УДК 517.972.5+519.65

О построении сплайнов методом воспроизводящих ядер*

А.И. Роженко[1,2], Т.С. Шайдоров[3]

[1]Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090

[2]Новосибирский государственный университет, ул. Пирогова 2, Новосибирск, 630090

[3]ООО НПФ "АРС ТЕРМ", Красный просп., 220, к. 36, к. 408, Новосибирск, 630000
E-mails: rozhenko@oapmg.sscc.ru (Роженко А.И.), shaydorov@gmail.com (Шайдоров Т.С.)

Роженко А.И., Шайдоров Т.С. О построении сплайнов методом воспроизводящих ядер // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2013. — Т. 16, № 4. — С. 365–376.

Изучается метод сплайн-аппроксимации с помощью воспроизводящего ядра полугильбертова пространства. Сформулированы условия, при которых естественное функциональное пространство однозначно определяется по воспроизводящему ядру, тренду сплайна и области, в которой выполняется сплайн-аппроксимация. Предложена конструкция *сплайна с внешним дрейфом*, позволяющая аппроксимировать функции, имеющие зоны больших градиентов или разрывы первого рода. Доказана условная положительная определенность нескольких известных радиальных базисных функций.

Ключевые слова: *сплайн, воспроизводящее ядро, тренд, радиальная базисная функция, внешний дрейф.*

Rozhenko A.I., Shaidorov T.S. On spline approximation with a reproducing kernel method // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2013. — Vol. 16, № 4. — P. 365–376.

Spline approximation with a reproducing kernel of a semi-Hilbert space is studied. Conditions are formulated that uniquely identify the natural Hilbert space by a reproducing kernel, a trend of spline, and the approximation domain. The construction of *spline with external drift* is proposed. It allows one to approximate functions having areas of big gradients or first-kind breaks. The conditional positive definiteness of some known radial basis functions is proved.

Keywords: *spline, reproducing kernel, trend, radial basis function, external drift.*

Введение

Алгоритм построения сплайна многих переменных методом воспроизводящих ядер широко используется в приложениях. Идея применения воспроизводящих ядер гильбертовых пространств [1] для характеризации сплайнов была предложена М. Аттья [2] и использовалась в дальнейшем многими математиками. В данной работе мы следуем терминологии А.Ю. Бежаева [3], конструируя сплайн с помощью воспроизводящего ядра полугильбертова пространства.

Для простоты мы ограничивается только случаем вещественнозначного функционального гильбертова пространства $X = X(\Omega)$, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, в котором дополнительно задана некоторая гильбертова полунорма $\pi(x)$ с конечномерным ядром P. Пусть в

*Работа выполнена при поддержке гранта РФФИ (проект № 11-07-00447) и интеграционного гранта Сибирского и Уральского отделений РАН (проект № 32).

Ω задана некоторая конечная сетка узлов $t_1, \ldots, t_N$, в которой известны значения z_i, $i = 1, \ldots, N$, интерполируемой функции. Сплайн $\sigma \in X$, удовлетворяющий условиям интерполяции $\sigma(t_i) = z_i$, $i = 1, \ldots, N$, и минимизирующий полунорму $\pi(x)$, можно представить в виде

$$\sigma(s) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_j G(s, t_i) + p(s), \quad p \in P,$$

где $G(s,t)$ — *воспроизводящее ядро полугильбертова пространства* (X, π) (см. п. 2). На коэффициенты λ_i дополнительно накладываются линейные ограничения (см. п. 3). С учетом дополнительных ограничений и условий интерполяции задача построения интерполяционного сплайна сводится к системе линейных уравнений, которую можно эффективно решить вычислительными методами.

В п. 1 вводится используемая далее терминология сплайн-аппроксимации, а также доказывается, что, при естественных предположениях о свойствах пространства X, полунормы π и множества Ω, множество всех сплайнов, связанных с конечными сетками узлов интерполяции, плотно в X. Этот факт позволяет далее в п. 2, посвященном определению и свойствам воспроизводящих ядер, установить единственность пространства X, соответствующего тройке $\langle G, P, \Omega \rangle$, где $G(s,t)$ — воспроизводящее ядро полугильбертова пространства (X, π), P — ядро полунормы π.

Далее в п. 3 приводится краткое описание алгоритма построения сплайна методом воспроизводящих ядер и доказаны два простых утверждения, с помощью которых можно конструировать новые сплайны и воспроизводящие ядра. Отметим вытекающую из теоремы 2 важную для приложений возможность расширения подпространства P, задающего *тренд сплайна*, путем добавления в базис произвольных функций. Получающаяся в результате аппроксимация названа *сплайном с внешним дрейфом*, по аналогии с методами кригинга с внешним дрейфом (см., напр., [4]), откуда, собственно, и была взята терминология. Использование внешнего дрейфа открывает возможность аппроксимации функций, имеющих зоны больших градиентов и разрывы первого рода. Функции, описывающие такие особые зоны, добавляются в базис тренда сплайна. В результате можно построить сплайн, с одной стороны, воспроизводящий особенности поведения аппроксимируемых данных и, с другой стороны, свободный от паразитических осцилляций вне особых зон.

