(О подобного рода сетках мы специально поговорим в проблеме интегрирования.)
Общий вывод: В практике вычислений избегают использования интерполяционных полиномов высокой степени. Вместо этого для интерполяции $f(x)$ на большом отрезке используют *кусочно-полиномиальную интерполяцию.*

§3. Сплайн-интерполяция

Определение. *Сплайном порядка p на сетке $\overline{w}_n$ называется кусочно - полиномиальная порядка p функция, имеющая на $[a, b]$ непрерывные до $(p-1)$-го порядка включительно производные.*

Как мы постараемся показать преимуществом сплайнов перед обычной полиномиальной интерполяцией многочленом является, во-первых, их *сходимость*, и, во-вторых, *устойчивость* процесса их вычисления.

Мы ограничимся рассмотрением распространенного частного случая — сплайна третьего порядка или *кубического сплайна.*

3.1 Определение кубического сплайна

Пусть на отрезке $[a, b]$ определена непрерывная (в дальнейшем достаточно гладкая) функция $f(x)$; задана невырожденная сетка $\overline{\omega}_n$

$$\overline{\omega}_n = \{a = x_0 < x_1 < x_2 < \ldots < x_n = b\}.$$

Обозначим значения $f(x)$ в узлах сетки через $y_i = f(x_i)$. Тогда
Определение. *Кубическим сплайном $s_3(x) \equiv s(x)$ на данной сетке $\overline{w_n}$ называется кусочно - полиномиальная 3-го порядка функция, удовлетворяющая следующим требованиям:*
1) На каждом частичном интервале $[x_{k-1}, x_k]$ многочлен $s(x)$ — многочлен 3-ей степени:

$$\begin{gathered} s(x) = a_k + b_k(x - x_k) + \tfrac{c_k}{2!}(x - x_k)^2 + \tfrac{d_k}{3!}(x - x_k)^3 \\ x_{k-1} \le x \le x_k, \quad k = 1, 2, \ldots, n \end{gathered} \tag{s1}$$

2) Функция $s(x)$, её первая и вторая производные непрерывны на $[a, b]$, т. е.

$$s^{(l)}(x - 0) = s^{(l)}(x + 0); \quad ;\forall x \in [a, b], \quad l = 0, 1, 2 \tag{s2}$$

(нужно проверять лишь в узлах сетки).
3) В узлах сетки $\overline{w_n}$ функция $s(x)$ удовлетворяет условиям интерполяции

$$s(x_i) = y_i; \qquad i = 0, \ldots, n \tag{s3}$$

4) Дополнительным, в некотором смысле естественным, условием для единственности определения сплайна является краевое условие в граничных точках сетки x_0 и x_n. Ограничимся рассмотрением случая нулевой кривизны сплайна $s(x)$. Тогда в этих точках

$$s''(x_0) = s''(x_n) = 0. \tag{s4}$$

3.2 Существование и единственность кубического интерполяционного сплайна $s(x)$

Теорема. *Сплайн* $s(x)$ *при условии* $(s1 - s4)$ *существует и единственен.*
Приведем конструктивное доказательства этого факта. Для сплайна $s(x)$ нам понадобятся производные до второго порядка включительно. Найде́м

$$\begin{array}{l} s'(x) = b_k + c_k(x - x_k) + \frac{d_k}{2!}(x - x_k)^2 \\ s''(x) = c_k + d_k(x - x_k). \end{array}$$

Причем в точке x_k имеем

$$\begin{array}{l} s(x_k) = a_k \\ s'(x_k) = b_k \\ s''(x_k) = c_k. \end{array}$$

Из определения интерполяционного сплайна $s(x)$ в узлах интерполяции должно иметь место

$$\begin{array}{ll} s(x_i) = y_i, & i = \overline{0,n} \\ s(x_i - 0) = s(x_i + 0), & i = \overline{1, n-1} \\ s'(x_i - 0) = s'(x_i + 0), & i = \overline{1, n-1} \\ s''(x_i - 0) = s''(x_i + 0), & i = \overline{1, n-1} \end{array}$$

