В.И. Дмитриев, Ж.Г. Ингтем

О ЧИСЛЕННОМ ДИФФЕРЕНЦИРОВАНИИ С ПОМОЩЬЮ СПЛАЙН ФУНКЦИЙ

Введение

При сглаживании экспериментальных данных достаточно широко используются полиномиальные сплайн-функции. Однако, полученные данные на сетке не предоставляют достаточно условий для построения сплайна. Для этого необходимо задавать краевые условия, обычно это значения производных на границах. Надо учитывать, что сплайн обладает свойством появления колебаний, амплитуда которых растет по мере удаления от границы. Чем с большей погрешностью заданна производная на границе, тем раньше возникают колебания в сплайн-функции. Чтобы подавить колебания и построить сплайн, который аппроксимирует результаты математического моделирования на большом участке, условие на границе необходимо определять из минимума нормы производной сплайна [1,2]. Такие сплайны с минимальной нормой производной эффективно использовать не только для сглаживания функции, но также в задачах численного дифференцирования. Таким образом, для аппроксимации производной некоторой функции, заданной таблично, необходимо просто продифференцировать сплайн с минимальной нормой производной, аппроксимирующий эту функцию.

При использовании квадратичного сплайна надо учитывать, что его производная является линейной, следовательно, необходимо простроить сплайн аппроксимацию по полученным значениям производной сплайна.

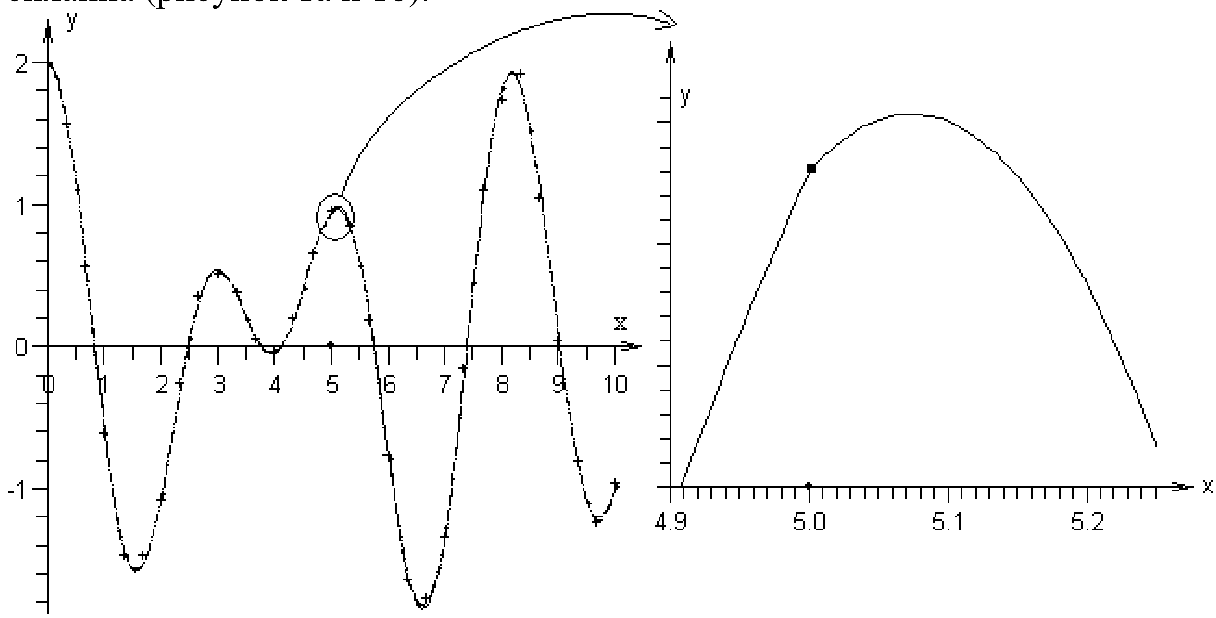
Если необходимо сглаживать данные, полученные с большим шагом и на большой области, то в силу того, что сплайн все равно на некотором шаге начнет накапливать ошибки и колебаться, целесообразно разбить область на несколько подобластей и на каждой подобласти строить свой сплайн с минимальной нормой производной. В данном подходе надо учитывать, что на стыке двух соседних сплайнов возможен разрыв производной. Это вызвано тем, что на границе двух подобластей производная слева получена из условий гладкой склейки, а справа – из условия минимума нормы производной. Даже, если допустить, что область делится только на две подобласти и минимальная норма производной каждого сплайна берется на границе двух подобластей, то значения производной справа и слева на границе, вообще говоря, могут не совпадать.

