

**МОДИФИКАЦИИ ИНТЕРПОЛЯЦИОННОГО МЕТОДА
ШЕПАРДА НА ОСНОВЕ ФУНДАМЕНТАЛЬНЫХ РЕШЕНИЙ**

Масюков А.В.
Кафедра информатики

Предложен новый подход к интерполяции, в котором выбор производящей функции порождает различные методы, в том числе одномерные сплайны или двумерную интерполяцию минимальной кривизны с натяжением. Рассмотрены различные варианты выбора производящей функции, для них установлены асимптотические и другие свойства интерполирующих функций. Доказано достаточное условие невырожденности возникающей системы линейных уравнений.

A new method for global multivariate interpolation is proposed. Its interpolant has a Shepard's form with an arbitrary method-generating function. Interpolation by minimum curvature splines with tension is a special case of the proposed method, corresponding to a certain choice of generating function.

Ключевые слова: многомерная интерполяция, интерполяция при неравномерных узлах.

Keywords: scattered data fitting, radial basis function interpolation.

Введение. Интерполяция функций многих переменных – при произвольном расположении узлов интерполяции – остается недостаточно разработанным вопросом. В методе Шепарда [1] интерполирующая функция представляется линейной комбинацией копий производящей функции, помещаемых в узлы интерполяции. Квадратичные модификации метода Шепарда [2,3] обеспечивают, в отличие от оригинального метода, гладкую интерполяцию, но не обеспечивают глобальную интерполяцию (когда каждое значение интерполирующей функции определяется всеми данными интерполяции) и не обеспечивают необходимого во многих случаях поведения интерполирующей функции на бесконечности. Метод минимальной кривизны [4] также не обеспечивает конечного на всей плоскости решения. Метод минимальной кривизны с натяжением [5] дает конечное решение, но не имеющее предела на бесконечности (существуют только пределы по направлениям).

Предлагаемый в настоящей работе метод является модификацией метода Шепарда, в которой коэффициенты интерполирующей линейной комбинации смещенных производящих функций определяются из решения системы линейных уравнений. Выбор производящей функции, как будет показано, порождает различные гладкие решения задачи глобальной интерполяции, в том числе имеющие предел на бесконечности. С другой стороны, предлагаемый метод является предельным случаем итерационных методов [6-8], который отличается тем, что масштабирование производящей функции не используется в процессе решения.

1. Метод. Пусть (\mathbf{x}_k, u_k) , $\mathbf{x}_k \in R^m$, $u_k \in R$, $k = 1, \dots, n$ – данные интерполяции. Функция

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^n c_k f(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|) \quad (1)$$

очевидно удовлетворяет условиям интерполяции

$$u(\mathbf{x}_j) = u_j, \quad j = 1, \dots, n, \quad (2)$$

если коэффициенты c_k линейной комбинации (1) удовлетворяют системе линейных уравнений

$$u(\mathbf{x}_j) = \sum_{k=1}^n c_k f(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|), \quad j = 1, \dots, n. \quad (3)$$

Естественно, будем считать, что $\mathbf{x}_j \neq \mathbf{x}_k$ при $j \neq k$. Выбор производящей функции f определяет различные варианты метода. Очевидно, что интерполант (1) наследует дифференцируемость производящей функции. Следующая теорема устанавливает достаточное условие положительной определенности матрицы системы (3).

Теорема 1. Квадратная матрица $F_{jk} = f(\|\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k\|)$, сформированная вещественной функцией f расстояний между всеми парами для n различных произвольных точек из R^m , является положительно определенной, если f непрерывна, $g(\mathbf{x}) \equiv f(\|\mathbf{x}\|)$ принадлежит L_2 и

$$\hat{f}(\mathbf{q}) \equiv \int_{R^m} f(\|\mathbf{x}\|) \exp(i\mathbf{x}\mathbf{q}) d^m \mathbf{x} > 0 \quad \forall \mathbf{q} \in R^m. \quad (4)$$

Доказательство. Вследствие условий теоремы, для преобразования Фурье функции g существует обратное

$$f(\|\mathbf{x}\|) = (2\pi)^{-m} \int_{R^m} \hat{f}(\mathbf{q}) \exp(-i\mathbf{x}\mathbf{q}) d^m \mathbf{q},$$

поэтому

$$\sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n F_{jk} a_j a_k = (2\pi)^{-m} \int_{R^m} \hat{f}(\mathbf{q}) \sum_{j=1}^n \sum_{k=1}^n a_j a_k \exp(-i(\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_k)\mathbf{q}) d^m \mathbf{q}$$

$$= (2\pi)^{-m} \int_{R^m} \hat{f}(\mathbf{q}) \left| \sum_{j=1}^n a_j \exp(-i\mathbf{x}_j \mathbf{q}) \right|^2 d^m \mathbf{q} > 0$$

для любых вещественных a_j таких, что $\sum_{j=1}^n |a_j| > 0$, в силу (4) и линейной независимости функций $g_j(\mathbf{q}) \equiv \exp(-i\mathbf{x}_j \mathbf{q})$.