Из условие интерполяции (s3) определим:

$$s(x_k) = a_k = y_k, \qquad k = 1, \ldots, n.$$

Положим $a_0 \equiv y_0$. Тем самым все коэффициенты $\{a_k\}$ определны.
Непрерывность производных сплайна $s(x)$ во внутренних узлах и найденные $\{a_k\}$ дают:
1) Непрерывность $s(x)$ в x_k:

$$a_k = a_{k+1} + b_{k+1}(x_k - x_{k+1}) + \tfrac{c_{k+1}}{2}(x_k - x_{k+1})^2 + \tfrac{d_{k+1}}{6}(x_k - x_{k+1})^3$$

где $k = 0, \ldots, n-1$.
Введем обозначения шага сетки $h_{k+1} = x_{k+1} - x_k$ (на $(k+1)$-ом интервале) и заменим $(k+1)$ на k. Тогда

$$b_k h_k - \frac{c_k}{2}h_k^2 + \frac{d_k}{6}h_k^3 = y_k - y_{k-1}, \qquad k = 1, \ldots, n; \qquad (*)$$

2)Непрерывность $s'(x)$ в т. x_k даёт:

$$b_k = b_{k+1} + c_{k+1}(x_k - x_{k+1}) + \frac{d_{k+1}}{2}(x_k - x_{k+1})^2 \qquad k = 1, \ldots, n-1$$

что нетрудно, аналогично рассмотренному выше, преобразовать к виду

$$c_k h_k - \frac{d_k}{2}h_k^2 = b_k - b_{k-1} \qquad k = 2, \ldots, n \qquad (**)$$

3)Из непрерывности $s''(x)$ в т. x_k найдем:

$$\begin{array}{c} c_k = c_{k+1} + d_{k+1}(x_k - x_{k+1}) \quad \text{или} \\ d_k h_k = c_k - c_{k-1}, \end{array} \qquad (***)$$

где $k = 2, \ldots, n$.
Добавим к (3n-2) уравнениям (*), (**) и (***) граничные условия (s4)

$$\begin{array}{lllll} s''(x_0) = 0 & \leftrightarrow & c_1 + d_1(x_0 - x_1) = 0 & \leftrightarrow & d_1 h_1 = c_1 - c_0; \\ s''(x_n) = 0 & \leftrightarrow & c_n = 0. & & \end{array}$$

Если положить $c_0 \equiv 0$, то граничные условия в точке x_0 в точности дают уравнение (**) при $k = 1$. Итак для определения коэффициентов $\{a, b, c\}$ сплайна $s(x)$ мы получим систему уравнений

$$\begin{cases} h_k b_k - \frac{c_k}{2} h_k^2 + \frac{d_k}{6} h_k^3 = y_k - y_{k-1}, & k = \overline{1, n} \quad \Rightarrow b_k; \quad b_{k-1} \qquad (1*) \\ c_k h_k - \frac{d_k}{2} h_k^2 = b_k - b_{k-1}, & k = \overline{2, n} \qquad\qquad\qquad\qquad (2*) \\ h_h d_k = c_k - c_{k-1}, & k = \overline{2, n} \quad \Rightarrow d_k; \quad d_{k-1} \qquad (3*) \\ c_0 = 0, \quad c_n = 0 & \end{cases}$$

Дальнейшее упрощение полученной системы связано с явным выражением b_k, b_{k-1}, из (1*) и d_k, d_{k-1}, из (3*)и подстановкой найденных выражений в (2*). Тогда

$$\begin{cases} c_0 = 0 \\ c_{k-1} h_k + 2(h_k + h_{k+1}) c_k + c_{k+1} h_{k+1} = 6 \left(\frac{y_{k+1} - y_k}{h_{k+1}} - \frac{y_k - y_{k-1}}{h_k} \right) \\ \qquad\qquad k = 1, \ldots, n-1 \\ c_n = 0 \end{cases} \tag{7}$$

получаем систему линейных алгебраических уравнений — СЛАУ с трехдиагональной матрицей.

- В силу диагонального преобладания элементов матрицы системы (7) её решение существует и единственно*1);
- Решения (7) эффективно строится методом *прогонки*;
- По найденным коэффициентам $\{c_k\}$ из (*) явно находятся $\{b_k\}$ и $\{d_k\}$.