Заключительный п. 4 посвящен радиальным воспроизводящим ядрам. В нем описываются популярные конструкции радиальных воспроизводящих ядер, а также доказывается положительная определенность воспроизводящих ядер типа Whittle–Matérn (см., напр., [5]), порождаемых радиальными функциями $(r^2+c^2)^{\nu/2} K_\nu\big((r^2+c^2)^{1/2}\big)$, где K_ν — модифицированная функция Бесселя второго рода порядка $\nu \in \mathbb{R}$. Также доказано, что функции $g_1(r) = -\big(\ln\frac{r}{2} + \gamma + K_0(r)\big)$ и $g_2(r) = \frac{r^2}{4}\ln\frac{r}{2} + \big(\ln\frac{r}{2} + \gamma + K_0(r)\big)$ (γ — константа Эйлера), используемые в [6] для сплайн-интерполяции в $\mathbb{R}^2$, порождают условно положительно определенные воспроизводящие ядра порядков 1 и 2 соответственно, и их можно использовать при построении сплайнов в $\mathbb{R}^d$ при любом $d \in \mathbb{N}$.

1. Сплайн-аппроксимация в функциональном пространстве

Пусть $X = X(\Omega)$ — некоторое гильбертово пространство вещественных функций над некоторым множеством $\Omega \subset \mathbb{R}^d$. Пусть в X задана ограниченная полунорма $\pi(x)$, порождаемая скалярным произведением $\pi(x,y)$ $(\pi(x) = \sqrt{\pi(x,x)})$, и $P \subset X$ — ядро этой полунормы, т.е. $P = \{x \in X : \ \pi(x) = 0\}$. Ясно, что P — замкнутое подпространство в X.

Далее будем предполагать следующее:

(а) Пространство X *локально вложено в класс непрерывных функций*, т.е. функции пространства X непрерывны в Ω, и для любого компакта $M \subset \Omega$, и любой функции $x \in X$ имеет место оценка $\max_{t \in M}|x(t)| \leq C_M \|x\|_X$ с константой C_M, не зависящей от x.

(б) Пространство X *полугильбертово* относительно полунормы $\pi(x)$, т.е. (X, π) — полное пространство (любая фундаментальная в полунорме π последовательность $\{x_n\}$ имеет некоторый предел $x_* \in X$). Это эквивалентно тому, что $(X/P, \pi)$ — гильбертово пространство, а также, если $\pi(x) = \|Tx\|_Y$ для некоторого линейного ограниченного оператора T, действующего из X в некоторое гильбертово пространство Y, то образ оператора T замкнут (см., напр., [7, теорема 1.9]).

(в) Подпространство P конечномерно, $K = \dim P < \infty$. Обычно P состоит из полиномов некоторой степени.

(г) Множество Ω *невырождено относительно* P, т.е. в нем найдется некоторое подмножество Δ, состоящее из K точек, на котором задача интерполяции $x(t) = z_t$, $t \in \Delta$, имеет единственное решение $x \in P$ для любого вектора чисел $\{z_t, \ t \in \Delta\}$. Такое множество точек называют *L-набором относительно* P.

Условие (а) гарантирует ограниченность функционалов $\delta_t(x) \equiv x(t)$, $t \in \Omega$, следовательно, можно рассматривать задачу интерполяции функций по значениям на сетке узлов из Ω. Условие (б) гарантирует существование решения задачи сплайн-интерполяции

$$\sigma = \arg\min\{\pi(x) : \ x \in X, \ x(t) = f(t), \ t \in \omega\}, \tag{1}$$

где $f \in X$ — заданная интерполируемая функция, $\omega \subset \Omega$ — множество узлов интерполяции. Условие (в) гарантирует, что решение задачи (1) единственно, если множество ω невырождено относительно P. Наконец, условие (г) гарантирует, что в Ω найдется невырожденная сетка ω.

Решение задачи (1) удовлетворяет условиям ортогональности:

$$\pi(\sigma, u) = 0 \quad \forall\, u \in X : \ \ u\,|_\omega = 0. \tag{2}$$

Множество функций, удовлетворяющих (2), обозначим через $S(\omega)$. Оно образует *пространство сплайнов* в X, соответствующее сетке ω. Через $S_{\dim}$ обозначим линейное пространство всех сплайнов, соответствующих конечным сеткам узлов, т.е.

$$S_{\dim} = \bigcup_{\omega \subset \Omega, \ |\omega| < \infty} S(\omega). \tag{3}$$

Теорема 1. *Множество $S_{\dim}$ плотно в X.*

Доказательство. Возьмем произвольную последовательность $\{r_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ положительных чисел, стремящуюся к бесконечности, и положим $B_n = B(0, r_n)$, где $B(s, r)$ — замкнутый шар радиуса r с центром в точке $s \in \mathbb{R}^d$. Возьмем также произвольную последовательность $\{\epsilon_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ положительных чисел, стремящуюся к нулю.

