Дискретный подход к задаче формосохраняющей интерполяции

Б. И. Квасов

Институт вычислительных технологий СО РАН,
Новосибирск

Рассматриваемый подход основан на формулировке задачи как дифференциальной многоточечной краевой задачи с ее последующей конечно-разностной аппроксимацией. Конструируются алгоритмы интерполяции точечных данных дискретными весовыми кубическими сплайнами, которые сохраняют монотонность и выпуклость данных. Проведенный анализ позволяет разработать два таких алгоритма с автоматическим выбором параметров формы (веса): один для сохранения монотонности данных и второй для сохранения выпуклости данных. Приведены результаты численных расчетов.

Постановка задачи

Пусть имеются данные

$$(x_i, f_i),\ i = 0, \dots, N+1, \tag{1}$$

где $a = x_0 < x_1 < \dots < x_{N+1} = b$. Положим

$$f[x_i, x_{i+1}] = (f_{i+1} - f_i)/h_i, \quad h_i = x_{i+1} - x_i, \quad i = 0, \dots, N.$$

Данные (1) будем называть монотонными, если

$$f[x_i, x_{i+1}] \ge 0, \quad i = 0, \dots, N,$$

и выпуклыми, если

$$\delta_i f = f[x_i, x_{i+1}] - f[x_{i-1}, x_i] \ge 0, \quad i = 1, \dots, N.$$

Задача формосохраняющей интерполяции состоит в построении достаточно гладкой функции S такой, что $S(x_i) = f_i$, $i = 0, \dots, N+1$ и S монотонна (выпукла) на участках монотонности (выпуклости) исходных данных.

Очевидно, что решение задачи формосохраняющей интерполяции неединственно. Будем искать его в виде весового кубического сплайна. Функцию $w(x)$ такую, что $0 < m \le w(x) \le M$, будем называть весовой функцией.

Определение 1. Весовым кубическим сплайном S называется решение дифференциальной многоточечной краевой задачи (сокращенно ДМКЗ):

$$\frac{d^2}{dx^2}(w(x)\frac{d^2S}{dx^2})=0, \quad x\in(x_i,x_{i+1}), \quad i=0,...,N; \tag{2}$$

$$S\in C^k[a,b], \quad k\geq 1; \tag{3}$$

$$w(x_i^-)S''(x_i^-)=w(x_i^+)S''(x_i^+), \quad i=1,...,N. \tag{4}$$

Будем считать, что кубический сплайн S удовлетворяет условиям интерполяции:

$$S(x_i)=f_i, \quad i=0,...,N+1.$$

Для однозначного определения сплайна нам также потребуются краевые условия. Наиболее часто используемыми являются ограничения следующих типов:

- задание граничных значений первой производной: $S'(a)=f_0'$, $S'(b)=f_{N+1}'$;

- задание граничных значений второй производной: $S''(a)=f_0''$, $S''(b)=f_{N+1}''$;

Конечно-разностная аппроксимация

Рассмотрим теперь дискретизацию сформулированной ДМКЗ (2)–(4). Пусть задано $n_i\in \mathrm{IN}$, $i=0,...,N$. Будем искать сеточную функцию

$$\{u_{ij},\ j=-1,...,n_i+1,\ i=0,...,N\},$$

удовлетворяющую разностным уравнениям:

$$\Lambda_i(w(x_{ij})\Lambda_i u_{ij})=0, \quad j=1,...,n_i-1,\ \ i=0,...,N, \tag{5}$$

где

$$\Lambda_i u_{ij}=\frac{u_{i,j-1}-2u_{ij}+u_{i,j+1}}{\tau_i^2}, \quad \tau_i=\frac{h_i}{n_i},$$

$$x_{ij}=x_i+j\tau_i, \quad j=0,...,n_i.$$

Аппроксимация условий гладкости (3) и (4) дает соотношения

$$u_{i-1,n_{i-1}}=u_{i0},$$

$$\frac{u_{i-1,n_{i-1}+1}-u_{i-1,n_{i-1}-1}}{2\tau_{i-1}}=\frac{u_{i,1}-u_{i,-1}}{2\tau_i}, \quad i=1,...,N, \tag{6}$$