Задача. *Получить расчетные формулы для* $\{b_k\}$ *и* $\{d_k\}$.

3.3 Сходимость интерполяционных сплайнов

Сформулируем без доказательства *2) теорему, устанавливающую характер сходимости *интерполяционного сплайна.* Имеет место

Теорема. *Если* $f(x) \in C^4[a, b]$ *и* $\overline{\omega}_n$ *- равномерная сетка с шагом* $h = \frac{(b-a)}{n}$, *то справедливы оценки:*

$$\begin{aligned} &\|f(x) - s(x)\|_{C[a,b]} = \sup |f(x) - S(x)| \leq C_0 M_4 h^4, \\ &\|f'(x) - s'(x)\|_{C[a,b]} \leq C_1 M_4 h^3, \\ &\|f''(x) - s''(x)\|_{C[a,b]} \leq C_2 M_4 h^2, \end{aligned} \tag{8}$$

где $M_4 = \sup\limits_{[a;b]} |f^{(4)}(x)|$.

*1)Об этом далее при рассмотрении решения СЛАУ.

*2)см. [3 (Самарский и др.)]

Таким образом, в случае четырежды непрерывно дифференцируемой функции $f(x)$ и краевых условий (s4), имеет место равномерная по x сходимость самого сплайна $s(x)$ и его производных к интерполируемой функции $f(x)$ с указанными порядками точности.
Вывод: *Сплайн-интерполяция* выгодно отличается от *полиномиальной интерполяции сходимостью* и *устойчивостью* вычисления интерполяционного сплайна $s(x)$.

§4. Среднеквадратичная аппроксимация

4.1 Задача аппроксимации функции

Решая задачу о приближении функции на отрезке $[a, b]$ зачастую бывает невыгодно требование интерполяции $g(x_i) = y_i$, т. е. совпадение с приближаемой функцией на некоторой сетке. Особенно это справедливо в случае, когда функция $f(x)$, точнее ее значения в узлах сетки $\{f(x_i)\}$, известны неточно (например, получены в ходе эксперимента).

В таком случае естественна постановка задачи *аппроксимации* на отрезке $[a, b]$, а именно:

Пусть задана функция $f(x)$ и множество функций $\mathcal{F} = \{F(x)\}$ из линейного нормированного (как правило полного) пространства $\mathcal{L}$. Выделяют две естественные проблемы и соответствующие постановки задачи аппроксимации:
а) *аппроксимация с заданной точностью* ε в метрике пространства $\mathcal{L}$: *По заданному* $\varepsilon > 0$ *найти такую функцию* $F_\varepsilon \in \mathcal{F}$ *из* $\mathcal{L}$, *чтобы имело место неравенство:*

$$\|f(x) - F_\varepsilon\|^2_{\mathcal{L}} < \varepsilon^2;$$

б) Нахождение *наилучшего приближения* на $\mathcal{F}$ (наилучшшая аппроксимация в заданной метрике). *Требуется найти* $\overline{F}(x)$, *удовлетворяющую условию*

$$\|f(x) - \overline{F}(x)\|^2_{\mathcal{L}} = \inf_{\mathcal{F}} \|f(x) - F(x)\|^2_{\mathcal{L}}.$$

(Пространство $\mathcal{F}$ предполагается полным и inf на нём достигается).

Мы ограничимся сначала рассмотрением случая *аппроксимации в гильбертовом пространстве* (*т. е. полном, нормированном, бесконечномерном, евклидовом* пространстве) вещественных измеримых в квадрате с весом $\rho(x) > 0$ функций

$$f(x) \in L_{2,p}[a, b], \quad \text{где} \quad \|f\|^2 = \int_a^b f^2(x)\rho(x)dx < +\infty.$$

В $L_{2,p}[a, b]$ определено скалярное произведение функций f и g:

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)\rho(x)dx$$

оно согласовано с соответствующей нормой функции

$$\|f(x)\| = \sqrt{(f, f)}.$$

Соответственно близость функций по $\|\cdot\|_{L_2}$ есть *среднеквадратичная* близость функций на $[a,b]$.
Как известно, в $L_{2,p}[a,b]$ существует ортонормированные системы функций $\{\varphi_k(x)\}$

$$(\varphi_k,\varphi_m)=\delta_{k,m}=\begin{cases}1, & k=m\\ 0, & k\neq m,\end{cases} \qquad k,m\in \mathsf{N}_0.$$

Рассмотрим задачу аппроксимации на линейном многообразии в $\mathcal{L}$, когда в качестве $\mathcal{F}$ рассмотрим линейная оболочка с порождающими элементами $\varphi_0,\ldots,\varphi_n$:

$$\mathcal{F}=\mathrm{Lin}\,(\varphi_0,\ldots,\varphi_n)=\left\{\varphi\in L_{2,p}[a,b];\quad \varphi=\sum_{k=0}^{n}c_k\varphi_k(x);\quad c_k\in R\right\}.$$

В таком случае аппроксимирующая функция $F(x)$ ищется в виде *обобщённого полинома* по системе функций $\{\varphi_k(x)\}$

$$F(x)=\sum_{k=0}^{n}c_k\varphi_k(x).$$

А задача *наилучшего среднеквадратичного приближения* представляет собой задачу приближения *квадратичной функции* $(n+1)$-го переменного $\{c_k\}$

$$\Phi(\bar c_0,\ldots,\bar c_n)=\inf_{\{c_i\}}\left\|f(x)-\sum_{k=0}^{n}c_k\varphi_k(x)\right\|^2_{L_{2,p}[a,b]}.$$

4.2 Существование и единственность наилучшего среднеквадратичного приближения

Вычислим среднеквадратичное уклонение между $f(x)$ и $F(x)$

$$\delta^2=\|f-F\|^2=(f-F,f-F)=(f,f)-2(f,F)+(F,F)=\|f\|^2-2(f,F)+\|F\|^2.$$

Далее

$$(f,F)=(f,\sum_{k=0}^{n}c_k\varphi_k(x))=\sum_{k=0}^{n}c_k(f,\varphi_k(x))=\sum_{k=0}^{n}c_kf_k;\qquad \text{где}\qquad f_k=(f,\varphi_k)$$

и

$$\|F\|^2=(F,F)=(\sum_{k=0}^{n}c_k\varphi_k(x),\sum_{p=0}^{n}c_p\varphi_p(x))=\sum_k\sum_p c_kc_p(\varphi_k,\varphi_p)=\left|\begin{array}{c}(\varphi_k,\varphi_p)=\\ =\delta_{kp}\end{array}\right|=\sum_{k=0}^{n}c_k^2.$$

Тогда

$$\begin{aligned}\delta^2=\|f-F\|^2&=\|f\|^2-2\sum_{k=0}^{n}c_kf_k+\sum_{k=0}^{n}c_k^2+\sum_{k=0}^{n}f_k^2-\sum_{k=0}^{n}f_k^2=\\&=\|f\|^2+\sum_{k=0}^{n}(c_k-f_k)^2-\sum_{k=0}^{n}f_k^2;\end{aligned}$$

отсюда следует, что

1) наименьшая погрешность на $\mathcal{F}$ достигается, т. е. существует $\overline{F}(x)$;

2) при $\bar{c}_k = f_k$, т. е. на функции

$$\overline{F}(x) = \sum_{k=0}^{n} f_k \varphi_k(x) \equiv F_n(x) \equiv \sum_{k=0}^{n} (f_k, \varphi_k) \cdot \varphi_k(x); \tag{9}$$

погрешность аппроксимации минимальна;

3) минимальная величина *среднеквадратичной погрешности* равна

$$\delta^2 = \|f - \overline{F}\|^2 = \|f\|^2 - \sum_{k=0}^{n} f_k^2.$$

Таким образом мы показали, что справедливы

1)**Теорема.** *Наилучшее среднеквадратичное приближение обобщенным полиномом по системе функций $\varphi_k(x)$ существует и единственно. Соответствующее приближение дается отрезком обобщенного ряда Фурье по системе $\{\varphi_k(x)\}$.*

