

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ

Тверской государственный университет

В.О. Ашкеназы

СПЛАЙН - ПОВЕРХНОСТИ
Основы теории и вычислительные алгоритмы

Учебное пособие

ТВЕРЬ 2003

УДК 519.6 (075.8)
ББК В161.547я731-1+В192.4я731-1
А98

Рецензенты:

Доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой
электронно-вычислительных машин
Тверского государственного технического университета
В.А. Григорьев

Кандидат технических наук, доцент
Тверского государственного технического университета
Г.П. Белова

Ашкеназы В. О.

А98 Сплайн-поверхности: Основы теории и вычислительные алгоритмы: Учебное пособие. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 2003. - 82 с.

Данное пособие предоставляет в распоряжение студентов-математиков достаточно простое и доступное руководство, содержащее элементарное изложение основных математических соотношений современной теории сплайн-поверхностей (вариационных D^m -сплайнов), а также вычислительных алгоритмов их построения и исследования при гладком выполнении функций многих переменных на произвольной сетке узлов.

Библиогр.: 54 назв.

Публикуется по решению методической комиссии Тверского государственного университета по естественно-научному образованию.

УДК 519.6 (075.8)
ББК В161.547я731-1+В192.4я731-1
© Ашкеназы В.О., 2003.
© Тверской государственный университет, 2003.

ПРЕДИСЛОВИЕ

В пособии обсуждается современный математический аппарат и вычислительные алгоритмы построения **сплайн-поверхностей** (сплайнов типа тонкой пластинки, D^m -сплайнов). Рассматривается вариационная задача оптимального гладкого восстановления (восполнения) функции многих переменных по исходным данным в произвольно расположенных точках (узлах).

В первых трех главах последовательно излагаются основные математические соотношения, обеспечивающие построение интерполяционных сплайн-поверхностей. Рассмотрены также основы построения сглаживающих сплайн-поверхностей, обеспечивающих гладкое восстановление функции многих переменных по исходным данным, известным со случайными погрешностями.

В главе 4 рассматриваются некоторые свойства сплайн-поверхностей, такие, как дифференцируемость и погрешности восстановления функций по дискретным данным. Обсуждаются современные результаты теоретических и экспериментальных исследований норм погрешностей интерполяции и сходимости сплайн-поверхностей на сгущающихся сетках узлов.

Глава 5 посвящена рассмотрению некоторых важных обобщений понятия D^m -сплайна, в частности – псевдо-полиномиальных многомерных сплайнов и стохастических сплайн-поверхностей.

В главе 6 детально обсуждаются вычислительные аспекты построения сплайн-поверхностей. После рассмотрения основных вычислительных алгоритмов построения интерполяционной или сглаживающей сплайн-поверхности по исходной "канонической" схеме описан более удобный в вычислительном отношении алгоритм, предложенный Ж. Менге. По соответствующей вычислительной схеме для нахождения коэффициентов сплайн-поверхности достаточно решить систему линейных алгебраических

уравнений с симметрической положительно определенной матрицей. Это позволяет воспользоваться численно устойчивым и эффективным методом Холецкого (метод квадратного корня), а также последовательно наращивать число узлов интерполяции, не обращаясь к повторному решению системы.

Наиболее значительная по объему глава 7 посвящена рассмотрению методики исследования вычислительных алгоритмов построения сплайн-поверхности. При выборе в качестве узлов интерполяции равномерно распределенных последовательностей точек (р.р.п.) можно минимизировать погрешности гладкого восполнения функции многих переменных. Обсуждаются количественные характеристики равномерности. Описаны алгоритмы, обеспечивающие практическую реализацию р.р.п.: последовательностей Холтона и ЛП_r-последовательностей. Подробно рассмотрены алгоритмы вычисления норм погрешностей восполнения функции сплайн-поверхностью и рассмотрена процедура "свертывания" оператора цикла при сканировании многомерной области.

Предлагаемое пособие является существенно расширенной и дополненной версией методической разработки 1993 г. [32]. Материалы пособия в течение многих лет используются автором при проведении занятий и руководстве научной работой студентов по дисциплине специализации "Сплайн-поверхности" на математическом факультете Тверского государственного университета (кафедра информатики и методов оптимизации).

1. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ПО ДИСКРЕТНЫМ ДАННЫМ

Я хочу определить некоторый экспериментальный закон; когда я буду знать его, его можно будет представить с помощью некоторой кривой; я делаю несколько отдельных наблюдений; пусть каждое из них изобразится некоторой точкой. Получив ряд различных точек, я провожу между ними кривую, стараясь возможно меньше уклониться от них и в то же время сохранить для моей кривой правильную форму, без угловых точек, без слишком резких изгибов, без внезапного изменения радиуса кривизны...

...Однако почему же я стараюсь провести кривую без извилин? Потому что закон, представляемый непрерывной функцией (или функцией, у которой производные высшего порядка малы), я уже а priori рассматриваю как более вероятный сравнительно с законом, не удовлетворяющим этому условию. Без этой уверенности рассматриваемая проблема не имела бы никакого смысла; интерполяция была бы невозможна; нельзя было бы вывести закон из конечного числа наблюдений; наука не существовала бы.

А. Пуанкаре. Наука и гипотеза

1.1. Задача интерполирования

Среди задач приближения функций, решаемых в прикладном численном анализе и вычислительной математике, важное место занимают задачи подгонки (восстановления, восполнения) функции по исходным данным, заданным на конечном множестве точек.

Пусть функция $f(x)$ известна лишь в узлах некоторой сетки $x_i, i = \overline{1, N}$, то есть задана таблицей $\{x_i, f_i = f(x_i), i = \overline{1, N}\}$, и мы хотим **восстановить** эту неизвестную функцию.

Тогда можно построить некоторую функцию $\varphi(x; a)$, зависящую от вектора параметров $a = (a_1, \dots, a_N)^T$, так, чтобы

$$\varphi(x_i; a_1, \dots, a_N) = f_i, \quad i = \overline{1, N}. \quad (1)$$

Задача построения такой функции $\varphi(x) \cong f(x)$ называется задачей **интерполирования**, а способ подбора параметров a в системе уравнений (1) называют **интерполяцией** (точнее, **лагранжевой** интерполяцией, в отличие от **эрмитовой** интерполяции, когда табулирована не только функция, но и ее производные вплоть до некоторого порядка).

Традиционно рассматривают **линейную** интерполяцию, когда функция $\varphi(x; a)$ линейно зависит от параметров, то есть представима в виде так называемого **обобщенного многочлена**

$$\varphi(x; a_1, \dots, a_N) = \sum_{k=1}^N a_k \varphi_k(x), \quad (2)$$

где $\varphi_k(x)$, $k = \overline{1, N}$, это набор некоторых заданных функций.

Тогда для отыскания параметров a решается система линейных уравнений

$$\sum_{k=1}^N a_k \varphi_k(x_i) = f_i, \quad i = \overline{1, N}. \quad (3)$$

Для того чтобы задача имела единственное решение, надо, чтобы функции $\varphi_k(x)$ были линейно независимыми и чтобы

$$\Delta \equiv \text{Det} \{ \varphi_k(x_i) \} = \begin{vmatrix} \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_N(x_1) \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \varphi_1(x_N) & \cdots & \varphi_N(x_N) \end{vmatrix} \neq 0 \quad (4)$$

при несовпадающих узлах $x_i \neq x_j$, $i \neq j$.

Система функций, удовлетворяющая требованию (4), называется **чебышевской**. Таким образом, при линейной интерполяции надо строить обобщенный многочлен по какой-нибудь чебышевской системе функций.

Для линейной интерполяции наиболее удобными считаются обычные алгебраические многочлены, ибо они легко вычисляются.

Так, для $x \in \mathbb{R}$

$$\varphi_k(x) = x^{k-1}, \quad 1 \leq k \leq N. \quad (5)$$

Тогда Δ есть **определитель Вандермонда**

$$\Delta = \begin{vmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \cdots & x_1^{N-1} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1 & x_N & x_N^2 & \cdots & x_N^{N-1} \end{vmatrix} = \prod_{1 \leq i < j \leq N} (x_j - x_i) \neq 0. \quad (6)$$

Следовательно, алгебраический интерполяционный многочлен $N - 1$ степени всегда существует, является единственным и легко вычисляется.

Такой интерполяционный **многочлен Лагранжа** может быть представлен в виде

$$\varphi(x) = \sum_{i=1}^N f_i \frac{(x - x_1) \dots (x - x_{i-1}) (x - x_{i+1}) \dots (x - x_N)}{(x_i - x_1) \dots (x_i - x_{i-1}) (x_i - x_{i+1}) \dots (x_i - x_N)}. \quad (7)$$

Используются и другие формы записи этого интерполяционного многочлена, наиболее распространенной из которых является запись в форме многочлена Ньютона (см., например, [2]).

Заметим, что при интерполяции алгебраическими многочленами увеличение числа узлов в попытке уменьшить погрешность восстановления функции приводит к соответственному увеличению степени интерполяционного многочлена, что усложняет расчеты и ведет к росту вычислительных погрешностей. Поэтому обычно рекомендуют производить локальную интерполяцию, вводя в расчет не более 3-5 узлов в окрестности интересующей нас точки x .

Существенно усложняется построение алгебраических интерполяционных многочленов в многомерных задачах.

1.2. Вариационная задача восстановления функции; кубический сплайн

Вернемся к решению поставленной ранее задачи (1) восстановления функции по дискретным данным. Очевидно, что подбор удачного вида формульной зависимости $\varphi(x; a)$ – это искусство, ибо истинное решение задачи неизвестно. Как указал в уже приведенном высказывании А. Пуан-

каре [1], целесообразно выбрать достаточно гладкую функцию $\varphi(x; a)$.

С.А. Смоляк в [5] писал:

"В мозгу каждого человека в ходе его развития и обучения сформировался некоторый функционал гладкости или "хорошести" функций (кривых) $J(\varphi)$ так, что, проводя через заданные точки кривую, он старается минимизировать этот функционал, т.е. старается решить задачу

$$\begin{aligned} \varphi(x_k; a) &= f_k \quad (k = 1, \dots, N), \\ J(\varphi) &= \min". \end{aligned} \tag{8}$$

Решение такой **вариационной задачи** минимизации функционала $J(\varphi)$ при заданных ограничениях (интерполяционных условиях) на функцию $\varphi(x)$ называется **сплайн-функцией**. На русский язык термин "spline" переводится как "гибкая рейка" или "плавная кривая". Смысл этого термина будет ясен из последующего.

Рассмотрим возможную постановку такой задачи при восстановлении функции одной переменной. Примем

$$J(\varphi) = \int_{-\infty}^{\infty} [\varphi''(x)]^2 dx. \tag{9}$$

Тогда, решая задачу (8), мы как бы проводим по данным точкам $\{x_k, f_k, k = \overline{1, N}\}$ интерполирующую кривую $\varphi(x)$ наименьшей кривизны.

Когда нужно начертить график функции по известным точкам $f_i = f(x_i), i = \overline{1, N}$, то обычно пользуются лекалом. Опытные инженеры – кораблестроители издавна использовали **гибкое лекало** – металлическую линейку, которую ставили на ребро и изгибали, придерживая в заданных точках так, чтобы ее ребро проходило сразу через все эти точки. Такую гибкую линейку и называли "сплайном".

Этот способ интерполяции можно описать математически в виде задачи (8), поскольку уравнение свободного равновесия гибкой упругой линейки $\varphi(x), -\infty < x < \infty$, шарнирно закрепленной в точках плоскости

Эта система содержит $2(N-1)$ уравнений. Для получения недостающих уравнений зададим условия непрерывности первых и вторых производных в узлах интерполяции, то есть условия гладкости кривой во всех точках.

Вычислим производные многочлена (12):

$$\begin{aligned}\varphi'(x) &= b_i + 2c_i(x - x_{i-1}) + 3d_i(x - x_{i-1})^2, \\ \varphi''(x) &= 2c_i + 6d_i(x - x_{i-1}).\end{aligned}$$

Приравнивая в каждом внутреннем узле $x = x_i$ значения этих производных, вычисленные в левом и правом от узла интервалах, получаем еще $2(N-2)$ уравнения

$$\left. \begin{aligned} b_{i+1} &= b_i + 2h_i c_i + 3h_i^2 d_i, & i = \overline{2, N-1}; \\ c_{i+1} &= c_i + 3h_i d_i, & i = \overline{2, N-1}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

Недостающие два соотношения получаются из условий закрепления концов сплайна.

В частности, при свободном закреплении концов можно приравнять нулю кривизну линии в этих точках:

$$\varphi''(x_1) = 2c_2 = 0, \quad \varphi''(x_N) = 2c_N + 6d_N h_N = 0. \quad (15)$$

Такая сплайн-функция называется **естественным** (свободным) кубическим сплайном. Однако могут быть записаны и другие краевые условия (например, для **периодического** сплайна).

Уравнения (13)-(15) составляют систему линейных алгебраических уравнений для определения $4(N-1)$ коэффициентов $a_i, b_i, c_i, d_i, i = \overline{2, N}$.

Эту систему уравнений можно решить любым из известных методов, в частности, методом исключения Гаусса (см., например, [2]). Однако ее полезно привести к более удобному виду. Из первого условия (13) сразу можно найти все коэффициенты a_i . Далее, из второго условия (14) и условий (15) получим

$$d_i = (c_{i+1} - c_i) / 3h_i, \quad i = \overline{2, N-1}; \quad d_N = -c_N / 3h_N. \quad (16)$$

Подставим эти соотношения и значения $a_i = f_{i-1}$ во второе условие (13) и найдем отсюда коэффициенты

$$\left. \begin{aligned} b_i &= (f_i - f_{i-1})/h_i - h_i(c_{i+1} + 2c_i)/3, \quad i = \overline{2, N-1}; \\ b_N &= (f_N - f_{N-1})/h_N - 2h_N c_N/3. \end{aligned} \right\} \quad (17)$$

Учитывая соотношения (16) и (17), исключаем из первого уравнения (14) коэффициенты d_i и b_i .

Окончательно получим следующую систему уравнений только для коэффициентов c_i :

$$\left. \begin{aligned} c_2 &= 0, \quad c_N = 0, \\ h_{i-1}c_{i-1} + 2(h_{i-1} + h_i)c_i + h_i c_{i+1} &= \\ &= 3((f_i - f_{i-1})/h_i - (f_{i-1} - f_{i-2})/h_{i-1}), \quad i = \overline{3, N-1}. \end{aligned} \right\} \quad (18)$$

Матрица этой системы $(N-1)$ уравнений с $(N-1)$ неизвестными является трехдиагональной **ленточной** матрицей, то есть ненулевыми в ней являются только элементы главной диагонали и двух соседних. Такие системы экономно решаются так называемым **методом прогонки** - этот важный частный случай метода Гаусса требует всего порядка $9N$ арифметических операций и $3N$ ячеек памяти компьютера (по сравнению с $2N^3/3$ операций и N^2 ячеек памяти в методе Гаусса). По найденным из системы (18) коэффициентам c_i легко вычислить $d_i, b_i, \quad i = \overline{2, N}$.

Рассмотренные нами соотношения привели к **алгебраическому** определению сплайн-функции как кусочно-многочленной функции, удовлетворяющей условиям интерполирования в узлах и "склеиваемой" по условиям непрерывности функции, а также ее производных.

Эта идея нашла широкое практическое применение и была с определенным успехом распространена и на многомерные задачи с регулярной сеткой узлов. Достаточно детальное изложение соответствующих результатов содержится, например, в [3].

2. ПОНЯТИЕ О СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТИ

Не может быть языка более всеобъемлющего, чем аналитические уравнения и более простого, лишённого ошибок и неясностей, то есть более достойного для выражения неизменных соотношений реального мира.

Ж. Фурье

2.1. Интерполяционная сплайн-поверхность (случай двух переменных)

В рамках алгебраического подхода многомерные сплайны чаще всего строятся из одномерных посредством тензорного произведения или смешивания; однако, каким бы удобным ни оказывался иногда этот подход, он страдает двумя присущими ему недостатками: ограничение областями и сетками узлов прямоугольного вида, использование в конечном счете довольно неестественных функциональных пространств и норм.

Для произвольно размещенных узлов в многомерной задаче восстановления функции более плодотворным оказывается первоначальный **вариационный подход**, описываемый общими условиями (1.8). Мы рассмотрим вытекающие из такого подхода математические основы и вычислительные аспекты интерполяции **сплайн-поверхностью**.

Еще Атья [4] сделал вывод о существовании общего вида сплайн-функций многих переменных, являющихся решением вариационной задачи минимизации на ограниченной области $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ функционала, подобного энергии изгиба тонкой пластинки (см. также [9]). Но значительно более простые и практически реализуемые результаты получаются, если заменить Ω на все пространство \mathbb{R}^n .

Так, первоначально предложенный в 1970 г. отечественным математиком С.А. Смоляком [5; 6] а затем, в 1972 г., американскими инженерами Хардером и Демарэ [7] остроумный математический инструмент, названный "сплайн-поверхностью", есть просто модель упругой пластинки бес-

конечной протяженности, которая деформируется лишь изгибом, причем ее отклонения от исходного состояния задаются в конечном числе независимых точек, где приложены соответствующие точечные нагрузки.

Для двумерной задачи гибкая пластинка является очевидным аналогом уже рассмотренного нами одномерного сплайна – гибкой линейки. Соответствующий **функционал гладкости** (определяемый при этом полной свободной энергией изогнутой тонкой упругой пластинки) в вариационной задаче (1.8) имеет вид

$$J_2(\varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right)^2 \right] dx dy \rightarrow \min. \quad (1)$$

Решение такой задачи минимизации, при

$$\varphi(x_i, y_i) = f_i, \quad i = \overline{1, N},$$

как мы убедимся в дальнейшем, имеет достаточно простой вид:

$$\varphi(x, y) = \sum_{i=1}^N c_i r_i^2 \ln r_i^2 + c_{N+1} + c_{N+2} x + c_{N+3} y, \quad (2)$$

где $r_i^2 = (x - x_i)^2 + (y - y_i)^2$.

