адамара о преобладании диагональных элементов матрицы:

$$\gamma_i > |\theta_{i1}| + |\alpha_i| + |\beta_i| + |\theta_{i6}| \quad (i=0, \dots, N). \quad (3.2)$$

Будем отыскивать решение системы по рекуррентному соотношению

$$t_i = \beta_i t_{i+1} + C_i t_{i+2} + \gamma_i + A_i t_N + D_i t_{N-1} \quad (3.3)$$

Подставляя t_{i-2} и t_{i-1} в i -е уравнение системы, получаем формулы прогоночных коэффициентов:

$$A_i = - \frac{\theta_{i1} A_{i-2} + (\alpha_i + \theta_{i1} \beta_{i-2}) A_{i-1}}{F_i},$$

$$\beta_i = - \frac{\beta_i + (\alpha_i + \theta_{i1} \beta_{i-2}) C_{i-1}}{F_i},$$

$$C_i = - \frac{\theta_{i2}}{F_i},$$

$$D_i = - \frac{\theta_{i1} D_{i-2} + (\alpha_i + \theta_{i1} \beta_{i-2}) D_{i-1}}{F_i},$$

$$\gamma_i = \frac{\gamma_i - \theta_{i1} \gamma_{i-2} - (\alpha_i + \theta_{i1} \beta_{i-2}) \gamma_{i-1}}{F_i},$$

где

$$F_i = \gamma_i + \theta_{i1} C_{i-2} + (\alpha_i + \theta_{i1} \beta_{i-2}) \beta_{i-1}.$$

Если формально ввести

$$A_{-2} = \beta_{-2} = \beta_{-1} = C_{-2} = C_{-1} = D_{-1} = \gamma_{-2} = \gamma_{-1} = 0, \quad A_{-1} = D_{-2} = 1,$$

то формулы (3.4) имеют смысл для $i = 0, 1, \dots, N$. Выпишем последние три соотношения типа (3.3), учитывая в общем случае цикличность индексов:

$$t_{N-2} = \gamma_{N-2} + (A_{N-2} + C_{N-2}) t_N + (B_{N-2} + D_{N-2}) t_{N-1}, \quad (3.5a)$$

$$(1 - D_{N-1}) t_{N-1} = C_{N-1} t_0 + \gamma_{N-1} + (A_{N-1} + B_{N-1}) t_N, \quad (3.5b)$$

$$(1 - A_N) t_N = B_N t_0 + C_N t_1 + \gamma_N + D_N t_{N-1}. \quad (3.5в)$$

Обратная прогонка по формуле (3.3) позволяет получить соотношения типа (3.5) для всех $i \leq N-2$:

$$t_i = p_i + q_i t_N + z_i t_{N-1} \quad (i=0, 1, \dots, N-2), \quad (3.6)$$

где

$$\left. \begin{aligned} p_i &= \beta_i p_{i+1} + C_i p_{i+2} + \gamma_i, \\ q_i &= \beta_i q_{i+1} + C_i q_{i+2} + A_i, \\ z_i &= \beta_i z_{i+1} + C_i z_{i+2} + D_i. \end{aligned} \right\} \quad (3.7)$$

Здесь формально введены $p_{N-1} = q_{N-1} = p_N = z_N = 0, z_{N-1} = q_N = 1$. Подставляя t_0 и t_1 (3.6) в (3.5b) и (3.5в), найдем t_{N-1} и t_N через уже известные величины:

$$\left. \begin{aligned} t_{N-1} &= \frac{b_1 a_{22} - b_2 a_{12}}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}}, \\ t_N &= \frac{-b_1 a_{21} + b_2 a_{11}}{a_{11} a_{22} - a_{12} a_{21}}. \end{aligned} \right\} \quad (3.8)$$

где

$$\begin{aligned} a_{11} &= 1 - D_{N-1} - C_{N-1} z_0, & a_{12} &= -(A_{N-1} + B_{N-1} + C_{N-1} q_0), \\ a_{21} &= -(B_N z_0 + C_N z_1 + D_N), & a_{22} &= 1 - A_N - B_N q_0 - C_N q_1, \\ b_1 &= C_{N-1} p_0 + \gamma_{N-1}, & b_2 &= B_N p_0 + C_N p_1 + \gamma_N. \end{aligned}$$

Окончательно по формулам (3.6) находятся все неизвестные величины t_i . Число операций в алгоритме равно $47(N+1)$.

