Вычислительные технологии **Том 9, № 4, 2004**

ВЫПУКЛАЯ КВАДРАТИЧНАЯ АППРОКСИМАЦИЯ

С. Е. Михеев
Санкт-Петербургский государственный университет, Россия
e-mail: him2@mail.ru

If a sum of quadratic deviations of parameters of a convex quadratic approximation (CQA) from the parameters of an unconditional quadratic approximation (UCA) is selected as a quality criteria of CQA, then the best CQA, according to this criterion, may be constructed in two finite stages. At first, one finds the best UQA, according to its own criteria. Then, the finite algorithm finds (in the convex cone of positively semi definite matrix) the element that is closest to the matrix of quadratic form in UQA, which is a quadratic part of the best CQA. The linear part of the best CQA coincides with the linear part of the best UQA. Validation of the algorithm is presented. Dependence of the node choice on the best CQA is investigated.

Введение

Требование выпуклости принципиально, когда известно, что исходная функция выпукла. Невыпуклость аппроксимации тогда однозначно свидетельствует о ее низком качестве. Бывают и иные причины добиваться выпуклости аппроксимации.

Традиционный подход к поиску *хорошей* выпуклой квадратичной аппроксимации (ВКА) состоит в использовании какого-либо удобного критерия качества, например того, на котором основан метод наименьших квадратов (МНК), плюс дополнительное условие выпуклости результата. Однако если безусловная оптимизация аппроксимации по МНК для любого интерполирующего агрегата сводится к решению системы линейных уравнений, то сочетание МНК с условием выпуклости образует непростую нелинейную программу. В [1] для нее был предложен итеративный алгоритм с решением полной проблемы собственных чисел и векторов на каждом шаге. В [2] для нее приводится итеративный алгоритм, основанный на других идеях, с несколько меньшей, но все еще значительной трудоемкостью.

При полном уважении к указанным алгоритмам, а также к другим поискам более эффективных алгоритмов условной минимизации связки МНК + выпуклость здесь предлагается иное понимание того, что есть “хорошая ВКА”. А именно, за критерий качества ВКА принимается минимальность уклонения ее параметров от параметров безусловной квадратичной аппроксимации, наилучшей согласно какому-либо (например, по безусловному МНК) критерию.

Понятно, что определение лучшего решения из двух наилучших, полученных согласно различным критериям, лишено смысла. Это относится и к различным ВКА, наилучшим согласно различным критериям. То есть можно утверждать, что они *равноправны*.

1. Выбор критерия качества

Пусть известны значения $y_1, ..., y_s$ вещественной скалярной функции $f(x)$, заданной в n-мерном векторном пространстве C^n над полем комплексных или вещественных чисел в узлах $x^1, ..., x^s$, и интерполяционный агрегат является квадратичной вещественной функцией:

$$\widetilde{f}(\check{H}, x) = \check{x}^* \check{H} \check{x}, \quad \check{x} = \begin{pmatrix} 1 \\ x \end{pmatrix}, \quad \check{H} = \begin{pmatrix} h_{00} & h_0 \\ h_0^* & H \end{pmatrix}, \tag{1}$$

где * обозначает операцию транспонирования и комплексного сопряжения; h_{00} — вещественное число, h_0 — n-мерная строка; H — эрмитова матрица размером $[n \times n]$: $H^* = H$. Когда все узлы принадлежат вещественному пространству, все параметры интерполяционного агрегата тоже полагаются вещественными, в этом случае в (1) операция * сводится к транспонированию, а эрмитовости соответствует симметричность.

Насколько общим является агрегат вида (1)? В вещественном пространстве

$$\widetilde{f}(\check{H}, x) \equiv h_{00} + 2h_0 + x^{\mathrm{T}} H x \tag{2}$$

с вещественными коэффициентами, как известно, описывает все квадратичные функции.

Рассмотрим комплексный случай.

Определение 1. Назовем вещественной квадратичной функцией от комплексного аргумента $x \in C^n$ функцию вида

$$\widetilde{f}(x) = v_{00} + v_0 \begin{pmatrix} \operatorname{Re} x \\ \operatorname{Im} x \end{pmatrix} + (\operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} \;\; \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}})\, V \begin{pmatrix} \operatorname{Re} x \\ \operatorname{Im} x \end{pmatrix}, \tag{3}$$

здесь Re и Im — операции выделения вещественной и мнимой частей; v_{00} — вещественное число; v_0 — вещественная строка длинной $2n$; V — вещественная симметричная матрица размером $[2n \times 2n]$.