Поскольку B_n — компакт, в нем найдется конечная $\epsilon_n/2$-сеть узлов. Пусть t — узел этой сети и $B(t, \epsilon_n/2) \cap \Omega \neq \emptyset$. Выберем произвольную точку из $B(t, \epsilon_n/2) \cap \Omega$ для каждого такого t. Полученное множество точек обозначим через Δ_n. По построению Δ_n —

конечная ϵ_n-сеть узлов в $B_n \cap \Omega$. Выберем из Ω некоторый L-набор узлов относительно P и обозначим его Δ_0. Положим $\omega_n = \cup_{i=0}^{n} \Delta_i$. Ясно, что ω_n — конечная ϵ_n-сеть узлов для $B_n \cap \Omega$, невырожденная относительно P, и $\omega_n \subset \omega_{n+1}$. Очевидно также, что множество $\omega_\infty = \cup_{n \in \mathbb{N}} \omega_n$ плотно в Ω.

Пусть $f \in X$ — произвольная функция. Через σ_n обозначим сплайн (1), интерполирующий функцию f на сетке ω_n. Поскольку множество ω_n невырождено относительно P, то σ_n определяется единственным образом. По построению $\sigma_n \in S_{\mathrm{dim}}$. Учитывая, что последовательность сеток $\{\omega_n\}_{n \in \mathbb{N}}$ вложенная ($\omega_n \subset \omega_{n+1}$), получаем согласно общей теореме сходимости (см., напр., [7, теорема 7.1]), что последовательность сплайнов σ_n сходится в норме пространства X к некоторой функции $\sigma \in X$. Учитывая, что $\sigma|_{\omega_\infty} = f|_{\omega_\infty}$, ω_∞ плотно в Ω и функции σ и f непрерывны, получаем $\sigma \equiv f$, т. е. последовательность $\{\sigma_n\}$ сходится к f. □

2. Воспроизводящее ядро полугильбертова пространства

Обозначим через P° подпространство ограниченных линейных функционалов в X, аннулирующих P, т. е. $P^\circ = \{\phi \in X^* :\ \phi(x) = 0,\ x \in P\}$. Функцию $G(s,t) : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$ называют *воспроизводящим ядром полугильбертова пространства* (X, π), если для любого $\phi \in P^\circ$:

- функция $g_\phi(s) = \phi G(s, \cdot)$ принадлежит X,
- функция $\phi(x) = \pi(x, g_\phi)$ для любого $x \in X$.

Здесь $\phi G(s, \cdot)$ означает действие линейного функционала ϕ на G по переменной t.

Функция G всегда существует, но не единственна в случае нетривиального P. Очевидны следующие свойства воспроизводящего ядра:

(а) симметричность на P°, т. е. $\psi\phi G = \phi\psi G = \pi(g_\phi, g_\psi)$ при $\phi, \psi \in P^\circ$,

(б) положительная определенность на P°, т. е. $\phi\phi G > 0$ при $\phi \in P^\circ \setminus \{0\}$.

Здесь выражение $\psi\phi G$ означает, что сначала функционал ϕ действует на G по переменной t, а затем применяется функционал ψ к функции переменной s.

Пусть $\omega \subset \Omega$ — конечная сетка узлов. Зададим на ней функцию λ со значениями λ_t, $t \in \omega$. Доопределим функцию λ нулями вне ω. Тогда $\operatorname{supp} \lambda \subset \omega$. Свяжем с функцией λ функционал ϕ_λ по правилу

$$\phi_\lambda = \sum_{t \in \operatorname{supp} \lambda} \lambda_t \delta_t. \tag{4}$$

Через $P^\circ_{\mathrm{dim}}(\Omega)$ обозначим множество сеточных функций $\lambda : \Omega \to \mathbb{R}$, носитель которых состоит из конечного числа точек и $\phi_\lambda \in P^\circ$.

Функцию $G(s,t)$ называют *условно положительно определенной относительно* P, если $\phi_\lambda \phi_\lambda G > 0$ для всех $\lambda \in P^\circ_{\mathrm{dim}}(\Omega) \setminus \{0\}$ (см., напр., [8]). Функцию $G(s,t)$ называют *условно симметричной относительно* P, если $\phi_\lambda \phi_\mu G = \phi_\mu \phi_\lambda G$ для всех $\lambda, \mu \in P^\circ_{\mathrm{dim}}(\Omega)$ (см. [7]).

Ясно, что из свойств (а), (б) воспроизводящего ядра следует его условная положительная определенность и симметричность относительно P. Верно и обратное [7, 9]: если $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ — некоторое множество и функция $G(s,t) : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$ условно положительно определена и симметрична относительно некоторого конечномерного подпространства функций P, определенных в Ω, то существует гильбертово пространство функций над Ω, снабженное ограниченной гильбертовой полунормой, относительно которой функция $G(s,t)$ будет воспроизводящим ядром.

Такое функциональное пространство, соответствующее тройке $\langle G, P, \Omega\rangle$, называют естественным (native) пространством. Способ построения естественного пространства основан на пополнении пространства сплайнов S_{dim} по специальной норме, определяемой этой тройкой. Опишем идею построения естественного пространства в соответствии с [7].

