第 29 卷第 1 期　　国 防 科 技 大 学 学 报 JOURNAL OF NATIONAL UNIVERSITY OF DEFENSE TECHNOLOGY　　Vol.29 No.1 2007

文章编号:1001-2486(2007)01-0122-04

再生核的一种新的计算法及其递推性*

张新建,姜 悦

(国防科技大学 理学院,湖南 长沙 410073)

摘 要:利用函数带积分余项的 Taylor 公式很自然地给出了 $W_2^m[a,b]$ 空间的内积;基于这个内积,用 Green 函数得到再生核简洁的表达式,并用矩阵讨论了再生核计算的递推关系。

关键词:再生核;Hilbert 空间;Green 函数;递推

中图分类号:O177　　**文献标识码**:A

A New Method and Recursion for Computing Reproducing Kernels

ZHANG Xin-jian, JIANG Yue

(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: By using the Taylor expansion with an integral remainder, an appropriate inner product for the space $W_2^m[a,b]$ were introduced. Based on this inner product, simple formulas for computing reproducing kernels were obtained by using the Green's function and recursive relationships for computing reproducing kernels were also discussed.

Key words: reproducing kernel; hilbert space; green function; recursion

设 $W_2^m[a,b]$ 表示区间 $[a,b]$ 上 $m-1$ 阶导数绝对连续、m 阶导数平方可积的函数全体。在合适的内积下,$W_2^m[a,b]$ 是具有再生核的 Hilbert 空间[1],即存在二元函数 $K(t,s)$ 满足:对每个给定的 $s\in[a,b]$,$K(t,s)$ 作为 t 的函数属于 $W_2^m[a,b]$,且对任意 $f\in W_2^m[a,b]$,有

$$<f,K(\cdot,t)>=f(t),\quad t\in[a,b] \tag{1}$$

其中 $<\cdot,\cdot>$ 表示内积。

在函数空间中引入再生核后,使得函数空间离散的插值问题具有了连续的表示形式,为函数空间的结构、函数插值、方程数值解等问题的研究提供了新的理论和方法,已得到了不少有意义的成果。在 $W_2^m[a,b]$ 中赋予不同的内积可得到不同形式的再生核,如何既使得内积不失一般性,又使得再生核比较容易计算,是再生核研究的重点内容。在一般情况下,再生核的实际计算是个比较复杂的问题。文献[2-3] 采用形如 $<u,v>=\int_a^b\sum_{0\leqslant k\leqslant m}C_m^k u^{(k)}(t)v^{(k)}(t)\mathrm{d}t\,(u,v\in W_2^m)$ 的内积,用解微分方程边值问题的方法在 W_2^1,W_2^2 空间中算得了再生核的具体形式,并在方程数值解中得到了应用。但用这种方法算得的再生核在 W_2^2 中就已经很复杂,在一般的 $W_2^m(m\geqslant 3)$ 中迄今没得到具体形式。

本文利用 Taylor 公式得到微分算子 D^m 的带一个端点($t=a$)初值条件的 Green 函数,并很自然地引入方便的内积。在此 Green 函数和内积的基础上,得到再生核简洁的表达式,并利用矩阵形式讨论了再生核的递推关系。

1 $W_2^m[a,b]$ 空间再生核的一种构造法

设有微分算子 D^m,记 $\varphi_{mi}(t)=\dfrac{(t-a)^{i-1}}{(i-1)!}(i=1,2,\cdots,m)$,则 $\varphi_{mi}(t)(1\leqslant i\leqslant m)$ 是 D^m 的零空间

* 收稿日期:2006-07-06
作者简介:张新建(1956—),男,副教授,硕士。

$\ker D^m$的基底。再记 $G_m(t,s)=\frac{1}{(m-1)!}(t-s)_+^{m-1}$,其中$(t-s)_+^k=(t-s)^k(t>s)$,$(t-s)_+^k=0(t\leqslant s)$,则对任意 $f\in W_2^m$,由带积分余项的 Taylor 公式,得

$$f(t)=\sum_{1\leqslant i\leqslant m}f^{(i-1)}(a)\varphi_{mi}(t)+\int_a^b G_m(t,s)[D^m f(s)]\mathrm{d}s \tag{2}$$

令 $\lambda_i(i=1,2,\cdots,m)$为赋值泛函:$\lambda_i f=f^{(i-1)}(a)$,则

$$\lambda_i\varphi_{mj}(t)=\delta_{ij},\lambda_i G_m(\cdot,s)=0(\text{当 } a<s\leqslant b \text{ 时}),\quad i,j=1,2,\cdots,m \tag{3}$$