Агрегат (3) зависит от $(2n+1)(n+1)$ вещественных параметров. Вещественная часть агрегата (1) зависит от $(n+1)(n+2)/2$ параметров, в его мнимой части — от $n(n+1)/2$ параметров, т. е. агрегат (1) описывается в общей сложности $(n+1)^2$ вещественными параметрами. Следовательно, (1) беднее (3) на $n(n+1)$ вещественных параметра.

Закрывает вопрос об общности в комплексном случае

Теорема 1. *Агрегат (1) является частным случаем агрегата (3).*

Доказательство. Пусть имеется агрегат (1). Положим $v_{00} = h_{00}$. Сделаем преобразования:

$$x^* h_0^* + h_0 x = \operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} \operatorname{Re} h_0^{\mathrm{T}} - \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}} \operatorname{Im} h^{\mathrm{T}} + \operatorname{Re} h_0 \operatorname{Re} x - \operatorname{Im} h_0 \operatorname{Im} x =$$
$$= 2 \operatorname{Re} h_0 \operatorname{Re} x - 2 \operatorname{Im} h_0 \operatorname{Im} x.$$

Положим $v_0 = 2\,(\operatorname{Re} h_0, \, -\operatorname{Im} h_0)$. Тогда

$$h_{00} + 2h_0 x = v_{00} + v_0 \begin{pmatrix} \operatorname{Re} x \\ \operatorname{Im} x \end{pmatrix},$$

и, таким образом, линейная часть агрегата (1) представлена в виде линейной части агрегата (3). (Заметим, что верно и обратное: произвольной линейной части агрегата (3) соответствует линейная часть того вида, который использован в агрегате (1).)

Установим соответствие квадратичных частей:

$$x^*Hx = \operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} H \operatorname{Re} x + \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}} H \operatorname{Im} x + i \operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} H \operatorname{Im} x - i \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}} H \operatorname{Re} x =$$

$$= \operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} \operatorname{Re} H \operatorname{Re} x + \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}} \operatorname{Re} H \operatorname{Im} x - \operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} \operatorname{Im} H \operatorname{Im} x + \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}} \operatorname{Im} H \operatorname{Re} x =$$

$$= (\operatorname{Re} x^{\mathrm{T}} \;\; \operatorname{Im} x^{\mathrm{T}}) \begin{pmatrix} \operatorname{Re} H & -\operatorname{Im} H \\ \operatorname{Im} H & \operatorname{Re} H \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \operatorname{Re} x \\ \operatorname{Im} x \end{pmatrix}.$$

□

Итак, задачи в комплексном пространстве C^n с квадратичными агрегатами общего вида (3) можно решать алгоритмами для вещественного пространства R^{2n}. В частном случае (1) будет предложен более экономный с точки зрения вычислений алгоритм.

Неформализованная задача (НФЗ). Найти параметры $\check{H}$, при которых агрегат $\widetilde{f}$ наилучшим образом приближает исходную функцию f.

Понятно, что НФЗ поставлена не полностью: не определен еще критерий качества, по величине которого можно судить, насколько хороша аппроксимация. Надо признать, что при выборе критерия качества чаще руководствуются не каким-то общим пониманием адекватности аппроксимации реалиям некоей исходной задачи, породившей НФЗ, а удобством использования критерия. Таков, например, критерий минимальности сумм квадратов отклонений значений $\widetilde{f}$ от значений f в узлах:

$$Q_1(\check{H}) = \sum_{i=1}^{s} \left| \widetilde{f}(\check{H}, x^i) - y_i \right|^d, \quad d = 2. \tag{4}$$

Его применение суть метода наименьших квадратов.

Замечание 1. Когда все узлы исходной задачи лежат в вещественном пространстве, допущение комплексности в интерполяционном агрегате (1) не дает возможности уменьшить критерий Q_1. В самом деле, мнимая компонента матрицы $\check{H}$, как легко проверить, не сказывается на значении $\widetilde{f}(x)$, если x вещественен. Отсюда — инвариантность Q_1 относительно мнимой компоненты.