Известно (см., напр., [3, 7]), что любой сплайн $\sigma \in S_{\mathrm{dim}}$ имеет единственное представление

$$\sigma(s) = \sigma(s;\lambda,p) = \sum_{t\in\operatorname{supp}\lambda} \lambda_t G(s,t) + p(s), \quad \lambda \in P^{\circ}_{\mathrm{dim}}(\Omega), \quad p \in P. \tag{5}$$

Для любой пары сплайнов $\sigma_1(s) = \sigma(s;\lambda_1,p_1)$, $\sigma_2(s) = \sigma(s;\lambda_2,p_2)$ вида (5) имеем

$$\pi(\sigma_1,\sigma_2) = \phi_{\lambda_1}\phi_{\lambda_2}G. \tag{6}$$

Тем самым скалярное произведение $\pi(x,y)$ определяется на S_{dim} через функцию G. По построению P — ядро полунормы, порождаемой скалярным произведением $\pi(x,y)$. Добавим к $\pi(x,y)$ дополнительное скалярное произведение

$$\rho(\sigma_1,\sigma_2) = \sum_{s\in\Delta} p_1(s)p_2(s), \tag{7}$$

где Δ — некоторый фиксированный L-набор узлов в Ω относительно P. Тогда скалярное произведение

$$(\sigma_1,\sigma_2) = \pi(\sigma_1,\sigma_2) + \rho(\sigma_1,\sigma_2)$$

порождает норму в S_{dim}, и пополнение S_{dim} по этой норме есть естественное пространство для $\langle G, P, \Omega\rangle$ с полунормой, порождаемой скалярным произведением $\pi(x,y)$.

Замечание 1. Из теоремы 1 следует, что если естественное пространство состоит из непрерывных функций, то оно определяется по $\langle G, P, \Omega\rangle$ единственным образом.

3. Применение воспроизводящих ядер

Пусть $\omega = \{t_1,\ldots,t_N\}$ и функции $u_1,\ldots,u_K$ образуют базис в P. Тогда сплайн (5), соответствующий сетке ω, принимает вид

$$\sigma(s) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j G(s,t_j) + \sum_{k=1}^{K} \mu_k u_k(s) \tag{8}$$

при условиях

$$\sum_{j=1}^{N} \lambda_j u_k(t_j) = 0, \quad k = 1,\ldots,K. \tag{9}$$

Пусть в узлах t_i заданы значения z_i интерполируемой функции. Тогда векторы неизвестных коэффициентов $\boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1, \ldots, \lambda_N)^\top$, $\boldsymbol{\mu} = (\mu_1, \ldots, \mu_K)^\top$ интерполяционного сплайна σ можно найти, решая систему линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix} \boldsymbol{G} & \boldsymbol{U} \\ \boldsymbol{U}^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\lambda} \\ \boldsymbol{\mu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{z} \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Здесь $\boldsymbol{G}$ — $N \times N$-матрица с коэффициентами $g_{ij} = G(t_i, t_j)$, $\boldsymbol{U}$ — $N \times K$-матрица с коэффициентами $u_{ik} = u_k(t_i)$, $\boldsymbol{z} = (z_1, \ldots, z_N)^\top$.

Невырожденность сетки ω означает, что $\operatorname{rank} \boldsymbol{U} = K$. При этих предположениях и при условии, что узлы t_i различны, система уравнений (10) однозначно разрешима. Пользуясь условной симметричностью и положительной определенностью воспроизводящего ядра относительно P, с помощью специальной замены переменных систему (10) можно свести к системе уравнений с симметричной, положительно определенной матрицей (см. [7]). При замене интерполяции на сглаживание получается система уравнений, аналогичная (10).

Вместо интерполяции по значениям функции в узлах сетки можно рассматривать интерполяцию по любому набору ограниченных линейных функционалов ϕ_i, $i = 1, \ldots, N$. Тогда представление (8) сплайна, соответствующего этому набору функционалов, и условия (9) принимают вид:

$$\sigma(s) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \phi_j G(s, \cdot) + \sum_{k=1}^{K} \mu_k u_k(s), \qquad \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \phi_j(u_k) = 0, \quad k = 1, \ldots, K.$$

Задача сплайн-интерполяции в этом случае также сводится к системе линейных уравнений, аналогичной (10).

Отметим, что пространство P можно расширить при тех же G и Ω, добавив в него произвольный набор линейно-независимых функций. При этом G также будет воспроизводящим ядром соответствующего естественного пространства функций над Ω. Это вытекает из следующей теоремы.

Теорема 2. *Пусть функция $G(s,t)$ условно положительно определена и симметрична в Ω относительно P. Пусть Q — конечномерное пространство функций над Ω, содержащее P. Тогда функция $G(s,t)$ условно положительно определена и симметрична в Ω относительно Q.*

Доказательство следует из очевидного соотношения $Q^\circ_{\dim}(\Omega) \subset P^\circ_{\dim}(\Omega)$.