Таким образом, доказано, что $F > 0$. \square

Заметим, что условие (4) эквивалентно представимости производящей функции как m -мерной автостосвертки

$$f(\|\mathbf{x}\|) = f_0 * f_0 = \int_{R^m} f_0(\mathbf{y}) f_0(\mathbf{x} - \mathbf{y}) d^m \mathbf{y}. \quad (5)$$

Заметим также, что в формулировке метода (1),(3) можно заменить $f(\|\cdot\|)$ на $f(\cdot)$, дополнительно потребовав $f(-\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$. То есть производящая функция не обязана быть радиальной, причем теорема, как нетрудно доказать, остается справедливой. Однако, далее мы не используем эту возможность.

2. Частные случаи – функции одной переменной. Для функций одной переменной будем обозначать $x = \mathbf{x}$, $r = |x|$.

Случай 1: $f(r) = r^3$. Этот выбор производящей функции метода (1),(3) приводит к интерполяции кубическими сплайнами. Действительно, интерполирующая функция между соседними узлами интерполяции является кубическим полиномом, а ее вторая производная всюду непрерывна. На кубический сплайн можно накладывать различные граничные условия. Нетрудно показать, что нахождение интерполирующей функции в виде

$$u(x) = a_0 + a_1x + \sum_{k=1}^n c_k |x - x_k|^3 \quad (6)$$

из условий

$$\begin{aligned} u(x_j) &= a_0 + a_1x_j + \sum_{k=1}^n c_k |x_j - x_k|^3, j = 1, \dots, n, \\ \sum_{k=1}^n c_k &= 0, \\ \sum_{k=1}^n c_k x_k &= 0 \end{aligned} \quad (7)$$

приводит к тому, что вне интервала узлов интерполяции кубический сплайн (6) является линейной функцией, то есть $u'' = u''' = 0$. Также нетрудно видеть, что интерполюант (6),(7) удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^4 u}{dx^4} = 12 \sum_{k=1}^n c_k \delta(x - x_k),$$

где δ есть дельта-функция Дирака, и граничным условиям $u''(\pm\infty) = u'''(\pm\infty) = 0$. Кроме того, интерполяция (6),(7) является решением задачи минимизации

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u''^2 dx \rightarrow \min,$$

при условиях интерполяции (2), то есть для интерполяции функций одной переменной кубический сплайн является решением минимальной кривизны. Заметим, что система уравнений (7) решается, разумеется, относительно $a_0, a_1, \{c_k, k = 1, \dots, n\}$.

Случай 2: $f(r) = \exp(-r) + r$. Как известно, кубические сплайны могут приводить к немонотонным интерполирующим функциям для монотонных данных интерполяции. Поэтому часто используют сплайны с натяжением (они не являются

полиномами), которые тоже оказываются вариантом нашего метода при соответствующем выборе производящей функции. Рассмотрим интерполяцию

$$u(x) = a_0 + \sum_{k=1}^n c_k f(|x - x_k|), \quad (8)$$

где

$$\begin{aligned} f(r) &= \exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right) + \frac{r}{\sigma}, \\ u(x_j) &= a_0 + \sum_{k=1}^n c_k f(|x_j - x_k|), \quad j = 1, \dots, n, \\ \sum_{k=1}^n c_k &= 0. \end{aligned} \quad (9)$$

Как нетрудно проверить, интерполирующая функция дважды непрерывно дифференцируема, удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^4 u}{dx^4} - \sigma^{-2} \frac{d^2 u}{dx^2} = -2\sigma^{-4} \sum_{k=1}^n c_k \delta(x - x_k),$$

и граничным условиям $u'(\pm\infty) = 0$. Интерполяция (8),(9) является решением задачи минимизации

$$\int_{-\infty}^{+\infty} u''^2 dx + \sigma^{-2} \int_{-\infty}^{+\infty} u'^2 dx \rightarrow \min,$$

то есть штрафуются не только кривизна, но и растяжение сплайна. Существуют, в отличие от случая 1, конечные пределы $u(+\infty)$, $u(-\infty)$. Параметр σ имеет смысл натяжения сплайна, или характерного расстояния экспоненциального стремления к пределам на бесконечности.