Безусловная задача (БЗ). Найти параметры аппроксимации вида (1), доставляющие минимум критерию Q_1 из (4), при этом, если узлы комплексны, то матрица H должна быть эрмитова, если узлы вещественны, то матрица H должна быть вещественной симметричной.

Однако если отвлечься от трудностей использования и не иметь дополнительной информации о НФЗ, ничуть не хуже будут критерии с произвольной степенью $d \in (0, +\infty)$ вместо квадрата в (4) или же критерии, использующие отклонения точек $(n+1)$-мерного пространства $\bar{y}_i = (y_i, x^i)$ от графика интерполирующего агрегата.

Еще более отличные от Q_1 критерии качества можно предложить, когда НФЗ обременена дополнительными условиями. Опишем эти условия в виде $\check{H} \in \bar{K}$. Здесь в качестве $\bar{K}$ будет рассматриваться множество параметров, обеспечивающих выпуклость интерполяционного агрегата.

Формализованная задача (ФЗ(Q)). Найти матрицу $\check{H}$, обеспечивающую выпуклость аппроксимации вида (1) и доставляющую минимум критерию качества Q.

Обозначим решение БЗ через $\check{H}^{\text{БЗ}}$ и выберем критерием качества для формализованной задачи близость ее решения к $\check{H}^{\text{БЗ}}$. А понятие близости зададим с помощью шуровской (евклидовой) нормы матрицы: $\|A\|_E \doteq \sqrt{\sum_{ij} |a_{ij}|^2}$.

Определение 2. Расстояние между двумя матрицами есть $\rho(X, Y) = \|X - Y\|_E$.

Итак, критерием качества назначаем

$$Q_2(\check{H}) = \|\check{H} - \check{H}^{\text{БЗ}}\|_E.$$

Если критерий Q_1 понимается как *невязка*, то Q_2 можно было бы в какой-то степени отнести к *абсолютной погрешности*.

Замечание 2. Элемент h_{00}, строка h_0 и столбец h_0^* в матрице $\check{H}$, очевидно, никак не сказываются на выпуклости аппроксимации $\widetilde{f}$ из (1). Поэтому если $\check{H}$ есть решение ФЗ(Q_2), то $h_{00} = h_{00}^{\text{БЗ}}$ и $h_0 = h_0^{\text{БЗ}}$.

Выпуклость аппроксимации $\widetilde{f}$ из (1) эквивалентна положительной полуопределенности (ППО) матрицы H. Как известно, положительно полуопределенные матрицы образуют замкнутый выпуклый конус $\bar{K}$. Таким образом, согласно замечанию 2, когда известно решение БЗ, поиск решения ФЗ(Q_2) соответствует поиску матрицы $[n \times n]$ из $\bar{K}$, ближайшей относительно введенной метрики ρ к $H^{\text{БЗ}}$.

Заметим, что положительно определенные матрицы также образуют выпуклый конус K, но открытый в отличие от $\bar{K}$. Этим оправдывается требование именно простой выпуклости в ФЗ, а не строгой.

Интенсивное применение решения ФЗ(Q_1) как части общего алгоритма находят, например, в поиске экстремума нелинейной функции методом параболоидов [3] и методом последовательной оптимизации [1], где на итерациях строится квадратичная аппроксимация по значениям исходной целевой функции в выбранных узлах, после чего решаются квадратичные программы. ФЗ(Q_1) сама является нелинейной программой. Для ее решения известен ряд итеративных методов с существенной трудоемкостью [1, 4].

ФЗ(Q_2) на порядок проще решается конечным алгоритмом. Для его обоснования потребуются четыре теоремы.

2. Обоснование алгоритма

Теорема 2. *Введенное в определении 1 расстояние между матрицами инвариантно относительно пары унитарных преобразований над ними:*

$$\rho(U^*XU, U^*YU) = \rho(X, Y) \quad \forall X, Y.$$

Доказательство. Известно [5, с. 66], что шуровская норма инвариантна относительно унитарного преобразования, поэтому из задания здесь метрики через шуровскую норму следует

$$(\forall X, Y) \quad \rho(U^*XU, U^*YU) = \|U^*(XU - YU)\|_E \overset{[5]}{=} \|XU - YU\|_E =$$

$$= \|U^*(X^* - Y^*)\|_E \overset{[5]}{=} \|X^* - Y^*\|_E = \|X - Y\|_E = \rho(X, Y).$$

Определение 3. Расстояние $\rho(K, X)$ между вектором (матрицей) X и множеством K есть $\inf\limits_{Y \in K} \rho(Y, X)$.