Пусть на отрезке $[a,b]$ задана равномерная сетка $\Delta_N = \{a = t_0 < t_1 < \ldots < t_N = b\}$, на которой в ходе некоторого эксперимента измерено N значений с погрешностью δ. Следуя изложенному выше разобьем отрезок $[a,b]$ $a = X_0 < X_1 < \ldots < X_M = b$ таким образом, чтобы каждый частичный отрезок $[X_k, X_{k+1}]$ содержал приблизительно одинаковое количество точек t_i, т.е. $X_k = t_{kl}$ где $l+1$ количество точек, которые содержатся в каждом отрезке $[X_k, X_{k+1}]$. Обозначим через x_i^k, $i = 0,1,\ldots,l$, $i = 0,1,\ldots,l$, $k = 0,1,\ldots,M-1$ такие узлы t_j сетки Δ_N, которые принадлежат отрезку $[X_k, X_{k+1}]$, $k = 0,1,\ldots,M-1$. На каждом таком отрезке $[X_k, X_{k+1}]$, $k = 0,\ldots,M-1$ будем строить сплайн $S^k(x)$ с минимальной нормой производной [1,2,3]. Таким образом, на всем отрезке $[a,b]$ будет построен сплайн $S(x)$ класса C^0, поскольку в каждой точке X_k, $k = 1,\ldots,M-1$ значения производных сплайна определяются из условия достижения минимума нормы первой производной на отрезке $[X_k, X_{k+1}]$, $k = 1,\ldots,M-1$, а не из условия гладкой склейки $(S'_{k-1}(X_k) = S'_k(X_k))$, $k = 1,\ldots,M-1$.

В следующем примере рассматривается функция

$$f(x) = \cos\left(\frac{3x}{2}\right) + \cos\left(\frac{7x}{3}\right),$$

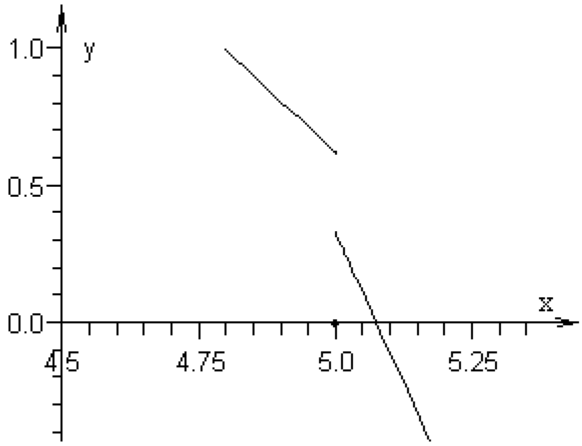
заданная 41 значением с погрешностью в 5% на отрезке $[0,10]$, для которого построена сплайн-аппроксимация с помощью квадратичного сплайна (рисунок 1а и 1б).



а б

Рисунок 1. *Квадратичный сплайн*

Как можно заметить, в точке стыка наблюдается разрыв первой производной (рисунок 1в).