Сплайн-функция $\varphi(x, y)$ бесконечно дифференцируема для любых (x, y) , кроме точек (x_i, y_i) , $i = \overline{1, N}$. В частности,

$$\left. \begin{aligned} \varphi_x'(x, y) &= 2 \sum_{i=1}^N c_i (x - x_i) \left(\ln \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] + 1 \right) + c_{N+2}, \\ \varphi_y'(x, y) &= 2 \sum_{i=1}^N c_i (y - y_i) \left(\ln \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] + 1 \right) + c_{N+3}. \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Коэффициенты c_i , $i = \overline{1, N+3}$, значения которых и определяют сплайн-поверхность $\varphi(x, y)$, находятся из решения системы линейных алгебраических уравнений:

$$\left. \begin{aligned} \varphi(x_j, y_j) &= \sum_{i=1}^N c_i r_{ij}^2 \ln r_{ij}^2 + c_{N+1} + c_{N+2} x_j + c_{N+3} y_j = f_j, \\ r_{ij}^2 &= (x_j - x_i)^2 + (y_j - y_i)^2, \quad j = \overline{1, N}; \\ \sum_{i=1}^N c_i &= 0; \quad \sum_{i=1}^N x_i c_i = 0; \quad \sum_{i=1}^N y_i c_i = 0. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Решение этой системы существует, если $N > 3$, и является единственным, если среди точек (x_j, y_j) , $j = \overline{1, N}$, имеются хотя бы три точки, не лежащие на одной прямой.

Если обозначить $\rho_{ij} = r_{ij}^2 \ln r_{ij}^2$, то можно представить эту систему более наглядно:

$$\begin{pmatrix} 0 & \rho_{12} & \dots & \rho_{1N} & 1 & x_1 & y_1 \\ \rho_{21} & 0 & \dots & \rho_{2N} & 1 & x_2 & y_2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ \rho_{N1} & \rho_{N2} & \dots & 0 & 1 & x_N & y_N \\ 1 & 1 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_N & 0 & 0 & 0 \\ y_1 & y_2 & \dots & y_N & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_N \\ c_{N+1} \\ c_{N+2} \\ c_{N+3} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ \dots \\ f_N \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (5)$$

Решать эту систему можно, используя любой вариант метода исключения Гаусса с выбором главного элемента (что необходимо ввиду наличия нулей в главной диагонали матрицы системы). Проведение соответствующих вычислений потребует примерно $2(N+3)^3$ арифметических операций и $(N+3)^2/2$ ячеек памяти ЭВМ, что в определенной степени ограничивает максимальное число узлов интерполяции N при непосредственном использовании рассматриваемого подхода.

2.2. Вывод уравнения сплайн-поверхности

Будем рассматривать сплайн-поверхность $\varphi(x, y)$, основанную на данных интерполяции x_i, y_i, f_i , $i = \overline{1, N}$, как математическую модель упругой тонкой пластинки, изогнутой под воздействием внешних сил, приложенных в точках (x_i, y_i) , $i = \overline{1, N}$.

Как показано, например, в [8], полная свободная энергия изогнутой упругой пластинки описывается соотношением

$$U = \frac{D}{2} \iint_{\Omega} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right)^2 + 2(1 - \sigma) \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \right)^2 - \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right] \right\} dx dy.$$

Здесь $\varphi(x, y)$ - смещение точек изогнутой пластинки; D - жесткость пластинки при изгибе; σ - коэффициент поперечного сжатия. Интегрирование производится по всей поверхности пластинки $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$.

Уравнение равновесия пластинки выводится из условия минимума ее свободной энергии. Для бесконечной идеально тонкой пластинки имеем вариационную задачу

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right)^2 \right\} dx dy \rightarrow \min \quad (6a)$$

при условиях

$$\varphi(x_i, y_i) = f_i, \quad i = \overline{1, N}. \quad (6b)$$

Решение этой задачи можно получить методом множителей Лагранжа, сведя ее к задаче о безусловном минимуме

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right)^2 \right\} dx dy - \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta(x_i, y_i) \rightarrow \min,$$

или, с учетом того, что

$$\varphi(x_i, y_i) = \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - x_i, y - y_i) \varphi(x, y) dx dy,$$

получаем

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \left\{ \left[\left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial x \partial y} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} \right)^2 \right] - \varphi(x, y) \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta(x - x_i, y - y_i) \right\} dx dy \rightarrow \min. \quad (7)$$

Здесь $\delta(x, y)$ - двумерная дельта-функция Дирака*.

Для **вариационной задачи** (7), в которой подынтегральная функция содержит производные второго порядка, дифференциальное **уравнение Эйлера** (необходимое условие минимума в вариационной задаче) с точностью до постоянного коэффициента имеет вид

$$\frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^4} + 2 \frac{\partial^4 \varphi}{\partial x^2 \partial y^2} + \frac{\partial^4 \varphi}{\partial y^4} = \sum_{i=1}^N \lambda_i \delta(x - x_i, y - y_i). \quad (8)$$

Заметим, что мы получили известное в теории упругости дифференциальное **уравнение Софи Жермен****, которое в векторной форме имеет вид

$$\Delta^2 \varphi = q / D,$$

где q - поперечная нагрузка, то есть действующая по нормали к пластинке внешняя сила, отнесенная к единице площади;

$\Delta = \partial^2 / \partial x^2 + \partial^2 / \partial y^2$ - двумерный оператор Лапласа.

Следуя [3], запишем общее решение уравнения (8) в виде

$$\varphi(x, y) = H(x, y) + \sum_{i=1}^N \lambda_i g(x - x_i, y - y_i).$$

Здесь $H(x, y)$ - произвольная **бигармоническая функция**, то есть общее

* Символическая дельта-функция Дирака $\delta(x)$ действительной переменной x определяется условием

$$\int_a^b f(x) \delta(x-t) dx = \begin{cases} 0 & \text{при } t > a, \quad t < b, \\ f(t)/2 & \text{при } t = a, \quad t = b, \\ f(t) & \text{при } a < t < b, \end{cases}$$

где $f(x)$ - произвольная функция, определенная в точке $x = t$.

В многомерном случае (для декартовой системы координат):

$$\delta(x_1, t_1; x_2, t_2; \dots; x_n, t_n) = \delta(x_1 - t_1) \delta(x_2 - t_2) \dots \delta(x_n - t_n).$$

** Софи Жермен (1.04.1776 – 27.06.1831) – французский математик и философ. Является одним из основоположников математической физики. За исследования в теории упругости (теории изгиба пластинок) получила Наполеоновскую премию Парижской академии наук в 1808 г. Это была первая премия, выданная Парижской академией женщине.

решение однородного бигармонического уравнения (см., например, [1]):

$$\Delta^2 H = 0.$$

а $g(x, y)$ - любое частное решение уравнения

$$\Delta^2 g(x, y) = \delta(x, y).$$

В качестве $g(x, y)$ выберем функцию

$$g(x, y) = C(x^2 + y^2) \ln(x^2 + y^2),$$

удовлетворяющую этому уравнению при некоторой постоянной C .

Теперь общее решение уравнения (8) может быть записано в виде

$$\begin{aligned} \varphi(x, y) = H(x, y) + \\ + \sum_{i=1}^N C_i \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] \ln \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right]. \end{aligned} \quad (9)$$

Применяя двумерный оператор Лапласа к левой и правой частям записанного соотношения, получим

$$\Delta \varphi(x, y) = \Delta H(x, y) + \sum_{i=1}^N 4C_i \left\{ \ln \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] + 2 \right\}.$$

Правая часть здесь состоит из двух членов, второй из которых растёт на бесконечности не быстрее $\ln(x^2 + y^2)$, а первый есть функция, **гармоническая** на всей плоскости (то есть являющаяся решением уравнения Лапласа $\Delta u = 0$) и поэтому либо равная константе, либо растущая на бесконечности не медленнее чем x и y .

В последнем случае интеграл от $|\Delta \varphi|^2$ по всей плоскости заведомо расходится, поэтому такой случай в силу (6а) невозможен.

Таким образом, $\Delta H(x, y) = const = a$, откуда

$$\begin{aligned} \Delta \varphi(x, y) &= \sum_{i=1}^N 4C_i \ln \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] + 8 \sum_{i=1}^N C_i + a = \\ &= \sum_{i=1}^N 4C_i \ln(x^2 + y^2) + 8 \sum_{i=1}^N C_i + a + \\ &\quad + 4 \sum_{i=1}^N C_i \ln \left[1 - (2xx_i + 2yy_i - x_i^2 - y_i^2) / (x^2 + y^2) \right] = \end{aligned}$$

$$= 4 \ln(x^2 + y^2) \sum_{i=1}^N C_i + 8 \sum_{i=1}^N C_i + a - \frac{8x}{x^2 + y^2} \sum_{i=1}^N C_i x_i - \frac{8y}{x^2 + y^2} \sum_{i=1}^N C_i y_i + O\left(\frac{1}{x^2 + y^2}\right).$$

Из условия интегрируемости $|\Delta\varphi|^2$ сразу же следует, что $a = 0$,

$$\sum_{i=1}^N C_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N C_i x_i = 0, \quad \sum_{i=1}^N C_i y_i = 0. \quad (10)$$

Обратно, если выполнены все эти четыре условия, то легко показать, что интеграл в задаче (6а) сходится.

Мы имеем $\Delta H(x, y) = 0$, то есть $H(x, y)$ - гармоническая функция на всей плоскости. Обратим внимание на то, что в задаче изгиба бесконечной пластинки (6) физический смысл имеют лишь те решения, для которых перерезывающие силы стремятся к нулю, то есть такие, для которых все вторые и третьи производные функции $\varphi(x, y)$ стремятся к нулю на бесконечности. Функция (9) удовлетворяет этому условию, если ему удовлетворяет функция $H(x, y)$. Но гармоническая функция, вторые производные которой стремятся к нулю на бесконечности, есть многочлен первой степени, то есть $H(x, y) = Ax + By + D$, где A, B, D - некоторые постоянные коэффициенты.

Итак, из (9) мы получили искомое соотношение, описывающее двумерную сплайн-поверхность

$$\varphi(x, y) = \sum_{i=1}^N C_i \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] \ln \left[(x - x_i)^2 + (y - y_i)^2 \right] + Ax + By + D. \quad (11)$$

Коэффициенты $C_1, C_2, \dots, C_N, A, B, D$ неизвестны и должны определяться из уравнений (6б) и (10). Этих $N + 3$ уравнений достаточно для нахождения неизвестных величин, и, поскольку они линейны, для их решения можно воспользоваться любым подходящим численным методом решения системы линейных алгебраических уравнений.

3. ОСНОВЫ ТЕОРИИ МНОГОМЕРНЫХ СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТЕЙ

Как много мы знаем и как мало понимаем.

А. Эйнштейн

Недостаточно лишь понять задачу, необходимо желание решить ее, а где есть желание, найдется путь.

Д. Пойя

3.1. Основные соотношения

Построение сплайн-поверхности можно распространить и на задачи большей размерности, а также не только на задачи интерполяции, но и на задачи сглаживания (при восстановлении функции по ее значениям, полученным с ошибками). Что касается соответствующего математического аппарата, то многие глубокие результаты были получены французскими математиками Ж. Дюшоном [13 - 15], Ж. Менге [18 - 20] и другими авторами. Соответствующие теоретические и прикладные результаты подробно изложены в работах В.А. Василенко и других отечественных публикациях (см., например, [25; 27; 29; 32; 42]).

Итак, рассмотрим построение сплайн-поверхностей в **многомерных задачах**.

Обсуждение будем вести для сплайн-функций φ из **пространства Соболева** W_p^m с гладкостью m (см. [10 - 12]).

Определение. *Пространством Соболева* $W_p^m(\Omega)$ называется пространство функций $\varphi = \varphi(t) \equiv \varphi(t_1, \dots, t_n)$, определенных на множестве $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$ и интегрируемых с p -й степенью их модуля ($1 \leq p \leq \infty$) вместе со своими обобщенными производными до порядка m включительно.

Введем в рассмотрение оператор ∇^m **обобщенных градиентов** порядка m , который функции $\varphi \in W_p^m$ ставит в соответствие набор частных производных m -го порядка:

$$\nabla^m \varphi = \left\{ \sqrt{\frac{m!}{\alpha!}} D^\alpha \varphi, |\alpha| = m \right\}. \quad (1)$$

Здесь D - оператор однократного дифференцирования в \mathbb{R}^n . Если $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ - **мультииндекс**, с $\alpha! = \alpha_1! \alpha_2! \dots \alpha_n!$ и $|\alpha| = \sum_{i=1}^n \alpha_i$, то

$$D^\alpha \varphi = \frac{\partial^{|\alpha|} \varphi}{\partial t_1^{\alpha_1} \partial t_2^{\alpha_2} \dots \partial t_n^{\alpha_n}}.$$

Для $\varphi \in W_p^m(\Omega)$ эти производные интегрируемы с квадратом, то есть выражение

$$\|\nabla^m \varphi\|_{L_2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} \sum_{|\alpha|=m} \frac{m!}{\alpha!} |D^\alpha \varphi(t)|^2 dt \right)^{1/2} \quad (2)$$

ограничено.

Заметим, что множество измеримых функций ψ , для которых функция $|\psi|^p$, при $p \geq 1$, интегрируема в области Ω , называют **пространством Лебега** $L_p(\Omega)$. Нормой функции $\psi \in L_p$ называют

$$\|\psi\|_{L_p(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} |\psi|^p dt \right)^{1/p}.$$

Далее, в соответствии с *Первой основной теоремой вложения* (см. [12]), при $mp > n$ всякая функция $\varphi(t)$ из $W_p^m(\Omega)$ непрерывна всюду в области Ω .

Поэтому мы будем предполагать, что

$$m > n/2. \quad (3)$$

Это условие гарантирует вложение пространства $W_p^m(\Omega)$ в пространство **непрерывных** функций $C(\Omega)$.

3.2. Интерполяционный D^m -сплайн

Итак, пусть Ω - некоторая ограниченная область в \mathbb{R}^n . В области Ω задан конечный набор несовпадающих точек (узлов интерполяции) t^1, t^2, \dots, t^N , в которых известны значения f_1, f_2, \dots, f_N .

Теперь, принимая в качестве функционала гладкости

$$J_m(\varphi) = \left\| \nabla^m \right\|_{L_2(\mathbb{R}^n)}^2,$$

мы можем поставить задачу отыскания соответствующей **сплайн-поверхности** (D^m -сплайна) $\varphi(t)$, $t \in \mathbb{R}^n$ из пространства Соболева $W_p^m(\mathbb{R}^n)$ с гладкостью m .

Интерполяционным D^m -сплайном назовем функцию $\varphi \in W_p^m(\mathbb{R}^n)$, являющуюся решением вариационной задачи

$$\left. \begin{aligned} J_m(\varphi) = \int_{\mathbb{R}^n} \sum_{|\alpha|=m} \frac{m!}{\alpha!} \left(D^\alpha \varphi(t) \right)^2 dt \rightarrow \min, \quad \varphi \in W_2^m(\mathbb{R}^n); \\ \varphi(t^i) = f_i, \quad i = \overline{1, N}. \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Эта задача обобщает задачу минимизации потенциальной энергии упругой пластины. Поэтому D^m -сплайны иногда называют "сплайнами типа тонкой пластинки" ("thin plate spline"). Пусть

$$M = C_{n+m-1}^n = \frac{(n+m-1)!}{n!(m-1)!}. \quad (5)$$

Очевидно, $M = \dim P_{m-1}$. Если $N \geq M$ и среди точек t^1, t^2, \dots, t^N найдется M точек, таких, что возможно однозначно определить многочлен степени $m-1$, принимающий любые заданные значения в этих точках (иногда это называют P_{m-1} -**унисольвентностью**), то наша вариационная задача (4) имеет **единственное** решение:

$$\varphi(t) = \sum_{i=1}^N c_i E_m(t, t^i) + \sum_{v=1}^M d_v \phi_v(t), \quad t \in \mathbb{R}^n, \quad (6)$$

где коэффициенты c_i удовлетворяют условиям

$$\sum_{i=1}^N c_i q(t^i) = 0, \quad \forall q \in P_{m-1}.$$

Здесь, в первом слагаемом,

$$E_m(u, v) = E(|u - v|) = E(\tau).$$

Функция $E(\tau)$ является фундаментальным решением (**функцией Грина**) **полигармонического уравнения** (так называемого *итерированного лапласиана*)

$$\Delta^m \varphi = \left(\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial t_i^2} \right)^m \varphi = 0,$$

которое для нашей вариационной задачи есть не что иное, как **уравнение Эйлера** (необходимое условие минимума функционала $J_m(\varphi)$). Эта функция Грина имеет вид (см. [11])

$$E(\tau) = \begin{cases} \frac{(-1)^{n/2-1}}{2^{2m-1} \pi^{n/2} (m-1)!(m-n/2)!} \tau^{2m-n} \ln \tau, & \text{если } 2m \geq n \text{ и } n \text{ четное;} \\ \frac{(-1)^m \Gamma(n/2 - m)}{2^{2m} \pi^{n/2} (m-1)!} \tau^{2m-n}, & \text{в остальных случаях.} \end{cases}$$

Учитывая свойства гамма-функции, с точностью до положительного постоянного множителя мы можем принять

$$E(\tau) = \begin{cases} (-1)^{n/2-1} \tau^{2m-n} \ln \tau, & \text{при } n \text{ четном;} \\ (-1)^{(n-1)/2} \tau^{2m-n}, & \text{при } n \text{ нечетном.} \end{cases} \quad (7)$$

Второе слагаемое в правой части выражения (6) является многочленом степени $m-1$:

$$p(t) = \sum_{v=1}^M d_v \phi_v(t), \quad t \in \mathbb{R}^n, \quad p \in P_{m-1}, \quad (8)$$

где $\phi_v(t)$, $v = \overline{1, M}$ - это различные n -мерные одночлены степени не большей, чем $m-1$, то есть всевозможные одночлены вида

$$\phi_v(t) = (t)^{\alpha^v} = (t_1)^{\alpha_1^v} (t_2)^{\alpha_2^v} \dots (t_n)^{\alpha_n^v} \equiv \prod_{j=1}^n (t_j)^{\alpha_j^v}, \quad (9)$$

при $|\alpha^v| = \sum_{j=1}^n \alpha_j^v = \overline{0, m-1}$.