$w(x_i^-)\Lambda_{i-1}u_{i-1,n_{i-1}} = w(x_i^+)\Lambda_i u_{i,0}.$

Условия интерполяции и краевые условия преобразуются к виду

$$u_{i,0} = f_i, \quad i = 0,\dots,N, \quad u_{N,n_N} = f_{N+1}, \tag{7}$$

$$\Lambda_0 u_{0,0} = f_0'', \quad \Lambda_N u_{N,n_N} = f_{N+1}''. \tag{8}$$

Соотношения (6)–(8) позволяют исключить “лишние” неизвестные $u_{i,-1}$ и u_{i,n_i+1}, $i = 0,\dots,N$. Дискретное сеточное решение будет определено как

$$\left\{u_{ij}, \quad j = 0,\dots,n_i,\ i = 0,\dots,N\right\}. \tag{9}$$

Вместо системы линейных уравнений с пятидиагональной матрицей (5)–(8) можно рассмотреть цепочку трехдиагональных систем. Введем обозначение:

$$M_{ij} = w(x_{ij})\Lambda_i u_{ij}, \quad j = 0,\dots,n_i, \quad i = 0,\dots,N. \tag{10}$$

Тогда на отрезке $[x_i, x_{i+1}]$ разностные уравнения (5) принимают вид:

$M_{i0} = M_i,$

$$\frac{M_{i,j-1} - 2M_{ij} + M_{i,j+1}}{\tau_i^2} = 0, \quad j = 1,\dots,n_i - 1, \tag{11}$$

$M_{i,n_i} = M_{i+1},$

где M_i и M_{i+1} – заданные числа.

В силу соотношений (10) и с учетом условий интерполяции (7) имеем

$u_{i0} = f_i,$

$$\frac{u_{i,j-1} - 2u_{ij} + u_{i,j+1}}{\tau_i^2} = \frac{M_{ij}}{w(x_{ij})}, \quad j = 0,\dots,n_i, \tag{12}$$

$u_{i,n_i} = f_{i+1}.$

Матрицы систем (11) и (12) имеют диагональное преобладание. Это позволяет устойчиво решить эти системы методом трехточечной прогонки. В общем случае к системам (11), (12) надо добавить линейную систему для нахождения величин M_i, $i = 0,\dots,N+1$.

Пусть далее w – кусочно-постоянная функция такая, что $w(x) = w_i$ для $x \in [x_i, x_{i+1})$, $i = 0, \ldots, N$. Тогда продолжение сеточного решения системы (12) будет кубическим многочленом. На всем отрезке $[a,b]$ получаем дискретный весовой кубический сплайн, у которого в силу (6) будут непрерывны разделенные разности, но не производные.

Дискретный весовой кубический сплайн

Будем использовать обозначения:

$$M_i = w_{i-1}\Lambda_i S(x_i^-) = w_i \Lambda_i S(x_i^+), \quad i = 1, \ldots, N,$$

$$M_0 = w_0 \Lambda_0 S(x_0^+), \quad M_{N+1} = w_N \Lambda_N S(x_{N+1}^-).$$

Для $x \in [x_i, x_{i+1}]$ имеем

$$\begin{aligned} S(x) = f_i(1-t) + f_{i+1}t + M_i[\Phi_i(x) - \Phi_i(x_i)(1-t)] + \\ + M_{i+1}[\Psi_i(x) - \Psi_i(x_{i+1})t], \end{aligned} \tag{13}$$

где $t = (x - x_i)/h_i$ и

$$\Phi_i(x) = \frac{1}{6w_i h_i}(x_{i+1} - x - \tau_i)(x_{i+1} - x)(x_{i+1} - x + \tau_i),$$

$$\Psi_i(x) = \frac{1}{6w_i h_i}(x - x_i + \tau_i)(x - x_i)(x - x_i - \tau_i). \tag{14}$$