Случай 3: $f(r) = \exp(-r)(1+r)$. Рассмотренные выше сплайны с натяжением (случай 2) не могут обеспечить выполнения условия

$$u(\pm\infty) = n^{-1} \sum_{k=1}^n u_k,$$

то есть выхода интерполирующей функции на среднее по узлам интерполяции значение на бесконечности. Оказывается, наш метод при соответствующем выборе производящей функции обеспечивает выполнение этого условия. Действительно, если

$$u(x) = a_0 + \sum_{k=1}^n c_k f(|x - x_k|), \quad (10)$$

где

$$\begin{aligned} f(r) &= \exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right) \left(1 + \frac{r}{\sigma}\right), \\ u(x_j) &= a_0 + \sum_{k=1}^n c_k f(|x_j - x_k|), \quad j = 1, \dots, n, \\ \sum_{k=1}^n c_k \sum_{j=1}^n f(|x_j - x_k|) &= 0, \end{aligned} \quad (11)$$

то, подставляя $x = x_j$ в уравнение (10) и суммируя по j , убеждаемся, что здесь

$$a_0 = u(\pm\infty) = n^{-1} \sum_{k=1}^n u_k.$$

Заметим, что в данном случае можно было не расширять систему уравнений (3) дополнительным ограничением до системы (11), а вместо этого вычесть из значений в узлах интерполяции их среднее a_0 , а в конце прибавить эту константу к интерполирующей функции. Интерполянт при том и другом способе действий один и тот же и удовлетворяет уравнению

$$\frac{d^4 u}{dx^4} - 2\sigma^{-2} \frac{d^2 u}{dx^2} + \sigma^{-4} (u - a_0) \equiv \left(\frac{d^2}{dx^2} - \sigma^{-2} \right)^2 (u - a_0) = 4\sigma^{-4} \sum_{k=1}^n c_k \delta(x - x_k),$$

а также является решением задачи минимизации

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \left(u''^2 + 2\sigma^{-2} u'^2 + \sigma^{-4} (u - a_0)^2 \right) dx \rightarrow \min,$$

в которой штрафуются кривизна, растяжение и отклонение сплайна от среднего. Как и в случае 2, параметр σ имеет смысл характерного расстояния, на котором происходит приближение интерполянта к предельному значению $u(\pm\infty)$.

В отличие от двух предыдущих случаев, здесь производящая функция конечна и интегрируема вместе с квадратом. Кроме того, она удовлетворяет условию доказанной выше теоремы, гарантирующей положительную определенность матрицы системы уравнений для коэффициентов интерполирующей функции. Действительно, нетрудно вычислить (4)

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \exp\left(-\frac{|x|}{\sigma}\right) \left(1 + \frac{|x|}{\sigma}\right) \exp(iqx) dx = 4\sigma (1 + q^2 \sigma^2)^{-2} > 0,$$

а также проверить (5), что

$$\exp\left(-\frac{|x|}{\sigma}\right) \left(1 + \frac{|x|}{\sigma}\right) = \sigma^{-1} \exp\left(-\frac{|x|}{\sigma}\right) * \exp\left(-\frac{|x|}{\sigma}\right).$$

Во всех трех рассмотренных выше случаях производящие функции являются дважды непрерывно дифференцируемыми, а их третьи производные в нуле терпят конечный разрыв. Соответственно, третьи производные интерполирующих функций разрывны в узлах интерполяции. Как показано, рассмотренные производящие

функции являются фундаментальными решениями соответствующих дифференциальных уравнений четвертого порядка. На Рис. 1 мы видим, что существенное различие между рассмотренными производящими функциями проявляется в асимптотическом поведении на бесконечности (вдали от узлов интерполяции). Данные примера Рис. 1 были взяты случайно, но для того, чтобы показать различие интерполянтов и между узлами интерполяции, два средних узла были сближены на расстояние 0.01 (при сохранении значений в них). Числа обусловленности матриц в численном эксперименте Рис. 1 равны, соответственно, $2.3 \cdot 10^8$, $9.5 \cdot 10^6$, $1.4 \cdot 10^5$ для случаев 1, 2, 3. При уменьшении неравномерности расположения того же числа узлов (20), число обусловленности для метода (10),(11) (случай 3) становится меньше 100, но для первых двух случаев остается очень большим.

