УДК 517.584+517.972.5+519.65

Сравнение радиальных базисных функций*

А.И. Роженко

Институт вычислительной математики и математической геофизики Сибирского отделения Российской академии наук, просп. Акад. М.А. Лаврентьева, 6, Новосибирск, 630090
E-mail: rozhenko@oapmg.sscc.ru

Роженко А.И. Сравнение радиальных базисных функций // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2018. — Т. 21, № 3. — С. 273–292.

В работе представлен обзор алгоритмов приближения функций многих переменных с помощью сплайнов, построенных на базисе из радиальных функций (РБФ-сплайнов). Подробно изложены алгоритмы интерполяции, сглаживания, выбора параметра сглаживания и регрессии с помощью сплайнов. В основе алгоритмов используется свойство условной положительной определенности радиальной базисной функции сплайна. Рассмотрено несколько семейств радиальных базисных функций, порождаемых с помощью условно вполне монотонных функций. Даны рекомендации по выбору базиса сплайна и по подготовке исходных данных для приближения с помощью РБФ-сплайна.

DOI: 10.15372/SJNM20180304

Ключевые слова: *сплайн, алгоритм, радиальная базисная функция, воспроизводящее ядро, тренд, внешний дрейф, интерполяция, сглаживание, регрессия, сплайн с натяжением, регуляризованный сплайн.*

Rozhenko A.I. A comparison of radial basis functions // Siberian J. Num. Math. / Sib. Branch of Russ. Acad. of Sci. — Novosibirsk, 2018. — Vol. 21, № 3. — P. 273–292.

A survey of algorithms for approximation of multivariate functions with radial basis functions (RBF) splines is presented. Algorithms of interpolation, smoothing, selecting the smoothing parameter, and regression with splines are described in detail. These algorithms are based on the properties of conditional positive definiteness of the spline radial basis function. Several families of the radial basis functions generated by means of conditionally complete monotone functions are considered. Recommendations for the selection of the spline basis and on the preparation of the initial data for approximation with the help of the RBF spline are given.

Keywords: *spline, algorithm, radial basis function, reproducing kernel, trend, external drift, interpolation, smoothing, regression, tension spline, regularized spline.*

Введение

В работе речь пойдет о методах приближения функции многих переменных, значения которой известны в конечном наборе узлов измерения. Другими словами, в некоторой области $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \in \mathbb{N}$, задана нерегулярная сетка узлов, в которой известны значения приближаемой функции. Значения могут быть замерены с ошибкой, а значит, аппроксимирующая функция не обязана в точности воспроизводить (интерполировать) сеточные данные, т. е. речь в этом случае идет о методах сглаживания данных.

В качестве аппарата приближения функций мы будем использовать сплайны, построенные с использованием некоторой РБФ. При выполнении определенных условий

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 15-07-07530).

(см. далее) РБФ является воспроизводящим ядром некоторого (полу)гильбертова пространства, называемого естественным пространством (native space)[1]. Этот факт дает теоретическое обоснование сходимости РБФ-сплайнов при сгущении сеток, а исследование свойств РБФ позволяет сделать выводы о гладкости функций естественного пространства и получить оценки сходимости РБФ-сплайнов. Наличие естественного пространства позволяет также рассматривать задачу сглаживания и выбирать параметр сглаживания на основе естественного критерия, когда квадратичное отклонение значений сглаживающего сплайна в узлах сетки от измеренных значений достигает заданного порога ошибки.

В этом обзоре мы ограничимся только теми алгоритмами приближения сплайнами, в разработку которых автор внес определенный вклад. Другие алгоритмы приближения, а также всесторонний анализ теоретических аспектов аппроксимации многомерных данных, приведены, например, в [3].

1. РБФ-сплайн

Будем строить приближение в виде РБФ-сплайна (см., например, [4, 5]):

$$\sigma(x) = \sum_{i=1}^{N} \lambda_i g(x, x_i) + p(x). \tag{1.1}$$

Здесь

- $x_i \in \mathbb{R}^d$, $i = 1, \dots, N$, — *опорные узлы* сплайна,
- $g(x, y) = \phi(|x-y|)$ — *радиальная базисная функция* ($\phi \in C[0,\infty)$ — функция одного переменного),
- $|x - y|$ — евклидово расстояние между точками $x, y \in \mathbb{R}^d$,
- $\lambda_i \in \mathbb{R}$ — коэффициенты сплайна,
- $p \in \mathcal{P}$, где $\mathcal{P}$ — заданное конечномерное пространство функций в $\mathbb{R}^d$, называемое *трендом* сплайна. Обычно $\mathcal{P}$ — пространство алгебраических полиномов некоторой степени.