Теорема 3. *Если K — конус ППО или конус положительно определенных матриц, то расстояние $\rho(K,A)$ между некоторой матрицей A и K инвариантно относительно пары унитарных преобразований U^*, U над матрицей A:*

$$\rho(K,A)=\rho(K,U^*AU).$$

Доказательство. По определению 3

$$\forall\varepsilon>0\ (\exists X\in K)\ \rho(K,A)+\varepsilon\geq\rho(X,A).$$

В силу теоремы 2, если U является унитарной матрицей, то $\rho(U^*XU,U^*AU)=\rho(X,A)$. Но матрица U^*XU принадлежит K, как подобная матрице X. Поэтому $\rho(K,U^*AU)\leq\rho(U^*XU,U^*AU)$. Откуда

$$\rho(K,U^*AU)\leq\rho(K,A)+\varepsilon. \tag{5}$$

Полагая $B=U^*AU$ и повторяя предыдущее рассуждение относительно B вместо A и U^* вместо U, получим $\rho(K,UBU^*)\leq\rho(K,B)+\varepsilon$, эквивалентное $\rho(K,A)\leq\rho(K,U^*AU)+\varepsilon$. Объединяя последнее с (5), получаем

$$\rho(K,U^*AU)-\varepsilon\leq\rho(K,A)\leq\rho(K,U^*AU)+\varepsilon.$$

Предельный переход по $\varepsilon\longrightarrow 0$ завершает доказательство.

Теорема 4. *Единственный ближайший к диагональной матрице D элемент из конуса $\bar{K}$ положительно полуопределенных матриц равен диагональной матрице D^+, получаемой из D заменой всех отрицательных элементов на нули. Иными словами, если $D=\mathrm{diag}_i(d_{ii})$, то*

$$\rho^2(K,D)=\rho^2(D^+,D)\equiv\sum_1^n(d_{ii}^+-d_{ii})^2,$$

где $D^+=\mathrm{diag}_i(d_{ii}^+)$, $d_{ii}^+=d_{ii}(1+\mathrm{sgn}\,d_{ii})/2$.

Доказательство. Так как конус $\bar{K}$ замкнут, в нем существует матрица X, которая реализует расстояние между D и $\bar{K}$. Рассмотрим диагональную подматрицу $X^d=\mathrm{diag}_i(x_{ii})$ матрицы X. Согласно необходимой части известного критерия [6], ППО матрицы X влечет $x_{ii}\geq 0$, $i=\overline{1,n}$. Согласно достаточной части того же критерия, неотрицательность элементов диагональной матрицы влечет ее ППО, следовательно, $X^d\in\bar{K}$. Но

$$\|X-D\|_E^2\equiv\sum_1^n(x_{ii}-d_{ii})^2+\sum_{i\neq j}x_{ij}^2\geq\|X^d-D\|_E^2.$$

Поскольку X является минимально удаленной от D ППО матрицей, а X^d тоже ППО, здесь возможно лишь равенство. Отсюда следует, что все недиагональные элементы матрицы X равны нулю, т. е. $X=X^d$. Таким образом, ближайшая к D ППО матрица находится среди диагональных.

Поиск решения квадратичной программы

$$\sum_1^n(x_{ii}-d_{ii})^2\ \longrightarrow\ \min_{x_{ii}\geq 0,\ i=\overline{1,n}}$$

незатруднителен. Минимум, очевидно, существует, единствен и достигается, когда $x_{ii}=d_{ii}^+, i=\overline{1,n}$, где $d_{ii}^+=d_{ii}(1+\mathrm{sgn}\,d_{ii})/2$.

Теорема 5. *Безусловная задача всегда имеет конечное решение.*

Доказательство элементарно.

3. Алгоритм

Шаг 1. Найти любым способом решение $\check{H}^{\text{БЗ}}$ безусловной задачи БЗ.

Шаг 2. Преобразовать унитарным преобразованием U подматрицу $H^{\text{БЗ}}$ матрицы $\check{H}^{\text{БЗ}}$ (см. (1)) к диагональному виду: $D = U^*HU$.

Шаг 3. Обнулить все отрицательные элементы в D, т. е. получить матрицу D^+.

