文章编号: 1001- 2486(2010) 03- 0149- 04

光顺样条函数的再生核表示与计算*

张新建, 杜新鹏
(国防科技大学 理学院, 湖南 长沙 410073)

摘 要: 光顺样条是散乱数据拟合的理想函数, 是噪声数据最优平滑的重要工具。因此, 光顺样条的数学表示和计算的研究具有重要的意义。本文在一般的线性微分算子和线性泛函的情况下讨论光顺样条函数的构造和计算, 通过构造一个适当的再生核 Hilbert 空间, 使得所讨论的微分算子光顺样条成为该空间中的最小范数问题, 再利用投影理论建立了光顺样条函数的再生核表示方法, 并得到了插值偏差表达式。作为特例, 还给出了奇次多项式光顺样条函数新的简洁的计算方法。

关键词: 线性微分算子; 再生核; 光顺样条函数; 插值偏差
中图分类号: O175.3 文献标识码: A

Construction and Computation of Smoothing Splines Via Reproducing Kernels

ZHANG Xin-jian, DU Xin-peng
(College of Science, National Univ. of Defense Technology, Changsha 410073, China)

Abstract: Smoothing splines are well known to be the ideal functions for fitting of discrete data, and also the effective method for smoothing noisy data. Therefore, it is very important to study the construction and computation of smoothing splines. In this paper, the construction and computation of smoothing splines associated with general linear differential operators and linear functionals were discussed. By constructing an appropriate reproducing kernel Hilbert space framework, the proposed splines were expressed as minimum norm problems. Thus the expression and interpolation error of the smoothing spline were obtained via reproducing kernel. Based on this, a new method for computing polynomial smoothing splines was presented.

Key words: linear differential operator; reproducing kernel; smoothing spline; interpolation error

经典的样条理论表明多项式插值与光顺样条函数可以通过 B- 样条进行计算[1], 但由一般线性微分算子确定的插值与光顺样条很难通过 B- 样条进行计算。上世纪 70~ 80 年代的研究表明, 通过再生核可以建立微分算子确定的插值与光顺样条函数的联系, 这种联系不仅为这些样条函数建立了算法, 而且使样条函数在概率统计中得到了重要应用[2-3]。从 80 年代末开始有学者用本质属于下述极小化问题(2)式的模型研究一类机械零件的外形设计和性能分析, 取得显著效果[4]。我们曾直接利用再生核研究一般线性微分算子确定的插值与光顺样条函数的构造和计算[5]。本文利用再生核进一步研究光顺样条函数的构造和计算, 并得到了插值偏差的表达式和多项式奇次光顺样条函数的一种新的简洁的计算方法。

1 一般光顺样条函数

设 m 为正整数, 记 $W_2^m[a,b]=\left\{f(t),t\in[a,b]:f^{(m-1)}\text{在}[a,b]\text{上绝对连续},f^{(m)}\in L^2[a,b]\right\}$。

又设 L 为 m 阶微分算子

$$L=D^m+a_{m-1}(t)D^{m-1}+a_{m-2}(t)D^{m-2}+\cdots+a_1(t)D+a_0(t) \tag{1}$$

$\left\{\lambda_i\right\}_1^n(n\geqslant m)$ 是 $W_2^m[a,b]$ 上一组线性无关的线性泛函, $\left\{\rho_i\right\}_1^n$, $\left\{r_i\right\}_1^n$ 为两组实数, 其中 $\rho_i>0(1\leqslant i\leqslant$

* 收稿日期: 2009- 09- 30
基金项目: 国家自然科学基金资助项目(10571178)
作者简介: 张新建(1956—), 男, 副教授, 博士。

$n)$, $a_i(t) \in C^i[a,b]$。

定义 1[1] 函数 $s(t) \in W_2^m[a,b]$ 称为关于 $\{\rho_i\}_1^n$, $\{r_i\}_1^n$ 和 $\{\lambda_i\}_1^n$ 的 L 光顺样条函数, 如果 $s(t)$ 是下述极小化问题的解:

$$\min_{f \in W_2^m[a,b]} \left\{ \int_a^b [Lf(t)]^2 \mathrm{d}t + \sum_{j=1}^n \rho_j^{-1} (r_j - \lambda_j f)^2 \right\} \tag{2}$$

