

# 散乱数据带自然边界条件三元多项式光顺样条\*

徐应祥<sup>1,2</sup>, 关履泰<sup>2</sup>, 许伟志<sup>2</sup>

(1. 中山大学新华学院, 广东 广州 510520;  
2. 中山大学科学计算与计算机应用系, 广东 广州 510275)

**摘要:** 考虑对 4 维空间散乱数据的一种带自然边界条件的样条光顺。为使得给定的目标泛函达到极小, 用 Hilbert 空间样条函数方法, 得出其解可表为一个分片三元多项式, 其表示形式简单, 且系数可由线性代数方程组确定。最后给出一些数值例子进行了验证。

**关键词:** 散乱数据; 光顺; 自然边界条件; 样条

**中图分类号:** O241.5; TP391.7 **文献标志码:** A **文章编号:** 0529-6579 (2012) 02-0022-08

## Tri-variable Polynomial Smoothing Spline with Natural Boundary Conditions for Scattered Data

XU Yingxiang<sup>1,2</sup>, GUAN Lutai<sup>2</sup>, XU Weizhi<sup>2</sup>

(1. Xinhua College, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510520, China;  
2. Department of Scientific Computation and Computer Application, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China)

**Abstract:** A spline smoothing method with natural boundary conditions for scattered data of 4D are considered. In order to minimization the given objective functional, using the spline function methods of Hilbert space, the solution is constructed as a piecewise tri-variable polynomial. Its expression is so simple and the coefficients are decided by a linear system. Some numerical examples are presented to illustrate the method.

**Key words:** scattered data; smoothing; natural boundary conditions; spline

散乱数据拟合在许多领域中都有广泛的应用<sup>[1-4]</sup>。以前考虑得比较多的是平面散乱数据拟合问题, 但近年来已有不少更高维的问题出现, 例如动画设计与制作, 动态医学三维图像演示等方面有热烈的讨论<sup>[5]</sup>。从上世纪 60 年代以来, 众多的科技工作者对散乱数据曲面插值问题进行了一系列的研究<sup>[6-10]</sup>。近来, Lai、吴宗敏等有一系列总结性的工作<sup>[11-14]</sup>, 但是对多元散乱数据与大规模散乱数据插值问题的解决一直不够理想。目前在空间散乱数据插值中用得较多的三角剖分方法很难推广到更高维去, 而径向基函数方法则在计算稳定性与良

好逼近性方面有欠缺, 不像一元三次 B-样条那样有一系列良好的性质, 能很好地解决一元散乱数据插值问题。李岳生和关履泰在 1989 年试图推广一元三次自然样条对散乱点插值的方法到二元情形, 提出散乱数据的二元多项式自然样条插值, 研究了广义混合样条函数空间矩形域带连续边界条件和离散边界条件的多元散乱数据最优插值问题<sup>[15]</sup>。1993 年, Chui 和关履泰把二元的结果全面地推广到一般多元情形<sup>[16]</sup>。关履泰在 1993 年给出了一种二元散乱数据的多项式自然样条光顺<sup>[17]</sup>, 并在 1997 年研究了类似 B-样条的多元局部支撑基函

\* 收稿日期: 2011-05-19

基金项目: 教育部高等学校博士点科研基金资助项目 (200805581022); 广东省自然科学基金资助项目 (7003624)

作者简介: 徐应祥 (1978 年生), 男, 博士, 讲师; E-mail: xuyx\_78@126.com

数<sup>[18]</sup>，并于 2003 年发表了关于这种局部支撑基的性质及插值自然样条算法<sup>[19]</sup>。但是这类样条的目标泛函比较复杂，带有一系列的积分项，没有明显的物理意义，而且在很多情形下，如果区域边界上没有插值点或插值点太少，那么插值效果就会比较差。关履泰、许伟志和朱庆勇等研究了一类新的二元自然样条插值方法，该方法的目标泛函较为简单，没有离散边界插值点，更符合实际情况，而且结果比以前的更加简单，计算起来更加方便<sup>[20]</sup>。

Laurent<sup>[21]</sup>在其著作《逼近与优化》中推广一元三次样条的优化性质，提出 Hilbert 空间样条进行研究，Bezhaev 等<sup>[22]</sup>其后在《样条的变分理论》中对多元 Hilbert 空间样条作了进一步的讨论，李岳生<sup>[4]</sup>对样条变分法的欧拉方程有进一步的分析。不论是一元还是多元 Hilbert 空间样条，解决问题的难点和关键都在于如何提出一个合理的目标泛函，使得用变分法得出的欧拉方程容易求解，从而能够求得问题显式的解。在动态医学图象处理，三维动画设计等实际应用问题中，出现了采样点不仅要确定三维空间中位置，而且还有时间的限制，这使得采样数据出现了 4 维散乱数据的情形，因此对于 4 维散乱数据的处理也要作进一步讨论，如怎样更有效的对 4 维散乱数据进行插值或光滑等。本文深入进行目标泛函的研究，提出简单合理的目标泛函进行讨论，构造出一种更符合实际的 Hilbert 空间三元带自然边界条件的样条。这种带自然边界条件的样条在简单情况下，即不带导数条件下是三奇次的多项式（即关于每个变元  $x_j$  是  $2p_j - 1$  次多项式， $j = 1, 2, 3$ ），其算子  $T$  的核是  $\langle p_1, p_2, p_3 \rangle$  阶（见定义 1）多项式空间的子空间，在一般情形下这种样条是三元多项式。用这种新的三元带自然边界条件的样条考虑 4 维空间散乱数据的光滑问题，则该问题的带自然边界条件的样条解与以往不同，其基函数有良好的边界条件与简单的表达式，且求解此问题时所用到的线性方程组的系数矩阵是对称矩阵，这使得求解也更为方便。虽然解在表达式上与单基有关，但可以证明对应的系数矩阵是正定对称的，可以有较稳定的迭代算法，这些我们在以后的文章中讨论。

### 1 散乱数据三元带自然边界条件的光顺样条

记  $\mathbf{R}^3 = \{(x_1, x_2, x_3) \mid x_i \in \mathbf{R}, i = 1, 2, 3\}$  为 3 维欧氏空间与  $\mathbf{Z}_+^3 = \{(x_1, x_2, x_3) \mid x_i \in \mathbf{Z}, x_i \geq 0, i = 1, 2, 3\}$ ，其中  $\mathbf{R}$  与  $\mathbf{Z}$  分别表示实数集与整数