Шаг 4. Найти $H^+ = UD^+U^*$.

Шаг 5. Заменить в $\check{H}^{\text{БЗ}}$ подматрицу $H^{\text{БЗ}}$ на H^+. То, что получится, и есть решение формализованной задачи с критерием Q_2 (ФЗ(Q_2)).

Замечание 3. Если все узлы вещественны, то подматрица $H^{\text{БЗ}}$ — вещественна, симметрична и к диагональному виду она приводится ортогональным преобразованием: на шаге 2 — $D = C^{\text{т}}HC$ а на шаге 3 — $H^+ = CD^+C^{\text{т}}$.

4. Единственность и узлы

Теорема 6. *Одному решению БЗ соответствует одно и только одно решение ФЗ(Q_2).*

Доказательство. Описанный выше алгоритм всегда реализуем и, согласно доказанным теоремам 2–5, он выдает одно из решений ФЗ(Q_2).

Покажем, что других решений нет. Допустим противное, есть два решения ФЗ(Q_2): $\check{H}$ и $\check{G}$. Согласно замечанию 2 они могут отличаться только своими подматрицами H и G размерности $[n \times n]$, стоящими в их правых нижних углах. Пусть БЗ имеет решение $\check{H}^{\text{БЗ}}$ с подматрицей $H^{\text{БЗ}}$. Тогда H и G суть проекции $H^{\text{БЗ}}$ на выпуклый конус K. Но, как известно, проекция на выпуклое множество единственна, следовательно, $H = G$ и $\check{H} = \check{G}$. □

Сама БЗ при неудачном выборе узлов может иметь бесконечное множество решений, что, как правило, является неудовлетворительным. Следовательно, число узлов s должно быть не менее числа параметров. Понятно, однако, что этого недостаточно.

Теорема 7. *Пусть интерполяционный агрегат имеет вид $\omega(x)g$, где g — k-мерный вещественный столбец, $x \in R^n$, $\omega(x)$ — k-мерная вещественная функция-строка, элементы которой зависят от x. Если среди узлов $x^1, ..., x^s$ есть подмножество $\mathcal{M}$, такое, что задача интерполяции на нем имеет единственное решение, то:*

— матрица при вторых производных функции

$$P(g) \doteq \sum_1^s \left(y_i - \omega(x^i)g\right)^2, \tag{6}$$

т. е. матрица $\Omega \doteq \sum_1^s \omega^T(x^i)\omega(x^i)$ положительно определена;

— минимайзер функции P существует, конечен и единствен.

Доказательство. 1. Положим, не умаляя общности, $\mathcal{M} = \{x^1, ..., x^m\}$ и разобьем P на два слагаемых:

$$P_1 \doteq \sum_1^m \left(y_i - \omega(x^i)g\right)^2, \quad P_2 \doteq \sum_{m+1}^s \left(y_i - \omega(x^i)g\right)^2.$$

Покажем сначала, что матрица $\Omega_1 \doteq \sum\limits_1^m \omega^{\text{т}}(x^i)\omega(x^i)$ положительно определена. Согласно условию этой теоремы существует единственное g^0, такое, что $P_1(g^0) = 0$. Так как

P_1 неотрицательно, g^0 является его минимайзером. Поэтому

$$0 = \nabla P_1(g^0) = -2\sum_1^m \left(y_i - \omega(x^i)g^0\right)\omega(x^i). \tag{7}$$

Пусть $g \neq g^0$, тогда в силу того что P_1 обнуляется только на g^0, из (7) следует

$$0 < P_1(g) = \sum_1^m \left(y_i - \omega(x^i)(g \pm g^0)\right)^2 =$$

$$= \sum_1^m \left(y_i - \omega(x^i)g^0\right)^2 + 2\sum_1^m \left(y_i - \omega(x^i)g^0\right)\omega(x^i)\left(g - g^0\right) + \sum_1^m \left(g - g^0\right)^{\mathrm{T}} \omega^{\mathrm{T}}(x^i)\omega(x^i)\left(g - g^0\right) =$$

$$= \sum_1^m \left(g - g^0\right)^{\mathrm{T}} \Omega_1 \left(g - g^0\right).$$

Так как g — произвольный отличный от g^0 столбец, это и подтверждает положительную определенность матрицы Ω_1.