Как уже отмечалось, коэффициенты $c_i, i = \overline{1, N}$ в выражении (6) удовлетворяют условиям $\sum_{i=1}^N c_i q(t^i) = 0, \forall q \in P_{m-1}$, то есть

$$\sum_{i=1}^N c_i \phi_v(t^i) = 0, \quad v = \overline{1, M}. \quad (10)$$

Заметим, что для ранее рассмотренного нами случая, когда $m = n = 2$, $t = (x, y) \in \mathbb{R}^2$, задача (4) принимает вид

$$\left. \begin{aligned} \varphi(x_i, y_i) &= f_i, \quad i = \overline{1, N}; \\ J_2(\varphi) &= \int_{\mathbb{R}^2} (\varphi_{xx}^2 + 2\varphi_{xy}^2 + \varphi_{yy}^2) dx dy = \min. \end{aligned} \right\}$$

В этом случае $M = 3!/2!/1! = 3$ и для существования и единственности решения задачи достаточно потребовать, чтобы среди узлов интерполяции нашлись три точки, не лежащие на одной прямой.

Коэффициенты D^m -сплайна (6)

$$c = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T, \quad d = (d_1, d_2, \dots, d_M)^T$$

находим из решения соответствующей линейной системы, состоящей из $N + M$ уравнений с $N + M$ неизвестными:

$$\left. \begin{aligned} E c + \Phi d &= f, \\ \Phi^T c &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (11)$$

или

$$\begin{bmatrix} E & \Phi \\ \Phi^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (11a)$$

Здесь $f = (f_1, f_2, \dots, f_N)^T$;

$E = \{E_{ij} \equiv E_m(t^i, t^j)\}$ - симметрическая матрица $N \times N$;

$\Phi = \{\Phi_{iv} \equiv \phi_v(t^i)\}$ - матрица $N \times M$.

Нетрудно убедиться в том, что матрица $(N + M) \times (N + M)$ этой системы имеет уже знакомый нам вид - с нулевой главной диагональю и для решения системы (11) могут использоваться те же численные методы линейной алгебры, что и в двумерном случае.

3.3. Понятие о сглаживающих сплайн-поверхностях

Интересно рассмотреть задачу восстановления функции $f(t)$, $t \in \mathbb{R}^n$, для которой значения функции в узлах $f_i = f(t^i)$, $i = \overline{1, N}$, известны не точно, а с ошибками. Тогда целесообразно построить сплайн-функцию $\varphi(t)$, $t \in \mathbb{R}^n$, минимизирующую функционал $J_m(\varphi)$, то есть наиболее "гладкую", но не проходящую точно через точки $\{t^i, f_i; i = \overline{1, N}\}$, а обеспечивающую приемлемое значение среднеквадратической погрешности (невязки), то есть

$$J_m(\varphi) = \min, \quad \left. \begin{array}{l} \\ \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\varphi(t^i) - f_i)^2 \leq \varepsilon^2. \end{array} \right\} \quad (12)$$

Очевидно, что при $\varepsilon = 0$ оптимальным решением задачи (12) будет интерполяционный D^m -сплайн.

Имеется еще одно критическое значение ε , определяемое условием

$$\varepsilon_*^2 = \min_{\varphi \in P_{m-1}} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\varphi(t^i) - f_i)^2. \quad (13)$$

Поскольку при этом $J_m(\varphi) = 0$, то при $\varepsilon \geq \varepsilon_*$ решением задачи (12) будет полином из P_{m-1} , на котором достигается минимум в (13).

Если рассматривать случай $0 < \varepsilon < \varepsilon_*$, то с помощью метода множителей Лагранжа задачу условной минимизации (12) можно свести к задаче безусловной минимизации:

$$\lambda J_m(\varphi_\lambda) + \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\varphi_\lambda(t^i) - f_i)^2 = \min, \quad \varphi_\lambda \in W_2^m. \quad (14)$$

Функцию $\varphi_\lambda \in W_2^m$, являющуюся решением задачи (14), назовем **сглаживающим D^m -сплайном с параметром сглаживания $\lambda \geq 0$** .

Решение этой задачи описывается теми же соотношениями (6)-(10), что и для интерполяционного D^m -сплайна, однако коэффициенты сглаживающего D^m -сплайна $c = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T$, $d = (d_1, d_2, \dots, d_M)^T$ находятся путем решения линейной системы

$$\left. \begin{aligned} (E + N\lambda I)c + \Phi d &= f, \\ \Phi^T c &= 0, \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

или

$$\begin{bmatrix} E + N\lambda I & \Phi \\ \Phi^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (15a)$$

где I - единичная матрица $N \times N$, а остальные обозначения такие же, как и в (11).

При $\lambda \rightarrow 0$ сглаживающие сплайны φ_λ сходятся к интерполяционному сплайну φ в норме пространства W_2^m .

Естественно, возникает вопрос о выборе параметра сглаживания λ . Пусть известен, хотя бы приблизительно, средний квадратичский уровень ε ошибки при определении значений f_1, f_2, \dots, f_N . Определим при $\lambda > 0$ функцию $\rho(\lambda)$, характеризующую меру "невязки" сплайн-функции $\varphi_\lambda(t)$ и исходных данных f_1, f_2, \dots, f_N :

$$\rho(\lambda) = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\varphi_\lambda(t^i) - f_i)^2 \right]^{1/2}. \quad (16)$$

Оптимальное значение параметра сглаживания λ_* можно искать из естественного условия

$$\rho(\lambda_*) = \varepsilon. \quad (17)$$

Вычислительные аспекты решения этого нелинейного уравнения рассмотрены, например, в [25; 29].

4. НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТЕЙ

Как это ни парадоксально звучит, все точные науки проникнуты идеей аппроксимации.

Б. Рассел

4.1. Дифференцируемость D^m -сплайнов

Сформулированное нами решение вариационной задачи оптимального восполнения функции многих переменных $f(t)$, $t \in \mathbb{R}^n$, сплайн-поверхностью $\varphi(t)$ обладает двумя важными свойствами: **гладкостью** и **полиномиальной точностью**. Это означает, в частности, что сплайн-поверхность $\varphi \in W_2^m(\mathbb{R}^n)$ **точно** (с точностью до погрешностей вычислений) восстанавливает n -мерный многочлен $(m - 1)$ -й степени.

Что касается гладкости, то сплайн-поверхности $\varphi(t)$ (или $\varphi_\lambda(t)$) бесконечно дифференцируемы в любых точках $t \in \mathbb{R}^n$, кроме точек $t = t^i$, $i = \overline{1, N}$, где они непрерывно дифференцируемы вплоть до производных порядка $k < 2m - n$. Таким образом, в зависимости от значений n и m , сплайн принадлежит классу $C^k(\mathbb{R}^n)$ с $k = 2m - n - 1$.

Поэтому, выбирая параметр $m > n/2$, входящий в вариационный функционал (функционал "гладкости") $J_m(\varphi)$, можно построить D^m -сплайн любого порядка гладкости. Например, в двумерной задаче ($n = 2$) при $m = 2$ сплайн-поверхность обладает гладкостью C^1 .

Увеличение m приводит к сплайнам, точно восстанавливающим полиномы более высокой степени, однако при этом растет порядок $(N + M) \times (N + M)$, $M = C_{n+m-1}^n$, и ухудшается **обусловленность** матрицы системы линейных алгебраических уравнений (3.11), (3.15), определяющей коэффициенты D^m -сплайна.

4.2. Оценки погрешностей интерполяции и сходимость сплайн-поверхностей

Рассмотрим некоторые результаты, касающиеся ошибок интерполяции сплайн-поверхностью и сходимости вариационных сплайн-поверхностей на сгущающихся сетках точек.

Впервые асимптотические оценки погрешностей интерполяции вариационной сплайн-поверхностью (D^m -сплайном) детально исследовал Ж. Дюшон (1978), который доказал следующую теорему.

Теорема (см. [15]).

Пусть Ω открытая ограниченная область из \mathbb{R}^n с липшицевой границей, целое $m > n/2$, $p \in [2, \infty]$, и целое $k \leq m - (n/2) + (n/p)$ (исключая случай $k = m - n/2$ при $p = \infty$). Для любой функции $f \in W_2^m(\Omega)$ и $\varepsilon > 0$ существует значение h_0 , такое, что для всякого множества точек интерполяции $A \subset \Omega$, при характерном параметре сетки

$$h = \sup_{t \in \Omega} \inf_{a \in A} |t - a| \leq h_0,$$

мы имеем для сплайн-поверхности $\varphi(t)$

$$\|D^k(f - \varphi)\|_{L_p(\Omega)} \leq \varepsilon h^{m-k-(n/2)+(n/p)}. \quad (1)$$

Некоторые исследования по этой проблематике проводились также В.А. Василенко (1978, 1983, 1984) (см. [17; 25; 27]) и А.Ю. Бежаевым (1984) (см. [26]).

Интересные уточнения и расширения результатов Ж. Дюшона предложил в 1999 г. М. Джонсон [37; 39; 43]. Он рассматривает асимптотическую оценку погрешности:

$$\delta \equiv \|f - \varphi\|_{L_p(\Omega)} = O(h^\gamma). \quad (2)$$

Наибольшее из значений γ называется *порядком L_p -аппроксимации*

при интерполяции функции f сплайн–поверхностью $\varphi \in W_2^m(\mathbb{R}^n)$ с гладкостью $m > n/2$ на ограниченной области $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ с достаточно гладкой границей. М. Джонсон доказал, что если точки интерполяции содержатся *внутри* замыкания $\bar{\Omega}$, то

$$\gamma_p + 1/2 \leq \gamma \leq m + 1/p, \quad (3)$$

где $\gamma_p = \min\{m, m - n/2 + n/p\}$ для любого $p \in [1, \infty]$ – это оценка снизу, полученная ранее Ж. Дюшоном.

Наиболее интересны случаи $p = 2$ и $p = \infty$. Так, для $p = 2$ (с учетом нормировки к $|\Omega| = 1$) мы имеем среднюю квадратическую оценку погрешности интерполяции:

$$\left. \begin{aligned} \delta_2 &= \left[\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} |f(t) - \varphi(t)|^2 dt \right]^{1/2} = O(h^\gamma); \\ \gamma &= m + 1/2. \end{aligned} \right\} \quad (4a)$$

Для $p = \infty$ получаем максимальную абсолютную погрешность:

$$\left. \begin{aligned} \delta_\infty &= \sup_{t \in \Omega} |f(t) - \varphi(t)| = O(h^\gamma); \\ m - n/2 + 1/2 &\leq \gamma \leq m. \end{aligned} \right\} \quad (4b)$$

Аппроксимативные свойства D^m –сплайнов при интерполировании функций на хаотических сетках точек исследовал также О.В. Матвеев (1991 – 1997). Как заметил М. Джонсон (частное сообщение), на основании результатов О.В. Матвеева [30, 31, 35] можно сформулировать следующее утверждение.

Если область оценки погрешностей интерполяции Ω_ε расположена *строго внутри* области Ω , содержащей точки интерполяции, то порядок L_p –аппроксимации γ составляет $2m$ для любого $p \in [1, \infty]$.

Полезные результаты по оценке погрешностей двумерной интерполяции сплайн-поверхностью ($n = 2, m = 2$) на конечных сетках точек получил в 1994 г. М. Пауэлл. В частности, в его работе [33] доказано следующее утверждение.

Теорема.

Пусть f это функция из R^2 на R , имеющая интегрируемые с квадратом вторые производные. Пусть конечное множество точек интерполяции $t^i \in \Omega, i = \overline{1, N}$, образует квадратную сетку с размером ячейки \tilde{h} , покрывающую единичный квадрат $\Omega = [0, 1] \times [0, 1]$. Тогда погрешность интерполяции для любого $t \in \Omega$ ограничена неравенством

$$|f(t) - \varphi(t)| \leq \left[(32\pi)^{-1} (3 \ln 2) I(f) \right]^{1/2} \tilde{h}, \quad (5)$$

где

$$I(f) = \int_{\Omega} \left[\left(\frac{\partial^2 f(t)}{\partial t_1^2} \right)^2 + 2 \left(\frac{\partial^2 f(t)}{\partial t_1 \partial t_2} \right)^2 + \left(\frac{\partial^2 f(t)}{\partial t_2^2} \right)^2 \right] dt.$$

Заметим, что сравнение приближенных значений $\delta_2(h)$ или $\delta_{\infty}(h)$, получаемых по результатам вычислительных экспериментов для конкретных тестовых функций $f(t), t \in R^n$, с приведенными выше асимптотическими зависимостями имеет смысл лишь для сеток со значениями характерного параметра h , близкими к параметру оптимального покрытия области Ω заданным числом точек N . Так будет, например, для "кубических" сеток (когда $h = \tilde{h} \sqrt{n}/2$) или для *равномерно распределенных* последовательностей точек (см. главу 7) и для множества тестовых функций $f(t)$.

При оценке соответствия экспериментальных значений порядка L_p -аппроксимации γ приведенным ранее теоретическим соотношениям можно считать, что $\delta \cong c h^{\gamma}$ или $\lg \delta \cong \lg c + \gamma \lg h$, учитывая, что для

квадратной сетки точек характерный параметр h отличается от шага сетки \tilde{h} лишь на постоянный множитель $1/\sqrt{2}$.

Некоторые результаты такого сопоставления экспериментальных оценок погрешностей гладкого восполнения функций двух переменных при интерполяции сплайн-поверхностью на сгущающихся сетках узлов с приведенными здесь теоретическими соотношениями обсуждаются в [40; 41]. При этом рассматривались различные тестовые функции $f(t)$, различные области размещения узлов интерполяции (квадрат, круг) и области оценок норм погрешностей.

В практических приложениях интересно оценивать асимптотическую зависимость погрешностей интерполяции не от характерного параметра сетки точек $h \rightarrow 0$, а от числа точек $N \rightarrow \infty$. При этом можно воспользоваться приведенными в главе 7 оценками так называемого "разброса" сетки, совпадающего с характерным параметром сетки h .

Так, для "кубических" сеток $h = \frac{\sqrt{n}}{2} N^{-1/n}$; для равномерно распределенных последовательностей точек (ЛП_τ-последовательности, последовательности Холтона и др.) имеется оценка

$$(\omega_n N)^{-1/n} \leq h \leq 2\sqrt{n} \cdot O(\ln N \cdot N^{-1/n}),$$

где ω_n - объем единичного шара в R^n . Полагая, что в общем случае $h \approx O(N^{-1/n})$, получаем

$$\delta \equiv \|f - \varphi\|_{L_p(\Omega)} = O(h^\gamma) \approx O(N^{-\gamma/n}). \quad (6)$$

5. ОБОБЩЕНИЕ ПОНЯТИЯ D^m -СПЛАЙНА

Никто не обнимет необъятного.

Козьма Прутков

5.1. Основные соотношения

Расширим понятие D^m -сплайна (сплайн-поверхности) и, следуя Ж. Дюшону [14], определим функционал гладкости $J(\varphi)$ через семейство **полуноrm**

$$J(\varphi) \equiv \|\varphi\|_{m,s} = \left(\int_{\mathbb{R}^n} |\tau|^{2s} |F \nabla^m \varphi(\tau)|^2 d\tau \right)^{1/2}. \quad (1)$$

Здесь F – оператор **преобразования Фурье**:

$$F f(x) = \bar{f}(x) = \frac{1}{(2\pi)^{n/2}} \int_{\mathbb{R}^n} f(\xi) e^{-i\xi \cdot x} d\xi,$$

$m > 0$ – фиксированное целое, s – вещественный параметр.

Примечание. Полуноrmой (или предноrmой) на векторном пространстве X называют отображение p со свойствами *нормы*:

$$\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|; \quad \|x + y\| \leq \|x\| + \|y\|,$$

кроме свойства *невырожденности*: равенство $\|x\| = 0$ не исключает $x \neq 0$.

Минимизация полуноrm (1) при заданных интерполяционных условиях приводит к сплайн-функциям $\varphi(x)$ уже знакомого нам очень простого вида, которые:

- 1) сохраняют многочлены степени $\leq m - 1$;
- 2) перестановочны как с гомотетиями, так и с переносами и вращениями в \mathbb{R}^n ;
- 3) сходятся в пространствах Соболева $W_2^{m+s}(\Omega)$.

Примечание. Перестановочность с гомотетиями означает, что интегрирование на сжатом множестве точек λA дает такой же результат,

что и интегрирование на A (с такими же значениями) и последующее применение сжатия $t \mapsto \lambda t$.

Мы будем рассматривать случай $m + s > \frac{n}{2}$, и $s < \frac{n}{2}$, когда W_2^{m+s} есть пространство **непрерывных** функций, а исходными данными являются значения в конечном множестве точек.

Теорема (Ж.Дюшон [13, 14]).