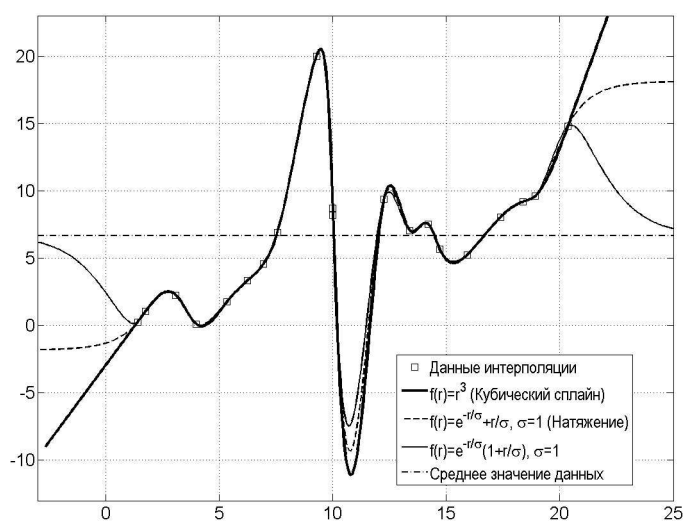


Рис. 1: Пример одномерной интерполяции предложенным методом при различных производящих функциях

3. Частные случаи – функции двух переменных. Для функций двух и более переменных развитие методов интерполяции при неравномерных узлах имеет практическую значимость для многих приложений. Будем здесь обозначать

$$(x, y) = \mathbf{x}, \quad r = \|\mathbf{x}\| = (x^2 + y^2)^{1/2}.$$

Рассмотрим несколько случаев выбора производящей функции метода (1),(3).

Случай 1: $f(r) = r^3$. В отличие от функций одной переменной, в этом случае интерполирующая функция теперь не является ни полиномом, ни решением задачи минимальной кривизны. Действительно, $\Delta \Delta r^3 = 9r^{-1}$, где Δ – двумерный оператор Лапласа. Как и для функций одной переменной, мы можем улучшить асимптотическое поведение интерполянта, накладывая дополнительные ограничения на коэффициенты выражения (1). Так как

$$\sum_{k=1}^n c_k \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|^3 = r^3 \sum_{k=1}^n c_k (1 - 3\|\mathbf{x}_k\| r^{-1} \cos(\phi - \phi_k) + O(r^{-2})), \quad r \rightarrow \infty,$$

где ϕ, ϕ_k – полярные углы точек \mathbf{x}, \mathbf{x}_k , то для обеспечения асимптотики

$$u(x, y) = O(r), \quad r \rightarrow \infty$$

интерполирующую функцию следует искать в виде

$$u(x, y) = a_0 + a_1x + a_2y + \sum_{k=1}^n c_k \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|^3, \quad (12)$$

накладывая условия

$$u(x_j, y_j) = a_0 + a_1x_j + a_2y_j + \sum_{k=1}^n c_k ((x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2)^{3/2}, \quad j = 1, \dots, n,$$

$$\sum_{k=1}^n c_k = 0, \quad \sum_{k=1}^n c_k x_k = 0, \quad \sum_{k=1}^n c_k y_k = 0.$$

Случай 2: $f(r) = r^2 \ln r$. Этот вариант выбора производящей функции обеспечивает интерполяцию минимальной кривизны функции двух переменных. Производящая функция является фундаментальным решением бигармонического уравнения [9]. То есть интерполирующая функция

$$u(x, y) = a_0 + \sum_{k=1}^n c_k ((x - x_k)^2 + (y - y_k)^2) \ln ((x - x_k)^2 + (y - y_k)^2) \quad (13)$$

удовлетворяет уравнению

$$\Delta^2 u(x, y) = 16\pi \sum_{k=1}^n c_k \delta(x - x_k) \delta(y - y_k)$$

и решает задачу минимизации

$$\int_{R^2} (\Delta u)^2 dx dy \rightarrow \min. \quad (14)$$

Константа a_0 введена для того, чтобы наложение дополнительного условия

$$\sum_{k=1}^n c_k = 0 \quad (15)$$

обеспечивало асимптотику

$$u(x, y) = O(r \ln r), \quad r \rightarrow \infty,$$

так как из (13) следует

$$u(x, y) = a_0 + 2 \sum_{k=1}^n c_k (r^2 - 2r \|x_k\| \cos(\phi - \phi_k) + \|x_k\|^2) \times (\ln r - r^{-1} \|x_k\| \cos(\phi - \phi_k) + O(r^{-2})), \quad r \rightarrow \infty.$$

Заметим, что условие (15) обеспечивает также стремление вторых и более высоких частных производных интерполянта к нулю при $r \rightarrow \infty$. А это граничное условие приводит к тому, что штрафная функция (14) равна интегралу от суммы квадратов главных кривизн, как нетрудно показать интегрированием по частям. Заметим также, что a_0 в выражении (13) не является, в отличие от одномерного случая 3, средним значением в узлах интерполяции.