в

Рисунок 1в. *Производная квадратичного сплайна в точке стыка*

В этом случае более выгодно использовать кубический сплайн, для построения которого, кроме полученных данных, необходимо два дополнительных значения. Эти значения дает условие достижения минимума нормы первой производной: $\min\limits_{p_0^k, p_1^k} \|S'(x)\|_{L_2}^2$, p_0^k – первая производная в точке x_0^k (x_0^k – начальная точка каждого отрезка $[X_k, X_{k+1}]$) а p_1^k– первая производная в точке x_1^k Однако, для обеспечения непрерывности первой производной следует значения первых производных получать из условия достижения минимума нормы первой производной только на отрезке $[X_0, X_1]$. В дальнейшем, значение p_0^k первой производной на границе подобластей, т.е. в точках X_k, $k = 1,2,\ldots,M-1$, необходимо получать из условия гладкой склейки; а значение p_1^k из условия достижения минимума нормы первой производной на каждом отрезке $[X_k, X_{k+1}]$, $k = 0,1,\ldots,M-1$. Построенный таким образом, полулокальный сплайн принадлежит классу C^1 на всем отрезке $[a,b]$, а на каждом частичном отрезке $[X_k, X_{k+1}]$, $k = 0,1,\ldots,M-1$ сплайн принадлежит классу C^2.

Такой подход позволяет эффективно решать задачи численного дифференцирования.

Кубический интерполяционный сплайн

Построим кубический сплайн $S(x)$, который удовлетворяет следующим условиям:

$$S(x) = S_i^k(x) = a_i^k x^3 + b_i^k x^2 + c_i^k x + d_i^k,$$

$$x \in [x_i^k, x_{i+1}^k], \quad i = 0,1,\ldots,l, \quad k = 0,1,\ldots,M-1;$$

$$S(x_i^k) = f_i^k, \ i = 0,1,\ldots,l, \ k = 0,1,\ldots,M-1;$$

где f_i^k заданные значения функции.

$$S'^k_i(x_{i+1}^k) = S'^k_{i+1}(x_{i+1}^k),$$

$$S'^k_{l-1}(x_l^k) = S'^{k+1}_0(x_0^{k+1}), \ i = 0,1,\ldots,l-2, k = 0,1,\ldots,M-2; \qquad (1)$$

$$S''_i(x_{i+1}^k) = S''_{i+1}(x_{i+1}^k), \ x_{i+1}^k \in (X_k, X_{k+1}), \ i = 0,1,\ldots,l-2, \ k = 0,1,\ldots,M-1. \quad (2)$$

Введем следующие обозначения: $S'(x_i^k) = p_i^k$, $i = 0,1,\ldots,N$, $k = 0,1,\ldots,M-1$. Выразив коэффициенты a_i^k, b_i^k, c_i^k и d_i^k через f_i^k, f_{i+1}^k, p_i^k и p_{i+1}^k, мы получим кубический сплайн $S_i^k(x)$, зависящий от значений f_i^k, f_{i+1}^k, p_i^k и p_{i+1}^k, $k = 0,1,\ldots,M-1$, $i = 0,1,\ldots,l-1$.

Условия гладкой склейки (1) и (2) позволят получить p_{i+1}^k через p_i^k; в свою очередь, все p_i^k выразятся через значения p_0^k и p_1^k на каждом отрезке $[X_k, X_{k+1}]$. p_0^0 и p_1^0, как было отмечено, находятся из условия минимизации нормы первой производной на отрезке $[X_0, X_1]$:

$$\min_{p_0^0 p_1^0} \|S'(x)\|^2_{L_2[X_0, X_1]}.$$

Условие (1) позволяет получать все остальные p_0^k, $k = 1,2,\ldots,M-1$; p_1^k находятся из условий $\min\limits_{p_1^k} \|S'(x)\|^2_{L_2[X_k, X_{k+1}]}$, $k = 1,2,\ldots,M-1$.