Пусть A есть конечное подмножество из \mathbb{R}^n , содержащее P_{m-1} -*унисольвентное* подмножество точек. Тогда существует единственная функция вида

$$\varphi(t) = \sum_{a \in A} c_a K_{2m+2s-n}(t-a) + p(t) \quad (2)$$

с $p \in P_{m-1}$, и $\sum_{a \in A} c_a q(a) = 0$, $\forall q \in P_{m-1}$, принимающая заданные значения на A .

Кроме того, если ψ есть другая функция, принимающая такие же значения на A , то мы имеем $\|\varphi\|_{m,s} \leq \|\psi\|_{m,s}$.

Здесь $K_r(\tau) = |\tau|^r \ln|\tau|$, если r - четное положительное целое число, и $K_r(\tau) = |\tau|^r$ в остальных случаях.

Заметим, что при $s = 0$, с учетом того, что **изометричность** преобразования Фурье на $L^2(\mathbb{R}^n)$ позволяет записать

$$\int_{\mathbb{R}^n} |F \nabla^m \varphi(t)|^2 dt = \int_{\mathbb{R}^n} |\nabla^m \varphi(t)|^2 dt,$$

мы получим в качестве $\varphi(t)$ известную нам сплайн-поверхность "типа тонкой пластинки".

Примечание. *Изометричным* преобразованием называется отображение метрического пространства X в X , сохраняющее расстояние между точками.

Сплайны, получаемые на основе функционала гладкости (1), принадлежат классу гладкости $C^k(\Omega)$, где $0 \leq k \leq 2m + 2s - n$.

Применительно к вариационной задаче

$$\begin{cases} \varphi(t^i) = f_i, & i = \overline{1, N}, \\ \|\varphi\|_{m,s} = \min, \end{cases} \quad (3)$$

решение имеет вид

$$\varphi(t) = \sum_{i=1}^N c_i G_{m,s}(t, t^i) + \sum_{v=1}^M d_v \phi_i(t), \quad (4)$$

где

$$G_{m,s}(u, v) = (-1)^{\left[m+s-\frac{n}{2} \right]+1} g_{2m+2s-n}(u-v), \quad (5)$$

причем

$$g_r(\tau) = \begin{cases} |\tau|^r \ln|\tau|, & \text{если } r - \text{четное целое число,} \\ |\tau|^r & \text{в остальных случаях;} \end{cases}$$

$$|\tau| = \left(\sum_{k=1}^n \tau_k^2 \right)^{1/2}.$$

Коэффициенты $c_i, i = \overline{1, N}$ и $d_v, v = \overline{1, M}$ находим из системы уравнений

$$\begin{bmatrix} G & \Phi \\ \Phi^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}. \quad (6)$$

5.2. Псевдо-полиномиальные сплайны

Рассмотрим некоторые рекомендации по выбору параметров m и s в формулах (1)-(5). Основным критерием выбора является требуемая **гладкость** решения $\varphi(t)$.

1. Пусть требуется построить интерполянт, принадлежащий классу $C^k(\Omega)$. Тогда параметры m, s необходимо выбирать из неравенства

$$m + s > k/2 + n/2. \quad (7)$$

Увеличение m приводит к сплайнам, точно восстанавливающим полиномы более высокой степени, однако при этом растет порядок и **число обусловленности** матрицы системы (6). Увеличение s не приводит к увеличению порядка матрицы, однако обусловленность матрицы тоже ухудшается.

2. С точки зрения эффективности вычислений следует выбирать вещественный параметр s так, чтобы величина

$$r = 2m + 2s - n \quad (8)$$

была **целым нечетным** числом.

Если r не является целым числом, то при построении матрицы и расчете частных производных сплайна возникает необходимость в операции возведения в вещественную степень, что достаточно "дорого" обходится при массовых вычислениях.

Если r - четное целое число, то вместо возведения в вещественную степень требуется операция логарифмирования, что также достаточно "дорого".

3. Для большинства приложений можно рекомендовать выбор

$$s = \frac{n-1}{2}, \quad (9)$$

и мы получаем так называемые **псевдо-полиномиальные** сплайны вида

$$\varphi(t) = \sum_{a \in A} c_a |t - a|^{2m-1} + p(t), \quad (10)$$

где $p \in P_{m-1}$ и $\sum c_a q(a) = 0, \forall q \in P_{m-1}$.

При $m = 1$ получаем **мульти-конические** сплайны

$$\varphi(t) = \sum_{a \in A} c_a |t - a| + C, \quad \text{с } \sum c_a = 0, \quad (11)$$

и множество A должно содержать **две различные** точки.

Наиболее интересен выбор

$$m = 2, \quad s = \frac{n-1}{2}. \quad (12)$$

При этом получаются **псевдо-кубические** сплайны, если A не содержится в гиперплоскости (или в прямой, при $n = 2$):

$$\varphi(t) = \sum_{a \in A} c_a |t - a|^3 + \alpha \cdot t + \beta, \quad \text{с } \sum c_a = 0 \text{ и } \sum c_a \cdot a = 0. \quad (13)$$

Возвращаясь к привычной нотации, можно записать

$$\varphi(t) = \sum_{i=1}^N c_i |t - t^i|^3 + \sum_{k=1}^n \alpha_k t_k + \beta, \quad t \in \mathbb{R}^n. \quad (13a)$$

Коэффициенты такого сплайна находим, решая линейную систему из $N + n + 1$ уравнений:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^N |t^i - t^j|^3 c_i + \sum_{k=1}^n t_k^j \alpha_k + \beta &= f(t^j), \quad j = \overline{1, N}; \\ \sum_{i=1}^N c_i t_k^i &= 0, \quad k = \overline{1, n}; \\ \sum_{i=1}^N c_i &= 0. \end{aligned} \quad (14)$$

Заметим, что при $n = 1$ мы получаем обычные полиномиальные (кубические) сплайны.

5.3. Стохастические сплайны

В некоторых задачах математическая модель восстанавливаемой по дискретным данным функции $f(t)$, $t \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, может быть определена **вероятностным** образом. Например, можно представить $f(t)$ как реализацию **случайного процесса** $\eta(t; \omega)$ на \mathbb{R}^n , с некоторыми заданными статистическими характеристиками.

Тогда, при данных $\{t^i, f_i = f(t^i), i = \overline{1, N}\}$, мы можем считать f_i значениями этой случайной реализации в N заданных точках t^i .

Задачу получения оценки $\varphi(t)$ для "случайной" реализации $f(t)$ можно представить в виде **статистической игры** (см., например, [46]) с функционалом потерь $W(f, \varphi)$. В такой игре "природа" выбирает $f(t)$ так, чтобы максимизировать W , а мы должны минимизировать W разумным выбором оценки $\varphi(t)$.

В моей работе 1984 г. [47] была получена соответствующая **минимаксная оценка** $\varphi(t)$ восстанавливаемой функции $f(t)$ для случая, когда $f, \varphi \in L_p(\Omega)$, а $W(f, \varphi) = \|\varphi - f\|_{L_p(\Omega)}^p$.

Если $\eta(t; \omega)$ есть гауссово случайное поле со средним значением $E[f(t)] = \mu$ и известной корреляционной функцией

$$H(t, s) = E[(f(t) - \mu)(f(s) - \mu)], \quad t, s \in \Omega,$$

то минимаксная оценка $\varphi(t)$ имеет вид

$$\varphi(t) = \mu + h(t)^T H^{-1}(f - M). \quad (15)$$

Здесь $h(t) = (H(t, t^1), \dots, H(t, t^N))^T$,

$$H = \{H(t^i, t^j); \quad i, j = \overline{1, N}\},$$

$$f = (f(t^1), \dots, f(t^N))^T,$$

$$M = (\mu, \dots, \mu)^T.$$

Аналогичную **байесовскую оценку** приводит Шаген в [45].

Заметим, что если корреляционная функция дважды дифференцируема, то и оценка $\varphi(t)$ будет гладкой функцией, причем аналитические формулы для производных от $\varphi(t)$ имеют столь же простой вид.

Достаточно реалистичным обычно является предположение об **однородности** и **изотропности** случайного поля $\eta(t; \omega)$, а

$$H(t, s) = \sigma^2 g(\tau), \quad \tau = |t - s|,$$

где $g(0) = 1$, и $|g(\tau)| \leq 1$ для $\tau \geq 0$, а σ^2 - **дисперсия** случайного поля: $\sigma^2 = E(f(t) - \mu)^2$. Тогда наша оценка $\varphi(t)$ принимает вид

$$\begin{aligned} \varphi(t) &= \mu + c(t)^T G^{-1}(f - M) = \\ &= \mu + \gamma^T c(t), \end{aligned} \quad (16)$$

где $c(t) = (g(|t - t^1|), \dots, g(|t - t^N|))^T$,

$$G = \{g(\tau_{ij}), \quad i, j = \overline{1, N}\}.$$

Очевидно, вектор

$$\gamma = G^{-1}(f - M) \quad (17)$$

зависит лишь от исходных N точек и может быть вычислен "раз и навсегда".

Заметим, что в нашем решении значение σ^2 не требуется, поскольку оно сокращается в приведенной выше формуле для $\varphi(t)$.

При параметрическом представлении корреляционной функции, например, в виде

$$g(\tau) = e^{-\tau^2/2\rho_0^2}, \quad (18)$$

где ρ_0 - **интервал пространственной корреляции** случайного поля $\eta(t; \omega)$, можно попытаться грубо оценивать значения μ и параметра $\rho_0 > 0$ по исходным данным $\{t^i, f_i, i = \overline{1, N}\}$.

Кстати, о дифференцировании $\varphi(t)$:

$$\frac{\partial}{\partial t_j} \varphi(t) = \gamma^T \frac{\partial}{\partial t_j} c(t), \quad j = \overline{1, n},$$

или, для выбранной нами модели случайного поля

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t_j} \varphi(t) &= \sum_{i=1}^n \gamma_i \frac{\partial}{\partial t_j} c_i(t) = \\ &= \sum_{i=1}^n \gamma_i (t_j^i - t_j) g(|t - t^i|) / \rho_0^2. \end{aligned} \quad (19)$$

В одной из опубликованных работ Киммельдорфа и Уабы [44] показано, что построение статистической оценки такого вида соответствует построению некоторого D^m -сплайна, обеспечивающего минимизацию **функционала гладкости** на элементах $\varphi(t)$ из гильбертова пространства с воспроизводящим ядром $H(t, s)$. Поэтому нашу оценку $\varphi(t)$ можно назвать **стохастической сплайн-поверхностью**.

6. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ ПОСТРОЕНИЯ СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТЕЙ

Нужен разум, чтобы знать, что давать машине.

Н. Винер

Недостаточно только иметь хороший разум, но главное - это хорошо применять его.

Декарт

6.1. Особенности реализации "канонического" алгоритма

Алгоритм построения интерполяционного или сглаживающего D^m -сплайна состоит из двух основных частей:

а) ввод исходных данных, формирование матрицы системы и решение системы линейных алгебраических уравнений с целью вычисления коэффициентов D^m -сплайна;

б) вычисление значений D^m -сплайна (а также, при необходимости, его производных) в любой заданной точке.

Рассмотрим более подробно некоторые вычислительные аспекты реализации этого алгоритмического процесса.

При **вводе исходных данных** должны быть заданы координаты и значения восстанавливаемой функции в N точках:

$$t^1, f_1; t^2, f_2; \dots; t^N, f_N, \quad (1)$$

где $t^i \equiv (t_1^i, t_2^i, \dots, t_N^i)^T \in \mathbb{R}^n$, $i = \overline{1, N}$.

Кроме того, выбирается параметр гладкости сплайна, m . Выполнение условия

$$m > n/2 \quad (2)$$

обеспечивает непрерывность D^m -сплайна $\varphi(t)$, $t \in \mathbb{R}^n$. Заметим, что параметр m определяет степень $m - 1$ многочленов от n переменных, точно

воспроизводимых сплайн-поверхностью $\varphi(t)$.

Количество точек N должно удовлетворять необходимому условию существования и единственности D^m -сплайна:

$$N \geq M, \quad (3)$$

где $M = (n + m - 1)! / (m - 1)! / n!$.

Последовательность ввода данных и порядок их индексации $i = 1, 2, \dots, N$, могут быть произвольными. Для того чтобы матрица системы при вычислении коэффициентов D^m -сплайна не оказалась вырожденной, необходимо, чтобы N точек t^1, t^2, \dots, t^N не лежали в гиперплоскости размерности $m - 1$ или меньшей. Например, если $m = 2$, то N точек не должны попасть на одну прямую. В целом, непротиворечивость исходных данных и соответственно невырожденность матрицы системы эффективно контролируется при ее последующем решении.

Следующим этапом решения задачи является **формирование матрицы системы** линейных алгебраических уравнений

$$\begin{bmatrix} E + N\lambda I & \Phi \\ \Phi^T & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (4)$$

или $Ab = z$. Здесь нами ранее были введены обозначения:

$$c = (c_1, c_2, \dots, c_N)^T, \quad d = (d_1, d_2, \dots, d_M)^T;$$

$$f = (f_1, f_2, \dots, f_N)^T;$$

$$E = \{E_{ij} \equiv E_m(t^i, t^j); \quad i, j = \overline{1, N}\};$$

$$\Phi = \{\Phi_{iv} = \phi_v(t^i); \quad i = \overline{1, N}; \quad v = \overline{1, M}\};$$

I – единичная матрица размера $N \times N$.

При построении интерполяционного D^m -сплайна принимаем $\lambda = 0$.

Матрица системы A размера $(N + M) \times (N + M)$ является симметрической и состоит из четырех клеток

$$A = \begin{bmatrix} E + N\lambda I & \vdots & \Phi \\ \dots\dots\dots & \vdots & \dots \\ \Phi^T & \vdots & 0 \end{bmatrix}. \quad (5)$$

Элементы E_{ij} ; $i, j = \overline{1, N}$ вычисляются по уже известной нам формуле

$$E(\tau) = \begin{cases} (-1)^{n/2-1} \tau^{2m-n} \ln \tau, & \text{при } n \text{ четном;} \\ (-1)^{(n-1)/2} \tau^{2m-n}, & \text{при } n \text{ нечетном,} \end{cases} \quad (6)$$

где $\tau_{ij} = |t^i - t^j| = \left(\sum_{k=1}^n |t_k^i - t_k^j|^2 \right)^{1/2}$, $i, j = \overline{1, N}$.

Заметим, что при *четном* значении размерности n целесообразно избежать вычисления квадратного корня в τ_{ij} и воспользоваться для E_{ij} соотношением

$$E_{ij} = (\tau_{ij}^2)^{m-n/2} \ln(\tau_{ij}^2). \quad (6a)$$

Это приведет лишь к соответствующему изменению масштаба коэффициентов D^m -сплайна, вычисляемых при решении системы (5).

Несколько сложнее обстоит дело с вычислением элементов Φ_{iv} , $i = \overline{1, N}$, $v = \overline{1, M}$. По-существу, для каждой точки t^i , $i = \overline{1, N}$, необходимо сформировать M одночленов $\phi_v(t^i)$, $v = \overline{1, M}$, то есть всевозможные одночлены вида

$$(t)^{\alpha^v} = (t_1)^{\alpha_1^v} (t_2)^{\alpha_2^v} \dots (t_n)^{\alpha_n^v}, \quad |\alpha^v| = \sum_{j=1}^n \alpha_j^v = \overline{0, m-1}. \quad (7)$$

В качестве справочного материала приводим процедуру вычисления целочисленного массива $\text{Ind}[1..n, 1..MM]$, содержащего *мультииндексы* $\alpha^v = (\alpha_1^v, \alpha_2^v, \dots, \alpha_n^v)$, $v = \overline{1, MM}$, используемые в (7). Процедура написана на языке Турбо Паскаля на основе соответствующего алгоритма из [25].


```

const nmax = ...; MMmax = ...;
type VecI = array[1..MMmax] of byte;
      IMatr = array[1..nmax] of VecI;
-----
procedure MultInd(n,m,MM: byte; var Ind: IMatr);
var i,j,k,l,n1,n2,a: byte;
begin
  for i := 1 to n do
    for j := 1 to MM do Ind[i,j] := 0;
  for j := 1 to m do Ind[1,j] := j - 1;
  n1 := m;
  i := 1;
  while (i <= n-1) and (n1 < MM) do begin
    n2 := n1;
    for j := 1 to n2 do begin
      a := 0;
      for k := 1 to n do a := a + Ind[k,j];
      if a < m-1 then begin
        for k := n1 + 1 to n1 + m - a - 1 do begin
          for l := 1 to i do Ind[l,k] := Ind[l,j];
          Ind[i + 1,k] := k - n1
        end;
        n1 := n1 + m - a - 1
      end
    end;
    i := i + 1
  end
end;

```

Например, если $n=2$, $m=3$, то $MM=4!/2!/2!=6$ и

$$\text{Ind} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 & 2 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 2 \end{bmatrix}$$

Таким образом,

$$\begin{aligned} \phi_1(t) &= 1, & \phi_2(t) &= t_1, & \phi_3(t) &= t_2, \\ \phi_4(t) &= (t_1)^2, & \phi_5(t) &= t_1 t_2, & \phi_6(t) &= (t_2)^2. \end{aligned}$$

С учетом того, что вычисление значений функций $E_m(t, t^j)$, $j = \overline{1, N}$, и $\phi_v(t)$, $v = \overline{1, M}$, потребуется также и при вычислении значений D^m -сплайна $\varphi(t)$, $t \in \mathbb{R}^n$, целесообразно оформить их в виде соответствующих вспомогательных алгоритмов (подпрограмм).

Итак, теперь необходимо найти решение **системы линейных алгебраических уравнений** (4) с плотной матрицей (5), которая всегда симметрична, но *не положительно определена* (это очевидно, в частности, для случая интерполяционного D^m -сплайна, при $\lambda = 0$).