Удостоверимся в положительной полуопределенности матрицы $\Omega_2 \doteq \sum_{m+1}^s \omega^{\mathrm{T}}(x^i)\omega(x^i)$. Очевидно,

$$P_2(g) = g^{\mathrm{T}}\Omega_2 g + \sum_{m+1}^s y_i^2 - 2\sum_{m+1}^s y_i\omega(x^i)g. \tag{8}$$

Если Ω_2 не положительно полуопределена, то найдется g^1, такое, что $(g^1)^{\mathrm{T}}\Omega_2 g^1 \doteq a < 0$. Тогда из (8) следует равенство

$$P_2(tg^1) = at^2 + \sum_{m+1}^s y_i^2 - 2\sum_{m+1}^s y_i\omega(x^i)g^1 t,$$

правая часть которого стремится к $-\infty$ при $t \to +\infty$. Но, так как $P_2(g) \geq 0$ для всех g, это невозможно.

Из положительной полуопределенности Ω_2 и положительной определенности Ω_1 следует

$$g^{\mathrm{T}}(\Omega_1 + \Omega_2)g \;\geq\; g^{\mathrm{T}}\Omega_1 g \;>\; 0,$$

т. е. Ω, равная $\Omega_1 + \Omega_2$, положительно определена.

2. Из п. 1 следует строгая выпуклость P. Разложив P на линейную функцию и квадратичную форму, имеющую вид $g^{\mathrm{T}}\Omega g$, легко заметить, что в силу положительной определенности Ω при $\|g\| \longrightarrow \infty$ имеет место $P \longrightarrow \infty$. Отсюда вытекают существование конечного минимайзера функции P и его единственность.

5. Выбор узлов

Рассмотренные выше задачи интерполяции могут являться частями более общих проблем, в которых перед определением параметров агрегата (1) предстоит еще выбрать узлы и вычислить в них значения исходной функции. Весьма часто из соображений, выходящих за рамки этой статьи, назначается некоторый начальный узел x^0, который должен быть включен в набор, постулируются ограничения сверху и иногда снизу на удаленность прочих узлов от x^0 и друг от друга и задается предельный уровень сплющенности набора.

Рассмотрим по отдельности действительный и комплексный случаи.

В вещественном пространстве R^n агрегат (1) зависит от $N = (n+1)(n+2)/2$ параметров. Следовательно, единственность решения задачи интерполяции агрегатом (1) на s узлах может быть обеспечена только при $s \geq N$. Понятно, однако, что этого недостаточно. Общее условие, которому должно подчиняться расположение узлов для гарантии единственности, громоздко аналитически, и из него затруднительно извлечь общие рекомендации по их выбору. Можно, однако, предложить конкретный вариант выбора $s = N$ узлов [4], обеспечивающих и единственность, и низкую чувствительность решения БЗ $\check{H}^{\text{БЗ}}$ к погрешностям в измерениях значений $y_1, ..., y_s$, который отличается удобством вычисления параметров агрегата.

1. Начальный узел x^0 получим из внешней задачи.

2. Также исходя из внешней задачи вычислим параметр $\varepsilon > 0$, характеризующий удаленность узлов друг от друга. Им может быть, например, половина радиуса минимального шара с центром в x^0, содержащего область, в которой намечено получать значения аппроксимации.

3. Назначим

$$\left.\begin{aligned} x^k &= x^0 + \varepsilon e^k \\ x^{n+k} &= x^0 - \varepsilon e^k \end{aligned}\right\} \quad k = \overline{1, n}. \tag{9}$$

4. Назначим

$$x^{2n+(2n-k)(k-1)/2+j-k} = x^0 + \varepsilon e^k + \varepsilon e^j, \quad k = \overline{1, n-1},\ j = \overline{k+1, n}. \tag{10}$$

Здесь e^r, $\ r = \overline{1, n}\ $ — единичные столбцы.

Если в значениях аппроксимируемой функции есть ошибка, то параметр ε должен существенно превосходить оценку этой ошибки.