2)**Теорема.** *Если система $\{\varphi_k(x)\}$ полна, то построенное приближение $\overline{F}(x) = F_n(x)$ сходится в среднем к $f(x)$ на $[a; b]$.*

Действительно. Из полноты $\{\varphi_k(x)\} \Rightarrow$ равенство Парсеваля - Стеклова

$$\sum_{k=0}^{\infty} f_k^2 = \|f\|^2 = \int_a^b f^2(x)\rho(x)dx,$$

т.е. ряд $\sum f_k^2$ сходится. Откуда

$$\delta^2 = \|f - \overline{F}\|^2 = \|f\|^2 - \sum_{k=0}^{n} f_k^2 = \sum_{k=n+1}^{\infty} f_k^2 \to 0$$

при $n \to \infty$.

Таким образом среднеквадратичное приближение $\overline{F} = F_n(x)$ сходится в среднем к $f(x): \quad F_n \overset{\text{ср}}{\to} f(x)$ и возможна аппроксимация в среднем с любой степенью точности

$$\forall \varepsilon > 0 \quad \exists N(\varepsilon) : \forall n > N(\varepsilon) : \|f(x) - F_n(x)\|_{L_{2,p}[a,b]} < \varepsilon.$$

Замечания. Если система функций не ортогональна (но линейно независима — ЛНЗ), то выкладки отчасти усложняются

$$\delta^2 = \Phi(c_0, \ldots, c_n) = \|f(x) - F(x)\|^2 = (f - \sum_{k=0}^{n} c_k\varphi_k, f - \sum_{k=0}^{n} c_k\varphi_k).$$

Из необходимого условия экстремума $\frac{\partial\varphi}{\partial c_i}$ найдем

$$2\left(-\varphi_i(x), f - \sum_{k=0}^{n} c_k\varphi_k\right) = 0 \quad \Leftrightarrow \quad \sum_{k=0}^{n} c_k(\varphi_k, \varphi_i) = (f, \varphi_i). \tag{9*}$$

Мы получим СЛАУ для определения $\{c_k\}$. Ее определитель - определитель Грама линейно независимой системы $\{\varphi_k(x)\}$. Он строго больше нуля

$$G(\varphi_0, \ldots, \varphi_n) = \det \|(\varphi_i, \varphi_k)\| > 0.$$

Это означает, что решения $\overline{F}(x)$ задачи аппроксимации сущетсвует и единственно. Однако заметим, что

1) Особенно плохо то, что увеличение n заставляет измениться все, найденные до этого коэффисиенты $\{c_k\}_{\overline{0,n}}$. В случае ортонормированных (ОНС) или ортогональных (ОС) систем функций $\{\varphi_k(x)\}$ этого не происходит.

2) СЛАУ (9*) с ростом n становится *плохо обусловленной*, ибо $G(\varphi_0, \ldots, \varphi_n) \underset{n\to\infty}{\to} 0$, что приводит к дополнительным рудностям при решении СЛАУ (9*).

3) Численная ортогонализация системы функций $\{\varphi_k(x)\}$ в свою очередь приводит к большой потере точности при проведении процедуры ортогонализации. Поэтому, если n - относительно велико, то нужно стремиться использовать готовые *ортогональные системы* функций. Напомним основные системы ортогональных полиномов на $[a, b]$.

4.3 Ортогональные в L_2 системы полиномов

Напомним основные системы ортогональных полиномов:

1) *многочлены Якоби* $P_n^{(\alpha,\beta)}(x)$ *(степени n и порядков α, β)* образуют на $[-1, 1]$ ортогональную с весом

$$\rho(x) = (1-x)^\alpha (1+x)^\beta; \qquad \alpha, \beta > -1$$

систему функций.

Они могут быть рекурентно получены по формуле Родрига

$$P_n^{(\alpha,\beta)} = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{d^n}{dx^n}\left((1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}\right)$$

$n = 0, 1, \ldots$.