Случай 3: $f(r) = K_0(r) + \ln r$. Из сравнения с одномерным случаем 2 понятно, что для того, чтобы построить производящую функцию, обеспечивающую двумерную интерполяцию сплайном с натяжением, необходимо найти фундаментальное решение для оператора

$$\Delta^2 - \sigma^{-2}\Delta = \Delta(\Delta - \sigma^{-2}). \quad (16)$$

Это решение не приводится в справочнике [9], но известны фундаментальные решения уравнений Пуассона и Гельмгольца

$$\Delta \ln r = 2\pi\delta(x)\delta(y), \quad (\Delta - \sigma^{-2})K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) = -2\pi\delta(x)\delta(y), \quad (17)$$

где K_0 – функция Макдональда (модифицированная функция Бесселя третьего рода). Поэтому (и на основе определения фундаментального решения) найдем фундаментальное решение для (16) как свертку

$$f(r) = \frac{-1}{4\pi^2}K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) * \ln r = \frac{-1}{8\pi^2} \int_0^{+\infty} \rho d\rho K_0\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) \int_0^{2\pi} d\phi \ln(r^2 - 2r\rho \cos \phi + \rho^2).$$

Так как

$$\ln(r^2 - 2r\rho \cos \phi + \rho^2) = \begin{cases} 2 \ln r - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{\rho}{r}\right)^k \frac{\cos k\phi}{k}, & \rho < r, \\ 2 \ln \rho - 2 \sum_{k=1}^{\infty} \left(\frac{r}{\rho}\right)^k \frac{\cos k\phi}{k}, & \rho > r, \end{cases}$$

то

$$\begin{aligned} f(r) &= \frac{-1}{4\pi^2} \ln r \int_0^r \rho d\rho K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) + \frac{-1}{4\pi^2} \int_r^{+\infty} \rho d\rho K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \ln \rho \\ &= \frac{-\sigma^2 \ln r}{4\pi^2} \left(1 - \frac{r}{\sigma} K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right)\right) - \frac{\sigma^2}{4\pi^2} \int_r^{+\infty} \ln \rho d\left(-\frac{\rho}{\sigma} K_1\left(\frac{\rho}{\sigma}\right)\right) \\ &= \frac{\sigma^2}{4\pi^2} \left(\ln r + K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right)\right), \end{aligned} \quad (18)$$

на основании тождеств [10]

$$(xK_1(x))' = -xK_0(x), \quad K_0'(x) = -K_1(x).$$

Используя (17), можно непосредственной подстановкой проверить, что (18) есть фундаментальное решение для (16). Найденное решение определено с точностью до аддитивной константы. Потребовав $f(0) = 0$, получим выражение для производящей функции двумерного сплайна с натяжением (определяется с точностью до множителя)

$$f(r) = K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) + \ln\left(\frac{r}{\sigma}\right) - \ln 2 + C, \quad (19)$$

где $C \approx 0.577215665$ – постоянная Эйлера, так как $K_0(x) \sim \ln \frac{2}{x} - C$ при $x \rightarrow +0$. Для того, чтобы интерполирующая функция оставалась конечной при $r \rightarrow \infty$, необходимо наложить ограничение (15), находя решение задачи в виде

$$u(x, y) = a_0 + \sum_{k=1}^n c_k f(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_k\|)$$

с найденной производящей функцией (19). Интерполяция в этом случае является решением задачи минимизации

$$\int_{R^2} [(\Delta u)^2 + \sigma^{-2} \|\nabla u\|^2] dx dy \rightarrow \min.$$

Случай 4: $f(r) = rK_1(r)$. Теперь рассмотрим двумерный аналог одномерного случая 3, то есть найдем производящую функцию сплайна, который имеет предел на бесконечности, равный среднему значению в узлах интерполяции. Для этого необходимо решить уравнение

$$(\Delta^2 - 2\sigma^{-2}\Delta + \sigma^{-4})f \equiv (\Delta - \sigma^{-2})^2 f = \delta(x)\delta(y). \quad (20)$$

Выполняя двумерное преобразование Фурье (20), найдем фундаментальное решение

$$\begin{aligned} f(r) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty q dq \int_0^{2\pi} d\phi \frac{\exp(iqr \cos \phi)}{(q^2 + \sigma^{-2})^2} \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \frac{J_0(qr) q dq}{(q^2 + \sigma^{-2})^2} = \frac{r\sigma}{4\pi} K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right), \end{aligned} \quad (21)$$

где известный интеграл от функции Бесселя вычисляется с помощью вычетов [10]. Можно проверить, что найденное фундаментальное решение (21) есть свертка