Этот этап является самым дорогостоящим как с точки зрения расхода машинного времени, так и с точки зрения потребной оперативной памяти компьютера. Требуется, как минимум, $(N + M)^2$ ячеек оперативной памяти и $2/3 (N + M)^3$ арифметических операций.

Существует много практических задач, в которых положение узлов интерполяции, а значит, и матрица системы, остаются неизменными, меняются от варианта к варианту лишь значения функции в узлах (то есть правая часть системы). В таких задачах рентабельно один раз найти обратную матрицу A^{-1} , после чего многократно использовать ее для вычисления решения системы $b = A^{-1} z$, то есть

$$\begin{bmatrix} c \\ d \end{bmatrix} = A^{-1} \begin{bmatrix} f \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (8)$$

затрачивая на каждый последующий вариант только $(N + M)^2$ действий.

Соответствующие вычислительные алгоритмы непосредственного решения системы могут быть основаны на **методе Гаусса с выбором главного элемента** (см., например, [2; 53]) и должны реагировать на возможную вырожденность матрицы системы (для выяснения, в частности, непротиворечивости исходных данных).

Отметим еще один вычислительный аспект, возникающий при решении системы (4). Если значения координат точек $t^i, i = \overline{1, N}$, заданы в реальных единицах измерения (метрах, километрах и т.д.), то значения элементов матрицы системы (5) могут весьма сильно различаться. Это может привести к ухудшению обусловленности матрицы и значительным ошибкам в решении системы. Чтобы избежать этого, целесообразно при формировании матрицы системы выполнить линейную замену переменных, переводящую область Ω , в которой расположены исходные точки $t^i, i = \overline{1, N}$, например, в единичный n -мерный куб. Для этого подсчитаем

$$t_{\min} = \min t_j^i, \quad t_{\max} = \max t_j^i; \quad i = \overline{1, N}, \quad j = \overline{1, n},$$

найдем

$$H = t_{\max} - t_{\min}$$

и сделаем замену переменных

$$t_j^* = (t_j - t_{\min}) / H, \quad j = \overline{1, n}. \quad (9)$$

Естественно, что при вычислении значений сплайна $\varphi(t), t \in \mathbb{R}^n$ необходимо будет вновь осуществить соответствующее линейное преобразование переменных. Тем самым мы реализуем такое важное свойство D^m -сплайнов, как *перестановочность с гомотетиями*.

6.2. Алгоритм Ж. Менге

Рассмотрим теперь более удобный в вычислительном отношении алгоритм построения D^m -сплайнов, предложенный Ж. Менге (см. [18–20; 29; 32]).

Напомним, что в исходной постановке эта вариационная задача формулировалась следующим образом:

$$J_m(\varphi) \rightarrow \min_{\varphi \in \Theta}, \quad \Theta = \left\{ \varphi \in W_2^m(\mathbb{R}^n) \mid \varphi(t^i) = f^i, i = \overline{1, N} \right\}, \quad (10)$$

где

$$J_m(\varphi) = \left\| \nabla^m \varphi \right\|_{L_2(\Omega)} = \left(\int_{\Omega} \sum_{|\alpha|=m} \frac{m!}{\alpha!} (D^\alpha \varphi)^2 d\Omega \right)^{1/2}$$

- это функционал "гладкости", $t^i, i = \overline{1, N}$ - это узлы интерполяции, $f_i, i = \overline{1, N}$ - заданные числа (значения восстанавливаемой функции в узлах интерполяции).

При $m > n/2$ имеет место вложение $W_2^m(\mathbb{R}^n) \subset C(\mathbb{R}^n)$ и единственное непрерывное решение задачи (10) имеет вид

$$\varphi(t) = \sum_{i=1}^N c_i E_m(t, t^i) + p(t), \quad t \in \mathbb{R}^n. \quad (11)$$

Здесь, с точностью до положительного постоянного множителя

$$E_m(u, v) = \begin{cases} (-1)^{n/2-1} |u-v|^{2m-n} \ln|u-v|, & \text{при четном } n; \\ (-1)^{(n-1)/2} |u-v|^{2m-n}, & \text{при нечетном } n, \end{cases} \quad (12)$$

а второе слагаемое является многочленом степени $m-1$:

$$p(t) = \sum_{v=1}^M d_v \phi_v(t) \in P_{m-1}, \quad (13)$$

причем $\phi_v(t), v = \overline{1, M}, M = C_{n+m-1}^n$ - это различные одночлены степени, меньшей или равной m .

Коэффициенты $c_i, i = \overline{1, N}$, и $d_v, v = \overline{1, M}$, определяются из системы линейных уравнений :

$$\left. \begin{aligned} \sum_{j=1}^N c_j E_m(t^i, t^j) + \sum_{v=1}^M d_v \phi_v(t^i) &= f^i, \quad i = \overline{1, N}; \\ \sum_{j=1}^N c_j \phi_v(t^j) &= 0, \quad v = \overline{1, M}. \end{aligned} \right\} \quad (14)$$

А теперь перейдем к алгоритму Ж. Менге.

Решение системы (14), а следовательно, и искомый D^m -сплайн (11) существуют, если $N \geq M$ и в множестве узлов $t^i, i = \overline{1, N}$, содержится подмножество из M узлов, на которых однозначно разрешима интерполяционная задача для многочленов из P_{m-1} . Будем считать, что это **первые M узлов** t^1, t^2, \dots, t^M .

Начнем с того, что определим совокупность **фундаментальных многочленов**

$$p_j(t) = \sum_{v=1}^M p_{vj} \phi_v(t) \in P_{m-1}, \quad j = \overline{1, M}, \quad (15)$$

удовлетворяющих условиям

$$p_j(t^i) = \delta_{ij}, \quad i, j = \overline{1, M}, \quad (16)$$

и образующих *базис* в пространстве P_{m-1} всех многочленов степени, меньшей m на \mathbb{R}^n .

Кстати, если обозначить

$$\Phi = \left\{ \Phi_{iv} = \phi_v(t^i), \quad i = \overline{1, M}, \quad v = \overline{1, M} \right\},$$

$$P = \left\{ P_{vj} = p_{vj}, \quad v = \overline{1, M}, \quad j = \overline{1, M} \right\},$$

то

$$P = \Phi^{-1}. \quad (16a)$$

Тогда интерполяционный многочлен $p^* \in P_{m-1}$, построенный по выбранным ранее первым M узлам, записывается в виде

$$p^*(t) = \sum_{j=1}^M f_j p_j(t). \quad (17)$$

Он удовлетворяет условиям

$$p^*(t^i) = f_i, \quad i = \overline{1, M}. \quad (18)$$

Рассмотрим функцию $w = \varphi - p^*$:

$$\left. \begin{aligned} w(t^i) &= 0, \quad i = \overline{1, M}; \\ \tilde{f}_i \equiv w(t^i) &= f_i - p^*(t^i), \quad i = \overline{M+1, N}; \\ J_m(w) &= J_m(\varphi). \end{aligned} \right\} \quad (19)$$

Тогда задача (10) равносильна задаче

$$\left. \begin{aligned} J_m(w) &\rightarrow \min_{w \in \Theta'}, \\ \Theta' &= \left\{ w \in W_2^m(\mathbb{R}^n) \mid w(t^i) = 0, \quad i = \overline{1, M}; \quad w(t^i) = \tilde{f}_i, \quad i = \overline{M+1, N} \right\}. \end{aligned} \right\} \quad (20)$$

Решение задачи (20) имеет вид

$$w(t) = \sum_{i=M+1}^N \gamma_i K(t, t^i), \quad t \in \mathbb{R}^n, \quad (21)$$

где (см. [29]), с точностью до постоянного положительного множителя,

$$\begin{aligned} K(u, v) &= (-1)^m \left\{ E_m(u, v) - \sum_{i=1}^M p_i(u) E_m(t^i, v) - \right. \\ &\quad \left. - \sum_{j=1}^M p_j(v) E_m(u, t^j) + \right. \\ &\quad \left. + \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^M p_i(u) p_j(v) E_m(t^i, t^j) \right\}. \end{aligned} \quad (22)$$

Очевидно, $K(t, t^j) = 0$ для $j = \overline{1, M}$.

Действительная функция $K(u, v)$, так же как и функция $E_m(u, v)$, является **симметричной** относительно аргументов $u, v \in \mathbb{R}^n$ и легко вычисляется. Заметим, что в выражении $K(u, v) = (-1)^m \{ E_m(u, v) - \Delta K(u, v) \}$ выражение для $\Delta K(u, v)$ зависит *только* от первых M узлов $t^i, i = \overline{1, M}$.

Коэффициенты $\gamma_i, i = \overline{M+1, N}$, в соответствии с (19), находятся из системы линейных уравнений

$$\sum_{j=M+1}^N \gamma_j K(t^i, t^j) = f_i - \sum_{j=1}^M f_j p_j(t^i), \quad i = \overline{M+1, N}. \quad (23)$$

Матрица $\{A_{ij} = K(t^i, t^j), \quad i, j = \overline{M+1, N}\}$ этой системы является симметрической и положительно-определенной **матрицей Грама** порядка $N - M$.

Заметим, что в правой части системы (23) для $\tilde{f}_i = f_i - \Delta \tilde{f}_i$, значения $\Delta \tilde{f}_i, \quad i = \overline{M+1, N}$, зависят *только* от данных по первым M узлам.

Система (23) имеет единственное решение, из которого получаем, с учетом (21) и (18),

$$\varphi(t) = w(t) + p^*(t). \quad (24)$$

Итак, по рассмотренной нами вычислительной схеме для построения D^m -сплайна нужно:

1. Выбрать $M = C_{n+m-1}^n$ из N узлов интерполяции, допускающих однозначное построение интерполяционного многочлена $m - 1$ степени.
2. Построить фундаментальные многочлены $p_j(t), \overline{1, M}$, то есть найти коэффициенты $p_{vj}, \quad v, j = \overline{1, M}$, путем решения системы M уравнений (16) или обращения матрицы Φ в соответствии с (16а).
3. Для нахождения коэффициентов $\gamma_i, \quad i = \overline{M+1, N}$, сплайна (21) решить систему (23) порядка $N - M$ с положительно определенной матрицей. При этом можно использовать устойчивые и экономичные вычислительные алгоритмы для систем с симметрическими матрицами (см. [2; 53]), например, метод квадратного корня (вариант известного метода Холецкого) или итерационный метод сопряженных градиентов.

6.3. Метод Холецкого

6.3.1. Основные соотношения

*Метод Холецкого** (метод квадратного корня) для решения системы линейных алгебраических уравнений с симметрической положительно определенной матрицей основан на следующей теореме.

Теорема Холецкого.

Если A - симметрическая положительно определенная матрица, то существует действительная невырожденная левая треугольная матрица L , такая, что

$$L L^T = A. \quad (25)$$

Более того, если диагональные элементы матрицы L положительны, то разложение (25) является единственным.

Элементы матрицы L можно определить, приравнявая соответствующие элементы матриц в выражении (25). Если матрицу L вычислять по строкам, то для элементов i -й строки, $i = 1, \dots, N$, справедливы следующие соотношения:

$$\sum_{k=1}^j l_{ik} l_{jk} = a_{ij}, \quad j = 1, \dots, i.$$

Отсюда при $j = i$:

$$\sum_{k=1}^i l_{ik} l_{ik} = a_{ii}, \quad i = 1, \dots, N,$$

или

$$l_{ii} = \left(a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik}^2 \right)^{1/2}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (26)$$

* Андре-Луи Холецкий (15.10.1875 - 31.08.1918) - французский математик, офицер геодезической службы.

и далее, для остальных элементов i -й строки:

$$l_{ij} = \frac{a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} l_{ik} l_{jk}}{l_{jj}}, \quad j = 1, \dots, i-1. \quad (27)$$

Когда все элементы матрицы L (строка за строкой) найдены, то решение линейной системы

$$Ax = b \quad (28)$$

сводится к последовательному решению двух систем с треугольными матрицами

$$\left. \begin{array}{l} Ly = b; \\ L^T x = y. \end{array} \right\} \quad (29)$$

Действительно,

$$Ax = LL^T x = Ly = b.$$

Соотношения (29) позволяют записать решение уравнения (28) в следующем виде:

$$y_i = \frac{b_i - \sum_{k=1}^{i-1} l_{ik} y_k}{l_{ii}}, \quad i = 1, \dots, N; \quad (30a)$$

$$x_i = \frac{y_i - \sum_{k=i+1}^N l_{ki} x_k}{l_{ii}}, \quad i = N, \dots, 1. \quad (30b)$$

Метод Холецкого требует примерно $N^3/3$ арифметических действий, т.е. при больших N вдвое быстрее метода Гаусса, и при соответствующей организации вычислений может занимать вдвое меньше ячеек памяти. Это понятно, ибо метод использует информацию о симметрии матрицы.

Высокая точность и устойчивость вычислительного процесса следуют из условия

$$\sum_{j=1}^i l_{ij}^2 = a_{ii}, \quad i = 1, \dots, N, \quad (31)$$

которое гарантирует ограниченность величин l_{ij} , если ограничены значения a_{ij} .

Кроме свойств устойчивости по отношению к ошибкам округления метод Холецкого обладает следующим важным достоинством (см., например, [29]). Добавим узел t^{N+1} и значение f_{N+1} . Требуется построить \mathbb{D}_m -сплайн $\bar{\varphi}(t)$ с узлами t^1, \dots, t^N, t^{N+1} , удовлетворяющий условиям

$$\bar{\varphi}(t^i) = f_i, \quad i = \overline{1, N+1}. \quad (32)$$

Для этого нужно решить систему типа (28) с положительно определенной матрицей

$$\bar{A} = \begin{bmatrix} A & \beta \\ \beta^T & a_{N+1, N+1} \end{bmatrix}; \quad \beta = \begin{bmatrix} a_{1, N+1} \\ \vdots \\ a_{N, N+1} \end{bmatrix}. \quad (33)$$

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

$$\bar{L} = \begin{bmatrix} L & 0 \\ v^T & l_{N+1, N+1} \end{bmatrix}. \quad (34)$$

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

$$Lv = \beta, \quad a_{N+1, N+1} = v^T v + l_{N+1, N+1}^2. \quad (35)$$

Решая систему $Lv = \beta$, получаем v , а затем находим

$$l_{N+1, N+1} = \sqrt{a_{N+1, N+1} - v^T v}. \quad (36)$$

Нетрудно показать, что в силу положительной определенности матрицы \bar{A} подкоренное выражение всегда положительно.

Таким образом, при решении задачи интерполяции на $N + 1$ точках можно существенно использовать результаты вычислений для N точек и весь процесс решения может быть описан в *рекурсивной форме*, причем стандартные алгоритмы, которыми следует пользоваться (разложение Холецкого и обратная подстановка), являются *численно устойчивыми* и очень *эффективными* по числу арифметических операций (см., например, [53]).

6.3.2. Программная реализация

В качестве справочного материала приведем тексты процедур разложения Холецкого (25) и последующего решения системы уравнений (28), написанные на языке Турбо Паскаля на основе соответствующих алгоритмов из [53].

Процедура разложения Холецкого $A = L L^T$

Здесь матрица A определена как массив размера $N \times N$; однако правильная запись ее элементов необходима лишь в правом треугольнике, поскольку поддиагональные элементы в процедуре не используются.

Матрица L , за исключением ее диагональных элементов, формируется на месте наддиагональных элементов матрицы A . Необходимые для последующих вычислений величины $1/l_{ii}$, $i = 1, \dots, N$, сформированы отдельно в виде вектора p . Таким образом, при выходе из процедуры имеем, например, для $N = 4$:

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & a_{14} \\ l_{21} & a_{22} & a_{23} & a_{24} \\ l_{31} & l_{32} & a_{33} & a_{34} \\ l_{41} & l_{42} & l_{43} & a_{44} \end{bmatrix}; \quad p = \begin{bmatrix} 1/l_{11} \\ 1/l_{22} \\ 1/l_{33} \\ 1/l_{44} \end{bmatrix}.$$

Выход из процедуры с параметром $res = false$ происходит в случае, если из-за ошибок округления вычисленные значения квадратов диагональных элементов матрицы L оказываются неположительными.

```
Const    Nmax = ... ;
Type     Vec = array [1..Nmax] of real;
         Mat = array [1..Nmax] of Vec;
-----
Procedure CholDet (N: integer; var A: Mat; var p: Vec; var res: boolean);
  var i,j,k: integer; x: real;
Begin
  res := true;
  for i := 1 to N do
    for j := i to N do begin
      x := A[i,j];
      for k := i-1 downto 1 do x := x - A[i,k]*A[j,k];
      if j = i then begin
        if x <= 0 then begin res := false; exit end;
        p[i] := 1/sqrt(x)
      end
      else A[j,i] := x*p[i]
    end
  end
End;
```

Процедура решения системы $Ax = b$

Процедура решения записана для системы уравнений вида $Ax = b$. При этом вектор решений x формируется отдельно от вектора правых частей b , так что массив b можно использовать для вычисления невязок.

```
Procedure CholSol (N: integer; var A: Mat; var p,b,x: Vec);
```

```
  var i,k: integer; z: real;
```

```
Begin
```

```
  { Решение системы  $Ly = b$  }
```

```
  for i := 1 to N do begin
```

```
    z := b[i];
```

```
    for k := i-1 downto 1 do z := z - A[i,k]*x[k];
```

```
    x[i] := z*p[i]
```

```
  end;
```

```
  { Решение системы  $L'x = y$  }
```

```
  for i := N downto 1 do begin
```

```
    z := x[i];
```

```
    for k := i+1 to N do z := z - A[k,i]*x[k];
```

```
    x[i] := z*p[i]
```

```
  end
```

```
End;
```

7. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ПОСТРОЕНИЯ СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТИ

Бросая в воду камешки, смотри на круги, ими образуемые; иначе такое бросание будет пустой забавой.