Замечание 2. В практических расчетах обычно в качестве P используют семейство полиномов некоторой степени $k \geq 0$, а в качестве Q — семейство полиномов более высокой степени (см., напр., [10, 11]). Однако из этой теоремы следует, что можно расширять базис P любыми дополнительными функциями, а не только мономами более высокой степени. Для однозначной разрешимости задачи сплайн-аппроксимации конечно важна невырожденность сетки узлов интерполяции относительно расширенного подпространства Q.

Идея расширения пространства P дополнительными неполиномиальными базисными функциями возникла в методах кригинга, используемых в геостатистике (см., напр., [4]). Связь сплайнов и кригинга хорошо известна [12]. По сути, метод универсального кригинга решает двойственную задачу к задаче сплайн-интерполяции, в которой требуется приблизить линейный функционал δ_s с помощью линейных функционалов $\{\delta_t,\ t \in \omega\}$.

Матрица получающейся при этом системы уравнений будет сопряженной к матрице системы (10) (см. также [13, 14]).

Функцию $p \in P$ в представлении (5) в методах кригинга называют *трендом сплайна.* Добавляя в базис тренда дополнительные функции, описывающие особенности поведения интерполируемых данных, можно, например, построить сплайн, свободный от паразитических осцилляций, возникающих из-за резкого изменения градиента функции, если дополнительные функции хорошо приближают этот градиент. С помощью этого приема можно также аппроксимировать сплайном со специальным трендом функции с разрывами первого рода. В соответствии с терминологией, используемой в кригинге, сплайн со специальным трендом назовем *сплайном с внешним дрейфом.*

Система уравнений сплайн-интерполяции с внешним дрейфом аналогична системе (10). Отличия заключаются только в матрице $\boldsymbol{U}$, в которой добавлены столбцы, соответствующие значениям функций дополнительного базиса в узлах сетки. Аналогично можно строить сглаживающий сплайн с внешним дрейфом.

Воспроизводящие ядра можно легко комбинировать, получая из них новые воспроизводящие ядра.

Теорема 3. *Пусть функции $G_i(s,t) : \Omega \times \Omega \to \mathbb{R}$ условно положительно определены и симметричны относительно конечномерных пространств функций P_i в $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $i = 1, \ldots, R$. Тогда функция*

$$G(s,t) = \sum_{i=1}^{R} c_i G_i(s,t), \quad c_i > 0, \tag{11}$$

условно положительно определена и симметрична относительно суммы подпространств $P = \sum_{i=1}^{R} P_i$.

Доказательство. Из теоремы 2 следует, что функции G_i условно положительно определены и симметричны относительно P. Отсюда функция G условно симметрична относительно P. Поскольку коэффициенты c_i положительны, то функция G условно положительно определена относительно P. □

4. Радиальные воспроизводящие ядра

Большинство известных на данный момент воспроизводящих ядер получены для случая $\Omega = \mathbb{R}^d$ и являются радиальными функциями, т. е. $G(s,t) = g(|s-t|)$, где $g(r)$ — функция скалярного аргумента, заданная на полуоси $[0, \infty)$, $|s - t|$ — евклидово расстояние между точками s и t. Симметричность таких функций очевидна.

Если пространство P состоит из полиномов степени, меньшей $m \in \mathbb{Z}_+$, то функцию $G(s,t)$ (а также функцию $g(r)$, если $G(s,t) = g(|s-t|)$), условно положительно определенную относительно P, также называют *условно положительно определенной порядка m* (см., напр., [8]). При $m = 0$ получаем $P = \{0\}$ и функция $G(s,t)$ $(g(r))$ положительно определена.

Порядок положительной определенности радиальной базисной функции определяет минимальный базис тренда P в формулах (8), (9). При $m = 0$ можно строить сплайн без тренда. Если же $m > 0$, то тренд P должен содержать полиномы степени $m - 1$. Как было отмечено в замечании 2, минимально необходимый базис тренда можно расширить, например, увеличив степень полиномов в нем или добавив к базису произвольные неполиномиальные линейно-независимые функции. Выбор тренда определяет поведение сплайнов на бесконечности, т. е. если тренд отсутствует и радиальная базисная функция положительно определена, то сплайн на бесконечности убывает к нулю. Задавая константу в качестве тренда при $m \leq 1$, получаем на бесконечности константу, в случае линейного тренда при $m \leq 2$ — линейную функцию и так далее.

В таблице приведены примеры условно положительно определенных в $\mathbb{R}^d$ функций при любом $d \in \mathbb{N}$. К этому списку следует также добавить *логарифмический мультиквадрик* $(-1)^{\beta+1}(r^2+c^2)^\beta \ln(r^2+c^2)$, $\beta \in \mathbb{Z}_+$, $c \neq 0$, используемый в DMM-сплайнах [10], порядок положительной определенности которого равен $\beta + 1$.

