Ограниченная лицензия

на использование файла и текста статьи
"Винокуров В.А.
Универсальный алгоритм многомерной полиномиальной интерполяции.
— "http://vinokur.narod.ru/polynom.pdf". Интернет. 2009."
именуемой далее "Статья", пользователем (далее по тексту "Пользователь").

1. Все авторские права на Статью принадлежат автору Винокурову В.А. (далее по тексту "Автор").
2. Данная ограниченная лицензия сопровождает каждый законно используемый экземпляр Статьи.
3. Данная ограниченная лицензия даёт право на ограниченное использование Статьи одновременно одним человеком на одном компьютере.
4. В рамках данной ограниченной лицензии Пользователь имеет право на неограниченное распространение и копирование настоящего файла "polynom.pdf" Статьи. Ни Пользователь, ни какое либо юридическое или физическое лицо не имеют права брать плату за распространение или передачу Статьи в любой форме без письменного разрешения Автора.
5. В рамках данной ограниченной лицензии не разрешается: проводить копирование и извлечение содержимого, печать Статьи целиком или частично, изменять файл или текст.
6. Для других видов использования: на бумажных носителях, на нескольких компьютерах, сетевого, библиотечного, коллективного и т.д. — должна быть получена у Автора особая лицензия.
7. Текст и файлы Статьи не могут копироваться, храниться в памяти компьютерных систем или воспроизводиться без лицензии, предоставленной Автором.
8. Допускаются ссылки на формулы, теоремы, леммы и т.д. из Статьи вида: "формула (10) статьи "Винокуров В.А. Универсальный алгоритм многомерной полиномиальной интерполяции. — "http://vinokur.narod.ru/polynom.pdf". Интернет. 2009." "
9. Формулы в тексте следует рассматривать как отдельные законченные произведения, авторские права на которые принадлежат Автору. Любые их записи на любых носителях в любых форматах на любых языках следует рассматривать как перевод, если сохраняется функциональная зависимость и физический смысл. Права Автора распространяются и на все производные формулы, полученные из них математическими операциями. Коммерческое использование или воспроизведение указанных формул в текстах, изображениях, компьютерных программах и т.д. возможно только с разрешения Автора.

Винокуров В.А.

Универсальный алгоритм многомерной полиномиальной интерполяции

В.А. Винокуров*†

Аннотация

При использовании математического моделирования довольно часто встречается ситуация, когда мы можем получить (из эксперимента или вычислений) значения функции в отдельных точках множества её определения, а затем по этой информации желательно построить "аналитическое" выражение для функции, т.е. метод вычисления значений функции и её производных первого и последующих порядков в ситуации — когда искомая функция полином. Тогда мы приходим к задаче определения коэффициентов полинома по данным его значениям в конечном числе точек. Это хорошо известная задача полиномиальной интерполяции, которая является ключевой и для гладких функций общего вида (см. [1, 2, 3]). Для полинома от одной переменной эта задача хорошо изучена (см. [3]). Для общего случая полинома произвольной конечной степени $m \in \mathbf{N}_o$ от произвольного конечного числа переменных $n \in \mathbf{N}$ ситуация более сложна (см. [1, 2]).

§1 Введение

Исследуя математические модели, описывающих биохимические процессы в митохондриях клеток живых организмов, мы столкнулись со следующей проблемой. Значения некоторой функции, определяющей скорости биохимических реакций, могут быть определены из эксперимента при каждом наборе её аргументов. Функция является полиномом и требуется определить коэффициенты этого полинома. Степень полинома $m \in \mathbf{N}_o$ и число переменных $n \in \mathbf{N}$ не фиксированы. При этом получение значения функции в одной точке, т.е. проведение одного эксперимента, может потребовать существенных материальных, финансовых и временных затрат. Нашей задачей было предложить универсальный алгоритм восстановления коэффициентов полинома по его измеренным значениям для

†Электронная почта автора: "vinokur@narod.ru", сайт автора: "vinokur.narod.ru".

любых m и n. Алгоритм должен использовать минимальное число точек измерения значения функции, т.е. минимальное число экспериментов.

В настоящей статье мы предлагаем метод решения задачи полиномиальной интерполяции для полиномов любой степени m с любым числом переменных n. Метод обладает следующими преимуществами перед ранее известными методами интерполяции (см. [1, 2]):

1) **универсальность** — единым образом для любого числа переменных n и любого порядка полинома m даются явные формулы для узлов интерполяции, а также для коэффициентов полинома через его значения в узлах интерполяции;

2) **технологичность** — метод содержит m-шаговый явный алгоритм восстановления коэффициентов полинома, непосредственно реализуемый на компьютере;

3) **экономичность** — метод использует минимальное число значений полинома.