Козьма Прутков

Для некоторых предприятий тщательно запланированный беспорядок – наилучший способ действий.

Герман Мелвилл. Моби Дик

7.1. Выбор узлов сплайн-интерполяции

В ряде случаев имеется возможность выбора координат узлов интерполяции при построении сплайн-поверхности.

При рассмотрении проблемы *сходимости* сплайн-поверхности на сгущающихся сетках узлов мы приводили асимптотическую оценку, полученную Ж. Дюшоном [15]:

$$\|D^k(f - \varphi)\|_{L_p(\Omega)} = o(h^{m-k-(n/2)+(n/p)}) = O(h^\gamma), \quad h \rightarrow 0,$$

из которой следует, что погрешности гладкого восполнения функции $f(t) \in W_2^m(\Omega)$ сплайн-поверхностью $\varphi(t), t \in \Omega \subset \mathbb{R}^n$, в общем случае определяются **характерным параметром сетки** из N точек t^1, t^2, \dots, t^N в n -мерной области Ω :

$$h = h(t^1, t^2, \dots, t^N) = \sup_{t \in \Omega} \min_{i=1, N} |t - t^i| > 0.$$

Таким образом, желательно выбирать узлы интерполяции так, чтобы этот параметр *минимизировать*, т.е. обеспечить

$$h^*(N) = \min_{t^1, t^2, \dots, t^N \in \Omega} h(t^1, t^2, \dots, t^N),$$

или **оптимальное покрытие** области Ω .

Заметим, что аналогичная проблема оптимального "зондирования" некоторой области $\Omega \in R^n$ конечным числом точек возникает в целом ряде прикладных задач – это и приближенное вычисление многомерных интегралов с помощью соответствующих *квадратурных формул*

$$\int_{\Omega} f(t) dt \approx \sum_{i=1}^N c_i f(t^i);$$

это и решение как задач *поисковой* минимизации функций многих переменных

$$f(t) \rightarrow \min, \quad t \in \Omega$$

путем последовательного выбора "пробных" точек $t^1, t^2, \dots, t^N, \dots$, так и более сложных и практически важных задач *многокритериальной* оптимизации, и др.

7.1.1. Равномерно распределенные последовательности точек

Однако проблема оптимального покрытия, являющаяся одной из труднейших задач дискретной геометрии, не решена даже для малых размерностей и достаточно простых областей. Поэтому мы рассмотрим некоторые практические пути *приближенного решения* этой проблемы. Здесь могут использоваться различные приемы "зондирования" области Ω **равномерно распределенными последовательностями** точек. Точки выбирают либо случайным образом в соответствии с некоторым заданным вероятностным распределением, либо детерминировано.

Что же такое "равномерность" применительно к нашей проблеме? Например - если точки придется размещать в n -мерном кубе (гиперкубе), когда количество точек $N \neq N_0^n$, $N_0 \in \mathbf{N}$, тем более если N надо увеличивать, не нарушая равномерности.

Такие вопросы изучает теория *равномерного распределения последовательностей* (см. [48-52]). Она исследует бесконечные последовательности

сти точек $t^1, t^2, \dots, t^i, \dots$, обладающие тем свойством, что группа точек t^1, t^2, \dots, t^N при каждом N в каком-то смысле равномерно распределена в единичном кубе. При увеличении N плотность заполнения куба точками увеличивается, а равномерность сохраняется.

Обозначим через $\mathbf{K}^n = \{t \in \mathbf{R}^n : 0 \leq t_j \leq 1, j = 1, 2, \dots, n\}$ *единичный гиперкуб* в n -мерном пространстве. Здесь $t = (t_1, \dots, t_n)^T$.

Рассмотрим бесконечную последовательность точек $t^1, t^2, \dots, t^i, \dots$, принадлежащих \mathbf{K}^n , и обозначим через $S_N(\mathbf{G})$ количество точек $t^i, i = 1, \dots, N$, принадлежащих множеству $\mathbf{G} \subset \mathbf{K}^n$.

Определение. Последовательность точек $t^1, t^2, \dots, t^i, \dots$ называется *равномерно распределенной* в \mathbf{K}^n (сокращенно *р.р.*), если для любой области $\mathbf{G} \subset \mathbf{K}^n$ объема $V_{\mathbf{G}}$ имеет место соотношение

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(\mathbf{G})/N = V_{\mathbf{G}}. \quad (1)$$

Геометрический смысл этого определения достаточно прост: при больших N количество точек р.р. последовательности, принадлежащих любой области \mathbf{G} , пропорциональна объему этой области. Если, например, разделить \mathbf{K}^n на несколько равновеликих частей, то (при достаточно больших N) в каждой из них окажется приблизительно одинаковое количество точек. Кстати, *проекции* точек р.р. последовательности на различные грани куба \mathbf{K}^n тоже представляют собой р.р. последовательности соответственно меньшей размерности.

Связь определения (1) с задачами теории функций и вычислительной математики в какой-то мере видна из следующей теоремы.

Теорема 1 (Теорема Вейля*).

Для того чтобы $\{t^i\}$ была р.р., необходимо и достаточно, чтобы для

* Вейль Герман Клаус Хуго (9.11.1885 – 8.12.1955) – немецкий математик. С 1933 г. работал в Принстоне (США).

любой интегрируемой по Риману функции $f(t)$ выполнялось соотношение

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(t^i) = \int_{\mathbf{K}^n} f(t) dt. \quad (2)$$

7.1.2. Количественные характеристики равномерности

Несмотря на то что первые р.р. последовательности были построены Г. Вейлем еще в 1916 году, "хорошие" р.р. последовательности научились строить только в 1960-х годах. Слово "хорошая" здесь означает, что:

- а) сходимость к пределу в (1) должна быть по возможности быстрой;
- б) равномерность расположения точек должна наблюдаться, начиная с небольших значений N , а не только при $N \rightarrow \infty$;
- в) алгоритм расчета точек t^i должен быть достаточно простым.

Существует ряд критериев, не только устанавливающих равномерность распределения точек, но и дающих количественную оценку равномерности. Это *отклонение (discrepancy)*, *неравномерность (nonuniformity)*, *разброс (dispersion of points)* (см., например, [52]).

Хотя наиболее содержательной мерой является неравномерность, мы рассмотрим простейший критерий - **отклонение**.

Отклонение. Рассмотрим в \mathbf{K}^n сетку, состоящую из N произвольных точек t^1, t^2, \dots, t^N . Каждой точке t из \mathbf{K}^n поставим в соответствие параллелепипед π_t с диагональю $0t$ (рис. 1).

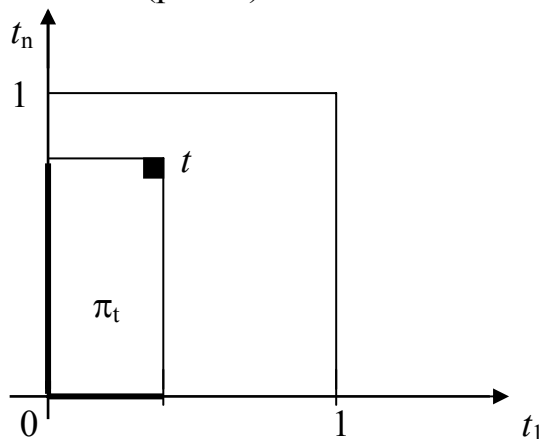


Рис. 1.

Объем этого параллелепипеда $V_t = t_1 t_2 \dots t_n$. Отклонением сетки t^1, t^2, \dots, t^N называется число

$$D_N = D(t^1, t^2, \dots, t^N) = \sup_t |S_N(\pi_t)/N - V_t|, \quad (3)$$

где верхняя грань берется по всем $t \in \mathbf{K}^n$. Здесь $D_N \leq 1$.

Теорема 2.

Для того, чтобы $\{t^i\}$ была р.р., необходимо и достаточно, чтобы

$$D(t^1, t^2, \dots, t^N) \rightarrow 0, \quad N \rightarrow \infty. \quad (4)$$

Казалось бы, осталось построить такую последовательность, для которой отклонение минимально. Но задача оказалась чрезвычайно сложной и до сих пор не решена. Нижняя граница для $D(t^1, t^2, \dots, t^N)$ неизвестна, за исключением случая $n = 1$, когда $\inf D_N = 1/2N$.

Для наилучших среди известных р.р. последовательностей справедливо следующее утверждение.

Теорема 3 (Холтон [48]).

Для любой размерности $n \geq 1$ существует бесконечная последовательность точек в \mathbf{K}^n , такая, что

$$D_N = O(N^{-1}(\ln N)^n). \quad (5)$$

Кроме того, для каждого $N \geq 2$ существует конечная последовательность из N точек в \mathbf{K}^n , такая, что

$$D_N = O(N^{-1}(\ln N)^{n-1}). \quad (5a)$$

Этот результат гарантирует, что для любой размерности существует квазислучайная последовательность точек, обеспечивающая существенно более высокую эффективность методов Монте Карло, чем при использовании статистической последовательности, когда $D_N = O(N^{-1/2})$.

Если рассматривать так называемую "кубическую" сетку, состоящую из $N = N_0^n$ точек с координатами

$$\left(\frac{i_1 - 1/2}{N_0}, \frac{i_2 - 1/2}{N_0}, \dots, \frac{i_n - 1/2}{N_0} \right),$$

где i_1, i_2, \dots, i_n независимо пробегает значения $1, 2, \dots, N_0$ (см. рис. 2), то нетрудно проверить, что значение $|S_N(\pi_t)/N - V_t|$ будет максимальным, например, в точке

$$t = (1 - 1/2 N_0 + \varepsilon, \dots, 1 - 1/2 N_0 + \varepsilon),$$

когда $S_N(\pi_t) = N$, $V_t = \left(1 - \frac{1}{2 N_0} + \varepsilon\right)^n$ при сколь угодно малом $\varepsilon > 0$.

Пример "кубической" двумерной ($n = 2$) сетки для случая $N_0 = 4$; $N = 16$ показан на рис. 2.

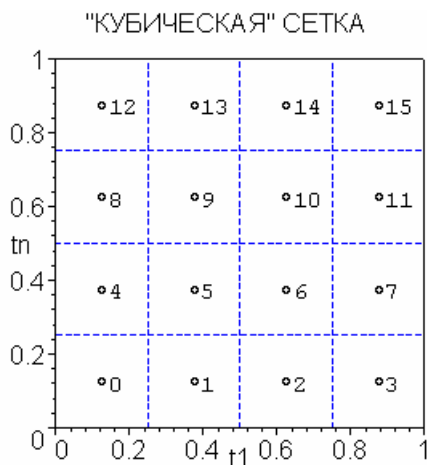


Рис. 2

Очевидно, для "кубической" сетки отклонение равно

$$D_N = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \left(1 - \left(1 - \frac{1}{2 N_0} + \varepsilon \right)^n \right) = 1 - \left(1 - \frac{1}{2 N_0} \right)^n.$$

Заметим, что в [52] дана неверная оценка $D_N = 1/2 N_0$.

Из наших результатов вытекает, что "кубические" сетки оптимальны при $n = 1$, когда $D = 1/2 N$. Однако с увеличением n равномерность таких сеток ухудшается, приближаясь по порядку величины к единице, и остается худшей, чем в (5)!

Необходимо отметить, что подавляющее число людей интуитивно полагает, что и в многомерном случае "кубические" сетки реализуют наиболее равномерное расположение точек в \mathbf{K}^n . И многочисленные неудачи, связанные с попытками использовать такие сетки при $n > 3$ нередко интерпретируют, как "проклятие размерности". А зря!

Для независимых случайных точек t^1, t^2, \dots, t^N , равномерно распределенных в \mathbf{K}^n , с большой вероятностью порядок D_N равен

$$D(t^1, t^2, \dots, t^N) \approx N^{-1/2}, \quad (7)$$

а это лучше, чем (6) уже при $n \geq 3$.

Разброс сетки. Если заданы точки t^1, t^2, \dots, t^N , то их *разброс* $d = d(t^1, t^2, \dots, t^N)$ равен

$$d = \sup_t \min_{1 \leq i \leq N} \rho(t, t^i), \quad (8)$$

где верхняя грань берется по всевозможным положениям точки t в \mathbf{K}^n , а $\rho(t, t')$ - это евклидово расстояние между точками $t = (t_1, \dots, t_n)^T$ и $t' = (t'_1, \dots, t'_n)^T$.

По существу, **разброс сетки** есть не что иное, как уже знакомый нам **характерный параметр** h покрытия области точками t^1, t^2, \dots, t^N . Нетрудно видеть, что для "кубической" сетки обеспечивается минимально возможное значение d_N при $N = N_0^n$, равное

$$d_N \equiv h(N) = \frac{\sqrt{n}}{2} N^{-1/n}. \quad (9)$$

Как показано, например, в [49], для р.р. последовательностей разброс определяется соотношениями

$$(\omega_n N)^{-1/n} \leq d_N \leq 2\sqrt{n} \left(D_N^{1/n} \right) \approx 2\sqrt{n} \cdot O(\ln N \cdot N^{-1/n}), \quad (10)$$

где ω_n - это объем единичного шара в \mathbf{R}^n . Заметим, что объем единичного шара $\omega_n = \pi^{n/2} / \Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)$ стремится к нулю при $n \rightarrow \infty$ и не превышает $\cong 5.26$ при $n = 5$. Соответствующая зависимость $\omega_n(n)$ показана на

следующем графике (рис. 3).

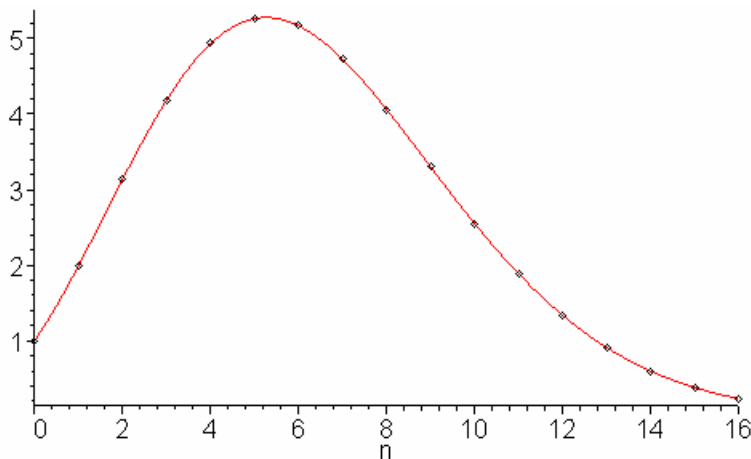


Рис. 3

Сравнение показывает, что, как ни странно, *разброс* "кубических" сеток имеет при $N \rightarrow \infty$ *оптимальный порядок*.

Однако по равномерности расположения точек (например, по отклонению D_N) начальные участки р.р. последовательностей *значительно лучше!* Но, как мы убедились в главе 4, асимптотика погрешностей интерполяции сплайн-поверхностью зависит именно от *характерного параметра* h .

Заметим, что по результатам выполненных нами вычислительных экспериментов **характерный параметр (разброс)** для р.р. размерности $n = 2 \div 5$ в 1,5 – 2 раза больше, чем для соответствующих "кубических" сеток при том же числе точек N . Такова "цена" возможностей произвольного наращивания числа точек при использовании р.р.п.

7.1.3. Практическая реализация равномерно распределенных последовательностей точек

Последовательность Холтона

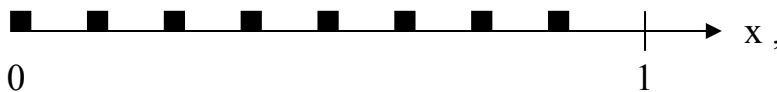
Рассмотрим произвольную последовательность точек $x^0, x^1, \dots, x^i, \dots$ принадлежащих отрезку $[0, 1]$. Такая последовательность называется *равномерно распределенной* на отрезке $[0, 1]$, если для любого l

$$\lim_{N \rightarrow \infty} S_N(l) / N = |l|. \quad (11)$$

Здесь $S_N(l)$ - количество точек x^0, x^1, \dots, x^{N-1} , принадлежащих отрезку $l \subseteq [0, 1]$.

Пример. Рассмотрим последовательность *двоично-рациональных дробей* в естественном порядке: $0, 1/2, 1/4, 3/4, 1/8, 3/8, 5/8, 7/8, 1/16, \dots$

Несмотря на очень равномерное распределение начальных участков этой последовательности, содержащих $N = 2^k$ точек, например, $k = 3$; $N = 2^3 = 8$:



последовательность эта *не является р.р.* Рассмотрим начальные участки, содержащие $N = N_k = 2^k + 2^{k-1}$ точек:



Пусть $l = [0, 1/2]$, тогда при $N = N_k$ количество точек $S_N(l) = 2 \cdot 2^{k-1} = (2/3)N$; следовательно, $\lim_{k \rightarrow \infty} S_{N_k}(l) / N_k = 2/3 \neq |l|$, хотя при $N = N_k = 2^k$ мы имеем $\lim_{k \rightarrow \infty} S_{N_k}(l) / N_k = 1/2 = |l|$.

Последовательность ван дер Корпута (van der Corput, 1935). Из тех же двоично-рациональных дробей построим р.р. $\{x^i\}$, где $x^i = p(i)$. Числа $p(i)$ можно определить следующими формулами:

если в *двоичной* системе счисления $i = e_m e_{m-1} \dots e_2 e_1$,

то в *двоичной же* системе $p(i) = 0, e_1 e_2 \dots e_{m-1} e_m$,

где все e_j - двоичные цифры, т.е. либо 0, либо 1.