$G_m(t,s)$称为微分算子 D^m 的 Green 函数[4],即当 $D^m f(t)=u(t)$时,有

$$D_t^m\int_a^b G_m(t,s)u(s)\mathrm{d}s=u(t) \tag{4}$$

根据(2)式,很自然地在 W_2^m 中定义内积

$$<f,g>=\sum_{1\leqslant i\leqslant m}(\lambda_i f)(\lambda_i g)+\int_a^b D^m f(t)\cdot D^m g(t)\mathrm{d}t \tag{5}$$

引理 1 W_2^m 关于内积(5)成为 Hilbert 空间。

证明 由内积(5)导出的范数记为 $\|\cdot\|$。设 $f_n(n=1,2,\cdots)$是 W_2^m 中的 Cauchy 序列,即当 $n\to\infty$ 时,有 $\|f_{n+p}-f_n\|^2=\sum_{i=1}^m(\lambda_i f_{n+p}-\lambda_i f_n)^2+\int_a^b[D^m(f_{n+p}-f_n)]^2\mathrm{d}t\to 0$。

由有限维空间和 $L^2[a,b]$的完备性知存在 $q_i(i=1,2,\cdots,m)$和函数 $h\in L^2[a,b]$,使$\lim_{n\to\infty}\lambda_i f_n=q_i(1\leqslant i\leqslant m)$,$\lim_{n\to\infty}\int_a^b[D^m f_n(t)-h(t)]^2\mathrm{d}t=0$。设 $g(t)\in W_2^m$,使 $D^m g(t)=h(t)$。取 $l(t)=\sum_{i=1}^m q_i\varphi_{mi}(t)+\int_a^b G_m(t,s)h(s)\mathrm{d}s\in W_2^m$,则由(4)式知,$D^m l(t)=h(t)$。于是

$$\|f_n-l\|^2=\sum_{i=1}^m(\lambda_i f_n-q_i)^2+\int_a^b[D^m f_n(t)-h(t)]^2\mathrm{d}t\to 0,n\to\infty$$

定理 1 W_2^m 关于内积(5)具有再生核

$$K_m(t,s)=\sum_{1\leqslant i\leqslant m}\varphi_{mi}(t)\varphi_{mi}(s)+\int_a^b G_m(t,\tau)G_m(s,\tau)\mathrm{d}\tau \tag{6}$$

证明 首先,对每个给定的 $s\in[a,b]$,若取 $f(t)=(-1)^m\frac{(s-t)_+^{2m-1}}{(2m-1)!}$,则 $D^m f(t)=G_m(s,t)$,由(4)式知

$$D_t^m\int_a^b G_m(t,\tau)_m G(s,\tau)\mathrm{d}\tau=G_m(s,t) \tag{7}$$

因此 $K_m(t,s)$作为 t 的函数存在 m 阶导数,即 $K_m(t,s)$属于 W_2^m。其次,根据(3)式知 $\lambda_i\int_a^b G_m(\cdot,\tau)G_m(s,\tau)\mathrm{d}\tau=0$,于是 $\lambda_i K(\cdot,s)=\varphi_{mi}(s)(i=1,2,\cdots,m)$。最后由(5)、(7)式知,对每个 $f\in W_2^m$,有

$$\begin{aligned}<f,K(\cdot,t)>&=\sum_{1\leqslant i\leqslant m}(\lambda_i f)[\lambda_i K(\cdot,t)]+\int_a^b[D^m f(s)][D_s^m K(s,t)]\mathrm{d}s\\&=\sum_{i=1}^m(\lambda_i f)\varphi_{mi}(t)+\int_a^b G_m(t,s)[D^m f(s)]\mathrm{d}s=f(t)\end{aligned}$$

即(1)式成立。所以 $K_m(t,s)$是空间 W_2^m 的再生核。

2 再生核的递推方法

记 $E_m(t,s)=\int_a^b G_m(t,\tau)G_m(s,\tau)\mathrm{d}\tau$,则 $K_m(t,s)$的计算主要是 $E_m(t,s)$的计算。

引理 2 当 $t\leqslant s$ 时,有

$$E_m(t,s)=\frac{(t-a)^m}{[(m-1)!]^2 m}\Big[(s-a)^{m-1}-\frac{m-1}{m+1}(s-a)^{m-2}(t-a)+\frac{(m-1)(m-2)}{(m+1)(m+2)}(s-a)^{m-3}(t-a)^2+\cdots+(-1)^{m-1}\frac{(m-1)!}{(m+1)\cdots(2m-1)}(t-a)^{m-1}\Big]$$