Займемся рассмотрением корректности метода. Во-первых, в силу неравенств (3.2), если

$$|A_k| + |\beta_k| + |C_k| + |D_k| \leq 1 \quad (k = i-2, i-1), \quad (3.9)$$

то

$$|A_i| + |B_i| + |C_i| + |D_i| < 1 \quad (3.10)$$

Действительно, из (3.4) следует, что

$$\begin{aligned} & |A_i| + |B_i| + |C_i| + |D_i| \leq \\ & \leq \frac{|\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}| (|A_{i-1}| + |C_{i-1}| + |D_{i-1}|) + |\beta_i| + |\theta_{i-1}| (|A_{i-2}| + |D_{i-2}|) + |\theta_{i6}|}{\delta_i^1 - |\theta_{i-1}| |C_{i-2}| - |\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}| |B_{i-1}|} \end{aligned}$$

По предположению $|A_{i-1}| < 1$, $|B_{i-2}| + |C_{i-2}| \leq 1$ и, кроме того, $|\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}| \leq |\alpha_i| + |\theta_{i-1}| |B_{i-2}|$. При этом знаменатель не меньше, чем $\delta_i^1 - |\alpha_i| - |\theta_{i-1}|$, а последнее больше нуля на основании (3.2). Тогда (3.10) выполняется, если верно неравенство

$$\begin{aligned} & |\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}| (|A_{i-1}| + |C_{i-1}| + |D_{i-1}|) + |\beta_i| + |\theta_{i-1}| (|A_{i-2}| + |D_{i-2}|) + |\theta_{i6}| < \\ & < \delta_i^1 - |\theta_{i-1}| |C_{i-2}| - |\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}| |B_{i-1}| \end{aligned}$$

Отсюда на основании (3.9) следует, что

$$|\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}| + |\beta_i| + |\theta_{i-1}| (|A_{i-2}| + |C_{i-2}| + |D_{i-2}|) + |\theta_{i6}| < \delta_i^1$$

Увеличивая левую часть, видим, что неравенство сохраняется

$$|\theta_{i-1}| (|A_{i-2}| + |B_{i-2}| + |C_{i-2}| + |D_{i-2}|) + |\alpha_i| + |\beta_i| + |\theta_{i6}| < \delta_i^1$$

в силу (3.9) и (3.2). Но суммы в (3.9) при $k = -1, -2$ равны единице, так как $|A_1| = |D_2| = 1$, а остальные коэффициенты равны нулю. Следовательно, неравенства (3.10) выполняются для всех $i = 0, 1, \dots, N$.

Во-вторых, из (3.5в) видно, что $q_{N-2} = A_{N-2} + C_{N-2}$, $z_{N-2} = B_{N-2} + D_{N-2}$. А тогда по доказанному (3.10) $|q_{N-2}| + |z_{N-2}| < 1$. Если добавить, что $|q_{N-1}| = |z_{N-1}| = 1$, то из (3.7) и (3.10) имеем неравенства

$$|q_i| + |z_i| < 1 \quad (3.11)$$

для всех $i = 0, 1, \dots, N-2$.

Теперь можно оценить знаменатель в (3.8). Величины $\alpha_N > 0$, $\alpha_{22} > 0$ согласно (3.10). Проверим, что $\alpha_N > |\alpha_{12}|$ и $\alpha_{22} > |\alpha_{21}|$. В самом деле, эти неравенства верны, если справедливо:

$$1 - |C_{N-1}| |z_0| - |D_{N-1}| > |A_{N-1}| + |B_{N-1}| + |C_{N-1}| |q_0|,$$

$$1 - |A_N| - |B_N| |q_0| - |C_N| |q_1| > |B_N| |z_0| + |C_N| |z_N| + |D_N|.$$

Они эквивалентны неравенствам

$$1 > |A_{N-1}| + |B_{N-1}| + |C_{N-1}| (|q_0| + |z_0|) + |D_{N-1}|,$$

$$1 > |A_N| + |B_N| (|q_0| + |z_0|) + |C_N| (|q_1| + |z_1|) + |D_N|.$$

Но последние выполняются по (3.10) и (3.11). Следовательно, $\alpha_N > |\alpha_{12}|$, $\alpha_{22} > |\alpha_{21}|$ и тогда

$$\alpha_{11} \alpha_{22} - \alpha_{12} \alpha_{21} > 0 \quad (3.12)$$

Третий шаг состоит в том, чтобы показать устойчивость метода вычислений по отношению к ошибкам округления. Поскольку выполняются неравенства (3.10), то подавно $|A_i| < 1$, $|B_i| < 1$, $|C_i| < 1$, $|D_i| < 1$. Однако этого достаточно только для устойчивости обратной прогонки по формулам (3.7).