Пример 2

В следующем примере построен полулокальный кубический сплайн с минимальной нормой производной, интерполирующий 100 значений функции Бесселя заданных с равномерным шагом на отрезке [0,50]. На каждом отрезке $[10n, 10(n+1)]$, $n = 0,1,2,3,4$ строится интерполяционный кубический сплайн класса C^2 с минимальной нормой производной. В точках 10, 20, 30 и 40 значения второй производной находятся из минимизации нормы первой производной сплайна на отрезке $[10n, 10(n+1)]$, $n = 1,2,3,4$, а первая находится из условия гладкой склейки (1).

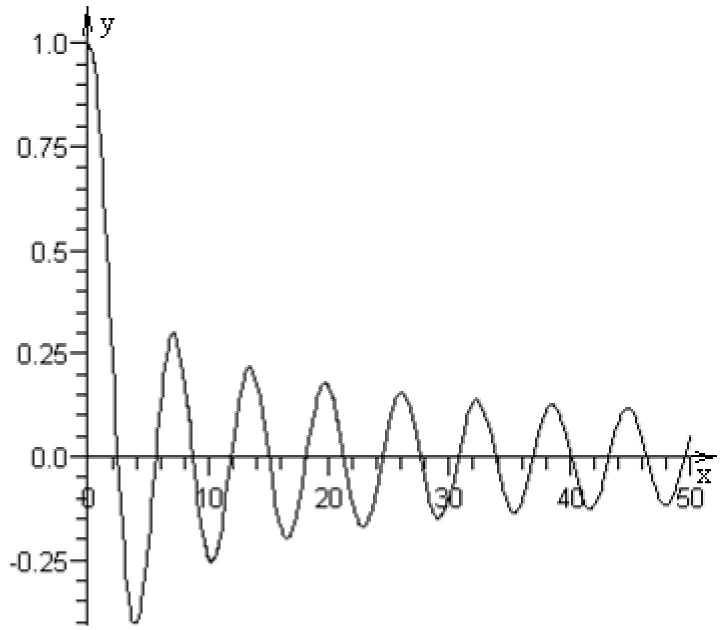


Рисунок 2. *Полулокальный сплайн с минимальной нормой производной.*

Кубический аппроксимационный сплайн

В случае, когда значения функции $f^* = (f_1^*, f_2^*, \dots, f_N^*)$ известны с погрешностью, необходимо найти аппроксимационные значения $\bar{f} = (\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \dots, \tilde{f}_M)$, которые позволят построить гладкий не колеблющийся сплайн. Для нахождения таких значений, обычно, прибегают к методу регуляризации Тихонова:

$$\min_{\bar{f}, p_0, p_1} \left\{ \left\| f^* - S(x, \bar{f}, p_0, p_1) \right\|_{R^{N+1}}^2 + \alpha \left\| S'(x, \bar{f}, p_0, p_1) \right\|_{L_2}^2 \right\}, \qquad (3)$$

где под $\|\bullet\|_{R^{N+1}}$ понимается евклидова норма в $(N+1)$- мерном пространстве значений на равномерной сетке Δ_N.

Вектор $\bar{f} = (\tilde{f}_1, \tilde{f}_2, \dots, \tilde{f}_M)$ представляет искомые значения (в дальнейшем волну будем опускать).

Следует отметить, что количество искомых значений должно быть меньше количества заданных, иначе информации для построения аппроксимации будет недостаточно, т.е. $M < N$. Если $M = N$, то из задачи аппроксимации мы перейдем, по сути, в задачу интерполяции.

Значения $p_0 = p_0(\bar{f})$ и $p_1 = p_1(\bar{f})$ первой производной определяются из условия минимизации нормы первой производной

Второе слагаемое условия (3) является стабилизатором в соответствии с теорией Тихонова о решении неустойчивых задач [4].

Параметр регуляризации α обычно выбирается из условия: $\|f^* - S\|_{R^{N+1}}^2 = \delta^2$, где δ – ошибка измерения функции $f(x)$. Учитывая, что данный сплайн строится таким образом, чтобы норма его первой производной достигала своего минимума в пространстве L_2, мы опускаем второе слагаемое, так как сплайн частично удовлетворяет условиям минимизации, накладываемым на стабилизатор.