证明 由于 $E_m(t,s)=\int_a^b G_m(t,\tau)G_m(s,\tau)\mathrm{d}\tau=\frac{1}{[(m-1)!]^2}\int_a^b(t-\tau)_+^{m-1}(s-\tau)_+^{m-1}\mathrm{d}\tau$,设 $t\leqslant s$,由分部积分得到

$$\begin{aligned}E_m(t,s)&=\frac{1}{[(m-1)!]^2}\int_a^t(\tau-t)^{m-1}(\tau-s)^{m-1}\mathrm{d}\tau\\&=\frac{1}{[(m-1)!]^2 m}\Big[(\tau-t)^m(\tau-s)^{m-1}\Big|_a^t-(m-1)\int_a^t(\tau-t)^m(\tau-s)^{m-2}\mathrm{d}\tau\Big]\\&=\frac{1}{[(m-1)!]^2 m}\Big[(\tau-s)^{m-1}(\tau-t)^m-\frac{m-1}{m+1}(\tau-s)^{m-2}(\tau-t)^{m+1}\\&\quad+\frac{(m-1)(m-2)}{(m+1)(m+2)}(\tau-s)^{m-3}(\tau-t)^{m+2}-\cdots\\&\quad+\frac{(-1)^{m-1}(m-1)!}{(m+1)(m+2)\cdots(2m-1)}(\tau-t)^{2m-1}\Big]_{\tau=a}^{\tau=t}\end{aligned}$$

上式代入上下限整理后即知引理2成立。

为了从引理2得到 $E_m(t,s)$ 的递推关系,引入对角矩阵

$$\boldsymbol{Q}_m=\mathrm{diag}\Big[\frac{1}{m},-\frac{m-1}{m(m+1)},\frac{(m-1)(m-2)}{m(m+1)(m+2)},\cdots,\frac{(-1)^{m-1}(m-1)}{m(m+1)\cdots(2m-1)}\Big]$$

$$\boldsymbol{\alpha}_m(t)=[1,t-a,\cdots,(t-a)^{m-1}],\quad \boldsymbol{\beta}_m(t)=[(t-a)^{m-1},\cdots,t-a,1]^{\mathrm{T}}$$

由引理2,可以得到

$$E_m(t,s)=\frac{(t-a)^m}{[(m-1)!]^2}\alpha_m(t)Q_m\beta_m(s),\quad t\leqslant s \tag{8}$$

设 $\boldsymbol{I}_m$ 是 m 阶单位矩阵,$\boldsymbol{O}_m$ 表示 m 阶零矩阵,再记 m 阶矩阵 $\boldsymbol{P}_m,\boldsymbol{H}_m$ 分别为

$$\boldsymbol{P}_m=\begin{bmatrix}0 & I_{m-1}\\ 1 & 0\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{H}_m=\begin{bmatrix}\boldsymbol{O}_{m-1} & 0\\ 0 & \dfrac{(m-1)^2}{m(2m-1)}\end{bmatrix}$$

定理2 W_2^m 关于内积(5)的再生核为

$$K_m(t,s)=\sum_{i=1}^m\varphi_{mi}(t)\varphi_{mi}(s)+\begin{cases}\dfrac{(t-a)^m}{[(m-1)!]^2}\boldsymbol{\alpha}_m(t)\boldsymbol{Q}_m\boldsymbol{\beta}_m(s), & t\leqslant s\\[2ex] \dfrac{(s-a)^m}{[(m-1)!]^2}\boldsymbol{\alpha}_m(s)\boldsymbol{Q}_m\boldsymbol{\beta}_m(t), & t>s\end{cases} \tag{9}$$

其中 Q_m 关于 m 具有递推关系:

$$\boldsymbol{Q}_m=\begin{bmatrix}\boldsymbol{M}_{m-1} & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{Q}_{m-1} & 0\\ 0 & \dfrac{(-1)^{m-1}(m-1)!}{m(m+1)\cdots(2m-1)}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\boldsymbol{N}_{m-1} & 0\\ 0 & 1\end{bmatrix},Q_1=1$$

且

$$\boldsymbol{M}_{m+1}=\begin{bmatrix}1 & 0\\ 0 & \dfrac{m+1}{m}\boldsymbol{M}_m\end{bmatrix},\quad \boldsymbol{N}_{m+1}=\begin{bmatrix}\dfrac{m+1}{m}(\boldsymbol{P}_m\boldsymbol{N}_m P_m^{\mathrm{T}}-\boldsymbol{H}_m) & 0\\ 0 & \dfrac{1}{2}\end{bmatrix},\quad M_1=1,N_1=\frac{1}{2}$$