Перейдём к описанию и обоснованию метода.

§2 Основные обозначения теории функций нескольких переменных

Далее мы будем использовать следующие обозначения. $\mathbf{N}$ — множество натуральных чисел. $\mathbf{N}_0 = \mathbf{N} \cup \{0\}$ — множество натуральных чисел, объединённое с нулём. $\alpha \in \mathbf{N}_0^n$, $\alpha \equiv (\alpha_1, \alpha_2, \ldots, \alpha_n)$ — мультииндекс; $|\alpha| \equiv \sum\limits_{i=1}^{n} \alpha_i$ — длина мультииндекса; $\alpha! \equiv \alpha_1!\alpha_2! \ldots \alpha_n!$. Если $x \in \mathbf{R}^n$, $x \equiv (x_1, x_2, \ldots x_n)$ и $\alpha \in \mathbf{N}_0^n$, то $x^\alpha \equiv x_1^{\alpha_1} x_2^{\alpha_2} \ldots x_n^{\alpha_n}$. Полином степени $m \in \mathbf{N}_0$ от $n \in \mathbf{N}$ переменных в этих обозначениях записывается в виде суммы

$$g(x) = \sum_{\substack{\alpha \in \mathbf{N}_0^n \\ |\alpha| \leqslant m}} g_\alpha x^\alpha. \tag{1}$$

Через $D_i \equiv \dfrac{\partial}{\partial x_i}$, $i \in \overline{1,n}$ мы обозначаем оператор взятия i-той частной производной дифференцируемой функции. Если $\alpha \in \mathbf{N}_0^n$ — мультииндекс, то $D^\alpha \equiv D_1^{\alpha_1} D_2^{\alpha_2} \ldots D_n^{\alpha_n}$, а через $f^{(\alpha)}(a) \equiv D_1^{\alpha_1} D_2^{\alpha_2} \ldots D_n^{\alpha_n} f(x)\big|_a$ обозначается частная производная порядка $\alpha \in {\mathbf{N}_o}^n$ функции f в точке a. Через

L_i, $i \in \overline{1,n}$, мы обозначаем оператор взятия i-той частной разности. Если $\alpha \in \mathbf{N}_0^n$— мультииндекс, то $L^\alpha \equiv L_1^{\alpha_1} L_2^{\alpha_2} \ldots L_n^{\alpha_n}$.

§3 Основная теорема и её следствия

Пусть $a \in \mathbf{R}^n$ — некоторая точка, тогда полином $g(x)$ степени m представим по формуле Тейлора

$$g(x) = \sum_{\substack{\alpha \in \mathbf{N}_0^n \\ |\alpha| \leqslant m}} \frac{g^{(\alpha)}(a)}{\alpha!}(x-a)^\alpha. \tag{2}$$

т. е. для коэффициентов разложения полинома $g(x)$ с центром в точке 0

$$g(x) = \sum_{\substack{\alpha \in \mathbf{N}_0^n \\ |\alpha| \leqslant m}} g_\alpha(0) x^\alpha \tag{3}$$

справедливо представление

$$g_\alpha(0) = \frac{g^{(\alpha)}(0)}{\alpha!}. \tag{4}$$

Используя формулу (4), мы вычислим коэффициенты g_α полинома $g(x)$, если вычислим значения производных $g^{(\alpha)}(0)$ через значения полинома $g(x)$ в конечном числе точек. Но последнее вычисление мы проведем, используя следующую теорему.

Теорема 1. *Пусть $g(x)$ — полином степени $m \in \mathbf{N}_0$, и $\alpha \in \mathbf{N}_0^n$ — мультииндекс такой, что $|\alpha| = m$, тогда верно равенство*

$$L^\alpha g(x) = D^\alpha g(x) = const. \tag{5}$$

Теорема 1 дает практический алгоритм восстановления полинома от нескольких переменных по его значениям в нескольких точках, оптимальный по числу точек.

§4 Описание результатов

Рассмотрим задачу о восстановлении коэффициентов полинома $g(x)$ степени m от n переменных, $x \in \mathbf{R}^n$, с центром разложения в точке

$a \in \mathbf{R}^n$ вида

$$g(x) = \sum_{\substack{\alpha \in \mathbf{N}_o^n \\ |\alpha| \leqslant m}} g_\alpha(a)(x-a)^\alpha. \tag{6}$$

по значениям этого полинома, заданным в конечном наборе точек.