集。对任意取定的  $x = (x_1, x_2, x_3) \in \mathbf{R}^3$  以及  $\beta = (\beta_1, \beta_2, \beta_3) \in \mathbf{Z}_+^3$ ，再记  $u^{(\beta)}(x) = \partial^\beta u = \frac{\partial^{|\beta|} u(x)}{\partial x_1^{\beta_1} \partial x_2^{\beta_2} \partial x_3^{\beta_3}}$ 。给定  $N$  个三维散乱数据点  $\{x_i \mid x_i = (x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}), i = 1, \dots, N\}$ ，设方型域为  $\Omega = \prod_{i=1}^3 [a_i, b_i] (a_i < b_i, i = 1, 2, 3)$  及 Hilbert 空间  $X_1 = H^p(\Omega) = \{u(x) \mid u^{(p)} \in L_2(\Omega), u^{(\alpha)} \text{ 均是绝对连续函数}, \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), \alpha_i = 0, 1, \dots, p_i - 1, i = 1, 2, 3, x \in \Omega\}$ ，其中  $p = (p_1, p_2, p_3) \in \mathbf{Z}_+^3 (p_i \geq 1, i = 1, 2, 3)$  为取定的 3 维正整数数组， $L_2(\Omega)$  是  $\Omega$  上的平方可积函数空间。

若函数  $u$  在区域  $\Omega$  的边界  $x_i = a_i (i = 1, 2, 3)$  满足如下的条件：

$$\begin{aligned} u^{(i_1, p_2, 0)}(a_1, x_2, x_3) &= 0, u^{(p_1, i_2, 0)}(x_1, a_2, x_3) = 0, \\ u^{(i_1, i_2, p_3)}(a_1, a_2, x_3) &= 0, u^{(p_1, p_2, i_3)}(x_1, x_2, a_3) = 0 \end{aligned} \quad (1)$$

其中  $i_k = 0, 1, \dots, p_k - 1, k = 1, 2, 3$ ，则称  $u$  满足自然边界条件  $NB$ ，简记为  $u \mid_{NB} = 0$ 。记  $Y_1 = L_2(\Omega)$ ，令  $T_1: X \rightarrow Y_1$  是一个从  $X$  到  $Y_1$  的线性算子，定义为  $T_1(u) = u^{(p)} = \partial^p u$ ，其中

$$X = \{u \mid u \in X_1, u \mid_{NB} = 0\}$$

再记  $z = (z_1^\alpha, \dots, z_N^\alpha), z_i^\alpha \in \mathbf{R} (i = 1, \dots, N)$ ，并令  $Q = \mathbf{R}^q$  是  $q$  维欧氏空间， $A: X \rightarrow Q$  是一个线性连续算子，满足：

$$Au = (u^{(\alpha)}(x_1), u^{(\alpha)}(x_2), \dots, u^{(\alpha)}(x_N))$$

其中  $u^{(\alpha)}(x_i) = u^{(\alpha)}(x) \mid_{x=x_i}, i = 1, \dots, N, k = 1, 2, 3$ 。对每个  $k$  有  $\alpha_k \in I_k$ ，而  $I_k \subset I_{p_k} = \{0, 1, \dots, p_k - 1\}$  都是任意指定的指标集，总指标数为  $q$ 。

对给定的  $q$  个实数值  $z_i^\alpha (i = 1, \dots, N)$ 。考虑以下的在 Hilbert 空间  $X$  中的样条光滑问题，也称之为 4 维散乱点带自然边界条件的样条光滑问题，问题的解称之为 4 维散乱点带自然边界条件的光顺样条，简称三元自然光顺样条。

问题 T 求  $u(x) \in X$ ，使得如下的泛函

$$J(u) = \int_{\Omega} (u^{(p)}(x))^2 dx + \rho \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} (u^{(\alpha)}(x_i) - z_i^\alpha)^2 \quad (2)$$

取极小，其中常数  $\rho > 0, dx = dx_1 dx_2 dx_3$ ，而  $\sum_{\alpha \in I}$  表示求和符号  $\sum_{\alpha_1 \in I_1} \sum_{\alpha_2 \in I_2} \sum_{\alpha_3 \in I_3}$ 。

取  $Y = Y_1 \otimes Q$  为  $Y_1$  与  $Q$  的乘积空间，定义线性连续算子  $T: X \rightarrow Y$  为  $T = T_1 \otimes A$ ，则问题 T 还可写成：

**问题 T1** 求  $\sigma(x) \in X$ , 使

$$\|T\sigma\|_Y^2 = \min_{u \in X} \{\|Tu\|_Y^2\} \quad (3)$$

这里考虑到正数  $\rho$  的作用, 定义空间  $Y$  的范数为

$$\|Tu\|_Y^2 = \|T_1u\|_{Y_1}^2 + \rho \|Au - z\|_Q^2$$

其中由  $Y_1$  与  $Q$  的范数有  $\|T_1u\|_{Y_1}^2 = \int_{\Omega} (u^{(p)}(x))^2 dx$ ,

$$\text{而 } \|Au - z\|_Q^2 = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} (u^{(\alpha)}(x_i) - z_i^\alpha)^2.$$

除以上问题中引入的记号外, 为表示简单, 后文中还需要用到如下的记号

$$\sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i = \sum_{i_1=0}^{p_1-1} \sum_{i_2=0}^{p_2-1} \sum_{i_3=0}^{p_3-1} c_{i_1 i_2 i_3} x_1^{i_1} x_2^{i_2} x_3^{i_3}$$

其中  $i = (i_1, i_2, i_3)$ ,  $x^i = x_1^{i_1} x_2^{i_2} x_3^{i_3}$ .

**定义 1** 称形如  $\sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i$  的三元多项式称为  $\langle p \rangle$

阶多项式, 所有这些多项式的全体称为  $\langle p \rangle$  阶多项式函数空间, 记为  $P\langle p \rangle$ .

**定理 1** 算子  $T_1$  的化零子空间满足

$$N(T_1) = P\langle p \rangle = \{u \mid u(x) = \sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i\} \quad (4)$$

**证明** 直接验证, 如果  $u(x) = \sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i$ ,  $c_i$  是任意实数, 那么  $u$  满足边界条件 (1), 因此  $u \in N(T_1)$ .