为了将上述极小问题描述成极小范数问题, 我们考虑新的空间

$$W_+^m[a,b] = \left\{ (f, \boldsymbol{e}) : f \in W_2^m[a,b], \boldsymbol{e} = (e_1, e_2, \cdots, e_n)^{\mathrm{T}} \in \mathrm{R}^n \right\} \tag{3}$$

利用 $W_2^m[a,b]$ 上的线性无关泛函 $\{\lambda_i\}_1^n$ 规定 $W_+^m[a,b]$ 上的线性无关泛函 $\{\lambda_i^+\}_1^n$:

$$\lambda_i^+(f, \boldsymbol{e}) = \lambda_i^+(f, (e_1, \cdots, e_n)^{\mathrm{T}}) = \lambda_i f + e_i, \quad i = 1, 2, \cdots, n \tag{4}$$

在 $W_+^m[a,b]$ 中定义内积和相应的范数:

$$\langle (f, \boldsymbol{e}), (y, \boldsymbol{d}) \rangle_+ = \int_a^b (Lf)(Ly) \mathrm{d}t + \sum_{i=1}^n \rho_i^{-1} e_i d_i + \sum_{i=1}^m (\lambda_i^+ f)(\lambda_i^+ y) \tag{5}$$

$$\| (f, \boldsymbol{e}) \|_+^2 = \int_a^b (Lf)^2 \mathrm{d}t + \sum_{i=1}^n \rho_i^{-1} e_i^2 + \sum_{i=1}^m (\lambda_i^+ f)^2 \tag{6}$$

可以证明 $W_+^m[a,b]$ 赋予内积(5)后成为 Hilbert 空间[6]。

设 $\{\varphi_i(t)\}_1^m$ 是 $\ker L = \left\{ f \in W_2^m[a,b] : Lf(t) = 0, t \in [a,b] \right\}$ 的对偶于 $\{\lambda_i\}_1^m$ 的基底, $G(t,u)$ 是 L 的对 $\{\lambda_i\}_1^m$ 满足齐次条件的 Green 函数, 即

$$L\varphi_i(t) = 0, \quad \lambda_i \varphi_j = \delta_{ij}, \quad 1 \leqslant i, j \leqslant m \tag{7}$$

$$LG(\cdot, u) = \delta(u - \cdot), \quad \lambda_i G(\cdot, u) = 0, 1 \leqslant i \leqslant m \tag{8}$$

再设

$$K(t,u) = \sum_{i=1}^m (1 + \rho_i) \varphi_i(t) \varphi_i(u) + \int_a^b G(t,\tau) G(u,\tau) \mathrm{d}\tau \tag{9}$$

引理 1[6] 设 $\Phi(t) = (\varphi_1(t), \cdots, \varphi_m(t), 0, \cdots, 0)^{\mathrm{T}}$ 为 n 维列向量, $\boldsymbol{E}_i (1 \leqslant i \leqslant n)$ 为实欧氏空间 $\boldsymbol{R}^n$ 的标准单位列量组, $Q = \mathrm{diag}(\rho_1, \cdots, \rho_n)$, 则 $W_+^m[a,b]$ 空间具有再生核

$$K_+(t,u) = \begin{cases} (K(t,u), -\boldsymbol{Q}\Phi(u)), & t, u \in [a,b] \\ (-\Phi^{\mathrm{T}}(t)\boldsymbol{Q}\boldsymbol{E}_u, \boldsymbol{Q}\boldsymbol{E}_u), & t \in [a,b], u \in \{1, 2, \cdots, n\} \end{cases} \tag{10}$$

于是对任意 $(f, \boldsymbol{e}) = (f, (e_1, \cdots, e_n)^{\mathrm{T}}) \in W_+^m[a,b]$, 有

$$\langle (f(\cdot), \boldsymbol{e}), K_+(\cdot, t) \rangle_+ = \begin{cases} f(t), & t \in [a,b] \\ e_t, & t \in \{1, 2, \cdots, n\} \end{cases} \tag{11}$$