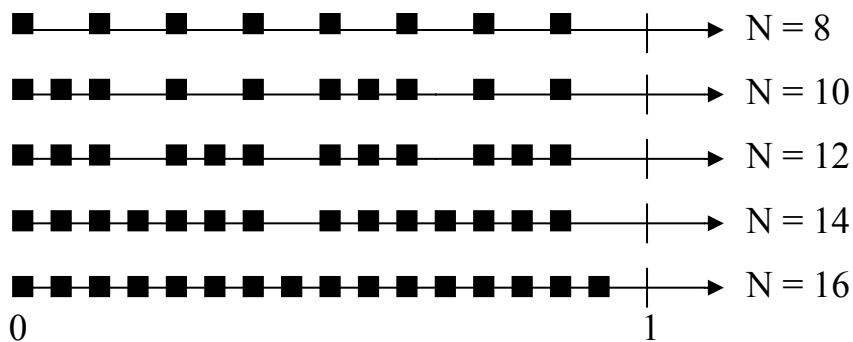
В *десятичной* системе счисления эти же формулы выглядят так:

$$i = e_1 + 2^1 e_2 + \dots + 2^{m-1} e_m,$$

$$p(i) = e_1 2^{-1} + e_2 2^{-2} + \dots + e_m 2^{-m}.$$

Для этой последовательности начальные участки при $N = 2^k$ такие же, как и для ранее рассмотренной последовательности двоично-рациональных дробей. Однако порядок заполнения каждой последующей груп-

пы по 2^k точек гораздо более сложный:



Рассмотрим некоторые квазислучайные последовательности точек для произвольной размерности $n \geq 2$ (см., например, [48; 52]).

Так называемая **последовательность Хэммерсли** (J.M. Hammersley, 1960) для построения многомерных конечных сеток основана на R -ичных обобщениях последовательности ван дер Корпута $\{p(i)\}$:

если в R -ичной системе счисления $i = e_m e_{m-1} \dots e_2 e_1$,

то также в R -ичной системе $\phi_R(i) = 0, e_1 e_2 \dots e_{m-1} e_m$,

где все e_j - это R -ичные цифры, т.е. $0, 1, 2, \dots, R-1$. Очевидно, $\phi_2(i) \equiv p(i)$.

Последовательность Хэммерсли для фиксированного числа N точек в \mathbf{K}^n имеет вид

$$\left(i/N, \phi_{R_1}(i), \phi_{R_2}(i), \dots, \phi_{R_{n-1}}(i) \right) \text{ для } i = 0, 1, 2, \dots, N-1, \quad (12)$$

где в качестве R_1, R_2, \dots, R_{n-1} принимаются первые $n-1$ простых чисел. Для такой *конечной* квазислучайной последовательности справедлива оценка *отклонения* (5а).

Если число точек N заранее не задано, то более удобной на практике оказывается **последовательность Холтона** (J.H. Halton, 1960) [20]:

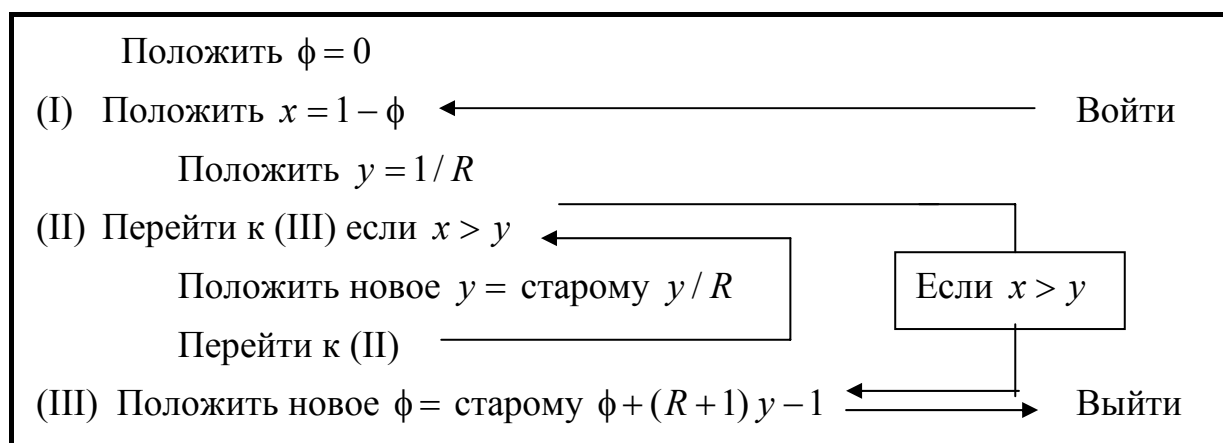
$$\left(\phi_{R_1}(i), \phi_{R_2}(i), \dots, \phi_{R_n}(i) \right) \text{ для } i = 0, 1, 2, \dots, \quad (13)$$

где R_1, R_2, \dots, R_n - это *взаимно простые числа*, т.е. целые числа, не имеющие общих простых делителей (хотя вполне можно воспользоваться и любыми s простыми числами). Для такой *бесконечной* квазислучайной последовательности справедлива оценка *отклонения* (5).

Некоторые численные значения $\phi_R(i)$ для $R = 2$ и 3 , характеризующие последовательность квазислучайных двумерных точек (X, Y) приведены в следующей таблице:

$(i)_{10}$	Двоичные		$\phi_2(i)_{10}$	Троичные		$\phi_3(i)_{10}$	X_i	Y_i
	i	$\phi_2(i)$		i	$\phi_3(i)$			
0	0	0	0	0	0	0	0	0
1	1	0,1	1/2	1	0,1	1/3	0.5000	0.3333
2	10	0,01	1/4	2	0,2	2/3	0.2500	0.6667
3	11	0,11	3/4	10	0,01	1/9	0.7500	0.1111
4	100	0,001	1/8	11	0,11	4/9	0.1250	0.4444
5	101	0,101	5/8	12	0,21	7/9	0.6250	0.7778
6	110	0,011	3/8	20	0,02	2/9	0.3750	0.2222
7	111	0,111	7/8	21	0,12	5/9	0.8750	0.5556
8	1000	0,0001	1/16	22	0,22	8/9	0.0625	0.8889
9	1001	0,1001	9/16	100	0,001	1/27	0.5625	0.0370
10	1010	0,0101	5/16	101	0,101	10/27	0.3125	0.3704
11	1011	0,1101	13/16	102	0,201	19/27	0.8125	0.7037
12	1100	0,0011	3/16	110	0,011	4/27	0.1875	0.1481
13	1101	0,1011	11/16	111	0,111	13/27	0.6875	0.4815
14	1110	0,0111	7/16	112	0,211	22/27	0.4375	0.8148
15	1111	0,1111	15/16	120	0,021	7/27	0.9375	0.2593

Холтон в [48] предложил также удобный алгоритм для быстрого вычисления n -мерных квазислучайных точек:



Трехшаговый цикл, начинающийся в (II), находит наиболее значащий (т.е. самый левый) разряд, в системе счисления с основанием R , для текущего значения дроби ϕ , которая меньше, чем $(R - 1)$. Следующее значение ϕ затем вычисляется в (III). Для каждого последующего значения ϕ (т.е.

$\phi(i)$, $i = 1, 2, \dots$) процедура начинается в (I) и завершается в (III).

Ниже приводится текст соответствующей процедуры, реализующей алгоритм Холтона на Турбо Паскале:

```
const nmax = 10; {Максимальная размерность квазислучайных точек}
type Vec = array [1..nmax] of real;
var fi: Vec;    {Текущая точка}
    j: word;    {Номер точки}
Procedure Halton (n:byte; var fi:vec; var i:word);
    const R: array [1..nmax] of byte = (2,3,5,7,11,13,17,19,23,29);
    var x,y: real; k:byte;
Begin
    if i = 1 then for k := 1 to n do fi[k] := 0
        else for k := 1 to n do begin
            x := 1 - fi[k]; y := 1 / R[k];
            while x <= y do y := y / R[k];
            fi[k] := fi[k] + (R[k] + 1) * y - 1
        end;
        i := i + 1
End;
```

Последовательным вызовам оператора процедуры Halton(n,fi,j) должно предшествовать присваивание $j := 1$.

Для иллюстрации рассмотренных р.р. последовательностей на рис. 4а показана двумерная *последовательность Хэммерсли* при $N = 16$ ($R_1 = 2$), а на рис. 4б – первые 16 точек двумерной *последовательности Холтона* ($R_1 = 2$, $R_2 = 3$).

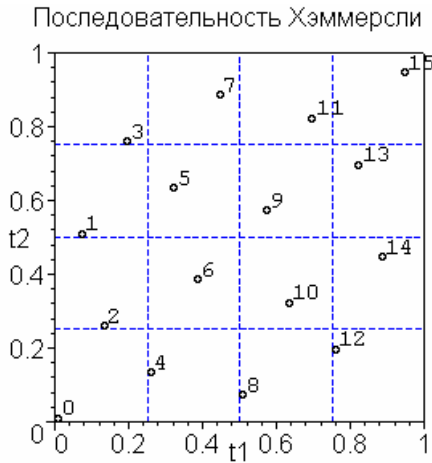


Рис. 4а

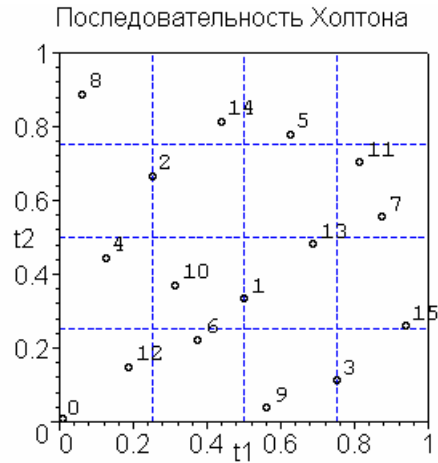


Рис. 4б

ЛП_τ-последовательности

Среди известных в настоящее время р.р. последовательностей наилучшие характеристики равномерности как при $N \rightarrow \infty$, так и при *малых* значениях N - у предложенных И.М. Соболев (1966 г.) так называемых **ЛП_τ-последовательностей** (см. [51; 52]). Точки одной из таких последовательностей $P_0, P_1, \dots, P_r, \dots$ легко вычисляются с помощью небольшой таблицы вспомогательных *направляющих* точек. Так, таблица, содержащая 20 направляющих точек, позволяет вычислить 2^{20} , т.е. более миллиона, точек ЛП_τ-последовательности.

Происхождение названия довольно курьезное. Сперва удалось построить сетки, состоявшие из *конечного* числа р.р. точек в \mathbf{K}^n , и получившие название П_τ-сеток. Затем были построены *бесконечные* последовательности таких точек, любой двоичный (т.е. содержащий по 2^k точек) участок которых есть П_τ-сетка. Отсюда термин - "ЛП_τ-последовательность"!

Теория ЛП_τ-последовательностей изложена в уже упомянутых работах И.М. Соболя [51; 52]. Там же приводится достаточно простой *арифметический* алгоритм:

$$x^i \in \mathbf{K}^n \subset \mathbf{R}^n, i = 0, 1, 2, \dots$$

$$x_j^i = \sum_{k=1}^m 2^{-k+1} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{l=k}^m \left[2 \left\{ i 2^{-l} \right\} \right] \left[2 \left\{ r_j^l 2^{k-1-l} \right\} \right] \right\} \quad (14)$$

Здесь $m = 1 + [\ln i / \ln 2]$, причем $[z]$ - целая часть, $\{z\}$ - дробная часть числа z ;

r_j^l - заранее вычисленные числа (*числители* "направляющих чисел").

При этом j определяет размерность, $2^l - 1$ - число точек. Числа r_j^l известны для $1 \leq j \leq 51$, $1 \leq l \leq 20$, что позволяет вычислить более миллиона квазислучайных точек размерности до 51.

Для всех ЛП_τ-последовательностей и для всех N справедлива оценка отклонения (5). Более того, если рассматривать только значения $N = 2^k$, $k = 1, 2, \dots$, то справедлива и более сильная оценка (5а).

Все ЛП_τ-последовательности удовлетворяют и тому требованию, что проекции их точек на любую s -мерную грань K^n также образуют s -мерную ЛП_τ-последовательность ($1 \leq s \leq n - 1$).

Описанная в (8) ЛП_τ-последовательность обладает в некотором смысле хорошо распределенными начальными отрезками P_0, P_1, \dots, P_{N-1} для произвольного N , даже при $N < 2^n$. Одно из таких свойств следующее. Рассмотрим гиперплоскости $x_j = 1/2$, $j = 1, 2, \dots, n$, которые делят K^n на $s = 2^n$ равных частей – *гипероктантов*. Если мы разобьем нашу последовательность на отрезки $P_0, \dots, P_{s-1}; P_s, \dots, P_{2s-1}; P_{2s}, \dots, P_{3s-1}; \dots$, то каждый такой отрезок содержит *одну и только одну* точку в каждом гипероктанте. Нетрудно убедиться, что для *случайных* точек P_0, \dots, P_{s-1} такое распределение крайне невероятно при $n \geq 3$. Вероятность такого события равна $s!s^{-s}$, и она быстро убывает с увеличением n . Так, при $n = 3$, когда $s = 8$, она равна $2.4 \cdot 10^{-4}$.

Далее приводится текст процедур, реализующих алгоритм (8) на Турбо Паскале:

```
const nmax = 5;
type Vec = array [1..nmax] of real;
Function Power(x:real; n: integer): real;
  var a: real; i: integer;
Begin
  a:=1;
  for i:=1 to abs(n) do a:=a*x;
  Power:=a
End;
Procedure LPTau (n:byte; I:word; var P: Vec);
  const NR: array[1..nmax,1..10] of word=
    ((1,1,1,1,1,1,1,1,1,1),
     (1,3,5,15,17,51,85,255,257,771),
     (1,1,7,11,13,61,67,79,465,721),
     (1,3,7,5,7,43,49,147,439,1013),
     (1,1,5,3,15,51,125,141,177,759));
  var J, K, L, M, NS: word; S: real;
Begin
  if I = 0 then
    for J := 1 to n do P[J] := 0
  else begin
    M := 1 + trunc(ln(I) / 0.693147181);
    for J := 1 to n do begin
      S := 0;
      for K := 1 to M do begin
        NS := 0;
```

```

for L := K to M do
  NS:=NS+
  trunc(2*frac(I/Power(2,L)))*trunc(2*frac(NR[J,L]/ Power(2, L+1-K)));
  S := S + frac(0.5*NS) / Power(2, K-1)
end;
P[J] := S
end
end
end;

```

Здесь массив NR содержит таблицу числителей r_j^l , обеспечивающую вычисление до 1024 точек ЛП $_{\tau}$ -последовательности из K^5 .

В качестве примера приведем 16 первых точек трехмерной ЛП $_{\tau}$ -последовательности, вычисленных с помощью этого алгоритма:

i	x_1^i	x_2^i	x_3^i
0	0.000000	0.000000	0.000000
1	0.500000	0.500000	0.500000
2	0.250000	0.750000	0.250000
3	0.750000	0.250000	0.750000
4	0.125000	0.625000	0.875000
5	0.625000	0.125000	0.375000
6	0.375000	0.375000	0.625000
7	0.875000	0.875000	0.125000
8	0.062500	0.937500	0.406250
9	0.562500	0.437500	0.187500
10	0.312500	0.187500	0.937500
11	0.812500	0.687500	0.437500
12	0.187500	0.312500	0.312500
13	0.687500	0.812500	0.812500
14	0.437500	0.562500	0.062500
15	0.937500	0.062500	0.562500

На рис. 5 показана двумерная проекция этих точек .

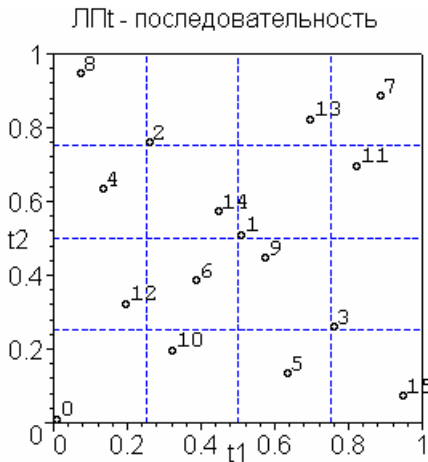


Рис. 5

Сравним эту сетку точек с "кубической" сеткой, показанной на Рис. 2. В обоих случаях каждому из 16 квадратиков принадлежит одна и только одна точка, так что, казалось бы, точность интерполяции для этих сеток должна быть примерно одинаковой. Но положение резко изменится, если функция $f(t_1, t_2)$ сильнее зависит от одной из координат: расчет в точках "кубической" сетки даст нам всего 4 различных значения t_1 и 4 различных значения t_2 , а расчет в точках ЛПт-последовательности даст 16 различных значений каждой из координат.

7.2. Вычисление погрешностей интерполяции функций сплайн-поверхностью

Рассмотрим уже знакомую нам *норму погрешностей* (норму $f - \varphi$ в пространстве Лебега L_p :

$$\delta_p \equiv \|f - \varphi\|_{L_p(\Omega)} = \left[\int_{\Omega} |f(t) - \varphi(t)|^p dt \right]^{1/p}.$$

Наиболее интересные случаи $p = \infty$ и $p = 2$.

При $p = 2$ мы имеем оценку *среднеквадратической погрешности* $\delta_p \equiv \|f - \varphi\|_{L_p(\Omega)}$, причем с нормировкой к $|\Omega| = 1$:

$$\delta_2 = \left[\frac{1}{|\Omega|} \int_{\Omega} |f(t) - \varphi(t)|^2 dt \right]^{1/2}.$$

Соответствующий интеграл по $\Omega \subset \mathbb{R}^n$ может быть приближенно вычислен численным методом, например,

$$\delta_2 \cong \sqrt{\frac{1}{S^n} \sum_{i_1=1}^S \sum_{i_2=1}^S \dots \sum_{i_n=1}^S \left(f(t_1^{i_1}, \dots, t_n^{i_n}) - \varphi(t_1^{i_1}, \dots, t_n^{i_n}) \right)^2}, \quad (15)$$

где S - число "делений" каждого ребра гиперкуба K^n . Желательно выбирать $S^n \gg N$ (числа узлов интерполяции).