Таким образом, вариационная задача (3) представляется в следующем виде:

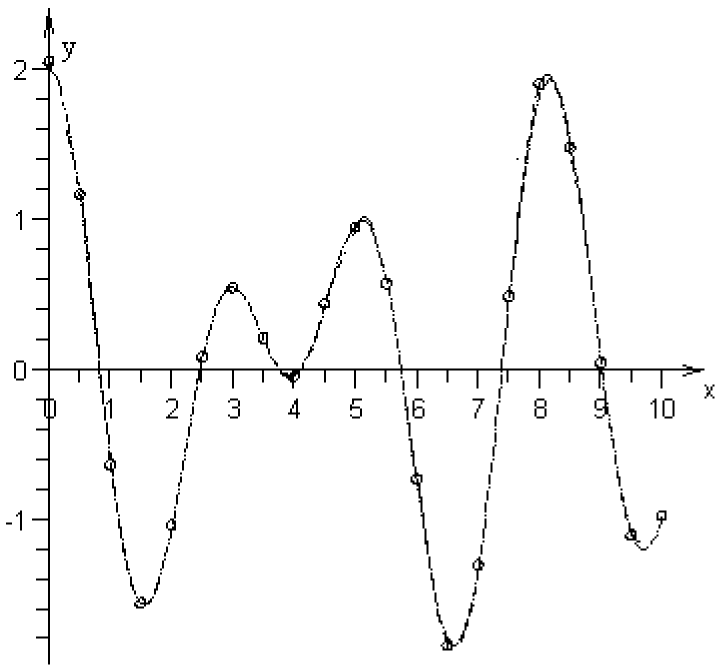
$$\min_{\bar{f}}\left\{ \left\|f^* - S\right\|^2_{R^{N+1}}\right\} = \min_{\bar{f}}\left\{\sum_{n=0}^{N}\left|f^* - S(\xi_n, \bar{f})\right|^2\right\}, \tag{4}$$

где $N+1$ – число измеренных с погрешностью δ, значений f_n^* функции $f(x)$ в точках ξ_n, $n = 0,1,\ldots,N$.

Задача (4) позволяет найти все $\tilde{f}_m$, $m = 0,1,\ldots,M$, по которым будет построен кубический сплайн.

Пример 3

В следующем примере построена кубическая сплайн аппроксимация функции $f(x) = \cos\left(\frac{3x}{2}\right) + \cos\left(\frac{7x}{3}\right)$ по известным в 41 точке значениям с погрешностью 1%. Как можно заметить сплайн эффективно приближает функцию. Из рисунка 3 видно, что графики функции и сплайна совпадают.



$\circ$ – полученные аппроксимационные значения.

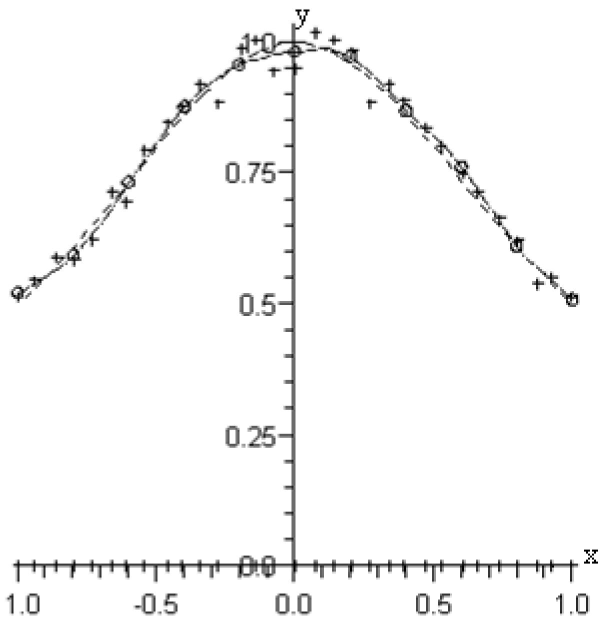
Рисунок 3. *Кубическая сплайн аппроксимация*