В методах интерполяции и сглаживания сетка опорных узлов совпадает с узлами измерения, но в общем случае эти сетки различны. Например, в методе сплайн-регрессии [6] сетка опорных узлов не связана с сеткой узлов измерения, а в методе сглаживания с двусторонними ограничениями [7, 8] опорные узлы сплайна являются подсеткой узлов измерения.

Для получения замкнутой системы линейных уравнений потребуем дополнительно, чтобы коэффициенты λ_i из (1.1) аннулировали тренд сплайна:

$$\sum_{i=1}^{N} \lambda_i p(x_i) = 0 \qquad \forall\, p \in \mathcal{P}. \tag{1.2}$$

Тогда, выбрав некоторый базис $u_i \in \mathcal{P}$, $i = 1, \dots, K$, $K = \dim \mathcal{P}$, и записывая функцию тренда p из (1.1) в виде:

$$p(x) = \sum_{i=1}^{K} \mu_i u_i(x),$$

[1] Термин “native space” был, по-видимому, введен в [1], а способ построения естественного пространства был предложен в [2].

при условиях интерполяции $\sigma(x_i) = z_i$, $i = 1, \dots, N$, получаем систему линейных уравнений:

$$\begin{pmatrix} G & U \\ U^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{1.3}$$

Здесь G — $N \times N$-матрица с коэффициентами $g_{ij} = g(x_i, x_j)$, U — $N \times K$-матрица с коэффициентами $u_{ik} = u_k(x_i)$, $\lambda = (\lambda_1, \dots, \lambda_N)^\top$ и $\mu = (\mu_1, \dots, \mu_K)^\top$ — векторы неизвестных коэффициентов сплайна, $z = (z_1, \dots, z_N)^\top$ — вектор значений функции в узлах измерения.

Мы будем предполагать, что все узлы x_i сетки измерений различны, что необходимо для существования решения задачи (1.3)[2]. Для однозначной разрешимости задачи (1.3) необходимо также выполнение условий $N \geq K$ и $\operatorname{rank} U = K$. Эти условия будут и достаточными, если функция $g(x, y)$ удовлетворяет условиям, изложенным далее.

2. Условная положительная определенность

Функцию $g : \mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}$ называют *условно положительно определенной* в $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ относительно $\mathcal{P}$, если для любой конечной сетки различных точек $y_i \in \Omega$, $i = 1, \dots, M$, $M \in \mathbb{N}$,

$$\sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{M} \xi_i \xi_j g(y_i, y_j) > 0, \tag{2.1}$$

где $\{\xi_i \in \mathbb{R},\ i = 1, \dots, M\}$ — все нетривиальные наборы значений, удовлетворяющие условиям

$$\sum_{i=1}^{M} \xi_i p(y_i) = 0 \quad \forall\, p \in \mathcal{P}. \tag{2.2}$$

Функция $g(x, y)$ не обязательно симметрична относительно x и y. Например, при $d = 1$ функция $g(x, y) = (-1)^m (x - y)_+^{2m-1}$ условно положительно определена относительно полиномов степени $m - 1$, но не симметрична. Здесь и далее $(t)_+ = \max(t, 0)$.

При отсутствии симметричности можно говорить об *условной симметричности* функции g в Ω относительно $\mathcal{P}$:

$$\sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{M} \xi_i \xi_j g(y_i, y_j) = \sum_{i=1}^{M} \sum_{j=1}^{M} \xi_i \xi_j g(y_j, y_i) \tag{2.3}$$

при условиях (2.2).

При наличии условной положительной определенности и условной симметричности можно утверждать, что функция $g(x, y)$ служит *воспроизводящим ядром* некоторого полугильбертова пространства [9, 10], которое называют естественным пространством для тройки $\langle g, \Omega, \mathcal{P} \rangle$ и обозначают в случае $g(x, y) = \phi(|x - y|)$ как $\mathcal{N}_\phi(\Omega, \mathcal{P})$[3].

Идея построения естественного пространства весьма проста: на подпространстве всех сплайнов вида (1.1), (1.2), удовлетворяющих условию $p(x) \equiv 0$ и построенных на всевозможных конечных сетках опорных узлов из Ω, билинейная форма

[2]Точнее, при наличии совпадающих узлов измеренные значения в них также должны совпадать. В противном случае система (1.3) не будет иметь решений. Но в такой ситуации совпадающие узлы измерений можно просто отбросить.