反之, 如果  $u \in N(T_1)$  且满足边界条件 (1), 则由  $u^{(p_1, p_2, p_3)}(x_1, x_2, x_3) = 0$ , 于是有

$$u(x_1, x_2, x_3) = \sum_{\mu=0}^{p_3-1} g_\mu(x_1, x_2) x_3^\mu$$

再由  $u^{(p_1, p_2, k)}(x_1, x_2, a_3) = 0, k = 0, 1, \dots, p_3 - 1$ , 知

$$\sum_{\mu=0}^{p_3-1} g_\mu^{(p_1, p_2, \cdot)}(x_1, x_2) a_3^\mu = 0$$

以及

$$\sum_{\mu=k}^{p_3-1} \mu(\mu-1)\cdots(\mu-k+1) g_\mu^{(p_1, p_2)}(x_1, x_2) a_3^{\mu-k} = 0, \\ k = 1, \dots, p_3 - 1$$

由此可知, 当  $a_3 \neq 0$  时 (不失一般性, 总假定  $a_1 \neq 0, a_2 \neq 0, a_3 \neq 0$ ; 否则平移即可), 有  $g_\mu^{(p_1, p_2)}(x_1, x_2) = 0, \mu = 0, 1, \dots, p_3 - 1$ . 因此, 可得

$$g_0(x_1, x_2) = \sum_{\nu=0}^{p_2-1} g_{0\nu}(x_1) x_2^\nu,$$

$$g_\mu(x_1, x_2) = \sum_{\eta=0}^{p_1-1} g_{\mu\eta}(x_2) x_1^\eta, \mu = 1, \dots, p_3 - 1$$

于是可推得

$$u(x_1, x_2, x_3) = \sum_{\mu=1}^{p_3-1} \sum_{\eta=0}^{p_1-1} g_{\mu\eta}(x_2) x_1^\eta x_3^\mu + \sum_{\nu=0}^{p_2-1} g_{0\nu}(x_1) x_2^\nu$$

再由边界条件

$$u^{(i, p_2, 0)}(a_1, x_2, x_3) = 0, i = 0, 1, \dots, p_1 - 1,$$

$$u^{(p_1, j, 0)}(x_1, a_2, x_3) = 0, j = 0, 1, \dots, p_2 - 1$$

可知

$$\sum_{\mu=1}^{p_3-1} \sum_{\eta=0}^{p_1-1} g_{\mu\eta}^{(p_2)}(x_2) a_1^\eta x_3^\mu = 0,$$

$$\sum_{\mu=1}^{p_3-1} \sum_{\eta=i}^{p_1-1} \eta(\eta-1)\cdots(\eta-i+1) g_{\mu\eta}^{(p_2)}(x_2) a_1^{\eta-i} x_3^\mu = 0,$$

$$\sum_{\nu=0}^{p_2-1} g_{0\nu}^{(p_1)}(x_1) a_2^\nu = 0,$$

$$\sum_{\nu=j}^{p_2-1} \nu(\nu-1)\cdots(\nu-j+1) g_{0\nu}^{(p_1)}(x_1) a_2^{\nu-j} = 0,$$

$$i = 1, \dots, p_1 - 1, j = 1, \dots, p_2 - 1$$

当  $a_1 \neq 0, a_2 \neq 0$ , 时, 由  $x_3$  的任意性及上述各式容易解得

$$g_{\mu\eta}^{(p_2)}(x_2) = g_{0\nu}^{(p_1)}(x_1) = 0, \eta = 0, 1, \dots,$$

$$p_1 - 1, \nu = 0, 1, \dots, p_2 - 1, \mu = 0, 1, \dots, p_3 - 1$$

于是可知

$$g_{\mu\eta}(x_2) = \sum_{l=0}^{p_2-1} c_{\mu\eta l} x_2^l, g_{0\nu}(x_1) = \sum_{k=0}^{p_1-1} c_{0\nu k} x_1^k$$

代入  $u(x_1, x_2, x_3)$  的表达式, 便知  $u$  可表示为

$$u(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=0}^{p_1-1} \sum_{j=0}^{p_2-1} \sum_{k=0}^{p_3-1} c_{ijk} x_1^i x_2^j x_3^k$$

即  $u \in P\langle p_1, p_2, p_3 \rangle = P\langle p \rangle$ . 综上所述可知  $N(T_1) = P\langle p \rangle$ .

**定理 2** 算子  $T$  的化零子空间满足

$$N(T) = \{u \in P\langle p \rangle \mid u^{(\alpha)}(x_i) = z_i^\alpha, \\ \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), \alpha_k \in I_k, k = 1, 2, 3, i = 1, \dots, N\} \quad (5)$$

**证明** 一方面, 如果  $u \in P\langle p \rangle$ , 那么  $u(x) = \sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i$ ,  $c_i$  是任意实数. 于是立即可得  $u$  满足边界条件 (1).

另外对  $p = (p_1, p_2, p_3)$ , 显然有  $u^{(p)}(x) = 0$  再由  $u^{(\alpha)}(x_i) = z_i^\alpha, \alpha_k \in I_k, k = 1, 2, 3, i = 1, \dots, N$ , 便立得  $T_1u = 0, Au = 0$ , 从而  $Tu = 0$ , 即  $u \in N(T)$ .

反之, 如果  $u \in N(T)$ , 则  $Tu = 0$  且满足边界条件 (1). 因此  $T_1u = 0, Au = 0$ .

一方面由  $T_1u = 0$ , 根据定理 1 可知  $u \in P\langle p \rangle$ .