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\pi^2} K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) * K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) &= \frac{1}{4\pi^2} \int_0^\infty \rho d\rho K_0\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) \int_0^{2\pi} d\phi K_0\left(\sigma^{-1} \sqrt{r^2 - 2r\rho \cos \phi + \rho^2}\right) \\ &= \frac{1}{2\pi} K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \int_0^r K_0\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) I_0\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) \rho d\rho + \frac{1}{2\pi} I_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \int_r^{+\infty} K_0\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) K_0\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) \rho d\rho \\ &= \frac{1}{2\pi} K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \frac{r^2}{2} \left[I_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) + I_1\left(\frac{r}{\sigma}\right) K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right] \\ &+ \frac{1}{2\pi} I_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \frac{r^2}{2} \left[\left[K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right]^2 - \left[K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right]^2 \right] \\ &= \frac{r^2}{4\pi} K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right) \left[I_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right) + I_1\left(\frac{r}{\sigma}\right) K_0\left(\frac{r}{\sigma}\right) \right] = \frac{r\sigma}{4\pi} K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right), \end{aligned}$$

где использована одна из теорем сложения [10] для бесселевых функций

$$K_0\left(\frac{1}{\sigma} \sqrt{r^2 - 2r\rho \cos \phi + \rho^2}\right) = \begin{cases} \sum_{k=-\infty}^{+\infty} K_k\left(\frac{r}{\sigma}\right) I_k\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) \cos k\phi, & \rho < r, \\ \sum_{k=-\infty}^{+\infty} I_k\left(\frac{r}{\sigma}\right) K_k\left(\frac{\rho}{\sigma}\right) \cos k\phi, & \rho > r, \end{cases}$$

затем формулы дифференцирования модифицированной функции Бесселя

$$(xI_1(x))' = xI_0(x), \quad I_0'(x) = I_1(x)$$

и аналогичные формулы для функции Макдональда, приведенные выше, а затем применено известное тождество [10]

$$I_k(x)K_{k+1}(x) + I_{k+1}(x)K_k(x) = x^{-1}.$$

Можно выбрать производящую функцию, соответствующую фундаментальному решению (21), как

$$f(r) = \frac{r}{\sigma} K_1\left(\frac{r}{\sigma}\right).$$

Тогда, как и в одномерном случае 3, $f(0) = 1$, $f'(0) = 0$ и

$$f(r) \sim \frac{r}{\sigma} \exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right), \quad r \rightarrow \infty,$$

причем $f(r)$ убывает монотонно. Без ограничения общности (как в одномерном случае 3) можем считать, что среднее значение в узлах интерполяции равно нулю, и находить интерполирующую функцию как

$$u(x, y) = \frac{1}{\sigma} \sum_{k=1}^n c_k \sqrt{(x - x_k)^2 + (y - y_k)^2} K_1\left(\frac{1}{\sigma} \sqrt{(x - x_k)^2 + (y - y_k)^2}\right), \quad (22)$$

где K_1 – функция Макдональда первого порядка. Как и для одномерного случая (10), (11), здесь выполняются условия (4), (5), поэтому матрица системы уравнений для коэффициентов (22)

$$u(x_j, y_j) = \frac{1}{\sigma} \sum_{k=1}^n c_k \sqrt{(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2} K_1\left(\frac{1}{\sigma} \sqrt{(x_j - x_k)^2 + (y_j - y_k)^2}\right), \quad (23)$$

$j = 1, \dots, n$ является положительно определенной. Параметр σ имеет смысл характерного расстояния, на котором происходит приближение интерполирующей функции к предельному значению при удалении от узлов интерполяции. При $\sigma \rightarrow \infty$ интерполирующая функция метода (22), (23) стремится к интерполянту минимальной кривизны в любой конечной области. Это следует из того, что интерполяция (22), как следует из уравнения (20), решает задачу минимизации

$$\int_{R^2} [(\Delta u)^2 + 2\sigma^{-2} \|\nabla u\|^2 + \sigma^{-4} (u - a_0)^2] dx dy \rightarrow \min,$$

где a_0 – среднее значение в узлах интерполяции.

На Рис. 2 показаны интерполирующие функции для четырех рассмотренных случаев выбора производящей функции метода (1), (3). Для всех случаев использованы одни и те же данные: случайное расположение 20 узлов интерполяции в квадратной области и случайные значения в них. Конечно, мы численно проверили, что вдали от узлов интерполяции приведенные решения соответствуют их установленным асимптотическим свойствам, но внутри области интерполяции, как видно на Рис. 2, все интерполянты похожи. Это объясняется тем, что все они

непрерывно дифференцируемы и имеют особенности более высоких порядков в узлах интерполяции, соответствующие приведенным уравнениям в частных производных, фундаментальные решения которых используются как производящие функции. Числа обусловленности матриц систем уравнений для коэффициентов интерполянтов в примере Рис. 2 равны $1.4 \cdot 10^7$, $1.3 \cdot 10^6$, $3.6 \cdot 10^3$ и 240 для случаев 1-4, соответственно. Надо отметить, что в других численных примерах вариант (22), (23) метода также демонстрирует лучшую обусловленность.