Используя (13), (14) и второе из соотношений (6), получаем

$$A_i M_{i-1} + B_i M_i + C_i M_{i+1} = D_i, \quad i = 1, \ldots, N, \tag{15}$$

где

$$A_i = \mu_i(1 - \varepsilon_{i-1}^2), \quad B_i = 2 + \mu_i \varepsilon_{i-1}^2 + \lambda_i \varepsilon_i^2, \quad C_i = \lambda_i(1 - \varepsilon_i^2),$$

$$D_i = 6(w_{i-1}\mu_i + w_i \lambda_i) f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}], \quad \varepsilon_i = \tau_i / h_i \le 1/2,$$

$$\lambda_i = \frac{w_{i-1}h_i}{w_{i-1}h_i + w_i h_{i-1}}, \quad \mu_i = 1 - \lambda_i. \tag{16}$$

Предположим, что система (15) замыкается краевыми условиями типа II (очевидно, что могут быть использованы краевые условия и других типов). Тогда соотношения (15) дают линейную систему с диагональным преобладанием. Решение этой системы существует, единственно и может быть найдено методом трехточечной прогонки.

Используя обозначение $m_i = S[x_i - \tau_i, x_i + \tau_i]$, $i = 0, \ldots, N+1$ и третье из соотношений (6), имеем

$$a_i m_{i-1} + b_i m_i + c_i m_{i+1} = d_i, \quad i = 1,\dots,N, \tag{17}$$
где
$$a_i = \lambda_i \frac{1-\varepsilon_{i-1}^2}{1+2\varepsilon_{i-1}^2}, \quad b_i = \lambda_i \frac{2+\varepsilon_{i-1}^3}{1+2\varepsilon_{i-1}^2} + \mu_i \frac{2+\varepsilon_i^2}{1+2\varepsilon_i^2}, \quad c_i = \mu_i \frac{1-\varepsilon_i^2}{1+2\varepsilon_i^2},$$
$$d_i = \frac{3\lambda_i}{1+2\varepsilon_{i-1}^2} f[x_{i-1}, x_i] + \frac{3\mu_i}{1+2\varepsilon_i^2} f[x_i, x_{i+1}].$$

Для замыкания системы (17) можно использовать краевые условия типа I. Соответствующая система линейных уравнений имеет диагональное преобладание, обеспечивающее существование и единственность дискретного весового кубического сплайна.

Условия монотонности и выпуклости

Беря линейные комбинации уравнений (15) и (17), замыкаемых с помощью краевых условий типов I и II, матрицы этих систем можно привести к матрицам монотонного типа [1. С. 152]. Это позволяет получить достаточные условия монотонности и выпуклости дискретного весового кубического сплайна.

Теорема 1. *Пусть дискретный весовой кубический сплайн* S *с краевыми условиями* $S'(x_0) = f_0'$ *и* $S'(x_{N+1}) = f_{N+1}'$ *интерполирует монотонные данные* $\{f_i\}$, $i = 0,\dots,N+1$. *Если выполняются условия*

$$0 \le f_0' \le 3f[x_0, x_1]/(1-\varepsilon_0^2), \quad 0 \le f_{N+1}' \le 3f[x_N, x_{N+1}]/(1-\varepsilon_N^2), \tag{18}$$
$$\lambda_i(1-\varepsilon_i^2) f[x_{i-1}, x_i] \le [1+\lambda_i + (1+\mu_i)\varepsilon_{i-1}^2] f[x_i, x_{i+1}],$$

$$\mu_i(1-\varepsilon_{i-1}^2) f[x_i, x_{i+1}] \le [1+\mu_i + (1+\lambda_i)\varepsilon_i^2]) f[x_{i-1}, x_i], \quad i = 1,\dots,N, \tag{19}$$
то $S[x-\tau_i, x+\tau_i] \ge 0$ *для всех* $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0,\dots,N$.