另一方面再由  $Au = 0$ , 知

$$\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} (u^{(\alpha)}(x_i) - z_i^\alpha)^2 = 0$$

由此得

$$u^{(\alpha)}(x_i) = z_i^\alpha, \alpha_k \in I_k, k = 1, 2, 3, i = 1, \dots, N$$

综上两方面可知定理得证。

## 2 散乱数据三元自然光滑样条特征及构造

**定理 3** (特征定理)  $\sigma \in X$  是 4 维带自然边界条件的光滑样条的充分必要条件如下:

$$\int_{\Omega} \sigma^{(p)}(x) u^{(p)}(x) dx + \rho \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} (\sigma^{(\alpha)}(x) - z_i^\alpha) u^{(p)}(x_i) = 0$$

对一切  $u \in X$  成立。

**证明** 根据定义, 上式即

$$\langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle_{Y_1} + \rho \langle A \sigma - z, Au \rangle_Q = 0$$

记  $J(u) = \|T_1 u\|_{Y_1}^2 + \rho \|Au - z\|_Q^2$ , 若  $\sigma \in X$  是带自然边界条件的光滑样条, 即  $\sigma \in X$  是问题 T 的解, 则由泛函取极值的必要条件, 对任意的  $\varepsilon > 0$  及任意的  $u \in X$ , 泛函  $J(\sigma + \varepsilon u)$  在  $\sigma$  处的变分  $\delta J = 0$ 。而

$$\delta J = \left. \frac{dJ(\sigma + \varepsilon u)}{d\varepsilon} \right|_{\varepsilon=0} =$$

$$\langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle_{Y_1} + \rho \langle A \sigma - z, Au \rangle_Q$$

因此有  $\langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle_{Y_1} + \rho \langle A \sigma - z, Au \rangle_Q = 0$ 。

反之, 若  $\langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle_{Y_1} + \rho \langle A \sigma - z, Au \rangle_Q = 0$ , 则

$$J(\sigma + \varepsilon u) = \|T_1(\sigma + \varepsilon u)\|_{Y_1}^2 + \rho \|A(\sigma + \varepsilon u) - z\|_Q^2 = J(\sigma) + \varepsilon^2 [\|T_1(u)\|_{Y_1}^2 + \rho \|A(u)\|_Q^2] \geq J(\sigma)$$

即  $J(u)$  在  $\sigma$  处取极小。

为了找出问题 T 的解, 即带自然边界条件的光滑样条所具有的形式, 先讨论在散乱点方型域  $\Omega$  中不带导数条件时的情形, 此时称问题 T 的解为简单带自然边界条件的光滑样条。

**定理 4** (构造定理) 4 维散乱数据的三元简单带自然边界条件的光滑样条  $\sigma(x)$  是三奇次多项式且具有如下的显式及紧凑格式的表达式:

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^N d_i g_i(x) + \sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i \quad (6)$$

其中

$$g_i(x) = \prod_{j=1}^3 G(x_{ji}, a_j; x_j), i = 1, \dots, N \quad (7)$$

是三奇次样条基函数, 并且有

$$G(x_{ji}, a_j; x_j) = (-1)^{p_j} \frac{(x_{ji} - x_1)_+^{2p_j-1}}{(2p_j - 1)!} + \sum_{k_j=0}^{p_j-1} c_{jk_j} (x_j - a_j)^{k_j} \quad (8)$$

此处

$$c_{jk_j} = (-1)^{p_j+k_j+1} \frac{(x_{ji} - a_j)^{2p_j-1-k_j}}{k_j!(2p_j - 1 - k_j)!} \quad (9)$$

$k_j = 0, 1, \dots, p_j - 1, j = 1, 2, 3$ 。系数  $c_{jk_l}$  及  $d_i$  由方程组

$$\begin{pmatrix} E & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \end{pmatrix} \quad (10)$$

决定, 此处  $D = (d_i)^T, C = (c_{lmn})^T$ , 矩阵  $E = (e_{ij})$  是  $N \times N$  阶方阵, 且满足

$$e_{ij} = g_j(x_i) (i \neq j), e_{ii} = \frac{1}{\rho} + g_i(x_i)$$

矩阵  $B = (b_{i,lmn})$  是  $N$  行  $p_1 p_2 p_3$  列的矩阵, 其元素为  $b_{i,lmn} = x_{1i}^l x_{2i}^m x_{3i}^n \cdot z = (z_i)^T \cdot 0$  是零矩阵。以上各式中的  $l = 0, \dots, p_1 - 1; m = 0, \dots, p_2 - 1; n = 0, \dots, p_3 - 1; i, j = 1, \dots, N$ 。

**证明** 由 Hilbert 空间样条函数理论<sup>[21-22]</sup>: 如果  $\sigma(x)$  是 Hilbert 空间插值样条函数解, 则对任意的  $v \in N(T_1)$ , 有  $\langle T_1^* T_1 \sigma, v \rangle = 0, T_1^*$  是  $T_1$  的共轭算子, 且存在系数  $d_i$  以及  $k_i \in X$  使得  $T_1^* T_1 \sigma = \sum_i d_i k_i$ 。现在该结论为  $T_1^* T_1 \sigma = \sum_i d_i k_i$ ;  $\sum_{i=1}^N d_i x_{1i}^l x_{2i}^m x_{3i}^n = 0$ , 其中  $l = 0, 1, \dots, p_1 - 1; m = 0, 1, \dots, p_2 - 1; n = 0, 1, \dots, p_3 - 1$ 。表示成矩阵形式, 正是

$$B^T D = 0 \quad (11)$$

对任意  $X$  中的元素  $u$ , 在  $a_1$  点 Taylor 展开, 有

$$u(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=0}^{p_1-1} \frac{u^{(i,0,0)}(a_1, x_2, x_3)}{i!} (x_1 - a_1)^i + \int_{a_1}^{b_1} \frac{u^{(p_1,0,0)}(t_1, x_2, x_3)}{(p_1 - 1)!} (x_1 - t_1)_+^{p_1-1} dt_1,$$

类似地, 由 Taylor 展开还有

$$u^{(i,0,0)}(a_1, x_2, x_3) = \sum_{j=0}^{p_2-1} \frac{u^{(i,j,0)}(a_1, a_2, x_3)}{j!} (x_2 - a_2)^j + \int_{a_2}^{b_2} \frac{u^{(i,p_2,0)}(a_1, t_2, x_3)}{(p_2 - 1)!} (x_2 - t_2)_+^{p_2-1} dt_2,$$

$$u^{(i,j,0)}(a_1, x_2, x_3) =$$

$$\sum_{k=0}^{p_3-1} \frac{u^{(i,j,k)}(a_1, a_2, a_3)}{k!} (x_3 - a_3)^k + \int_{a_3}^{b_3} \frac{u^{(i,j,p_3)}(a_1, a_2, t_3)}{(p_3 - 1)!} (x_3 - t_3)_+^{p_3-1} dt_3,$$

$$u^{(p_1,0,0)}(t_1, x_2, x_3) =$$

$$\sum_{m=0}^{p_2-1} \frac{u^{(p_1,m,0)}(t_1, a_2, x_3)}{m!} (x_2 - a_2)^m +$$

$$\int_{a_2}^{b_2} \frac{u^{(p_1, p_2, 0)}(t_1, t_2, x_3)}{(p_2 - 1)!} (x_2 - t_2)_+^{p_2-1} dt_2,$$

$$u^{(p_1, p_2, 0)}(t_1, t_2, x_3) =$$

$$\sum_{n=0}^{p_3-1} \frac{u^{(p_1, p_2, n)}(t_1, t_2, a_3)}{n!} (x_3 - a_3)^n +$$

$$\int_{a_3}^{b_3} \frac{u^{(p_1, p_2, p_3)}(t_1, t_2, t_3)}{(p_3 - 1)!} (x_3 - t_3)_+^{p_3-1} dt_3$$