Теорема 8. *Наличие в составе узлов подмножества вида* (9) *и* (10) *гарантирует существование и единственность решения безусловной задачи БЗ в вещественном пространстве.*

Действительно, положив

$$\omega(x) = (1\ \ x_1\ ...\ x_n\ \ x_1^2\ ...\ x_1 x_n\ \ x_2^2\ ...\ x_2 x_n\ ...\ x_3^2\ ...\ x_n^2),$$

$$g = (h_{00}\ \ h_0\ \ h_{11}\ \ 2h_{12}\ ...\ 2h_{1n}\ \ h_{22}\ ...\ 2h_{2n}\ ...\ h_{33}\ ...\ h_{nn}),$$

видим, что

$$P(g) \equiv \sum_1^s \left(y_i - \omega(x^i)g\right)^2 = \sum_1^s \left(y_i - h_{00} - h_0 x^i - (x^i)^{\mathrm{T}} H x^i\right)^2 =$$

$$= \sum_1^s \left(y_i - (\check{x}^i)^{\mathrm{T}} \check{H} \check{x}^i\right)^2 \equiv Q_1(\check{H}).$$

Таким образом, минимайзер функции Q_1, являющийся решением БЗ, совпадает с минимайзером функции P, который согласно теореме 6 существует, конечен и единствен. $\square$

Включение произвольных дополнительных узлов в совокупность (9), (10) может повысить чувствительность решения БЗ к погрешностям входных данных. Так, например, происходит, когда эти узлы располагаются в линейном многообразии, проходящем через x^0. Напротив, если они выбирались равномерно распределенными в шаре или на сфере с центром в x^0 радиусом ε, то чувствительность решения БЗ к погрешностям в численных экспериментах понижалась. А если исходная функция была квадратичной, то вычисляемые параметры аппроксимации стремились к параметрам исходной функции. То же происходило и при добавлении новых узлов сериями вида (9) + (10) с различными ε.

Из *комплексного пространства* C^n, когда к оптимизации предлагается квадратичный агрегат общего вида (3), следует перейти в вещественное пространство R^{2n}, после чего выбор $(2n+1)(n+1)$ вещественных узлов производится по схеме (9) + (10). Когда интерполирующий агрегат имеет вид (1), свойствами обеспечения единственности и удобством вычисления параметров агрегата обладает следующий выбор узлов.

Первые N узлов назначаются так же, как для вещественного случая (см. пп. 1–4, формулы (9), (10)). В прочие узлы вводится комплексное отклонение от начального. Пусть i — мнимая единица.

5. Назначим

$$x^{N+k-1} = x^0 + i\varepsilon e^k, \quad k = \overline{1,n}. \tag{11}$$

6. Назначим

$$x^{N+(2n-k+1)k/2+j-k-1} = x^0 + \varepsilon e^k + i\varepsilon e^j, \quad k = \overline{1,n-1},\ j = \overline{k+1,n}. \tag{12}$$

Покажем, что узлы (9)–(12) обеспечивают единственность решения задачи интерполяции агрегатом (1). Для этого опишем схему вычислений параметров этого агрегата, в которой единственность результата очевидна.

Подставляем узлы $x^k = x^0 + \varepsilon e^k,\ k = \overline{1,n}$, в агрегат (1) и выражаем коэффициент w_k при первой степени ε через параметры агрегата:

$$\widetilde{f}(\check{H}, x^k) = \widetilde{f}(\check{H}, x^0) + \left[\left((x^0)^* H + h_0\right) e^k + (e^k)^{\text{т}} \left(H x^0 + h_0^*\right)\right] \varepsilon + e^k H e^k \varepsilon^2, \tag{13}$$

$$w_k = \left((\bar{x}^0)^{\text{т}} H + (x^0)^{\text{т}} H^{\text{т}} + 2\operatorname{Re} h_0\right) e^k = \left((\bar{x}^0)^{\text{т}} H + (x^0)^{\text{т}} H^{\text{т}} + 2\operatorname{Re} h_0\right) e^k.$$

Используем $\bar{H} = H^{\text{т}}$:

$$w_k = 2\left((\operatorname{Re} x^0)^{\text{т}} \operatorname{Re} H + (\operatorname{Im} x^0)^{\text{т}} \operatorname{Im} H + \operatorname{Re} h_0\right) e^k. \tag{14}$$

Отметим, что при подстановке узлов $x^{n+k} = x^0 - \varepsilon e^k,\ k = \overline{1,n}$, коэффициенты для первой степени ε будут равны аналогичным для предыдущей серии, взятым с обратным знаком, т. е.

$$\widetilde{f}(\check{H}, x^{k+n}) = \widetilde{f}(\check{H}, x^0) - w_k \varepsilon + e^k H e^k \varepsilon^2. \tag{15}$$

Связи (13) и (15) образуют невырожденную линейную систему относительно w_k и h_{kk}:

$$\left.\begin{array}{rcl} \varepsilon^2 h_{kk} + \varepsilon w_k &=& y_k - y_0 \\ \varepsilon^2 h_{kk} - \varepsilon w_k &=& y_{n+k} - y_0 \end{array}\right\},\ k = \overline{1,n}. \tag{16}$$

Отсюда получаем диагональ матрицы H и набор вспомогательных параметров $w_1, \ldots, w_n$.