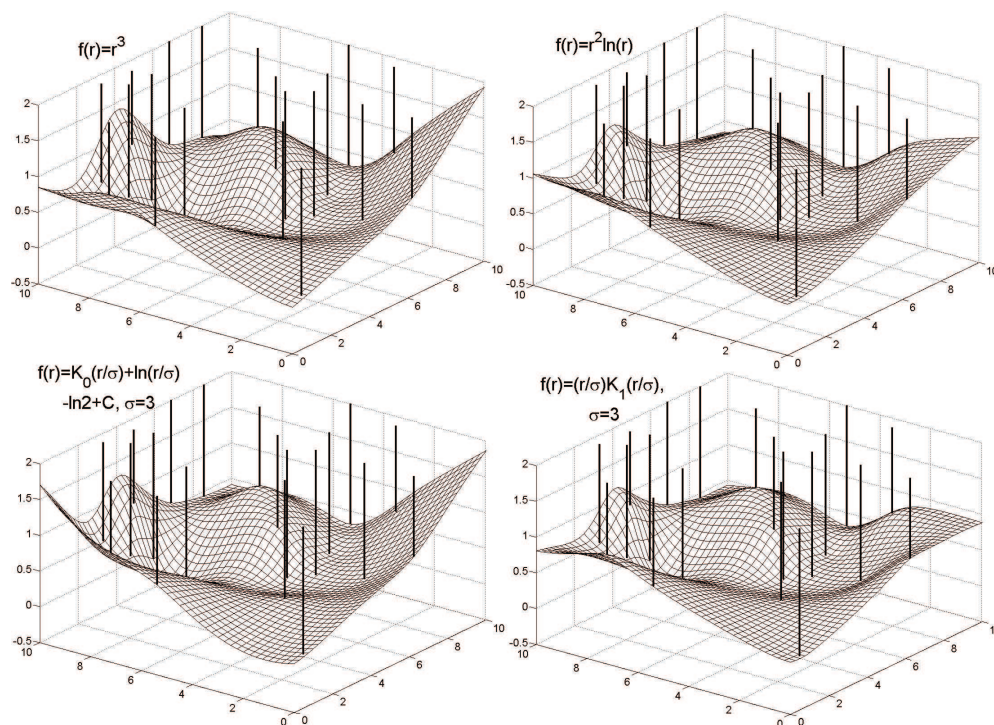


Рис. 2: Пример двумерной интерполяции предложенным методом при различных производящих функциях. Вертикальные линии изображают данные интерполяции

4. Интерполяция функций трех переменных. Построим производящую функцию нашего метода в трехмерном случае. Если, по аналогии с двумерным случаем (20), мы рассмотрим оператор $(\Delta - \sigma^{-2})^2$, то в R^3 его фундаментальное решение $(8\pi)^{-1}\sigma \exp(-\sigma^{-1}r)$ не обеспечит непрерывно дифференцируемой интерполяции. Поэтому решим уравнение

$$(\Delta - \sigma^{-2})^3 f = \delta(x)\delta(y)\delta(z), \quad (24)$$

эквивалентное, как нетрудно показать, задаче минимизации

$$\int_{R^3} [\|\nabla \Delta u\|^2 + 3\sigma^{-2}(\Delta u)^2 + 3\sigma^{-4}\|\nabla u\|^2 + \sigma^{-6}u^2] dx dy dz \rightarrow \min$$

для интерполирующей функции. Найдем решение (24) следующим вычислением

– аналогично (21)

$$\begin{aligned} f(r) &= (2\pi)^{-3} \int_0^\infty \frac{q^2 dq}{(q^2 + \sigma^{-2})^3} \int_0^\pi \sin \alpha d\alpha \int_0^{2\pi} d\phi \exp(-iqr \cos \alpha) \\ &= \frac{1}{2\pi^2 r} \int_0^\infty \frac{\sin(qr) q dq}{(q^2 + \sigma^{-2})^3} = \frac{-\sigma^3}{32\pi} \exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right) \left(1 + \frac{r}{\sigma}\right), \end{aligned}$$

с помощью вычетов. Таким образом, для интерполяции функций трех переменных предлагается дважды непрерывно дифференцируемая производящая функция

$$\exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right) \left(1 + \frac{r}{\sigma}\right),$$

радиальная зависимость которой совпадает с функцией, вычисленной в одномерном случае 3.