根据自然边界条件 (1), 并由  $\sum_{i=1}^N d_i x_{1i}^l x_{2i}^m x_{3i}^n = 0$ ,

可知,

$$\langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle = \sum_{i=1}^N d_i u(x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}) =$$

$$\int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \int_{a_3}^{b_3} \sum_{i=1}^N d_i u^{(p_1, p_2, p_3)}(t_1, t_2, t_3) \cdot$$

$$\prod_{j=1}^3 \frac{(x_{ji} - t_j)_+^{p_j-1}}{(p_j - 1)!} dt_1 dt_2 dt_3 = \langle T_1 G, T_1 u \rangle$$

从而有  $G(x) = \sum_{i=1}^N d_i g_i(x) + f(x)$ ,  $f(x) \in N(T_1)$ ,

其中  $g_i(x) = \prod_{j=1}^3 G(x_{ji}, a_j; x_j)$ ,  $i = 1, \dots, N$ , 是三奇次自然样条基函数, 并满足:

$$G^{(p_j)}(x_{ji}, a_j; x_j) = \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{p_j-1}}{(p_j - 1)!}, j = 1, 2, 3$$

及自然边界条件 (1)。所以

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^N d_i g_i(x) + \sum_{j=0}^{p_1-1} \sum_{k=0}^{q_1-1} \sum_{l=0}^{r_1-1} c_{jkl} x_1^j x_2^k x_3^l$$

由  $G^{(p_j)}(x_{ji}, a_j; x_j) = \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{p_j-1}}{(p_j - 1)!}$ , 可知

$$G(x_{ji}, a_j; x_j) = (-1)^{p_j} \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{2p_j-1}}{(2p_j - 1)!} +$$

$$\sum_{k_j=0}^{p_j-1} c_{jk_j} (x_j - a_j)^{k_j}$$

再由  $g_i(x_1, x_2, x_3)$  满足自然边界条件

$$g_i^{(l, p_2, 0)}(a_1, x_2, x_3) = 0, l = 0, 1, \dots, p_1 - 1$$

可知

$$[G^{(l)}(x_{1i}, a_1; a_1)] G^{(p_2)}(x_{2i}, a_2; x_2) G(x_{3i}, a_3; x_3) = 0$$

由此有

$$\frac{(-1)^{p_1+l} (x_{1i} - a_1)_+^{2p_1-1-l}}{(2p_1 - 1 - l)!} + l! c_{1l} = 0,$$

$$l = 0, 1, \dots, p_1 - 1$$

于是可得

$$c_{1k} = (-1)^{p_1+k+1} \frac{(x_{1i} - a_1)_+^{2p_1-1-k}}{k! (2p_1 - 1 - k)!}, k=0, 1, \dots, p_1 - 1$$

类似地可得  $G(x_{2i}, a_2; x_2)$  及  $G(x_{3i}, a_3; x_3)$ , 其形式与  $G(x_{1i}, a_1; x_1)$  类同, 这里不再赘述。

再由特征定理可知在不带导数的简单情形下有

$$\int_{\Omega} \sigma^{(\rho)}(x) u^{(\rho)}(x) dx + \rho \sum_{i=1}^N (\sigma(x_i) - z_i) u(x_i) = 0$$

而由前述证明有

$$\int_{\Omega} \sigma^{(\rho)}(x) u^{(\rho)}(x) dx = \langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle = \sum_{i=1}^N d_i u(x_i)$$

所以有  $\sum_{i=1}^N u(x_i) [d_i + \rho(\sigma(x_i) - z_i)] = 0$ 。由  $u$  的任意性得  $d_i + \rho(\sigma(x_i) - z_i) = 0$ , 即有

$$\frac{1}{\rho} d_i + \sum_{j=1}^N d_j g_j(x_i) + \sum_{i=0}^{p_1-1} \sum_{j=0}^{p_2-1} \sum_{k=0}^{p_3-1} c_{ijk} x_{1i}^j x_{2i}^k x_{3i}^l - z_i = 0,$$

$$i = 1, \dots, N$$

这正好是方程

$$AD + BC = z \quad (12)$$

综合式 (11)、(12), 定理得证。

下面用类似的方法再考虑带导数条件的一般情形, 则有

**定理 5** (构造定理) 设  $\sigma(x)$  是 4 维散乱数据的三元带自然边界条件的光顺样条, 则其具有如下的显式及紧凑格式的表达式

$$\sigma(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} d_i^\alpha g_i^\alpha(x) + \sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i \quad (13)$$

其中

$$g_i^\alpha(x) = \prod_{j=1}^3 G^{\alpha_j}(x_{ji}, a_j; x_j), i = 1, \dots, N \quad (14)$$

是三维样条基函数, 并且有

$$G^{\alpha_j}(x_{ji}, a_j; x_j) = (-1)^{p_j} \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{2p_j-\alpha_j-1}}{(2p_j - \alpha_j - 1)!} +$$

$$\sum_{k_j=0}^{p_j-1} c_{jk_j} (x_j - a_j)^{k_j} \quad (15)$$

此处

$$c_{jk_j} = (-1)^{p_j+k_j+1} \frac{(x_{ji} - a_j)_+^{2p_j-1-k_j}}{k_j! (2p_j - 1 - k_j)!} \quad (16)$$

$k_j = 0, \dots, p_j - 1, j = 1, 2, 3$ . 系数  $c_{jkl}$  及  $d_i$  由方程组

$$\begin{pmatrix} E & B \\ B^T & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} D \\ C \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \end{pmatrix} \quad (17)$$