Полином общего вида степени m от n переменных задаётся набором

$$M(m,n) = \frac{(m+n)!}{m!n!}. \tag{7}$$

числовых коэффициентов $\{g_\alpha(a)\}_{\alpha\in\mathbf{N}_o^n, |\alpha|\leq m}$ (см. [2, стр. 25]). Таким образом для восстановления полинома общего вида требуется использовать его значения в $\nu \geq M(m,n)$ точках. Минимально возможное число точек — узлов интерполяции есть $M(m,n)$. В окрестности точки a мы указываем множество S из $M(m,n)$ точек — узлов интерполяции, по значениям в которых коэффициенты полинома общего вида степени m от n переменных однозначно определяются.

Ключевой инструмент нашего построения теорема 1. Сформулируем для дальнейшего использования следующее следствие 1 этой теоремы.

Следствие 1. *Пусть $g(x)$ полином степени не выше m и α мультииндекс длины m, тогда для коэффициента $g_\alpha(a)$ полинома $g(x)$ справедливо представление*

$$g_\alpha(a) = \frac{1}{\alpha!} L^\alpha g(a). \tag{8}$$

§5 Множество $S(a,h,n,m)$ узлов интерполяции

Возьмём произвольную точку $a \in \mathbf{R}^n$ и вектор шага $h \in \mathbf{R}^n$, $h \equiv (h_1, h_2, \dots h_n)$. Требуется, чтобы все компоненты вектора h были не равны нулю, а в остальном этот вектор может быть произвольным. Введём следующее множество узлов интерполяции:

$$S(a,h,n,m) = \{a + \sum_{i=1}^n \beta_i h_i e_i \mid (\beta_1, \beta_2, \dots \beta_n) \equiv \beta \in \mathbf{N}_o^n, |\beta| \leq m\}, \tag{9}$$

$\{e_i\}_{i=1}^n$ – стандартный базис в $\mathbf{R}^n$.

Через L_i обозначим оператор взятия частной разности по i-той переменной:

$$L_i f(x) \equiv \frac{1}{h_i}\left(f(x + h_i e_i) - f(x)\right). \tag{10}$$

Если $\alpha = (\alpha_1, \alpha_2, ..., \alpha_n)$ – мультииндекс, $h = (h_1, h_2, ..., h_n)$ – вектор шага, то положим:

$$L^\alpha \equiv \prod_{i=1}^{n} L_i^{\alpha_i}. \tag{11}$$

Напомним, что длиной $|\alpha|$ мультииндекса α называется сумма его координат.

Замечание 1. *При $|\alpha| \leq m$ значения величины $L^\alpha f(a)$ выражаются только через значения функции f в точках множества $S(a, h, n, m)$.*

§6 m-шаговый алгоритм вычисления коэффициентов полинома по его значениям в точках множества S

Пусть $g(x)$ полином степени не выше m. Опишем m шагов вычисления коэффициентов $g_\alpha(a)$ многочлена по его значениям в точках множества $S(a, h, n, m)$. Построение проводится в обратном порядке — начинается со значения целого неотрицательного индекса $k = m$ и кончается значением индекса $k = 0$.

Шаг m. Полагаем $k = m$. Полагаем

$$g_m(x) \equiv g(x). \tag{12}$$

Мультииндекс $\alpha \in \mathbf{N}_o^n, \quad |\alpha| = m$. Согласно следствию 1 справедливо равенство

$$g_\alpha(a) = \frac{1}{\alpha!} L^\alpha g(a). \tag{13}$$

Итак, коэффициенты $g_\alpha(a)$ при мономах порядка $k = m$ теперь известны.

Шаг $m - 1$. Полагаем $k = m - 1$. Полагаем

$$g_{m-1}(x) \equiv g(x) - \sum_{\alpha \in \mathbf{N}_o^n, |\alpha| = m} g_\alpha(a)(x - a)^\alpha. \tag{14}$$

Мультииндекс $\alpha \in \mathbf{N}_o^n, \quad |\alpha| = m - 1$. Согласно следствию 1 справедливо равенство

$$g_\alpha(a) = \frac{1}{\alpha!} L^\alpha g_{m-1}(a). \tag{15}$$

Итак, коэффициенты $g_\alpha(a)$ при мономах порядка $k \geq m - 1$ теперь известны.

Шаг k. Пусть $k \in \overline{0,m}$. Полагаем

$$g_k(x) \equiv g(x) - \sum_{\alpha \in \mathbf{N}_o^n,\, k<|\alpha|\le m} g_\alpha(a)(x-a)^\alpha. \tag{16}$$

(Сумма по пустому множеству индексов по определению полагается равной нулю.) Мультииндекс $\alpha \in \mathbf{N}_o^n, \quad |\alpha| = k$. Согласно следствию 1 справедливо равенство

$$g_\alpha(a) = \frac{1}{\alpha!} L^\alpha g_k(a). \tag{17}$$

Мы убедились в справедливости следующей теоремы.