При $p = \infty$ мы имеем оценку $\delta_{\infty} \equiv \|f - \varphi\|_{C(\Omega)} = \sup_{t \in \Omega} |f(t) - \varphi(t)|$ *максимальной абсолютной погрешности*.

Соответственно

$$\delta_{\infty} \cong \max_{i_1=1..S, \dots, i_n=1..S} \left| f(t_1^{i_1}, \dots, t_n^{i_n}) - \varphi(t_1^{i_1}, \dots, t_n^{i_n}) \right|. \quad (16)$$

Значения $\delta_2, \delta_{\infty}$ удобно вычислять в общем вложенном цикле по всем n координатам нашей области Ω , например, гиперкуба K^n . Обсудим более подробно возникающую при этом проблему **"свертывания" оператора цикла**.

Рассмотрим процедуру, которая заменяет собой (*свертывает*) " n -слойный" оператор цикла, выполняющий в конечном счете обращение к некоторому оператору подпрограммы P . Примером такой задачи может быть "сканирование" регулярной сетки точек в n -мерном параллелепипеде, с обработкой получаемых данных.

Предполагается, что число вложений циклов n заранее неизвестно. Поэтому использование вложенной конструкции вида

```

for I1 := U1 to V1 do
  for I2 := U2 to V2 do
    -----
    for In := Un to Vn do P;

```

может оказаться затруднительным.

Будем решать эту задачу путем *перебора* всех комбинаций из значений индексов I_1, I_2, \dots, I_n (обсуждение вычислительных алгоритмов такого перебора см., например, в [25]). Для хранения *последовательности индексов* используем целочисленный массив $I[1..n]$ и зададим массивы *нижних* и *верхних* границ соответствующих индексов $U, V[1..n]$.

Чтобы *перейти от предыдущей последовательности к следующей*, нужно прибавить 1 к *последнему* индексу $I[n]$. Это, однако, можно сделать, только если значение этого индекса не равно $V[n]$ (т.е. *верхней границе*). Если последний индекс уже равен $V[n]$, его надо заменить на $U[n]$ (т.е. на значение *нижней границы*) и попытаться прибавить 1 к *предпоследнему* индексу $I[n-1]$ и т.д. Эти действия можно записать в виде следующего фрагмента программы:

```
j := n;
while I[j] = V[j] do begin
  I[j] := U[j]; j := j - 1
end; { I[j] <> V[j] }
{ Переход к следующей последовательности I : }
I[j] := I[j] + 1;
```

Для проверки *окончания перебора* введем некоторую *фиктивную* компоненту нашего массива $I[0]$. Тогда процедура организации n вложенных циклов обработки данных может иметь вид

```
const nmax = ...;
type Vecn = array [0..nmax] of byte;
Procedure For_n (n: byte; U, V: Vecn);
  var j: byte; I: Vecn;
Begin   { Формирование начальной последовательности индексов: }
  for j := 1 to n do I[j] := U[j];
```



```

I[0] := 0;
repeat
  P; { Обработка текущей последовательности }
  j := n;
  while I[j] = V[j] do begin
    I[j] := U[j]; j := j-1
  end; { I[j] <> V[j] }
  { Переход к следующей последовательности индексов: }
  I[j] := I[j] + 1
until I[0] = 1;
{ Перебор всех последовательностей индексов завершен }
End;

```

Ну, а теперь мы можем записать соответствующую процедуру Scan для вычисления норм погрешностей q_1 (максимальная абсолютная погрешность δ_∞) и q_2 (среднеквадратичная погрешность δ_2) интерполяции сплайн-поверхностью $\tilde{f}(i)$ (т.е. $\varphi(t)$) по данным тестовой функции $f(t)$. Здесь будут использованы параметры: n – размерность задачи; A и B – массивы границ области в R^n ; M_0 – число шагов сканирования по каждой из координат (а общее число точек сканирования $ll = (M_0 + 1)^n$).

```

const nmax = ...;
type Vec = array [1..nmax] of real;
Procedure Scan (n: byte; A, B: Vec; M0: byte; var q1, q2: real);
  var j: byte; I: array [0..nmax] of byte; ll: longint; H, T: Vec; z: real;
Begin
  q1 := 0; q2 := 0; ll := 0; I[0] := 0;
  for j := 1 to n do begin
    I[j] := 0; H[j] := (B[j] - A[j])/M0;
  end;

```

```

repeat
  for j := 1 to n do T[j] := A[j] + H[j]*I[j];
  z := abs(fi(T) - f(T));
  if z > q1 then q1 := z;
  q2 := q2 + sqr(z); inc(l1);
  j := n;
  while I[j] = M0 do begin
    I[j] := 0; j := j - 1
  end; { I[j] < M0 }
  I[j] := I[j] + 1
until I[0] = 1;
q2 := sqrt(q2/l1)
End;

```

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

Ниже приводится список основных публикаций по теории и вычислительным аспектам построения и исследования сплайн-поверхностей, дающий представление об истории становления современного математического аппарата гладкого восполнения функций по данным на произвольной многомерной сетке узлов.

1. **Пуанкаре А.** О науке. - М.: Наука, 1983. – 560 с. (С. 127-128).
2. **Калиткин Н.Н.** Численные методы. - М.: Наука, 1978. – 512 с.
3. **Завьялов Ю.С., Квасов Б.И., Мирошниченко В.Л.** Методы сплайн-функций. - М.: Наука, 1980. – 352 с.
4. **Atteia M.** Existence et determination des fonctions "spline" á plusieurs variables // C.R. Acad. Sc. Paris.- 1966. - Т. 262, Serie A. - P. 575-578.
5. **Смоляк С.А.** Оптимальное восстановление функций и связанные с ним геометрические характеристики множеств // Труды третьей зимней школы по математическому программированию и смежным вопросам (24 января - 3 февраля 1970 г.,г.Дрогобыч), вып.III. - М.: 1970. - С. 509-557.
6. **Смоляк С.А.** Сплайны и их применение // Экономика и математические методы. - 1971. - Т.7, вып.3. - С. 419-431.
7. **Harder R.L., Desmarais R.N.** Interpolation using surface splines // Journal of Aircraft. - 1972. - Vol.9, № 2. - P. 189-191.
8. **Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М.** Теория упругости. - М.: Наука, 1965. – 204 с. - (Теоретическая физика, т.VII).
9. **Laurent P.-J.** Approximation et Optimisation. - Paris: Hermann, 1972. (Русский перевод: **Лоран П.-Ж.** Аппроксимация и оптимизация. - М.: Мир, 1975. - 496 с.).

10. **Соболев С.Л.** Некоторые применения функционального анализа в математической физике. - Л.: Изд-во ЛГУ, 1950. - 255 с.; 3-е изд., перераб. и доп. - М.: Наука, 1988. - 336 с.
11. **Соболев С.Л.** Введение в теорию кубатурных формул. - М.: Наука, 1974. - 808 с. (см. также [24]).
12. **Соболев С.Л.** Избранные вопросы теории функциональных пространств и обобщенных функций. - М.: Наука, 1989. - 254 с.
13. **Duchon J.** Interpolation des fonctions de deux variables suivant le principe de la flexion des plaques minces // RAIRO Analyse Numerique. - 1976. - Vol.10, № 12. - P. 5-12.
14. **Duchon J.** Splines minimizing rotation-invariant semi-norms in Sobolev spaces // Constructive theory of functions of several variables, Oberwolfach 1976. - Berlin-Heidelberg: Springer-Verlag, 1977. - P. 85-100.
15. **Duchon J.** Sur l'erreur d'interpolation des fonctions de plusieurs variables par des D^m -splines // RAIRO Analyse Numerique. - 1978. - Vol.12, № 4. - P. 325-334.
16. **Завьялов Ю.С., Имамов А.** О вариационных задачах теории сплайнов // Математический анализ и смежные вопросы математики. - Новосибирск: Наука, 1978. - С. 27-36.
17. **Василенко В.А.** Теория сплайн-функций. - Новосибирск: Изд-во НГУ, 1978. - 65 с.
18. **Meinguet J.** An intrinsic approach to multivariate spline interpolation at arbitrary points // Polynomial and Spline Approximation. Proc. NATO Adv. Study Inst. - Calgary, 1978; Dordrecht e.a., 1979. - P. 163-190.
19. **Meinguet J.** Basic mathematical aspects of surface spline interpolation // Seminaire de mathematique appliquee et mecanique, 1e semestre 1979. - P. II/1-II/10. (См. также: Numerische Integration. - Basel e.a, 1979. - S. 211-220).

20. **Meinguet J.** Multivariate interpolation at arbitrary points made simple // Journal of Applied Mathematics and Physics (ZAMP). - 1979. - Vol.30, № 2. - P. 292-304.

21. **Wahba G.** Convergence rates of thin plate splines when the data are noisy (preliminary report) // Lecture Notes in Mathematics. - 1979. - Vol.757. - P. 233-245.

22. **Ковалков А.В.** Функции Грина и сплайн-аппроксимация в многомерных областях. - Новосибирск, 1980. - 22 с. (Препринт ВЦ СО АН СССР: 70).

23. **Wahba G., Wendelberger J.** Some new mathematical methods for variational objective analysis using splines and cross-validation // Monthly Weather Review. - 1980. - Vol. 108, № 8. - P. 1122-1143.

24. **Goodman T.N., Lee S.L.** Cardinal interpolation by D^m -splines // Proc. Royal Soc. Edinburgh. - 1983. - Vol. A94, № 1-2. - P. 149-161.

25. **Василенко В.А.** Сплайн-функции: теория, алгоритмы, программы. - Новосибирск: Наука, 1983. - 214 с.

26. **Бежаев А.Ю.** Оценки ошибки сплайн-интерполяции в ограниченных областях. - Новосибирск, 1984. - 19 с. (Препринт ВЦ СО АН СССР: 102).

27. **Василенко В.А., Зюзин М.В., Ковалков А.В.** Сплайн-функции и цифровые фильтры. - Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1984. - 156 с.

28. **Библиотека программ LIDA-3 по аппроксимации функций и цифровой фильтрации сигналов и изображений: Часть I. Аппроксимация: Оперативно-информационный материал.** - Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1987. - 170 с.

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

30. **Матвеев О.В.** Аппроксимативные свойства интерполяционных D^m -сплайнов // Доклады АН СССР. - 1991. - Т. 321, № 1. - С. 14-18.

31. **Матвеев О.В.** Сплайн-интерполяция функций нескольких переменных и базисы в пространствах Соболева // Тр. МИРАН. - 1992. - Т. 198. – С. 125-152.
32. **Ашкеназы В.О.** Сплайн-поверхности: Методическая разработка. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 1993. - 32 с.
33. **Powell M.J.D.** The uniform convergence of thin plate spline interpolation in two dimensions // Numerische Mathematik. – 1994. – Vol. 68. – P. 107–128.
34. **Ашкеназы В.О.** Сплайн-поверхности и аппроксимационный поиск экстремума // Ученые записки: Материалы научной конференции, посвященной 25-летию университета. - Тверь: Тверской гос. ун-т, 1996. – Т. 1. - С. 36-37.
35. **Матвеев О.В.** Об одном методе интерполирования функций на хаотических сетках // Математические заметки. – 1997. – Т. 62, вып. 3. – С. 404–417.
36. **Ашкеназы В.О.** Сплайн-поверхности и аппроксимационный поиск экстремума // Применение функционального анализа в теории приближений. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 1999. – С. 19-30.
37. **Johnson M.J.** The L_2 -approximation order of surface spline interpolation // Math. Comp. - 2000. - Vol. 70. – P. 719-737.
38. **Beatson R.K., Light W.A. and Billings S.** Fast solution of radial basic function interpolation equations: domain decomposition methods // SIAM J. Sci. Comput. - 2000. - Vol. 22. – P. 1717-1740.
39. **Johnson M.J.** An improved order of approximation for thin-plate spline interpolation in the unit disk // Numerische Mathematik. – 2000. – Vol. 84, № 3. – P. 451–474.

40. **Ашкеназы В.О.** Оценки погрешностей интерполяции сплайн-поверхностью // Материалы юбилейной научной конференции, посвященной 30-летию Тверского гос. ун-та (Сентябрь–октябрь 2000 г.). – Тверь: Тверской гос. ун-т, 2001.

41. **Ашкеназы В.О.** Погрешности интерполяции функции D^m -сплайнами // Оптимальное управление динамическими системами: Сб. науч. трудов. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 2001. – С. 34-40.

42. **Ашкеназы В.О.** Сплайн-поверхности: Дополнительные главы: Учебное пособие. – Тверь: Тверской гос. ун-т, 2001. – 36 с. //

<http://Aszkenazy.narod.ru/SurfSplA.ZIP> .

43. **Johnson M.J.** The L_2 -approximation order of surface spline interpolation for $1 \leq p \leq 2$ (manuscript). – Kuwait University, April 24, 2002.

Список литературы по стохастическим сплайн-поверхностям

44. **Kimmeldorf G.S., Wahba G.A.** Correspondence between Bayesian estimation on stochastic processes and smoothing by splines // The Annals of Math. Statistics. - 1980. - Vol. 41, № 2. – P. 495-502.

45. **Shagen I.P.** The use of stochastic processes in interpolation and approximation // Intern. J. Computer Math. - 1980. - Section B, Vol. 8. – P. 63-76.

46. **Ашкеназы В.О.** Статистические игры, - Калинин: КГУ, 1981. – 32 с.

47. **Ашкеназы В.О.** Статистическая игра оценивания функции по неточным данным // Математические методы оптимизации и управления в системах. - Калинин: КГУ, 1984. – С. 42-48.

**Список литературы по равномерно распределенным
последовательностям точек**

48. **Halton J.H.** On the efficiency of certain quasi-random sequences of points in evaluating multi-dimensional integrals // Numerische Mathematic. - 1960. - V. 2, № 2. - S. 84-90.

49. **Kuipers L., Niederreiter H.** Uniform distribution of sequences. – New York: Wiley, 1974. (Русский перевод: **Кейперс Л., Нидеррейтер Г.** Равномерное распределение последовательностей. - М.: Мир, 1985. – 408 с.).

50. **Niederreiter H.** Quasi-Monte Carlo methods and pseudorandom numbers // Bulletin of the American Mathematical Society. - 1978. - V. 84, № 6. - P. 957-1041.

51. **Соболев И. М., Статников Р.Б.** Выбор оптимальных параметров в задачах с многими критериями. - М.: Наука, 1981.

52. **Соболев И.М.** Точки, равномерно заполняющие многомерный куб. - М.: Знание, 1982. - 32 с. (Новое в жизни, науке, технике. Сер. "Математика, кибернетика"; № 1).

**Список литературы по вычислительным алгоритмам
и программированию**

53. **Wilkinson J.H., Reinsch C.** Handbook for Automatic Computation. Linear Algebra. - Berlin–Heidelberg: Springer-Verlag, 1971. (Русский перевод: **Уилкинсон, Райнш.** Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. - М.: Машиностроение, 1976. – 389 с.).

54. **Вьюкова Н.И., Галатенко В.А., Ходулев А.Б.** Систематический подход к программированию. – М.: Наука, Физматлит, 1988. – 208 с.

СОДЕРЖАНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ	3
1. ВОССТАНОВЛЕНИЕ ФУНКЦИИ ПО ДИСКРЕТНЫМ ДАННЫМ..	5
1.1. Задача интерполирования	5
1.2. Вариационная задача восстановления функции; кубический сплайн	7
2. ПОНЯТИЕ О СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТИ	12
2.1. Интерполяционная сплайн-поверхность (случай двух переменных)	12
2.2. Вывод уравнения сплайн-поверхности	14
3. ОСНОВЫ ТЕОРИИ МНОГОМЕРНЫХ СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТЕЙ	19
3.1. Основные соотношения	19
3.2. Интерполяционный D^m -сплайн	21
3.3. Понятие о сглаживающих сплайн-поверхностях	24
4. НЕКОТОРЫЕ СВОЙСТВА СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТЕЙ	26
4.1. Дифференцируемость D^m -сплайнов	26
4.2. Оценки погрешностей интерполяции и сходимость сплайн- поверхностей	27
5. ОБОБЩЕНИЕ ПОНЯТИЯ D^m -СПЛАЙНА	31
5.1. Основные соотношения	31
5.2. Псевдо-полиномиальные сплайны	33
5.3. Стохастические сплайны	35
6. ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫЕ АСПЕКТЫ ПОСТРОЕНИЯ СПЛАЙН- ПОВЕРХНОСТЕЙ	38
6.1. Особенности реализации "канонического" алгоритма	38
6.2. Алгоритм Ж. Менге	44
6.3. Метод Холецкого	48

6.3.1. Основные соотношения	48
6.3.2. Программная реализация	51
7. МЕТОДИКА ИССЛЕДОВАНИЯ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНЫХ АЛГОРИТМОВ ПОСТРОЕНИЯ СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТИ	54
7.1. Выбор узлов сплайн-интерполяции	54
7.1.1. Равномерно распределенные последовательности точек	55
7.1.2. Количественные характеристики равномерности	57
7.1.3. Практическая реализация равномерно распределенных последовательностей точек	61
7.2. Вычисление погрешностей интерполяции функций сплайн-поверхностью	70
СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ	75

АШКЕНАЗЫ Вениамин Осипович

СПЛАЙН-ПОВЕРХНОСТИ
Основы теории и вычислительные алгоритмы

Учебное пособие

Тверской государственный университет,
Редакционно-издательское управление.
Адрес: Россия, 170000, г. Тверь, ул. Желябова, 33,