[3]В [3] и других источниках используется упрощенное обозначение $\mathcal{N}_\phi(\Omega)$, в котором опущен второй параметр.

$$(\sigma_1, \sigma_2)_G = \sum_{i=1}^{N_1} \sum_{j=1}^{N_2} \lambda_i^{(1)} \lambda_j^{(2)} g(x_i^{(1)}, x_j^{(2)})$$

будет положительно определена и симметрична в силу условий (2.1)–(2.3). Выполняя пополнение линейного пространства таких сплайнов по норме $\|\sigma\|_G = (\sigma, \sigma)_G^{1/2}$, получаем гильбертово пространство, которое обозначим $G_g(\Omega, \mathcal{P})$. Тогда $\mathcal{N}_g(\Omega, \mathcal{P}) = G_g(\Omega, \mathcal{P}) + \mathcal{P}$ — искомое естественное полугильбертово пространство, причем $\|\cdot\|_G$ — полунорма в нем с ядром $\mathcal{P}$.[4]

Отсюда следует, что матрица G из (1.3) будет симметрична и положительно определена на подпространстве векторов λ, удовлетворяющих условию $U^\top \lambda = 0$. На этой идее основан алгоритм построения сплайна методом преобразования системы уравнений (1.3) к системе с симметричной положительно определенной матрицей, известный также как алгоритм Анселона–Лорана [11, 13].

Поскольку g — воспроизводящее ядро функционального пространства $\mathcal{N}_g(\Omega, \mathcal{P})$ в полунорме $\|\cdot\|_G$, сплайн (1.1), (1.2) с коэффициентами, удовлетворяющими системе уравнений (1.3), минимизирует полунорму $\|\cdot\|_G$ на множестве всех функций $f \in \mathcal{N}_g(\Omega, \mathcal{P})$, удовлетворяющих условиям интерполяции $f(x_i) = z_i$, $i = 1, \ldots, N$ (см., например, [9, 10]).

Условие минимальности полунормы $\|\cdot\|_G$ на сплайнах позволяет также сформулировать задачу построения сглаживающего сплайна:

$$\sigma_\alpha = \arg \min_{f \in \mathcal{N}_g(\Omega, \mathcal{P})} \left(\alpha \|f\|_G^2 + \sum_{i=1}^{N} \frac{(f(x_i) - z_i)^2}{p_i} \right). \tag{2.4}$$

Здесь $p_i > 0$ — некоторые заданные весовые параметры, пропорциональные квадрату ошибки измерения значений z_i в узлах сетки, а $\alpha > 0$ — параметр сглаживания, который можно варьировать. В предположении, что система (1.3) имеет единственное решение ($N \geq K$ и $\operatorname{rank} U = K$), задача (2.4) имеет единственное решение, коэффициенты которого удовлетворяют системе уравнений:

$$\begin{pmatrix} G + \alpha P & U \\ U^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{2.5}$$

Здесь $P = \operatorname{diag}(p_1, \ldots, p_N)$ — диагональная матрица весов из (2.4). Очевидно, что при $\alpha \to 0$ сглаживающий сплайн σ_α стремится к интерполяционному, а при $\alpha \to \infty$ в пределе получается функция из тренда $\mathcal{P}$, минимизирующая функционал $\sum_{i=1}^{N} \frac{(f(x_i) - z_i)^2}{p_i}$. Возникает вопрос: из каких соображений выбирать параметр сглаживания α?

Обозначим через

$$\rho(f) = \left(\sum_{i=1}^{N} \frac{(f(x_i) - z_i)^2}{p_i} \right)^{1/2} \tag{2.6}$$

взвешенное квадратичное отклонение функции $f \in \mathcal{N}_g(\Omega, \mathcal{P})$ от измерений в узлах сетки. Будем выбирать параметр α на основе *принципа невязки*, решая нелинейное уравнение $\rho(\sigma_\alpha) = \varepsilon$, где $\varepsilon > 0$ — требуемый порог взвешенной ошибки.

[4]Если представить эту полунорму в виде $\|f\|_G = \|Tf\|_Y$, где T — линейный оператор, действующий в некоторое гильбертово пространство Y (в качестве оператора T можно, например, взять фактор-отображение из $\mathcal{N}_g(\Omega, \mathcal{P})$ в $G_g(\Omega, \mathcal{P})$ с ядром $\mathcal{P}$), то $g(x, y)$ будет функцией Грина оператора T^*T (см., например, [11, 12]).