Теорема 2. *Коэффициенты любого многочлена степени m от n переменных вычисляются через его значения на множестве $S(a,h,n,m)$ вида (9) по формулам (16, 17).*

Из доказанной теоремы 2 следует, что для любых чисел $n \in \mathbf{N}$ и $m \in \mathbf{N}_o$ в любой окрестности любой точки $a \in \mathbf{R}^n$ существует множество $S(a,h,n,m)$ вида (9) такое, что коэффициенты любого полинома степени m от n переменных вычисляются через его значения на множестве $S(a,h,n,m)$ по формулам (16, 17).

Для полиномов частного вида, у которых часть коэффициентов известна, например, часть коэффициентов равна нулю, можно обойтись меньшим, чем $M(n,m)$ количеством узлов интерполяции.

§7 Свойства шаблона

Далее введенное в разделе 5 конечное множество узлов интерполяции $S(a,h,n,m) \subset \mathbf{R}^n$ будем называть *шаблоном.* Шаблон состоит из $M(n,m)$ точек. Произвольный полином степени $m \in \mathbf{N}_0$ от n переменных может быть записан в виде (6), т. е. задается набором $M(n,m)$ числовых коэффициентов $g_\alpha(a)$.

Рассмотрим n-мерный симплекс $\Gamma \subset \mathbf{R}^n$, являющийся наименьшим замкнутым выпуклым телом, содержащем точку $a \in \mathbf{R}^n$ и n точек $z_i \in \mathbf{R}^n$ вида

$$z_i \equiv a + m h_i e_i, \quad i \in \overline{1,n}. \tag{18}$$

Множество $S(a,h,n,m) \subset \Gamma$ состоит из всех целочисленных точек симплекса Γ, т. е. точек вида

$$x = a + \sum_{i=1}^{n} \beta_i h_i e_i, \tag{19}$$

где мультииндекс $\beta \in \mathbf{N}_0^n$. Объем симплекса Γ в $n!$ раз меньше объема параллелепипеда P со сторонами $m|h_1|$, $m|h_2|$, $\ldots$, $m|h_n|$. Параллелепипед P содержит

$$p(n,m) \equiv (m+1)^n \tag{20}$$

целочисленных точек вида (19). Известно, что объем параллелепипеда P в $n!$ раз больше объема симплекса Γ, поэтому можно было бы ожидать выполнения неравенства

$$N(n,m) \leqslant \frac{p(n,m)}{n!} \tag{21}$$

при $n \in \mathbf{N}$ и $m \in \mathbf{N}_0$. Однако при $n \geqslant 2$ и $m \geqslant 1$ неравенство (21) неверно, т.е. верно обратное неравенство

$$\forall\, n \geqslant 2 \quad \forall\, m \geqslant 1 \quad \Big| N(n,m) > \frac{p(n,m)}{n!}. \tag{22}$$

Тем не менее, при любом $n \in \mathbf{N}$ справедливо предельное соотношение

$$\lim_{m\to\infty} \frac{p(n,m)}{N(n,m)} = n!, \tag{23}$$

которое говорит об асимптотической справедливости неравенства (21) при достаточно больших степенях m полинома.

§8 Об ошибке восстановления коэффициентов полинома

Восстановление коэффициентов полинома g_α по значениям полинома в конечном числе точек шаблона производится по формулам (13–17). Эти формулы показывают, что любой коэффициент полинома g_α является линейным функционалом от набора значений полинома в точках шаблона. Для случая старших коэффициентов полинома норма этого линейного отображения имеет вид

$$\mathrm{normc}(\alpha, h) = \frac{b_\alpha}{|h^\alpha|}, \tag{24}$$

где b_α — положительная константа, не зависящая от вектора $h \in \mathbf{R}^n$. Формула (24) показывает, что ошибка δ_α вычисления коэффициента g_α по набору значений полинома g в точках шаблона S равна

$$\delta_\alpha = \frac{b_\alpha}{|h^\alpha|} \cdot \delta, \tag{25}$$

где δ — норма ошибки задания набора значений полинома в соответствующем нормированном пространстве. В случае равного шага по всем осям

$$h_1 = h_2 = \ldots = h_n \equiv h_0 \tag{26}$$

формула (25) принимает вид

$$\delta_\alpha = \frac{b_\alpha}{|h_0|^m} \cdot \delta. \tag{27}$$

Более подробную информацию по затронутым вопросам смотрите на сайте “vinokur.narod.ru”.

§Список литературы

[1] Соболев С.Л. Введение в теорию кубатурных формул. — М.: "Наука", 1974.

[2] Мысовских И.П. Интерполяционные кубатурные формулы. — М.: "Наука", 1981.

[3] Гельфонд А.О. Исчисление конечных разностей. — М.: "Наука", 1967.