$g(r)$	Ограничения	Порядок	Ссылка
$(-1)^{[\beta]+1}r^{2\beta}$	$\beta > 0,\ \beta \notin \mathbb{N}$	$[\beta]+1$	Ядро Дюшона [15] или степенное ядро [16]
$(-1)^{\beta+1}r^{2\beta}\ln r$	$\beta \in \mathbb{N}$	$\beta+1$	Ядро Дюшона [15] или логарифмическое ядро [16]
$(-1)^{[\beta]+1}(r^2+c^2)^\beta$	$\beta > 0,\ \beta \notin \mathbb{N}$	$[\beta]+1$	Мультиквадрик (см., напр., [17, 18])
$(r^2+c^2)^\beta$	$\beta < 0,\ c \neq 0$	0	Обратный мультиквадрик (см., напр., [17, 18])
$e^{-\beta r^2}$	$\beta > 0$	0	Гауссиан

Условно положительно определенные в $\mathbb{R}^d$ радиальные базисные функции тесно связаны с вполне монотонными функциями.

Определение. Говорят, что функция $f : (0,\infty) \to \mathbb{R}$ вполне монотонна, если $f \in C^\infty(0,\infty)$ и $(-1)^n f^{(n)}(t) \geq 0$ для всех $n \in \mathbb{Z}_+$, $t > 0$.

Доказательство условной положительной определенности всех перечисленных выше функций можно получить с помощью теоремы Мичелли [8], приводимой здесь в формулировке [19] с небольшим упрощением (не рассматривается случай условной положительности).

Теорема 4 (Мичелли). *Пусть функция $f \in C^\infty(0,\infty)$ имеет конечный предел при $t \to 0$. Тогда функция $f(r^2)$ условно положительно определена порядка m в $\mathbb{R}^d$ для любого $d \in \mathbb{N}$ тогда и только тогда, если функция $(-1)^m f^{(m)}$ вполне монотонна и не является константой.*

Замечание 3. Ясно, что если все условия теоремы 4 выполнены, кроме существования конечного предела при $t \to 0$, то функция $f(r^2 + c^2)$, $c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$, будет условно положительно определена порядка m в $\mathbb{R}^d$ для любого $d \in \mathbb{N}$. Этот факт, например, отмечался в [20].

Рассмотрим параметрическое семейство функций

$$h_\nu(t) = t^{\nu/2} K_\nu(\sqrt{t}), \quad \nu \in \mathbb{R}, \quad t \in (0,\infty). \tag{12}$$

Здесь $K_\nu(x)$ — модифицированная функция Бесселя второго рода порядка ν. Функция $K_\nu(x)$ непрерывна на $(0,\infty)$, имеет особенность в нуле, положительна, монотонна и экспоненциально убывает к нулю при $x \to \infty$.

Известно (см., напр., [5]), что при $\nu = k - d/2 > 0$, $k \in \mathbb{N}$, функция $h_{k-d/2}(|s-t|^2)$ есть воспроизводящее ядро пространства Соболева $W_2^k(\mathbb{R}^d)$. Далее мы покажем, что параметр ν и размерность пространства d не связаны между собой, как и у других радиальных базисных функций, рассмотренных выше.

Теорема 5. *Справедливы следующие утверждения*:

(а) $h_\nu(t) = t^\nu h_{-\nu}(t)$ *для всех* $\nu \in \mathbb{R}$, $t \in (0, \infty)$;

(б) *функция* h_ν *имеет конечный предел* $h_\nu(0) = \Gamma(\nu)2^{\nu-1}$ *при* $t \to 0$ *и* $\nu > 0$;

(в) *функция* h_ν *вполне монотонна, причем*

$$h'_\nu(t) = -\frac{h_{\nu-1}(t)}{2} \quad \text{для всех } \nu \in \mathbb{R},\ t \in (0, \infty). \tag{13}$$

Доказательство. Утверждение (а) следует из равенства $K_\nu(z) = K_{-\nu}(z)$.

Утверждение (б) следует из асимптотической оценки $K_\nu(z) \sim \frac{\Gamma(\nu)}{2}\left(\frac{z}{2}\right)^{-\nu}$ при малых z и $\operatorname{Re}\nu > 0$ (см., напр., [21, п. 9.6.9]).

Утверждение (в) следует из формулы (13) и положительности функций h_ν. Для доказательства формулы (13) воспользуемся формулой Бассета для функций $K_\nu(z)$ при $\nu + \frac{1}{2} > 0$, $\operatorname{Re} z > 0$ (см., напр., [21, п. 9.6.25]):

$$K_\nu(z) = \frac{\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)(2z)^\nu}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} \int_0^\infty \frac{\cos u}{(u^2 + z^2)^{\nu+1/2}}\, du. \tag{14}$$

Формулу (13) докажем сначала для $\nu > 0$. С учетом (14)

$$h_\nu(t) = \frac{\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}(2t)^\nu \int_0^\infty \frac{\cos u}{(u^2 + t)^{\nu+1/2}}\, du, \quad \nu > 0.$$