Для устойчивости прямой прогонки необходимо, чтобы при переходе к точке с большим номером не возрастали ошибки в определении прогоночных коэффициентов (3.4). Обозначим:

$$U_i = -\frac{\theta_{i-1}}{F_i}, \quad V_i = -\frac{\alpha_i + \theta_{i-1} B_{i-2}}{F_i}$$

Тогда ошибки в определении A_i получается как вариация ее выражения

$$\delta A_i = U_i \delta A_{i-2} + V_i \delta A_{i-1} + A_{i-2} \delta U_i + A_{i-1} \delta V_i$$

Так как

$$\delta U_i = -U_i \frac{\delta F_i}{F_i}, \quad \delta V_i = U_i \delta B_{i-2} - V_i \frac{\delta F_i}{F_i},$$

$$\frac{\delta F_i}{F_i} = -[U_i \delta C_{i-2} + U_i B_{i-1} \delta B_{i-2} + V_i \delta B_{i-1}],$$

то, очевидно, что ошибки δA_i не будут прогрессивно возрастать, если $|U_i| < 1$ и $|V_i| < 1$, хотя некоторое накопление возможно за счет операций сложения. К этим же неравенствам сводится и анализ вариаций δB_i , δC_i , δD_i и δq_i . Условия $|U_i| < 1$ обычными выкладками сводятся к неравенствам

$$\delta_i^1 > 2(|\alpha_i| + |\theta_{i-1}|), \quad (3.13)$$

в условия $|U_i| < 1$ к более слабым $\delta_i^1 > 2|\theta_{i-1}| + |\alpha_i|$. Очевидно, если вместо условий (3.13) выполняются условия $\delta_i^1 > 2(|\beta_i| + |\theta_{i6}|)$ ($i = 1, 0, \dots, N$), то, меняя нумерацию неизвестных, снова приходим к (3.13). Итак, ограничения (3.2) и (3.13) являются до-

статочными для устойчивости метода, но не обязательно необходимыми.

В заключение отметим, что в случае равностоящих точек множества Δ и $\varepsilon_i = \varepsilon = \text{const}$ условия (3.13) выполняются, как только выполнены условия (3.2). Пусть $\theta_{ij} = \theta = \text{const}$, $\alpha_i = \beta_i = \frac{1}{2} - 4\theta$, $\delta_i = 2 + 6\theta$. Тогда неравенства (3.2), (3.13) приводят к одному неравенству $1 + 3\theta > \theta + \frac{1}{2} - 4\theta$. При малых $\theta \leq \frac{1}{8}$ это всегда справедливо, а при $\theta > \frac{1}{8}$ дает условие $\theta < \frac{3}{7}$ ($\varepsilon < 1/4$).

Метод прогонки устойчив при малых параметрах сглаживания ε_i , когда сглаживающий кубический многообразий близок к интерполирующему.

2. Итерационный метод. Иногда, в частности, в задачах проектирования деталей сложной формы [8], экспериментальные точки не равноценны, т.е. одни заданы более точно, другие менее. В этих случаях приходится применять различные веса ρ_i , и при малых ρ_i окажутся большими соответствующие ε_i . Тогда следует воспользоваться итерационными методами. Эта возможность связана с положительной определенностью матрицы $A = Q + \beta T \varepsilon T$ системы (2.16). Для систем с такими матрицами разработано несколько эффективных методов [12], [14].

Мы отметим здесь эффективный попеременно-треугольный алгоритм, предложенный А.А. Самарским [15]. Для его сходимости необходимо, чтобы матрицу A можно было бы представить в виде суммы $A = A_1 + A_2$ нижней треугольной A_1 и верхней треугольной A_2 матриц, таких, что $t'A_1 t \geq c(t't)$, $c_1 > 0$ ($\beta = 1, 2$). Но этого всегда можно добиться, если A — положительно определенная матрица. Действительно, пусть L — поддиагональная, D — диагональная и R — наддиагональная матрицы для матрицы A . Тогда, взяв $A_1 = L + \frac{1}{2}D$, $A_2 = R + \frac{1}{2}D$, как нетрудно видеть, имеем $t'A_1 t = \frac{1}{2}t'At$. Но согласно экстремальным свойствам собственных значений положительно определенных матриц $t'At \geq \lambda_0(t't)$, где λ_0 — наименьшее собственное значение, и требуемые условия выполняются.

Попеременно-треугольный алгоритм представляет двухэтапный итерационный процесс:

$$(D + A_1)t^{(2s+1)} = (D - A_2)t^{(2s)} + g,$$

$$(D + A_2)t^{(2s+2)} = (D - A_1)t^{(2s+1)} + g,$$

где s — номер итерации, а D — диагональная матрица. Если $D = \frac{1}{2}D^0$, то на каждом шагу имеем итерационный процесс Неймана-Зейделя ([12] § 33), проходимый один раз, как обычно, "вниз", а второй раз — "вверх".