若记 $U_+(r) = \left\{ (f, e) \in W_+^m[a,b] : \lambda_i^+(f, e) = r_i, i = 1, 2, \cdots, n \right\}$, 则当 $(f, \boldsymbol{e}) \in U_+(r)$ 时, 有 $e_i = r_i - \lambda_i f (1 \leqslant i \leqslant n)$, 由范数(6)式知, 极小化问题(2)式与下述极小范数问题等价:

$$\min_{(f,e) \in U_+(r)} \| (f, \boldsymbol{e}) \|_+^2 \tag{12}$$

定理 1 设 $K(t,u)$ 如(9)式, $\{\varphi_i(t)\}_1^m$ 如(7)式, 则(12)式确定的 L 光顺样条函数 $s(t)$ 为

$$s(t) = \sum_{j=1}^m c_j \varphi_j(t) + \sum_{j=m+1}^n c_j [\lambda_j K(\cdot, t)] \tag{13}$$

其中系数 $c_j (1 \leqslant j \leqslant n)$ 由以下线性方程组确定:

$$\begin{cases} c_i + \sum_{j=m+1}^n (\lambda_j \varphi_i) c_j = r_i, & i = 1, 2, \cdots, m \\ \sum_{j=1}^m (\lambda_i \varphi_j) c_j + \sum_{j=m+1}^n [\lambda_i \lambda_j K(\cdot, \cdot) + \rho_i \delta_{ji}] c_j = r_i, & i = m+1, m+2, \cdots, n \end{cases} \tag{14}$$

证明 设泛函 $\{\lambda_i^+\}_1^n$ 在 $W_+^m[a,b]$ 空间的表示元为 $\{h_i^+\}_1^n$, 设 $h_j^+ = (h_j, \theta_j)$, 其中 $\theta_j = (\theta_{j1}, \theta_{j2}, \cdots,$

$\theta_{jn})^{\mathrm{T}} \in \mathbf{R}^n$, 则由(11)式和(7)~(9)式知

$$h_j(t) = \langle h_j^+, K_+(\bullet, t)\rangle_+ = \lambda_j^+ K_+(\bullet, t) = \begin{cases} \lambda_j K(\bullet, t) - \rho_j \varphi_j(t) = \varphi_j(t), & 1 \leqslant j \leqslant m \\ \lambda_j K(\bullet, t), & j > m \end{cases} \tag{15}$$

$$\theta_{jk} = \lambda_j^+ K_+(\bullet, k) = \lambda_j^+(-\Phi^{\mathrm{T}}(\bullet)\boldsymbol{QE}_k, \boldsymbol{QE}_k) = -\lambda_j \Phi^{\mathrm{T}}(\bullet)\boldsymbol{QE}_k + \rho_k \delta_{jk}$$
$$= \begin{cases} -\rho_k \lambda_j \varphi_k(\bullet) + \rho_k \delta_{jk} = 0, & 1 \leqslant j \leqslant m,\ 1 \leqslant k \leqslant n \\ -\rho_k \lambda_j \varphi_k(\bullet) + \rho_k \delta_{jk} = -\rho_k \lambda_j \varphi_k(\bullet), & m+1 \leqslant j \leqslant n,\ 1 \leqslant k \leqslant m \\ \rho_k \delta_{jk}, & m+1 \leqslant j \leqslant n,\ m+1 \leqslant k \leqslant n \end{cases} \tag{16}$$

记 $H_+ = \mathrm{Span}\left\{h_1^+, h_2^+, \cdots, h_n^+\right\}$, 则由(12)式和Hilbert 空间投影理论知极小范数问题(13)式的解$(s, \omega) = (s(t), (\omega_1, \omega_2, \cdots, \omega_n))$ 是 $U_+(r)$ 中任意元素在 H_+ 上的投影, 于是可设

$$(s(t), \omega) = \sum_{j=1}^{n} c_j (h_j(t), \theta_j),$$

即

$$s(t) = \sum_{j=1}^{n} c_j h_j(t), \quad \omega = \sum_{j=m+1}^{n} c_j \theta_j$$

再由 $\lambda_i^+(s, \omega) = \lambda_i s + \omega_i = r_i\ (1 \leqslant i \leqslant n)$ 及(15)和(16)式, 并注意到

$$\lambda_i h_j = \lambda_i \lambda_j K(\bullet, \bullet) = \lambda_j \lambda_i K(\bullet, \bullet) = \lambda_j[\rho_i \varphi_i + \varphi_i], \quad 1 \leqslant i \leqslant m,\ m+1 \leqslant j \leqslant n$$