Рассмотрим теперь условия выпуклости весового кубического сплайна. Уравнения (15) с краевыми условиями типа II могут быть переписаны в виде
$$A_1 M_0 = D_0,$$
$$A_i M_{i-1} + B_i M_i + C_i M_{i+1} = D_i, \quad i = 1,\dots,N, \tag{20}$$
$$C_N M_{N+1} = D_{N+1},$$
где правые части имеют вид
$$D_0 = A_1 w_0 f_0', \quad D_{N+1} = C_N w_N f_{N+1}', \quad D_i = \frac{6w_{i-1}w_i}{w_i h_{i-1} + w_{i-1}h_i} \delta_i f. \tag{21}$$

Теорема 2. *Пусть весовой кубический сплайн* S *с краевыми условиями*

$S''(x_0) = f''_0$ *и* $S''(x_{N+1}) = f''_{N+1}$ *интерполирует выпуклые данные* $\{f_i\}$, $i = 0,\dots,N+1$. *Если правые части системы* (20) *удовлетворяют неравенствам*

$$D_0 \ge 0, \quad D_{N+1} \ge 0, \quad D_i - \frac{A_i}{B_{i-1}} D_{i-1} - \frac{C_i}{B_{i+1}} D_{i+1} \ge 0, \quad i = 1,\dots,N, \tag{22}$$

то $\Lambda_i S(x) \ge 0$ *для всех* $x \in [x_i, x_{i+1}]$, $i = 0,\dots,N$.

Адаптивный выбор параметров формы

Предположим для определенности, что данные являются монотонно возрастающими: $f[x_i, x_{i+1}] \ge 0$, $i = 0,\dots,N$. Принимая во внимание формулы (16), неравенства (19) можно переписать в виде

$$\frac{w_{i-1}}{w_i}\frac{h_i}{h_{i-1}} \ge \frac{f[x_i, x_{i+1}]}{f[x_{i-1}, x_i]} - 2, \quad \frac{w_i}{w_{i-1}}\frac{h_{i-1}}{h_i} \ge \frac{f[x_{i-1}, x_i]}{f[x_i, x_{i+1}]} - 2, \quad i = 1,\dots,N. \tag{23}$$

Отсюда следует, что при выборе достаточно больших значений отношения w_{i-1}/w_i можно существенно уменьшить ограничения на данные, достаточные для получения монотонности весового кубического сплайна. Для обычного дискретного кубического сплайна имеем $w_{i-1}/w_i = 1$.

Отметим, что для каждого i одно из неравенств (23) выполняется. Пусть, например, выполняется неравенство $f[x_i, x_{i+1}] > f[x_{i-1}, x_i]$. Тогда второе неравенство в (23) выполнено. Первое неравенство может быть выполнено за счет выбора w_i непосредственно из этого неравенства. Предлагается следующий рекуррентный алгоритм, использующий формулу для начального задания весов (см. [4]):

$$w_i = [1 + C_i f[x_i, x_{i+1}]^2]^{-\beta_i}, \quad C_i \ge 1, \quad \beta_i \ge 0, \quad i = 0,\dots,N. \tag{24}$$

Алгоритм 1. Пусть на отрезке монотонности данных первый параметр w_{i-1} известен (обычно по формуле (24)). Если неравенства (23) выполняются для $w_i = w_{i-1}$, то полагаем $w_i = w_{i-1}$. В противном случае вычисляем w_i из того неравенства (23), которое не выполняется при $w_i = w_{i-1}$, путем замены знака неравенства на знак равенства. Если на некотором шаге $w_i < \varepsilon$ ($w_i > \varepsilon^{-1}$), то полагаем $w_i = \varepsilon$ ($w_i = \varepsilon^{-1}$), где ε – достаточно малое положительное число. Алгоритм начинаем с задания w_0 и легко находим все параметры $\{w_i\}$, обеспечивающие монотонность дискретного весового кубического сплайна для любых монотонных данных.

