

К. Ю. Осипенко

## ПОДПРОГРАММА ВЫЧИСЛЕНИЯ ПЕРВОЙ И ВТОРОЙ ПРОИЗВОДНОЙ ФУНКЦИИ ОДНОГО ПЕРЕМЕННОГО МЕТОДОМ СГЛАЖИВАЮЩИХ СПЛАЙНОВ

Подпрограмма *SMØØTH* предназначена для вычисления значений функции действительного переменного вместе с ее первой и второй производной по приближенным значениям функции в узлах произвольной сетки. В подпрограмме используется метод сглаживающих сплайнов [1], [2].

Подпрограмма написана на языке ФОРТРАН [3].

### §1. ОБРАЩЕНИЕ К ПОДПРОГРАММЕ

Обращение к подпрограмме имеет вид:

*CALL SMØØTH(X, Y, P, D, E, K, N, D1, RØ, Y0, Y1, Y2, R, A)*

Здесь формальные параметры имеют следующий смысл:

*X* — вещественный одномерный массив (размерности *N*) значений аргумента функции.

*Y* — вещественный одномерный массив (размерности *N*) значений функции в узлах сетки.

*P* — вещественный одномерный массив (размерности *N*) значений весовых коэффициентов.

*D* — числовой параметр, определяющий начало итерационного процесса (см. описание метода в § 2).

*E* — числовой параметр, характеризующий среднеквадратическую точность задаваемых значений функции в узлах сетки.

*K* — условное число, принимающее целые значения 0 или 1 и задаваемое пользователем.

Если  $K = 1$ , то в процессе работы подпрограммы *E* присваивается значение  $E * RØ$ , где *RØ* — среднеквадратичное отклонение от прямой, получаемой по методу наименьших квадратов.

*N* — число точек сетки.

*D1* — значение параметра *D* при выходе из итерационного процесса (см. описание метода в § 2).

*RØ* — значение достигнутой точности приближения.

*Y0* — вещественный одномерный массив (размерности *N*) значений сглаживающего сплайна в узлах сетки.

*Y1* — вещественный одномерный массив (размерности *N*) значений первой производной сглаживающего сплайна в узлах сетки.

*Y2* — вещественный одномерный массив (размерности *N*) значений второй производной сглаживающего сплайна в узлах сетки.

$R$  — значение сглаживающего функционала

$$R = \int_{x_1}^{x_N} [y''(x)]^2 dx.$$

$A$  — вещественный двумерный массив (размерности  $N \times 7$ ) рабочих ячеек.

## §2. ОПИСАНИЕ МЕТОДА ПОСТРОЕНИЯ СГЛАЖИВАЮЩЕГО СПЛАЙНА

Ставится задача нахождения функции (сглаживающего сплайна), которая минимизирует функционал

$$R = \int_{x_1}^{x_N} [y''(x)]^2 dx$$

на классе функций, имеющих непрерывную вторую производную на отрезке  $[x_1, x_N]$  и удовлетворяющую условию

$$\sum_{i=1}^N p_i (y(x_i) - y_i)^2 \leq E^2,$$

где  $y_i$  — задаваемые значения табличной функции  $y(x)$  в узлах сетки  $x_i$  ( $i = 1, 2, \dots, N$ ),  $p_i > 0$  — весовые коэффициенты,  $E$  — абсолютная или относительная точность задаваемых значений функции  $y_i$ , определяемая параметром  $K$ : при  $K = 0$  величина  $E$  определяет абсолютную точность, при  $K = 1$  величина  $E$ ,  $0 < E < 1$ , определяет среднеквадратичную точность  $E := E\rho(0)$ , где  $\rho(0)$  — среднеквадратическая погрешность приближения заданных значений прямой линией, определяемая программно.

Введем обозначения:  $h_i = x_{i+1} - x_i$ ,  $i = 1, \dots, N - 1$ , и определим матрицы:

$$Q^T = \begin{pmatrix} \frac{1}{h_1} - \left(\frac{1}{h_1} + \frac{1}{h_2}\right) & \frac{1}{h_2} & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{h_2} & -\left(\frac{1}{h_2} + \frac{1}{h_3}\right) & \frac{1}{h_3} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{1}{h_{N-2}} - \left(\frac{1}{h_{N-2}} + \frac{1}{h_{N-1}}\right) & \frac{1}{h_{N-1}} \end{pmatrix}$$

$$T = \begin{pmatrix} \frac{1}{3}(h_1 + h_2) & \frac{h_2}{6} & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{h_2}{6} & \frac{1}{3}(h_2 + h_3) & \frac{h_3}{6} & \dots & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \frac{h_{N-2}}{6} & \frac{1}{3}(h_{N-2} + h_{N-1}) \end{pmatrix}$$

$$P = \begin{pmatrix} p_1 & & & 0 \\ & p_2 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & p_N \end{pmatrix}.$$

Положим

$$\|z\|_p^2 = \sum_{i=1}^N p_i z_i^2$$

и

$$\rho(d) = \|P^{-1}Q(Q^T P^{-1}Q + dI)^{-1}Q^T \hat{y}\|_p,$$

где  $\hat{y} = (y_1, y_2, \dots, y_N)^T$ ,  $d > 0$  — вещественный параметр.