Сглаживание измерений с неравномерным шагом

В силу природных или технических причин измерения не всегда удается получить с равномерным шагом. Условие (4) позволяет находить аппроксимационные значения $\tilde{f}_m,\ m = 0,1,\ldots,M$ с равномерным шагом, даже если измеренные значения получены с неравномерным шагом. Таким образом, по неточным значениям, известным на неравномерной сетке, мы строим сплайн с минимальной нормой производной на равномерной сетке, что позволяет эффективно строить математические модели разных задач.

Пример 4

В данном примере рассматривается неравномерная сетка, на которой заданно с погрешностью 5% 31 значение функции $f(x) = \dfrac{1}{x^2+1}$. Несмотря на большую погрешность данных, сплайн позволяет эффективно приближать искомую функцию.



- - - - - сплайн, ——— искомая функция, $+$ приближенные значения, $\circ$ – полученные значения с равномерным шагом в ходе аппроксимации.

Рисунок 4. *Сплайн аппроксимация на неравномерной сетке.*

О численном дифференцировании

Как уже было изложено выше, квадратичный сплайн с минимальной нормой производной принадлежит классу C^1, если он определен на всей области, классу C^0 в полулокальном случае. В то время как построенный кубический сплайн с минимальной нормой производной принадлежит классу C^2, когда сплайн определен на всей области, и классу C^1 в полулокальном случае. Таким образом, мы видим, что использование кубического сплайна предпочтительно в задачах численного дифференцирования, поскольку для получения значения производной некоторой функции, заданной своими табличными значениями, достаточно просто продифференцировать построенный кубический сплайн с минимальной нормой производной.

В данном примере показано, как с помощью полулокального сплайна строится приближение производной функции Бесселя $J_0(x)$. На рисунке 5 производная полулокального сплайна и $J_1(x)$ совпадают. На отрезке [0,50] построен сплайн, интерполирующий 100 значений функции Бесселя $J_0(x)$. Сплайн состоит из 5 кубических сплайнов. Для получения производной данный сплайн продифференцирован на всем отрезке [0,50].

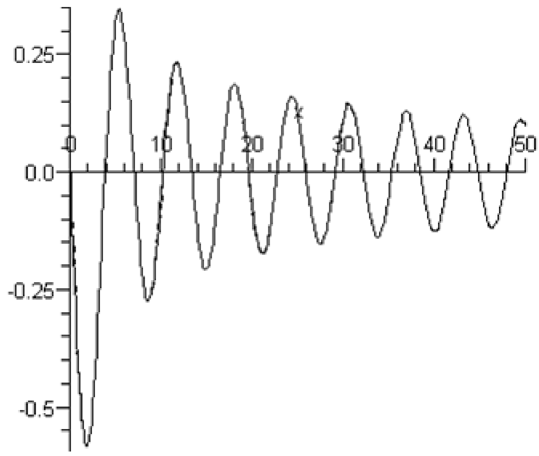


Рисунок 5. *Производная полулокального сплайна с минимальной нормой производной*

Литература

1. V.I.Dmitriev J.G.Ingtem A two-dimensional minimum-derivative spline// Computational mathematics and modeling vol.21 № 2 pp 206-211// Springer 2010.
2. Ингтем Ж.Г. Сплайн функция с минимальной нормой производной в задачах интерполяции и аппроксимации// Вестник Московского Университета Вычислительная математика и кибернетика №4, 2008, с.16-27.
3. V.I.Dmitriev, J Ingtem Solving an integral equation of the first kind by spline approximation// Computational mathematics and modeling vol.15 № 2 April-June 2004//Kluwer academic consultants bureau.
4. Тихонов А.Н. Некорректно поставленные задачи и методы их решения.// Методы решения некорректных задач и их применение. Тр. всесоюзной школы молодых ученных. М.: МГУ 1974 с. 6-11.