Рассмотрим теперь алгоритм выбора параметров веса w_i для сохранения выпуклости данных. Будем предполагать, что данные являются выпуклыми, т. е. $\delta_i f > 0$, $i = 1,\ldots,N$. Ограничения (22) будут выполнены, если удовлетворяются следующие неравенства:

$$D_0 \ge 0, \quad D_{N+1} \ge 0, \quad D_i - \frac{\mu_i}{2} D_{i-1} - \frac{\lambda_i}{2} D_{i+1}, \quad i = 1,\ldots,N.$$

Последние неравенства можно усилить, расщепив их на две части. Имеем

$$D_i - \frac{\mu_i}{2} D_{i-1} - \frac{\lambda_i}{2} D_{i+1} = \mu_i (D_i - \frac{1}{2} D_{i-1}) + \lambda_i (D_i - \frac{1}{2} D_{i+1}), \quad i = 1,\ldots,N.$$

Поэтому неравенства (22) выполняются, если выполнены следующие условия:

$$\begin{aligned} &0 \le D_0 / 2 \le D_1, \quad 0 \le D_{N+1} \le 2D_N, \\ &D_{i-1} / 2 \le D_i \le 2D_{i-1}, \quad i = 2,\ldots,N. \end{aligned} \qquad (25)$$

Принимая во внимание (21), нетрудно показать, что неравенства (25) будут выполнены, если выполняются следующие ограничения на краевые условия:

$$0 < f_0'' < 6\delta_1 f / h_0, \quad 0 < f''_{N+1} < 6\delta_N f / h_N$$

и на весовые параметры:

$$\begin{aligned} &\frac{w_0}{w_1}\frac{h_1}{h_0} \le \frac{6\delta_1 f}{h_0 f_0''} - 1, \\ &\frac{1}{2\lambda_{i-1}}\frac{\delta_i f}{\delta_{i-1} f} \le \frac{w_{i-1}}{w_i}\frac{h_i}{h_{i-1}} + 1 \le \frac{2}{\lambda_{i-1}}\frac{\delta_i f}{\delta_{i-1} f}, \quad i = 2,\ldots,N, \\ &\frac{w_N}{w_{N-1}}\frac{h_{N-1}}{h_N} \le \frac{6\delta_N f}{h_N f''_{N+1}} - 1. \end{aligned} \qquad (26)$$

Если положить $w_i = 1$ для всех i, то неравенства (26) принимают вид

$$\frac{1}{2} f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}] \le f[x_{i-2}, x_{i-1}, x_i] \le 2 f[x_{i-1}, x_i, x_{i+1}], \quad i = 2,\ldots,N.$$

Дискретный кубический сплайн будет выпуклым, если выполняются эти неравенства. Однако это возможно только для слабо меняющихся данных.

Нетрудно видеть, что если $\delta_{i-1} f \delta_i f \leq 0$, то неравенства (26) не могут быть выполнены ни для каких весов $w_i > 0$. По этой причине отделим участки выпуклости и вогнутости данных, где может быть использован алгоритм, аналогичный рассмотренному для монотонности (или аналогичный алгоритмам из [2, 5]). Предлагается следующий алгоритм для определения параметров веса w_i.

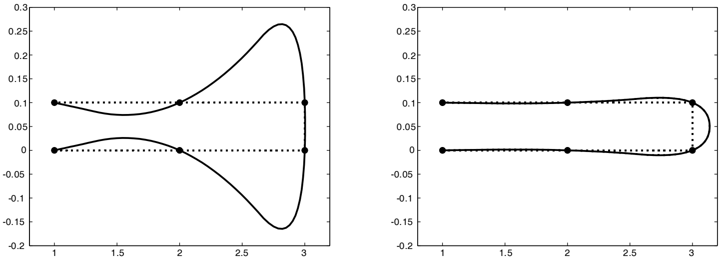
Алгоритм 2. Пусть на отрезке выпуклости данных первые два параметра w_{i-2} и w_{i-1} известны. Обычно они задаются по формуле (24). Если неравенства (26) выполняются для $w_i = w_{i-1}$, то полагаем $w_i = w_{i-1}$. В противном случае w_i находим из невыполненного неравенства (26) путем замены в нем знака неравенства на знак равенства. Для $w_i < \varepsilon$ ($w_i > \varepsilon^{-1}$) полагаем $w_i = \varepsilon$ ($w_i = \varepsilon^{-1}$), где ε – достаточно малое положительное число. Алгоритм начинаем с w_0 и w_1 и легко находим все параметры $\{w_i\}$, обеспечивающие выпуклость дискретного весового кубического сплайна для любых выпуклых данных.