即可得到(13)和(14)式。 □

定理 2 由(13)和(14)式确定的光顺样条函数 $s(t)$ 的插值偏差为

$$\lambda_j s - r_j = \begin{cases} -\rho_j \sum_{i=m+1}^{n} c_i(\lambda_i \varphi_j), & j = 1, 2, \cdots, m \\ \rho_j, & j = m+1, m+2, \cdots, n \end{cases} \tag{17}$$

证明 因为 $\lambda_i^+(s, \omega) = \lambda_i s + \omega_i = r_i (1 \leqslant i \leqslant n)$, 而 $\omega = (\omega_1, \cdots, \omega_n) = \sum_{j=m+1}^{n} c_j \theta_j$, 即 $\omega_j = \sum_{i=m+1}^{n} c_i \theta_{ij}$, 再由(16) 式即得到(17) 式。 □

2 多项式奇次光顺样条函数

若取(1)式中的微分算子 $L = D^m$, 且设 $\lambda_i (1 \leqslant i \leqslant m)$ 是初值插值泛函: $\lambda_i f = f^{(i-1)}(a)\ (i = 1, 2, \cdots, m)$, 则易知满足(7)和(8)式的对偶基和 Green 函数分别为

$$u_i(t) = \frac{1}{(i-1)!}(t-a)^{i-1}\ (i = 1, 2, \cdots, m), \quad g_m(t, \tau) = \frac{1}{(m-1)!}(t-\tau)_+^{m-1} \tag{18}$$

给定区间$[a, b]$的一个分划 Δ: $a = t_1 < t_2 < \cdots < t_{n-m} < t_{n-m+1} = b$, 在(2)或(12)式中取

$$L = D^m, \quad \lambda_i f = f^{(i-1)}(a)\ (i = 1, 2, \cdots, m), \quad \lambda_{m+i} f = f(t_{i+1})\ (i = 1, 2, \cdots, n-m)$$

则所确定的光顺样条函数 $s(t)$ 就是通常的奇次($2m-1$ 次) 光顺样条函数[1], 记为 $s_m(t)$。

定理 3 在上述假设下, 由(2)或(12)式确定的奇次光顺样条函数为

$$s_m(t) = \sum_{i=1}^{m}\left[c_i + (1+\rho_i)\sum_{k=1}^{n-m} c_{m+k} u_i(t_{k+1})\right] u_i(t) + \sum_{k=1}^{n-m} c_{m+k} E_m(t_{k+1}, t) \tag{19}$$

其中

$$E_m(t, \tau) = \begin{cases} (t-a)^m \boldsymbol{a}_m(t) \boldsymbol{Q}_m \beta_m(\tau), & t \leqslant \tau \\ (\tau - a)^m \boldsymbol{a}_m(\tau) \boldsymbol{Q}_m \beta_m(t), & t > \tau \end{cases} \tag{20}$$

$$\boldsymbol{Q}_m = \mathrm{diag}\left(\frac{0!}{m!}, -\frac{1!}{(m+1)!}, \frac{2!}{(m+2)!}, \cdots, \frac{(-1)^{m-1}(m-1)!}{(2m-1)!}\right)$$

$$\alpha_m(t) = \left(u_1(t), u_2(t), \cdots, u_m(t)\right), \quad \beta_m(t) = \left(u_m(t), u_{m-1}(t), \cdots, u_1(t)\right)'$$

系数 $c_j (1 \leqslant j \leqslant n)$ 由(14) 式确定。

证明 在定理的条件下,类似于文献[7]的方法,可以求得

$$E_m(t,\tau) \triangleq \int_a^b g_m(t,\xi)g_m(\tau,\xi)\mathrm{d}\xi = \begin{cases}(t-a)^m a_m(t)Q_m\beta_m(\tau), & t\leqslant\tau\\ (\tau-a)^m a_m(\tau)Q_m\beta_m(t), & t>\tau\end{cases}$$

由(9)式确定的$K(t,\tau)$此时成为

$$K_m(t,\tau)=\alpha_m(t)\cdot\mathrm{diag}\left(1+\rho_1,1+\rho_2,\cdots,1+\rho_m\right)\cdot[\alpha_m(\tau)]^{\mathrm{T}}+E_m(t,\tau) \tag{21}$$