决定, 此处  $D = (d_i^\alpha)^T, C = (c_{lmn})^T$ , 矩阵  $E = (e_{ij}^{\mu, \alpha})$ ,

且  $e_{ij}^{\mu, \alpha} = g_j^{\alpha(\mu)}(x_i) (i \neq j), e_{ii}^{\mu, \alpha} = \frac{1}{\rho} + g_i^{\alpha(\mu)}(x_i)$ 。矩

阵  $B = (b_i^{\mu, \alpha})$ , 且  $b_i^{\mu, \alpha} = (x_{1i}^{\mu_1} x_{2i}^{\mu_2} x_{3i}^{\mu_3})^{(\alpha)} |_{x=x_i}$ ,  $z$  是

给定的实数集  $z = (z_i^\alpha)^T$ ,  $0$  是元素为零的矩阵。

其中  $\mu = (\mu_1, \mu_2, \mu_3), \alpha = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3), \mu_k, \alpha_k \in I_k$ ,

$k = 1, 2, 3; l = 0, \dots, p_1 - 1; m = 0, \dots, p_2 - 1; n = 0,$

$\dots, p_3 - 1; i, j = 1, \dots, N$ 。

**证明** 类似定理 4 的证明存在  $k_i^\alpha$  满足  $\langle k_i^\alpha, u \rangle$

$= u^{(\alpha)}(x_i)$ ，并使式  $T_1^* T_1 \sigma = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} d_i^\alpha k^\alpha$  成立。  
 再由  $\langle T_1^* T_1 \sigma, v \rangle = 0$  对一切  $v \in N(T_1)$  成立，立  
 得  $\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} d_i^\alpha (x^\mu)^{(\alpha)} \Big|_{x=x_i} = 0$ ，其中  $\mu = (\mu_1, \mu_2,$   
 $\mu_3)$ ， $\mu_k \in I_k, k = 1, 2, 3$ ，此即

$$B^T D = 0 \tag{18}$$

对任意  $X$  中的元素  $u$ ，在  $a_1$  点 Taylor 展开，有

$$u^{(\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3)}(x_1, x_2, x_3) = \sum_{i=0}^{p_1 - \alpha_1 - 1} \frac{u^{(\alpha_1+i, \alpha_2, \alpha_3)}(a_1, x_2, x_3)}{i!} (x_1 - a_1)^i + \int_{a_1}^{b_1} \frac{u^{(p_1, \alpha_2, \alpha_3)}(t_1, x_2, x_3)}{(p_1 - \alpha_1 - 1)!} (x_1 - t_1)_+^{p_1 - \alpha_1 - 1} dt_1$$

类似地，由 Taylor 展开还有

$$u^{(\alpha_1+i, \alpha_2, \alpha_3)}(a_1, x_2, x_3) = \sum_{j=0}^{p_2 - \alpha_2 - 1} \frac{u^{(\alpha_1+i, \alpha_2+j, \alpha_3)}(a_1, a_2, x_3)}{j!} (x_2 - a_2)^j + \int_{a_2}^{b_2} \frac{u^{(\alpha_1+i, p_2, \alpha_3)}(a_1, t_2, x_3)}{(p_2 - \alpha_2 - 1)!} (x_2 - t_2)_+^{p_2 - \alpha_2 - 1} dt_2, \\ u^{(\alpha_1+i, \alpha_2+j)}(a_1, x_2, x_3) = \sum_{k=0}^{p_3 - \alpha_3 - 1} \frac{u^{(\alpha_1+i, \alpha_2+j, \alpha_3+k)}(a_1, a_2, a_3)}{k!} (x_3 - a_3)^k + \int_{a_3}^{b_3} \frac{u^{(\alpha_1+i, \alpha_2+j, p_3)}(a_1, a_2, t_3)}{(p_3 - \alpha_3 - 1)!} (x_3 - t_3)_+^{p_3 - \alpha_3 - 1} dt_3, \\ u^{(p_1, \alpha_2, \alpha_3)}(t_1, x_2, x_3) = \sum_{m=0}^{p_2 - \alpha_2 - 1} \frac{u^{(p_1, \alpha_2+m, \alpha_3)}(t_1, a_2, x_3)}{m!} (x_2 - a_2)^m + \int_{a_2}^{b_2} \frac{u^{(p_1, p_2, \alpha_3)}(t_1, t_2, x_3)}{(p_2 - \alpha_2 - 1)!} (x_2 - t_2)_+^{p_2 - \alpha_2 - 1} dt_2, \\ u^{(p_1, p_2, \alpha_3)}(t_1, t_2, x_3) = \sum_{n=0}^{p_3 - \alpha_3 - 1} \frac{u^{(p_1, p_2, \alpha_3+n)}(t_1, t_2, a_3)}{n!} (x_3 - a_3)^n + \int_{a_3}^{b_3} \frac{u^{(p_1, p_2, p_3)}(t_1, t_2, t_3)}{(p_3 - \alpha_3 - 1)!} (x_3 - t_3)_+^{p_3 - \alpha_3 - 1} dt_3$$

根据条件 (1)，并由  $\sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} d_i^\alpha (x^\mu)^{(\alpha)} \Big|_{x=x_i} = 0$ ，  
 可知

$$\langle T_1 \sigma, T_1 u \rangle = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha_1 \in I_1} \sum_{\alpha_2 \in I_2} \sum_{\alpha_3 \in I_3} d_i^\alpha u^{(\alpha)}(x_{1i}, x_{2i}, x_{3i}) = \int_{a_1}^{b_1} \int_{a_2}^{b_2} \int_{a_3}^{b_3} \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha_1 \in I_1} \sum_{\alpha_2 \in I_2} \sum_{\alpha_3 \in I_3} d_i^\alpha u^{(p)}(t_1, t_2, t_3) \times \prod_{j=1}^3 \frac{(x_{ji} - t_j)_+^{p_j - \alpha_j - 1}}{(p_j - \alpha_j - 1)!} dt_1 dt_2 dt_3 = \langle T_1 G, T_1 u \rangle$$

因此  $G(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} d_i^\alpha g_i^\alpha(x) + f(x), f(x) \in N(T_1)$ ，