Отсюда

$$\begin{aligned} h'_\nu(t) &= \frac{\Gamma\left(\nu + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} 2\nu(2t)^{\nu-1} \int_0^\infty \frac{\cos u}{(u^2 + t)^{\nu+1/2}}\, du - \frac{\Gamma\left(\nu + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)}(2t)^\nu \int_0^\infty \frac{\cos u}{(u^2 + t)^{\nu+3/2}}\, du \\ &= \nu t^{\nu/2-1} K_\nu(\sqrt{t}) - \frac{t^{(\nu-1)/2}}{2} K_{\nu+1}(\sqrt{t}) = \frac{t^{(\nu-1)/2}}{2}\left(\frac{2\nu}{\sqrt{t}} K_\nu(\sqrt{t}) - K_{\nu+1}(\sqrt{t})\right) \\ &= -\frac{t^{(\nu-1)/2}}{2} K_{\nu-1}(\sqrt{t}) = -\frac{h_{\nu-1}(t)}{2}. \end{aligned} \tag{15}$$

В предпоследнем равенстве в (15) мы воспользовались рекуррентным соотношением

$$K_{\nu-1}(z) - K_{\nu+1}(z) = -2\nu z^{-1} K_\nu(z).$$

Теперь докажем формулу (13) при $\nu \le 0$. Учитывая тождество $K_\nu(z) = K_{-\nu}(z)$ и (14),

$$h_\nu(t) = t^{\nu/2} K_{-\nu}(\sqrt{t}) = \frac{\Gamma\left(-\nu + \frac{1}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} 2^{-\nu} \int_0^\infty \frac{\cos u}{(u^2 + t)^{-\nu+1/2}}\, du, \quad \nu \le 0.$$

Отсюда

$$h'_\nu(t) = -\frac{\Gamma\left(-\nu + \frac{3}{2}\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right)} 2^{-\nu} \int_0^\infty \frac{\cos u}{(u^2 + t)^{-\nu+3/2}}\, du = -\frac{h_{\nu-1}(t)}{2}. \qquad \square$$

Следствие. *Функция* $h_\nu(r^2+c^2)$ *положительно определена в* $\mathbb{R}^d$ *для любого* $d \in \mathbb{N}$ *при условиях*: $c \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ *при* $\nu \le 0$ *и* $c \in \mathbb{R}$ *при* $\nu > 0$.

Следующий пример функции, порождающей воспроизводящее ядро, применяется в *сплайне с натяжением* [6]. В цитируемой статье предлагается при построении сплайна в $\mathbb{R}^2$ использовать радиальную базисную функцию

$$g_1(r) = -\left(\ln\frac{r}{2} + \gamma + K_0(r)\right), \tag{16}$$

где $\gamma = 0.577215\ldots$ — константа Эйлера. Добавка $\ln(r/2)+\gamma$ компенсирует особенность функции K_0 в нуле и подобрана так, чтобы выполнялось $g_1(0)=0$.

Теорема 6. *Функция* $g_1(r)$ *условно положительно определена порядка* 1 *в* $\mathbb{R}^d$ *для любого* $d \in \mathbb{N}$.

Доказательство. Полагая $f(t) \equiv g_1(\sqrt{t})$ и учитывая, что $K_0(\sqrt{t}) = h_0(t)$, с помощью утверждений (в) и (а) теоремы 5 выводим

$$f^{(n)}(t) = \frac{(-1)^n(n-1)!}{2t^n} - (-1)^n\frac{h_{-n}(t)}{2^n} = \frac{(-1)^n}{(2t)^n}\big((n-1)!\,2^{n-1} - h_n(t)\big).$$

Неотрицательность выражения в скобках следует из утверждения (б) теоремы 5 и убывания функции h_n ($h_n'(t) < 0$). Отсюда функция $(-f'(t))$ вполне монотонна. □

Рассмотрим еще один пример функции, порождающий воспроизводящее ядро *регуляризованного сплайна*, также приведенный в [6][1]:

$$g_2(r) = \frac{r^2}{4}\ln\frac{r}{2} + \left(\ln\frac{r}{2} + \gamma + K_0(r)\right). \tag{17}$$

Теорема 7. *Функция* $g_2(r)$ *условно положительно определена порядка* 2 *в* $\mathbb{R}^d$ *для любого* $d \in \mathbb{N}$.

Доказательство. Полагая $f(t) \equiv g_2(\sqrt{t})$, получаем следующее выражение для производных функции f при $n \ge 2$:

$$\begin{aligned} f^{(n)}(t) &= (-1)^n\frac{(n-2)!}{8t^{n-1}} - \frac{(-1)^n}{(2t)^n}\big((n-1)!\,2^{n-1} - h_n(t)\big) \\ &= \frac{(-1)^n}{t^n}\left[\frac{t(n-2)!}{8} - \frac{1}{2^n}\big((n-1)!\,2^{n-1} - h_n(t)\big)\right]. \end{aligned} \tag{18}$$

С учетом утверждений (б), (в) теоремы 5 при $n \ge 2$ справедлива оценка

$$h_n(t) \ge h_n(0) + th_n'(0) = (n-1)!\,2^{n-1} - t(n-2)!2^{n-3}.$$

Подставляя эту оценку в (18), получаем, что выражение в квадратных скобках не отрицательно. □

[1]Между формулой (17) и радиальной базисной функцией регуляризованного сплайна из [6] есть несколько несущественных отличий: параметр τ положен равным 1, а также отброшен член вида $a+br^2$, который не влияет на порядок условной положительной определенности данной функции и, с учетом условий ортогональности (9), уходит в тренд сплайна.