再由(3)~(5)式,知定理结论成立。

例1 在定理3中令$m=2$便得到三次光顺样条函数。此时

$$\boldsymbol{Q}_2=\begin{pmatrix}\frac{1}{2} & 0\\ 0 & \frac{-1}{6}\end{pmatrix},\quad \boldsymbol{a}_2(t)\boldsymbol{Q}_2\beta_2(\tau)=-\frac{1}{6}t+\frac{1}{2}\tau-\frac{1}{2}a$$

$$E_2(t,\tau)=\begin{cases}(t-a)^2\left(-\frac{1}{6}t+\frac{1}{2}\tau-\frac{1}{2}a\right), & t\leqslant\tau\\ (\tau-a)^2\left(-\frac{1}{6}\tau+\frac{1}{2}t-\frac{1}{2}a\right), & t>\tau\end{cases} \tag{22}$$

取$[a,b]=[0,2]$, $t_i=i-1(i=1,2,3)$,则$n=4$,且

$$\lambda_1 f=f(0),\quad \lambda_2 f=f^{(1)}(0),\quad \lambda_3 f=f(1),\quad \lambda_4 f=f(2) \tag{23}$$

由(19)和(20)式算得三次光顺样条函数

$$s_2(t)=\begin{cases}c_1+(c_3+c_4)(1+\rho_1)+[c_2+(c_3+2c_4)(1+\rho_2)]t+\\ \left(\frac{1}{2}c_3+c_4\right)t^2-\frac{1}{6}(c_3+c_4)t^3, \quad 0\leqslant t<1,\\ c_1-\frac{1}{6}c_3+(c_3+c_4)(1+\rho_1)+\left[c_2+\frac{1}{2}c_3+(c_3+2c_4)(1+\rho_2)\right]t+\\ c_4t^2-\frac{1}{6}c_4t^3, \quad 1\leqslant t\leqslant 2\end{cases} \tag{24}$$

此时(19)式中的$u_1(t)=1$, $u_2(t)=t$,由(22)式知$\lambda_3u_1(t)=\lambda_4u_1(t)=1$, $\lambda_3u_2(t)=1$, $\lambda_4u_2(t)=2$。再由(22)和(23)式算得$\lambda_3\lambda_3K(\cdot,\cdot)=\frac{7}{3}+\rho_1+\rho_2$, $\lambda_3\lambda_4K(\cdot,\cdot)=\lambda_4\lambda_3K(\cdot,\cdot)=\frac{23}{6}+\rho_1+2\rho_2$, $\lambda_4\lambda_4K(\cdot,\cdot)=\frac{23}{3}+\rho_1+4\rho_2$。代入(14)式知(24)式中的系数$c_j(1\leqslant j\leqslant 4)$由下述方程组确定:

$$\begin{cases}c_1+c_3+c_4=r_1\\ c_2+c_3+2c_4=r_2\\ c_1+c_2+\left(\frac{7}{3}+\rho_1+\rho_2+\rho_3\right)c_3+\left(\frac{23}{6}+\rho_1+2\rho_2\right)c_4=r_3\\ c_1+2c_2+\left(\frac{23}{6}+\rho_1+2\rho_2\right)c_3+\left(\frac{23}{3}+\rho_1+4\rho_2+\rho_4\right)c_4=r_4\end{cases}$$

由定理2得$s_2(t)$的插值偏差为

$$s_2(a)-r_1=-\rho_1(c_3+c_4),\ s_2^{(1)}(a)-r_2=-\rho_2(c_3+2c_4)$$

参 考 文 献:

[1] 程正兴, 数据拟合[M]. 西安: 西安交通大学出版社, 1986.
[2] Kohn R, Ansley C F. A New Algorithm for Spline Smoothing Based on Smoothing a Stochastic Process[J]. SIAM J. SCI. STAT. COMPUT., 1987(1): 33-48.
[3] Ramsay J O, Silverman B W, Functional Data Analysis[M]. 北京: 科学出版社, 2006.
[4] 张可村. 高阶光滑逼近曲线的一种有效算法[J]. 工程数学学报, 1989, 2(2): 99-108.
[5] 张新建. 龙汉. 样条函数与再生核[M]. 长沙: 国防科技大学出版社, 2008.
[6] 张新建. Lg 光顺样条函数的递推建立法[J]. 国防科技大学学报, 1990, 12(3): 32-38.
[7] 张新建, 姜悦. 再生核的一种新的计算法及其递推性[J]. 国防科技大学学报, 2007, 29(1): 122-125.