其中  $g_i^\alpha = \prod_{j=1}^3 G^{\alpha_j}(x_{ji}, a_j; x_j)$ ， $i = 1, \dots, N$ ，是三奇  
 次自然样条基函数，并满足：

$$(G^{\alpha_j})^{(p_j)}(x_{ji}, a_j; x_j) = \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{p_j - \alpha_j - 1}}{(p_j - \alpha_j - 1)!}, j = 1, 2, 3$$

及自然边界条件 (1)。所以

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha \in I} d_i^\alpha u^{(\alpha)}(x_i) + \sum_{i=0}^{p-1} c_i x^i$$

由  $(G^{\alpha_j})^{(p_j)}(x_{ji}, a_j; x_j) = \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{p_j - \alpha_j - 1}}{(p_j - \alpha_j - 1)!}$ ，可知

$$G(x_{ji}, a_j; x_j) = (-1)^{p_j} \frac{(x_{ji} - x_j)_+^{2p_j - \alpha_j - 1}}{(2p_j - \alpha_j - 1)!} + \sum_{k_j=0}^{p_j-1} c_{jk_j} (x_j - a_j)^{k_j}$$

余下讨论与定理 4 类同，这里不再赘述。

### 3 数值例子

#### 例 1 取三元函数

$$u(x_1, x_2, x_3) = \cos x_1 \sin x_2 \sin x_3$$

边界取为  $a_1 = a_2 = a_3 = -0.5, b_1 = b_2 = b_3 = 4.5$ ，  
 即区域  $\Omega$  为  $[-0.5, 4.5] \times [-0.5, 4.5] \times [-0.5,$   
 $4.5]$ 。散乱数据位于  $[0.5, 3.5] \times [0.5, 3.5] \times$   
 $[0.5, 3.5]$ ，由随机函数产生。用  $\langle 2, 2, 2 \rangle$  阶三奇  
 次简单带自然边界条件光滑样条拟合函数  $u$ 。在此  
 仅列出当参数  $\rho = 0.5, x_3 = 2$  时，取 500 个散乱  
 点和 1 500 个散乱点的光顺曲面图形，最大误差和  
 平均误差 (图 1，图 2 及表 1)。

表 1  $x_3 = 2$  时的误差

Table 1 Errors for  $x_3 = 2$

散乱数据点数	最大误差	平均误差
500	0.355 902 131 043 00	0.059 967 300 531 83
1 500	0.274 267 052 350 04	0.034 607 167 479 02

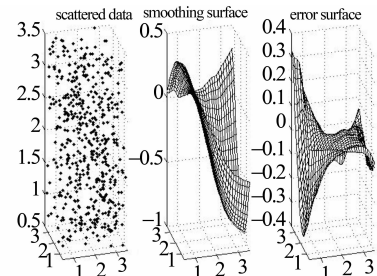


图 1  $x_3 = 2$  时 500 个散乱点，光顺与误差曲面  
 Fig. 1 Surfaces of smoothing and error of  $x_3 = 2$   
 and 500 scattered points

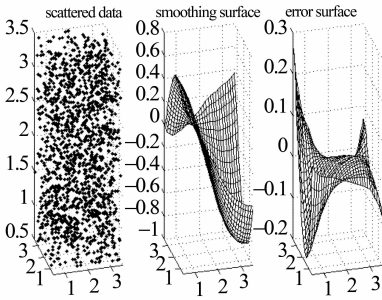


图 2  $x_3 = 2$  时 1 500 个散乱点, 光顺与误差曲面  
Fig. 2 Surfaces of smoothing and error of  $x_3 = 2$  and 1 500 scattered points

面, 插值曲面及曲面真实的等高线图 (图 3, 图 4, 图 5)。由等高线图可知, 光顺曲面的等高线图更接近曲面真实等高线图。

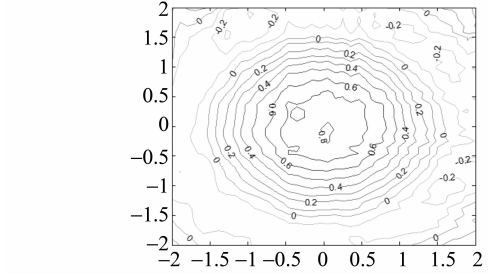


图 3 光顺曲面等高线

Fig. 3 Contour of smoothing surface

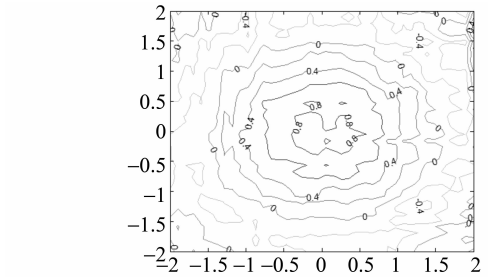


图 4 插值曲面等高线

Fig. 4 Contour of interpolation surface

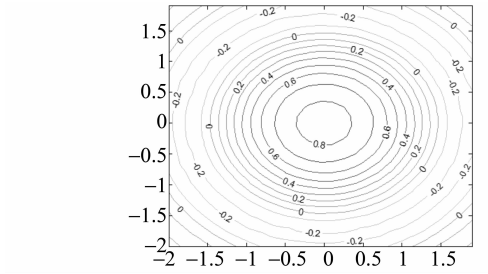


图 5 曲面真实等高线

Fig. 5 Contour of real surface

### 4 小结

本文主要针对 4 维散乱数据, 提出了一种带自然边界条件的样条光顺方法。在使得即定的目标泛函达到极小的要求下, 给出了解的构造过程, 得到了光顺问题的解——称为 4 维散乱数据带自然边界条件的光顺样条。这种光顺样条是三元的多项式, 对每一个变量都奇次多项式, 但并不要求关于每个变量的次数都是一样的, 这使得在具体问题中对带自然边界条件的光顺样条可以根据需要选择其对每个变量的次数, 如可选择带自然边界条件的光顺样