证明 由(5)式和引理2知(9)式成立。将 $E_m(t,s)$ 和 $E_{m-1}(t,s)$ 分别用(8)式表示,通过直接验证知递推关系成立。

当 $m=1,2$ 时,很容易得到 $K_1(t,s)=\begin{cases}t-a+1, & t\leqslant s\\ s-a+1, & t>s\end{cases}$

$$K_2(t,s)=\begin{cases}1+(t-a)(s-a)+\dfrac{1}{6}(t-a)^2(3s-t-2a), & t\leqslant s\\ 1+(s-a)(t-a)+\dfrac{1}{6}(t-a)^2(3t-s-2a), & t>s\end{cases}$$

3 结束语

建立的再生核形式简洁、计算方便,并建立了直接的递推关系,为再生核的程序化计算提供了启示。另外,本文作者之一曾用空间正交分解和投影的方法研究过抽象算子样条和算子方程[5],而本文采用的内积使得分解式(2)是正交分解,这为将再生核与样条插值相结合的研究提供了基础。

参考文献:

[1] Dalzell C J, Ramsay J O. Computing Reproducing Kernels with Arbitrary Boundary Constrains[J]. SIAM. J. Sci. Comput., 1993(14): 511-518.

[2] 崔明根,邓中兴. W_2^1 空间中的最佳插值逼近算子[J]. 计算数学,1986,8(2):209-216.

[3] 崔明根,吴勃英. 再生核空间数值分析[M]. 北京:科学出版社,2004.

[4] Schumaker L. Spline Functions: Basic Theory[M]. New York: John Wiley & Sons, 1981.

[5] 张新建. 希氏空间中算子样条插值及算子方程的近似解[J]. 数学学报,2002,45(2):227-234.

(上接第 115 页)

参考文献:

[1] Spellman P T, Gavin S, Michael Q Z. Comprehensive Identification of Cell Cycle-regulated Genes of the Yeast Saccharomyces cerevisiae by Microarray HybridizationhD[J]. Molecular Biology of the Cell, 1998, 9: 3273-3297.

[2] Alexandre G B, Serge H, Alain M. Influence of Microarrays Experiments Missing Values on the Stability of Gene Groups by Hierarchical Clustering [J]. BMC Bioinformatics, 2004, 5: 114-123.

[3] 李瑶. 基因芯片与功能基因组[M]. 北京:化学工业出版社, 2004.

[4] Liebermeister W. Linear Modes of Gene Expression Determined by Independent Component Analysis[J]. Bioinformatics, 2002, 18(1), 51-60.

[5] Olga T, Michael C, Sherlock G, Pat B, Trevor H, Robert T, David B, Russ B A. Missing Value Estimation Methods for DNA Microarrays[J]. Bioinformatics, 2001, 17: 520-525.

[6] Sandrine D, Jane F, Terence P S. Comparison of Discrimination Methods for the Classification of Tumors Using Gene Expression Data [J]. Journal of the American Statistical Association, 2002, 97: 77-87.

[7] Zhou X B, Wang X D, Edward R D. Missing-value Estimation Using Linear and Non-linear Regression with Bayesian Gene Selection[J]. Bioinformatics, 2003, 19(17): 2302-2307.

[8] Oba S. A Bayesian Missing Value Estimation Method for Gene Expression Profile Data[J]. Bioinformatics, 2003, 19: 2088-2096.

[9] Ouyang M, Welsh W J, Georgopoulos P. Gaussian Mixture Clustering and Imputation of Microarray Data[J]. Bioinformatics, 2004, 20 (6): 917-923.

[10] Bo T H, Dysvik B, Jonassen I. LSimpute: Accurate Estimation of Missing Values in Microarray Data with Least Squares Methods[J]. Nucleic Acids Res, 2004, 32(3), e34.

[11] Hyunsoo Kim, Gene H G, Haesun P. Missing Value Estimation for DNA Microarray Gene Expression Data: Local Least Squares Imputation [J]. Bioinformatics, 2005, 2(21): 187-198.

[12] Hastie T, Tibshirani R, Friedman J. The Elements of Statistical Learning, Data Mining, Inference, and Prediction[M]. 范明,柴玉梅,等译. 北京:电子工业出版社, 2004.

[13] Gasch A P, Spellman P T, Kao C M, et al. Genomic Expression Responses to DNA-damaging Agents and the Regulatory Role of the YeastATRhomolog Mec1p[J]. Mol. Biol. Cell, 2001, 12: 2987-3003.