Алгоритм решения такого уравнения сводится к итерационному процессу, на каждом шаге которого решается задача (2.5) при $\alpha = \alpha_n$, $n = 0, 1, \dots$. Здесь α_0 — начальное приближение, α_1, α_2, …— приближения на следующих шагах итерационного процесса. Алгоритм решения этот задачи, сводящийся к итерациям метода Ньютона, имеющего второй порядок сходимости, был предложен в [14]; оптимальный способ итерирования был обоснован в [15]; комбинированный алгоритм, использующий итерации метода Ньютона и дробно-рациональную аппроксимацию, был предложен в [16, 17]. Наконец, в [18] был обоснован алгоритм с повышенной (наперед заданной) скоростью сходимости, а в [19] алгоритм был доведен до практической реализации.

3. Выбор параметра сглаживания

Опишем алгоритм выбора параметра сглаживания из принципа невязки согласно [17, 19]. Введем оператор невязки R_α, сопоставляющий вектору измерений z вектор невязки $\zeta = R_\alpha z$ по формуле $\zeta_i = z_i - \sigma_\alpha(x_i)$, $i = 1, \dots, N$, где σ_α — решение задачи сглаживания (2.4). Введем также взвешенное скалярное произведение в $Z = \mathbb{R}^N$: $(u, v)_Z = \sum_{i=1}^N \frac{u_i v_i}{p_i}$. Тогда уравнение невязки можно представить в виде

$$\rho(\sigma_\alpha) = \|R_\alpha z\|_Z = \varepsilon. \tag{3.1}$$

Из первой группы уравнений в (2.5) выводим $G\lambda + U\mu = z - \alpha P\lambda$. Здесь слева записан вектор значений сглаживающего сплайна в узлах сетки. Отсюда $R_\alpha z = \alpha P\lambda$.

Очевидно, что функция $\rho(\sigma_\alpha)$ монотонно возрастает, причем монотонность будет строгая, если $\lambda \neq 0$, т.е. если уравнение $U\mu = z$ не имеет решений (вектор измерений нельзя проинтерполировать функцией из тренда). Другими словами, либо $\rho(\sigma_\alpha)$ — строго монотонно возрастающая функция, либо $\rho(\sigma_\alpha) \equiv 0$. Далее будем предполагать, что $\rho(\sigma_\alpha) \not\equiv 0$.

Очевидно также, что уравнение (3.1) имеет решение, если $\varepsilon \le \varepsilon_{\max} = \|R_\infty z\|_Z$. Величину $\varepsilon_{\max}$ можно получить, решая задачу взвешенных наименьших квадратов на $\mathcal{P}$ или перейдя к пределу при $\alpha \to \infty$ в системе уравнений (2.5) следующим образом: полагая $\beta = 1/\alpha$, $\tilde\lambda = \alpha\lambda$ и умножая вторую группу уравнений на α, приходим к эквивалентной системе уравнений:

$$\begin{pmatrix} \beta G + P & U \\ U^\top & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \tilde\lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ 0 \end{pmatrix}. \tag{3.2}$$

Отсюда $R_\infty z = P\tilde\lambda$ при решении (3.2) с $\beta = 0$.

Пусть $0 < \varepsilon < \varepsilon_{\max}$, α_* — решение уравнения (3.1) и α_0 — начальное приближение параметра сглаживания. Согласно [15], уравнение (3.1) следует преобразовать к виду $1/\rho(\sigma_{1/\beta}) = 1/\varepsilon$, при котором скорость сходимости метода Ньютона максимальна. Функция $1/\rho(\sigma_{1/\beta})$ строго выпукла вверх, поэтому итерации метода Ньютона будут сходиться, если $\alpha_0 \le \alpha_*$, т.е. $\|R_{\alpha_0} z\|_Z \ge \varepsilon$. Если это условие не выполнено, то в качестве первого шага строим дробно-рациональное приближение $\tilde\rho(\alpha)$ функции невязки по трем значениям: $\rho(\sigma_{\alpha_0})$, $\rho'(\sigma_{\alpha_0})$ и $\rho(\sigma_\infty) = \varepsilon_{\max}$ и выбираем α_1, решая уравнение невязки $\tilde\rho(\alpha) = \varepsilon$.