Графические примеры

Цель первого примера состоит в рассмотрении эффектов параметров формы w_i при применении различных видов параметризации. Сплошная линия на рис. 1 соответствует графику дискретного кубического сплайн-интерполянта при использовании параметризаций по длине хорд (a) и единичной (b) с граничными условиями $(S_x''(t_i), S_y''(t_i)) = (0,0)$, $i = 1,6$ и исходными данными из табл. 1. Штриховые кривые на рис. 1 дают графики весовых кубических сплайн-интерполянтов для тех же данных при выборе весов по алгоритму 1 монотонной интерполяции и $\varepsilon = 0.0001$. Рис. 1 иллюстрирует тот факт, что форма интерполяционной кривой при использовании параметризации по длине хорд может не соответствовать замыслу пользователя. Весовой сплайн дает ожидаемые результаты.

Таблица 1. Данные для рис. 1

x_i	1	2	3	3	2	1
f_i	0	0	0	0,1	0,1	0,1



(a) (b)

Рис. 1. Параметрический дискретный кубический сплайн (сплошная кривая) и дискретный весовой сплайн (штриховая кривая) для одних и тех же данных: a – параметризация по суммарной длине хорд; b – единичная параметризация

Алгоритм 2 автоматического выбора параметров веса для сохранения выпуклости данных был протестирован на двух примерах с данными в табл. 2 и 3 (см. [3]). Интерполяционные кривые показаны на рис. 2. Приведенные результаты позволяют сделать вывод, что предложенный метод выпуклой интерполяции дает визуально вполне удовлетворительные кривые. Метод прост в реализации и экономичен в вычислениях.

Таблица 2. Данные для рис. 2(a)

x_i	0	1	5	8	10
f_i	5	7	9	9	1

Таблица 3. Данные для рис. 2(b)

x_i	0	1	2	3	4	5	6	7	8	9
f_i	0	3	3,6	3,8	4,1	5,5	7,2	9	4	2

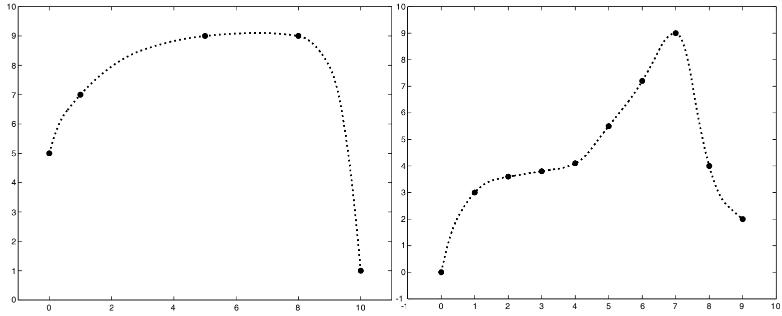


Рис. 2. Интерполяция выпуклых данных по алгоритму 2 с автоматическим выбором параметров контроля формы: a – кривая по строго выпуклым данным; b – кривая по нестрого выпуклым данным

Автор выражает благодарность Российскому фонду фундаментальных исследований (код проекта 12-01-00160) за финансовую поддержку.

Литература

1. *Квасов Б.И.* Методы изогеометрической аппроксимации сплайнами. М.: Физматлит, 2006.
2. *Costantini P.* On monotone and convex spline interpolation // Math. Comp. 1986. V. 46. P. 203–214.
3. *Han X.* Convexity-preserving piecewise rational quartic interpolation // SIAM J. Numer. Anal. 2008. V. 46, N 2. P. 920–929.
4. *Salkauskas K.* C^1 splines for interpolation of rapidly varying data // Rocky Mountain Journal of Mathematics. 1984. V. 14, N 1. P. 239–250.
5. *Schmidt J.W., Hess W.* Schwach verkoppelte Ungleichungssysteme und konvexe Spline-Interpolation // Elem. Math. 1984. V. 39. P. 85–96.