2) *Многочлены Лежандра* $P_n(x)$. *(Частный случай многочленов Якоби: $\alpha = \beta = 0$, $\rho(x) = 1$).* Они образуют ортогональную на $[-1, 1]$ с весом $\rho(x) = 1$ систему полиномов

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}\frac{d^n}{dx^n}\left((1-x^2)^n\right), \quad n = 0, 1, \ldots$$

3) *Многочлены Чебышева* (частный случай многочленов Якоби):

1-го рода: $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$, $x \in [-1, 1]$, $n = 0, \ldots, \infty$; $(\alpha = \beta = -\frac{1}{2})$ — образуют ортогональную с весом $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ систему полиномов.

2-го рода: $U_n(x) = \frac{T'_{n+1}(x)}{n+1}$, $n = 0, 1, \ldots$ — ортогональная на $[-1, 1]$ с весом $\rho(x) = \sqrt{1-x^2}$ система многочленов.

4) *Многочлены Лагера* $L_n^{(\alpha)}(x)$ *степени n и порядка α* образуют на полупрямой $0 \le x < +\infty$ ортогональную с весом $\rho(x) = x^\alpha e^{-x}$; $\alpha > -1$ систему функций

$$L_n^{(\alpha)} = \tfrac{1}{n!}x^{-\alpha}e^x\tfrac{d^n}{dx^n}\left(x^{\alpha+n}e^{-x}\right), \quad n = 0, 1, \ldots$$

5) *Многочлены Эрмита* $H_n(x)$ образуют на прямой $(-\infty < x < \infty)$ ортогональную систему полиномов с весом $\rho(x) = e^{-x^2}$

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} \left(e^{-x^2} \right)$$

Приведенные системы полиномов могут быть получены ортогонолизацией на $[a, b]$ системы функций $\{x^k\}$ с соответствующим весом.

Помимо рассмотренных ортогональных систем многочленов, часто удобной ортогональной системой функций оказываются решения задачи Штурма-Лиувилля для соответствующего дифференциального эллиптического уравнения 2-го порядка.

Задача. *Записать для рассмотренных полиномов по три первых представителя. Нормировка рассмотренных полиномов.*

§5. Метод наименьших квадратов (МНК)

5.1 Задача среднеквадратичной аппроксимации сеточных функций

Задача среднеквадратичной аппроксимации в случае заданной таблично на сетке $\overline{\omega}_n$ функции приводит к методу, называемому *метод наименьших квадратов*. (Выбор среднеквадратичной аппроксимации всязан с метрикой соответствующего гильбертова пространства сеточных функций).

Рассмотрим сеточный аналог гильбертова пространства $\mathcal{L}_{2,\rho}[a; b]$ — пространство $\mathcal{H}$ сеточных функций на $\overline{\omega}_n$ (это конечномерное "$n + 1$"-мерное евклидово пространство) , определив в нем скалярное произведение и норму так:

$$(f, g)_{\mathcal{H}} = \sum_{k=0}^{n} \rho_k f(x_k) g(x_k); \quad \rho_k \geq 0; \qquad \|f\|_{\mathcal{H}} = \sqrt{(f, f)_{\mathcal{H}}}.$$

Мы рассмотрим линейно-независимую систему $\{\varphi_i(x) \mid \varphi_i(x) \in \mathcal{L}_{2,\rho}[a; b]\}_N$ *1) и будем считать, что с их помощью ищется наилучшее среднеквадратичное приближение обобщенным сеточным полиномом

$$F \equiv F_N = \sum_{i=0}^{N} C_i \, \varphi_i(x_p); \quad p = \overline{0, n}; \qquad N \neq n, \text{ как правило, } N < n.$$

Такая постановка приводит нас к задаче на экстремум для среднеквадратичного уклонения δ_N^2 на сетке $\overline{\omega}_n$:

$$\Phi \equiv \Phi(\overline{C}_0, \overline{C}_1, \ldots, \overline{C}_N) = \delta_N^2 = \|f - F_N\|^2_{\mathcal{L}_{2,\rho}(\overline{\omega}_n)} =$$

$$= \inf_{\{C_i\}} \sum_{k=0}^{n} \rho_k \left(f(x_k) - \sum_{i=0}^{n} C_i \varphi_i(x_k) \right)^2;$$

*1) но на самом деле $\mathcal{L}_{2,\rho}[a; b]$ "хорошие" в смысле гладкости функции