Формула шага метода Ньютона при $\rho(\sigma_{\alpha_n}) \ge \varepsilon$

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n \frac{1 - \omega(\alpha_n)}{\rho(\sigma_{\alpha_n})/\varepsilon - \omega(\alpha_n)}, \tag{3.3}$$

$$\omega(\alpha) = \frac{(R_\alpha z, R_\alpha^2 z)_Z}{(R_\alpha z, R_\alpha z)_Z} = \frac{(R_\alpha z, R_\alpha^2 z)_Z}{\rho^2(\sigma_\alpha)}.$$

Формула шага дробно-рационального метода при $\rho(\sigma_{\alpha_n}) < \varepsilon$

$$\alpha_{n+1} = \alpha_n \frac{(1-\rho(\sigma_{\alpha_n})/\varepsilon_{\max}) - (1-\rho(\sigma_{\alpha_n})/\varepsilon)\, d(\alpha_k)}{\rho(\sigma_{\alpha_n})/\varepsilon - \rho(\sigma_{\alpha_n})/\varepsilon_{\max}}, \tag{3.4}$$

$$d(\alpha) = \frac{\rho(\sigma_\alpha)/\varepsilon_{\max} - \omega(\alpha)}{1-\omega(\alpha)}.$$

На каждом шаге итераций по формулам (3.3), (3.4) требуется решить две системы линейных уравнений вида (2.5) с векторами z и $R_\alpha z$ в правой части. При использовании прямых методов решения системы уравнений (2.5) трудоемкость факторизации матрицы существенно дороже, чем трудоемкость решения системы с факторизованной матрицей. Поэтому можно выиграть по числу операций, если за счет увеличения числа задач вида (2.5), решаемых на каждой итерации, добиться более высокой скорости сходимости метода.

Идея такого метода основывается на разложении оператора R_α и дополнительного к нему оператора $Q_\beta = I - R_{1/\beta}$ в окрестности точек α_0 и $\beta_0 = 1/\alpha_0$ в ряды по степеням операторов R_{α_0} и Q_{β_0} [17, 18]:

$$R_\alpha = I - \sum_{m=0}^{\infty}\Big(\frac{\alpha_0-\alpha}{\alpha_0}\Big)^m R_{\alpha_0}^m (I - R_{\alpha_0}) = \frac{\alpha}{\alpha_0}\sum_{m=0}^{\infty}\Big(\frac{\alpha_0-\alpha}{\alpha_0}\Big)^m R_{\alpha_0}^{m+1}, \tag{3.5}$$

$$R_{1/\beta} = \sum_{m=0}^{\infty}\Big(\frac{\beta_0-\beta}{\beta_0}\Big)^m Q_{\beta_0}^m (I - Q_{\beta_0}) = I - \frac{\beta}{\beta_0}\sum_{m=0}^{\infty}\Big(\frac{\beta_0-\beta}{\beta_0}\Big)^m Q_{\beta_0}^{m+1}. \tag{3.6}$$

Заменяя в этих формулах верхний предел суммирования на $L-1$ при некотором конечном L, получаем двустронние приближения функции невязки в окрестности точек α_0 и β_0 с порядком L [18], а значит, алгоритм, использующий эти приближения, будет иметь L-й порядок сходимости. В [19] было проведено детальное исследование способов приближения данным методом, результаты которого следующие.

При $\rho(\sigma_{\alpha_n}) \ge \varepsilon$, воспользовавшись формулой

$$R_\alpha^{(L)} = \frac{\alpha}{\alpha_n}\sum_{m=0}^{L-1}\Big(\frac{\alpha_n-\alpha}{\alpha_n}\Big)^m R_{\alpha_n}^{m+1},$$

получаем α_{n+1}, решая уравнение $\|R_\alpha^{(L)} z\|_Z = \varepsilon$.