5. Обсуждение. Предложенный метод интерполяции (1),(3) – в зависимости от выбора производящей функции f – приводит к известным решениям, например, минимальной кривизны и минимальной кривизны с натяжением, или порождает новые гладкие решения задачи интерполяции, удовлетворяющие заданным уравнениям в частных производных, или заданным целевым функционалам. Например, решение (22),(23) для многих приложений предпочтительнее уже потому, что имеет предел на бесконечности (вдали от узлов интерполяции выходит на их среднее значение). Часто интерполяция выполняется на равномерную сетку (гриддинг), предложенный метод исключительно эффективен для больших сеток. Вычислительная сложность метода определяется системой линейных уравнений (3), размерность которой равна числу узлов интерполяции и обусловленность которой зависит от расположения узлов (но не значений в них). Найдено условие на производящую функцию, достаточное для положительной определенности матрицы системы (3). Решение (22),(23) удовлетворяет этому условию.

Однако, при большом числе узлов интерполяции или их очень неравномерном расположении обусловленность системы (3) может оказаться слишком плохой для получения численного решения. В связи с этим заметим, что конечно-разностная реализация интерполяции минимальной кривизны тоже приводит к недопустимо плохо обусловленным системам и практически выполняется методом последовательного сгущения сеток [4,5]. Можно предложить различные варианты последовательного применения рассмотренного метода, когда, например, вначале интерполяция выполняется для меньшего числа осредненных узлов. Но, по-видимому, практически наилучшим вариантом здесь окажется итерационно-масштабируемая модификация метода Шепарда [8], предельным случаем которой и является предложенный метод, который оказывается, конечно, проще для аналитического изучения (выбора производящей функции).

В итерационной модификации метода Шепарда [8] интерполирующая функция вычисляется как

$$u(\mathbf{x}) = \sum_{j=0}^{\infty} \sum_{k=1}^n u_k^{(j)} \frac{f\left(\frac{\mathbf{x}-\mathbf{x}_k}{\sigma_j}\right)}{\sum_{p=1}^n f\left(\frac{\mathbf{x}_p-\mathbf{x}_k}{\sigma_j}\right)}, \quad (25)$$

где $u_k^{(j)}$ – невязки интерполяции на j -том шаге, $u_k^{(0)} \equiv u_k$,

$$u_k^{(j+1)} = u_k^{(j)} - \sum_{q=1}^n u_q^{(j)} \frac{f\left(\frac{\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_q}{\sigma_j}\right)}{\sum_{p=1}^n f\left(\frac{\mathbf{x}_p - \mathbf{x}_q}{\sigma_j}\right)} \quad k = 1, \dots, n, \quad (26)$$

На каждой итерации изменяется масштабирующий фактор $\sigma_{j+1} \leq \sigma_j$. Доказывается, что итерации сходятся к значениям в узлах интерполяции, если производящая функция абсолютно интегрируемая, $f > 0$, и $\sigma_j \rightarrow 0$ при $j \rightarrow \infty$, так как при этих условиях матрица преобразования невязок интерполяции на некоторой итерации становится сжимающей (ее собственные числа меньше 1 по абсолютной величине). Однако, можно показать, что при условии (4) на производящую функцию, сходимости имеет место и когда $\sigma_{j+1} = \sigma_j$. Тогда метод (25),(26) становится итерационным решением системы (3), то есть рассмотренный в настоящей работе метод является предельным случаем метода [8].

Список литературы

- [1] D. Shepard. A two dimensional interpolation function for irregularly-spaced data // ACM National Conference, 1968, pp 517 – 524.
- [2] R. Franke and G. Nielson. Smooth interpolation of large sets of scattered data // Int. J. Numer. Methods Eng., 1980, v. 15, pp 1691 – 1704.
- [3] R. Renka. Multivariate interpolation of large sets of scattered data // ACM Trans. on Mat. Software, 1988, v. 14, pp 139 – 148.
- [4] I. Briggs. Machine contouring using minimum curvature // Geophysics, 1974, v. 39, pp39-48.
- [5] W. Smith and P. Wessel. Gridding with continuous splines in tension // Geophysics, 1990, v. 55, pp 293-305.
- [6] Масюков А.В., Масюков В.В. Итерационный метод интерполяции, основанный на масштабируемом сглаживании // Математическое моделирование, 2005, т. 17, с. 46-56.
- [7] A. Masjukov and V. Masjukov. A new fast iterative method for interpolation of multivariate scattered data // Computational Methods in Applied Mathematics, 2005, v.5 pp 1-18.
- [8] A. Masjukov and V. Masjukov. Multiscale modification of Shepard's method for multivariate interpolation of scattered data // Mathematical Modelling and Analysis, 2005, v.10, pp 467-472.

- [9] Полянин А.Д. Справочник по линейным уравнениям математической физики. Москва, ФИЗМАТЛИТ, 2001.
- [10] Ватсон Г.Н. Теория бесселевых функций. Москва, ИЛ, 1949.