### 例 2 取三元函数

$$u(x_1, x_2, x_3) =$$

$$\sqrt{1 - (x_1 - 1)^2 - (x_2 - 1)^2 - (x_3 - 1)^2}$$

边界取为  $a_1 = a_2 = a_3 = -0.1, b_1 = b_2 = b_3 = 2.2$ , 即区域  $\Omega$  为  $[-0.1, 2.2] \times [-0.1, 2.2] \times [-0.1, 2.2]$ 。散乱点位于  $[0.9, 1.2] \times [0.9, 1.2] \times [0.9, 1.2]$ , 由随机函数产生。分别用  $\langle 4, 4, 4 \rangle$  阶, 参数  $\rho = 100$  的三奇次简单带自然边界条件的光顺样条与三奇次简单带自然边界条件的插值样条分别拟合函数  $u$ 。在此仅列出当  $x_3 = 1$  时, 取 500 个散乱点 (其中 10 个点上有值为 1 的噪声) 和 1 500 个散乱点 (其中 15 个点上有值为 1 的噪声) 时光顺与插值的最大误差和平均误差 (表 2)。由表 2 可以看出, 当测得的数据有噪声时, 光顺的效果要比插值好很多, 这说明光顺具有一定的去噪效果。

表 2  $x_3 = 1$  时的误差

Table 2 Errors for  $x_3 = 1$

散乱数据点数	最大误差		平均误差	
	插值	光顺	插值	光顺
500	0.014 879 78	0.010 496 04	0.002 749 65	0.002 794 13
1 500	0.014 293 00	0.007 309 83	0.001 514 11	0.001 720 65

### 例 3 取三元函数

$$u(x_1, x_2, x_3) = \frac{\sin(x_1^2 + x_2^2 + x_3^2)}{x_1^2 + x_2^2 + x_3^2} (x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 \neq 0)$$

相应的边界取为  $a_1 = a_2 = a_3 = -3, b_1 = b_2 = b_3 = 3$ , 即区域  $\Omega$  为  $[-3, 3] \times [-3, 3] \times [-3, 3]$ 。散乱点位于  $[-2, 2] \times [-2, 2] \times [-2, 2]$ , 由随机函数产生。用参数  $\rho = 100$  为  $\langle 4, 4, 6 \rangle$  阶三奇次简单带自然边界条件的光顺样条与  $\langle 4, 4, 6 \rangle$  阶三奇次简单带自然边界条件的插值样条拟合函数  $u$ 。在此仅列出当  $x_3 = 1$  时, 取 1 500 个散乱点的光顺曲

条是  $\langle 4,4,2 \rangle$  阶或者  $\langle 2,2,4 \rangle$  阶的等等。从构造过程可知, 这种三元带自然边界条件的光顺样条并不是由一元奇次多项式通过张量积的方法得到, 是一种新的非张量积多元样条。由于是多项式, 所以在计算上来说是较为简单的。但是由于篇幅的限制, 本文只讨论和研究了这种带自然边界条件的光顺样条的特征与构造方法, 而未能将如下的问题一一作出详细讨论:

- (i) 光顺问题解的存在唯一性;
- (ii) 光顺问题与插值问题的关系;
- (iii) 光顺问题解的收敛性与误差估计;
- (iv) 求光顺问题解时得到的线性方程组的特点及如何求解等。

对于以上问题将另文讨论和研究。

#### 参考文献:

- [1] ANDREW R W. 统计模式识别[M]. 王萍, 杨培龙, 罗颖昕, 译. 2 版. 北京: 电子工业出版社, 2004.
- [2] TONY F C, SHEN J H. 图像处理与分析: 变分、PDE、小波及随机方法[M]. 北京: 科学出版社, 2009.
- [3] 唐泽圣. 三维数据场可视化[M]. 北京: 清华大学出版社, 1999.
- [4] 李岳生. 分布欧拉方程与分片函数的表示[J]. 计算数学, 2006, 28(3): 225 - 236.
- [5] KAZHDAN M, BOLITHO M, HOPPE H. Poisson surface reconstruction [C] // Proceeding of Eurographics Symposium on Geometry Processing, Cagliari, Italy, 2006: 61 - 70.
- [6] 王仁宏. 多元样条及其应用[M]. 北京: 科学出版社, 1992.
- [7] 崔锦泰. 多元样条理论用其应用[M]. 程正兴, 译. 西安: 西安交通大学出版社, 1991.
- [8] GUAN L T, LIU B. Surface design by natural splines over refined grid points[J]. Journal of Computational and Applied Mathematics, 2004, 163(1): 107 - 115.
- [9] 关履泰, 罗笑南, 黎罗罗. 计算机辅助几何图形设计[M]. 北京: 高等教育出版社//海德尔堡: 施普林格出版社, 1999.
- [10] 关履泰, 覃廉, 张健. 用参数样条插值挖补方法进行大规模散乱数据曲面造型[J]. 计算机辅助设计与图形学学报, 2006, 18(3): 372 - 377.
- [11] LAI M J, SCHUMAKER L L. Spline functions over triangulations[M]. London: Cambridge University Press, 2007.
- [12] LAI M J. Multivariate splines for data fitting and approximation, approximation theory [M]. Brentwood: Nashboro Press, 2008: 210 - 228.
- [13] ZHOU T H, HAN D F, LAI M J. Energy minimization method for scattered data hermit interpolation[J]. Applied Numerical Mathematics, 2008, 58: 646 - 659.
- [14] 吴宗敏. 散乱数据拟合的模型、方法和理论[M]. 北京: 科学出版社, 2007.
- [15] 李岳生, 关履泰. 散乱数据的二元多项式自然样条插值[J]. 计算数学, 1990, 23(1): 135 - 146.
- [16] CHUI C K, GUAN L T. Multivariate polynomial natural spline for interpolation of scattered data and other applications [C] // Workshop on Computational Geometry, World Scientific, 1993: 77 - 98.
- [17] 关履泰. 散乱数据的多项式自然样条光顺与广义插值[J]. 计算数学, 1993, 26(4): 383 - 401.
- [18] GUAN L T. A local basis for bivariate polynomial natural splines of scattered data [C] // Guangzhou International Symposium of Computational Mathematics, 1997.
- [19] GUAN L T. Bivariate polynomial natural spline interpolation algorithms with local basis for scattered data[J]. J Comp Anal and Appl, 2003, 1: 77 - 101.
- [20] 关履泰, 许伟志, 朱庆勇. 一种双三次散乱多点多项式自然样条插值[J]. 中山大学学报: 自然科学版, 2008, 47(5): 1 - 4.
- [21] LAURENT P J. Approximation et optimization [M]. Paris: Hermann, 1972.
- [22] BEZHAEV A Y, VASILENKO V A. Variational theory of splines [M]. New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2001.