На узлах (10) получим уравнения для определения вещественных частей недиагональных элементов матрицы H:

$$\varepsilon^2 \operatorname{Re} h_{kj} + \varepsilon^2 h_{kk} + \varepsilon^2 h_{jj} + \varepsilon w_k + \varepsilon w_j = y_{2n+(2n-k)(k-1)/2+j-k} - y_0,$$

$$k = \overline{1, n-1},\ j = \overline{k+1, n}. \tag{17}$$

Подставим узлы x^{N+k-1} серии (11) в (1) и выразим коэффициенты u_k при первых степенях ε через параметры агрегата:

$$u_k = \left((x^0)^* H + h_0\right) e^k i - (e^k)^{\mathrm{T}} \left(H x^0 + h_0^*\right) i = \left[(\overline{x}^0)^{\mathrm{T}} H i - (x^0)^{\mathrm{T}} H^{\mathrm{T}} i + 2 \operatorname{Im} h_0\right] e^k =$$

$$= 2\left[\left(\operatorname{Im} x^0\right)^{\mathrm{T}} \operatorname{Re} H - \left(\operatorname{Re} x^0\right)^{\mathrm{T}} \operatorname{Im} H + \operatorname{Im} h_0\right]. \tag{18}$$

Значения параметров u_k определяются из линейного уравнения:

$$\varepsilon u_k + \varepsilon^2 h_{ii} = y_{N+k} - y_0. \tag{19}$$

Для определения $\operatorname{Im} H$ используются узлы (12):

$$\varepsilon^2(h_{kk} + h_{jj} - \operatorname{Im} h_{kj}) + \varepsilon w_k + \varepsilon u_j = y_{N+(2n-k+1)k/2+j-k-1} - y_0,$$

$$k = \overline{1, n-1}, j = \overline{k+1, n}. \tag{20}$$

Для определения $\operatorname{Re} h_0$ используется (14) и (18) — для определения $\operatorname{Im} h_0$.

В заключение вычисляется постоянная составляющая аппроксимации:

$$h_{00} = y_0 - h_0 x^0 - (x^0)^* H x^0. \tag{21}$$

Итак, схема вычислений параметров (1) при интерполяции по узлам (9)–(12) такова: решаются линейные уравнения в порядке (16), (17), (19), (20), (15), (18), затем применяется (21).

Замечание 4. В вещественном пространстве схема вычислений параметров (1) при интерполяции по узлам (9), (10) является подмножеством описанной выше схемы вычислений для комплексного пространства, а именно следует решить (16), (17), потом из (14), полагая $\operatorname{Im} H = 0$, найти $h_0 = \operatorname{Re} h_0$, затем применить (21).

Список литературы

[1] Пономарев В.М., Горичев Ю.В., Городецкий В.М. Последовательная оптимизация нелинейного закона управления // Нелинейная оптимизация систем автоматического управления / Под ред. В.М. Пономарева. М.: Машиностроение, 1970. С. 22–56.

[2] Михеев С. Е., Никольский А. М. Метод спуска в задачах аппроксимации // Процессы управления и устойчивость: Тр. XXX науч. конф. ф-та ПМ-ПУ СПбГУ. СПб., 1999. С. 119–125.

[3] Ортега Дж., Рейнболдт В. Итерационные методы решения нелинейных систем уравнений со многими неизвестными. М.: Мир, 1975. 558 с.

[4] Михеев С.Е. Нелинейные методы в оптимизации. СПб.: Изд-во СПб. ун-та, 2001. 276 с.

[5] Уилкинсон Дж.Х. Алгебраическая проблема собственных значений. М.: Наука, 1970. 564 с.

[6] Гантмахер Ф.Р. Теория матриц. М.: Наука, 1988. 548 с.

Поступила в редакцию 21 апреля 2004 г.