В работах [1], [2] показано, что решение поставленной ранее экстремальной задачи является кубический сплайн  $y_0(x)$ , значения которого в узлах сетки  $\{x_i\}$  определяются компонентами вектора  $\hat{y}_d$ :

$$\hat{y}_d = \hat{y} - P^{-1}Q\bar{s}, \quad (Q^T P^{-1}Q + dI)\bar{s} = Q^T \hat{y},$$

где вектор  $\bar{s} = (s_2, s_3, \dots, s_{N-2})$ , а параметр  $d$  является (единственным) решением скалярного уравнения:

$$\rho(d) = E.$$

Для решения этого уравнения применяется итерационный метод касательных Ньютона, при этом начальное значение параметра  $d = D$ , а вычисленное программой —  $D1$ . Всегда можно положить  $D = 0$ , однако, если проводится серия расчетов при близких значениях  $E$ , то для ускорения времени счета целесообразно задавать значение  $D = D1$ , полученному на предыдущем шаге.

Значение первой  $y_1(x_i)$  и второй  $y_2(x_i)$  производной сглаживающего сплайна в узловых точках сеток определяются по формулам:

$$\text{I) } y_1(x_i) = \frac{y_0(x_{i+1}) - y_0(x_i)}{h_i} - \frac{2y_2(x_i) + y_2(x_{i+1})}{6} h_i, \quad i = 1, 2, \dots, N-1,$$

$$y_1(x_N) = y_1(x_{N-1}) + \frac{y_2(x_{N-1})}{2} h_{N-1};$$

$$\text{II) } y_2(x_i) = ds_i, \quad i = 2, \dots, N-1, \quad y_2(x_1) = y_2(x_N) = 0.$$

Значение  $R = \int_{x_1}^{x_N} [y_2(x)]^2 dx$  определяется равенством

$$R = (T\bar{s}, \bar{s}).$$

### §3. ТЕСТОВЫЙ ПРИМЕР

Пусть  $x_i = \frac{i-1}{10}$ ,  $p_i = 1$ ,  $i = 1, \dots, 30$ , а  $y_i$  — значения  $\sin x_i$  с точностью до трех знаков

$y_1 = .000$	$y_{11} = .841$	$y_{21} = .909$
$y_2 = .100$	$y_{12} = .891$	$y_{22} = .863$
$y_3 = .199$	$y_{13} = .932$	$y_{23} = .808$
$y_4 = .296$	$y_{14} = .964$	$y_{24} = .746$
$y_5 = .389$	$y_{15} = .985$	$y_{25} = .675$
$y_6 = .479$	$y_{16} = .997$	$y_{26} = .598$
$y_7 = .565$	$y_{17} = 1.000$	$y_{27} = .516$
$y_8 = .644$	$y_{18} = .992$	$y_{28} = .427$
$y_9 = .717$	$y_{19} = .974$	$y_{29} = .335$
$y_{10} = .783$	$y_{20} = .946$	$y_{30} = .239$

Было задано  $E = \sqrt{2.5} \times 10^{-3}$ ,  $D = 0$ . Обращение к подпрограмме имело вид:

*CALL SMØØTH(X, Y, P, 0., E, 0, 30, D1, RØ, Y0, Y1, Y2, R, A)*

Были получены следующие результаты (приводятся с точностью до пяти знаков после запятой).

$x_i$	Y0	Y1	Y2
0.0	0.00030	0.99965	0.00000
0.1	0.10011	0.99513	-0.09043
0.2	0.19897	0.97985	-0.21524
0.3	0.29568	0.95259	-0.32996
0.4	0.38926	0.91863	-0.34921
0.5	0.47921	0.87881	-0.44723
0.6	0.56459	0.82595	-0.60993
0.7	0.64407	0.76305	-0.64797
0.8	0.71704	0.69531	-0.70686
0.9	0.78292	0.62113	-0.77669
1.0	0.84107	0.54123	-0.82134
1.1	0.89098	0.45578	-0.88777
1.2	0.93202	0.36401	-0.94750
1.3	0.96357	0.26602	-1.01240
1.4	0.98522	0.16799	-0.94822
1.5	0.99727	0.07306	-0.95032
1.6	0.99969	-0.03621	-1.03504
1.7	0.99191	-0.12921	-1.02508
1.8	0.97392	-0.22982	-0.98710
1.9	0.94611	-0.32548	-0.92605
2.0	0.90898	-0.41666	-0.89750
2.1	0.86288	-0.50463	-0.86194
2.2	0.80823	-0.58727	-0.79091
2.3	0.74555	-0.66626	-0.78882
2.4	0.67521	-0.73824	-0.65071
2.5	0.59826	-0.79957	-0.57597

2.6	0.51542	-0.85731	-0.57890
2.7	0.42708	-0.90652	-0.40520
2.8	0.33465	-0.93955	-0.25534
2.9	0.23985	-0.95231	-0.00000

---

$D1 = 3020, 98091, R\emptyset = 0.00158, R = 1.55938.$

#### ЛИТЕРАТУРА

1. Морозов В.А. О задаче дифференцирования и некоторых алгоритмах приближения экспериментальной информации. Сб. работ "Вычислительные методы и программ.", вып. XIV, изд. Моск. ун-та, М., 1970, 46–62.
2. Reinsch С.Н. Smoothing by splines functions. Numer. Math., 1967, 10, № 3, 177–183.
3. Язык ФОРТРАН. Под ред. В.П. Ширикова, ВЦ МГУ, М., 1970.