Вычислительная схема алгоритма для системы (2.16) имеет вид:

$$t_i^{(2s+1)} = -\frac{1}{\delta_i} (\theta_{i1} t_{i-2}^{(2s+1)} + \alpha_i t_{i-1}^{(2s+1)} + \beta_i t_{i+1}^{(2s)} + \theta_{i2} t_{i+2}^{(2s)} - g_i), \quad (3.14a)$$

$$t_i^{(2s+2)} = -\frac{1}{\delta_i} (\theta_{i1} t_{i-2}^{(2s+1)} + \alpha_i t_{i-1}^{(2s+1)} + \beta_i t_{i+1}^{(2s+2)} + \theta_{i2} t_{i+2}^{(2s+2)} - g_i). \quad (3.14b)$$

В качестве начального приближения t^0 можно брать нулевые значения неизвестных. Если при шаге "вниз" по формуле (3.14a), кроме $t_i^{(2s+1)}$ ($i=0, 1, \dots, N$), запоминать $\theta_{i2} t_{i+2}^{(2s)}$ и $\alpha_i t_{i-1}^{(2s)}$, то при очередном шаге "вверх" по (3.14b) приходится выполнять не все $9(N+1)$ операций, а только $6(N+1)$. Если при шаге "вверх" запоминать $\beta_i t_{i+1}^{(2s+1)}$ и $\theta_{i2} t_{i+2}^{(2s+1)}$, то сокращается число операций на очередном шаге "вниз". Если предварительно коэффициенты в i -м уравнении разделить на δ_i , то число операций сокращается с $8(N+1)$ до $5(N+1)$. В этом смысле попеременно-треугольный алгоритм является экономичным.

В ряде случаев итерационный метод можно применять для уточнения решения, получаемого по методу прогонки, если не все условия его устойчивости выполняются, и нет уверенности, что результаты достаточно точны. В качестве t^0 берется тогда решение, даваемое прогонкой.

Автор благодарен Б.И. Квасову, проверившему все выкладки в публикуемых в этом сборнике статьях автора.

ЛИТЕРАТУРА

1. J.C. HOLLADAY. Smoothest curve approximation. - Math.Tables Aids Computation, 1957, vol.11, N 60, 233-243.
2. J.L. WALSH, J.H. AHLBERG, E.N. NILSON. Best approximation properties of the spline fit. - J.Math.Mech., 1962, vol. 11, N 2, 225-234.
3. J.H. AHLBERG, E.N. NILSON, J.L. WALSH. The theory of splines and their applications. New York-London, Acad.press, 1967.
4. I.J. SCHOENBERG. Spline functions and the problem of graduation. - Proc. Nation. Acad. Sci. U.S., 1964, vol.52, N4, 947-950.
5. Э. УИТТЕКЕР, Г. РОБИНСОН. Математическая обработка результатов наблюдений. М.-Л., ГИИ, 1933.
6. С.Н. REINSCH. Smoothing by spline functions. - Numer.Math., 1967, vol. 10, N 4, 177-183.
7. P.J. LAURENT. Représentation de données expérimentales a l'aide de fonctions-spline d'ajustement et evaluation optimal de fonctionnelles lineaires continues. Applikace Matematiky, 1968, s.13, N 2, 154-162.
8. Ю.С. ЗАВЬЯЛОВ. Применение вычислительных систем для решения сложных задач проектирования в машиностроении. - Вычислительные системы, Новосибирск, 1970, вып.38, стр.3-23.
9. Ю.С. ЗАВЬЯЛОВ. Интерполирование кубическими многозвенниками. Там же, стр. 24-73.
10. Г. КОРН, Т. КОРН. Справочник по математике для научных работников и инженеров. М., "Наука", 1968.
11. С.Г. МИХЛИН. Курс математической физики. М., "Наука", 1968.
12. Д.К. ФАДДЕЕВ, В.Н. ФАДДЕЕВА. Вычислительные методы линейной алгебры. М.-Л., Физматгиз, 1963.
13. А.А. АБРАМОВ, В.Б. АНДРЕЕВ. О применении метода прогонки к нахождению периодических решений дифференциальных и разностных уравнений. - Журнал вычислительн. математики и математ. физики, 1963, т.3, № 2, стр.377-381.
14. В.В. ВОЗВОДИН. Численные методы алгебры (теория и алгоритмы). М., "Наука", 1966.
15. А.А. САМАРСКИЙ. Об одном экономичном алгоритме численного решения дифференциальных и алгебраических уравнений. - Ж. вычислит. математики и математ. физики, 1964, т.4, № 3, стр. 580-585.

Поступила в редакцию
8 июня 1970 г.