Благодарности. Авторы выражают благодарность А.Ю. Бежаеву за полезные замечания, а также благодарят анонимного рецензента за кропотливую работу по рецензированию статьи.

Литература

1. **Aronszajn N.** Theory of reproducing kernels // Trans. Amer. Math. Soc. — 1950. — Vol. 68, № 1–3. — P. 337–404.
2. **Atteia M.** Fonctions “spline” et noyaux reproduissants d’Aronszain–Bergman // RAIRO. — 1970. — Vol. 4, № 3. — P. 31–43.
3. **Bezhaev A.Yu.** Reproducing mappings and vector spline-functions // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 2. — P. 91–109.
4. **Dubrule O.** Geostatistics for Seismic Data Integration in Earth Models. — Tulsa: Society of Exploration Geophysicists & European Association of Geoscientists and Engineers, 2003; О. Дюбрул. Использование геостатистики для включения в геологическую модель сейсмических данных. — EAGE, 2002.
5. **Bozzini M., Rossini M., and Schaback R.** Generalized Whittle–Matérn and polyharmonic kernels // Adv. Comput. Math. — August 2012. — doi:10.1007/s10444-012-9277-9.
6. **Mitáš L., Mitášová H.** General variational approach to the interpolation problem // Comput. Math. Appl. — 1988. — Vol. 16, № 12. — P. 983–992.
7. **Роженко А.И.** Теория и алгоритмы вариационной сплайн-аппроксимации / А.М. Мацокин. — Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2005.
8. **Micchelli C.A.** Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions // Constr. Approx. — 1986. — Vol. 2. — P. 11–22.
9. **Madych W.R., Nelson S.A.** Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions II // Math. Comput. — 1990. — Vol. 54. — P. 211–230.
10. **Волков Ю.С., Мирошниченко В.Л.** Построение математической модели универсальной характеристики радиально-осевой гидротурбины // Сиб. журн. индустр. матем. — 1998. — Т. 1, № 1. — С. 77–88.
11. **Bogdanov V.V., Karsten W.V., Miroshnichenko V.L., and Volkov Yu.S.** Application of splines for determining the velocity characteristic of a medium from a vertical seismic survey // Cent. Eur. J. Math. — 2013. — Vol. 11, iss. 4. — P. 779–786.
12. **Matheron G.** Splines and kriging; their formal equivalence // Solutions Looking for Geological Problems / D.F. Merriam. — Syracuse NY, 1981. — P. 77–95. — (Syracuse Univ. Geology Contribution; 8).
13. **Бежаев А.Ю.** Приближение линейных функционалов и многомерная сплайн-интерполяция // ДАН. — 1989. — Т. 307, № 6. — С. 1293–1296; A.Yu. Bezhaev. Approximation of linear functionals and multidimensional spline-interpolation // Soviet Math. Dokl. — 1990. — Vol. 40, № 1. — P. 221–224.
14. **Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A.** Variational Theory of Splines. — New York: Kluwer Academic/Plenum Publishers, 2001.
15. **Duchon J.** Spline minimizing rotation-invariant seminorms in Sobolev spaces // Lect. Notes Math. — 1977. — Vol. 571. — P. 85–100.
16. **Игнатов М.И., Певный А.Б.** Натуральные сплайны многих переменных. — Л.: Наука. Ленингр. отд-ние, 1991.
17. **Hardy R.L.** Multiquadric equations of topography and other irregular surfaces // J. Geophys. Res. — 1971. — Vol. 76. — P. 1905–1915.

18. **Schaback R., Wendland H.** Characterization and construction of radial basis functions // Multivariate Approximation and Applications / N. Din, D. Leviatan, D. Levin, A. Pinkus, eds. — Cambridge: Cambridge University Press, 2001. — P. 1–24.

19. **Wedland H.** Scattered Data Approximation. — Cambridge: Cambridge University Press, 2005. — (Cambridge Monographs on Appl. and Comput. Math.; 17).

20. **Buhmann M.D.** Radial Basis Functions: Theory and Implementation. — Cambridge: Cambridge University Press, 2004. — (Cambridge Monographs on Appl. and Comput. Math.; 12).

21. Справочник по специальным функциям с формулами, графиками и математическими таблицами / Пер. с англ. под ред. В.А. Диткина и Л.Н. Кармазиной; Под ред. М. Абрамовица и И. Стиган. — М.: Наука, 1979; Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables / M. Abramowitz, I.A. Stegun, eds. — New York: Dover Publications, 1972.

Поступила в редакцию 13 ноября 2012 г.,
в окончательном варианте 22 марта 2013 г.