При $\rho(\sigma_{\alpha_n}) < \varepsilon$ на первом шаге ($n = 0$) выбираем α_1 методом дробно-рациональной аппроксимации (3.4), а при других n вычисляем $\alpha_{n+1} = 1/\beta_{n+1}$, решая уравнение $\|\hat{R}_{1/\beta}^{(L)} z\|_Z = \varepsilon$, где

$$\hat{R}_{1/\beta}^{(L)} = \sum_{m=0}^{L-1}\Big(\frac{\beta_n-\beta}{\beta_n}\Big)^m Q_{\beta_n}^m (I - Q_{\beta_n}).$$

Легко убедиться, что в обоих случаях на каждом шаге требуется решить L систем вида (2.5) с разными правыми частями. Ясно, что при вычислении $\|R_\alpha^{(L)} z\|_Z$ ($\|\hat{R}_{1/\beta}^{(L)} z\|_Z$) мы также можем попутно вычислить $\|R_\alpha^{(l)} z\|_Z$ ($\|\hat{R}_{1/\beta}^{(l)} z\|_Z$) для $l < L$. Основываясь на этой информации, можно выполнить экстраполяцию приближений функции невязки по L и уточнить ее значение при каждом α (β), а значит, ускорить сходимость. Этот метод был применен в [20], а затем улучшен в [19].

4. Алгоритм решения задачи сглаживания

Очевидно, что система уравнений в задаче интерполяции (1.3) есть частный случай системы уравнений сглаживания (2.5). Поэтому достаточно рассмотреть общий случай. Система (2.5) не симметрична, если функция $g(x, y)$ не симметрична (в случае РБФ-сплайнов симметричность очевидна). Даже в случае симметричности матрицы G спектр этой системы знакопеременный (конечно, при нетривиальном тренде $\mathcal{P}$). Еще недостаток этой системы связан с зависимостью числа обусловленности ее матрицы от способа выбора базиса в $\mathcal{P}$. Поэтому применяя стандартные методы решения, можно существенно потерять в точности решения, если базис в $\mathcal{P}$ выбран неудачно.

В предположениях п. 2 матрица G симметрична и положительно определена на подпространстве векторов $U^\top \lambda = 0$. Поэтому хотелось бы воспользоваться этим фактом и свести систему (2.5) к эквивалентной системе уравнений на подпространстве, в которой матрица была бы симметрична и положительно определена. Такое преобразование было фактически предложено в [13] и основывалось на построении линейного оператора $H : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^{N-K}$ со свойствами $\operatorname{rank} H = N - K$, $HU = 0$, т.е. этот оператор должен иметь полный ранг и аннулировать образ оператора U. В классическом случае полиномиальных сплайнов одной переменной степени $2m - 1$ матрица оператора H собиралась из коэффициентов конечных разностей m-го порядка, аннулирующих полиномы степени $m-1$ на различных подсетках. В многомерном случае аналогичный подход применялся многими исследователями, но результат сильно зависел от выбора подсеток для построения конечных разностей и не гарантировал, что при таком преобразовании обусловленность исходной системы не ухудшится.

Автором в [21] был предложен алгоритм чисто алгебраического построения оператора H, сохраняющий число обусловленности матрицы G ($\operatorname{cond}_2 G$) на подпространстве векторов $U^\top \lambda = 0$. Сведем матрицу U к верхнетреугольному виду, воспользовавшись методом вращений или отражений:

$$QU = \begin{pmatrix} \tilde{U} \\ O \end{pmatrix}. \tag{4.1}$$

Здесь Q — оператор преобразования, состоящий из последовательности элементарных операций вращения или отражения, $\tilde{U}$ — невырожденная верхнетреугольная матрица размерности $K \times K$, O — нулевой блок размерности $(N - K) \times K$. Ясно, что образ оператора QU состоит из векторов, у которых ненулевые элементы находятся в первых K позициях, и, чтобы аннулировать образ, надо просто отбросить первые K компонент вектора. Формально разобьем матрицу тождественного оператора I в $\mathbb{R}^N$ на два блока:

$$I = \begin{pmatrix} J_1 \\ J_2 \end{pmatrix},$$

где $J_1 : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^K$ составлен из первых K строк матрицы оператора I, а $J_2 : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^{N-K}$ — из оставшихся $N - K$ строк. Тогда искомый оператор H задается формулой: $H = J_2 Q$.

Из тождества $U^\top \lambda = 0$ следует, что вектор λ принадлежит ядру оператора $U^\top$. Отсюда легко получить, что вектор λ можно представить в виде $H^\top \nu$, причем вектор $\nu \in \mathbb{R}^{N-K}$ определяется единственным образом. Подставляя $\lambda = H^\top \nu$ в (2.5) и действуя на первую группу уравнений оператором H, получаем эквивалентную систему уравнений относительно ν:

$$(A+\alpha HPH^\top)\nu = Hz, \tag{4.2}$$

где $A = HGH^\top$. Ясно, что $(A\nu,\nu) = (G\lambda,\lambda)$ и $U^\top\lambda = 0$ в силу свойств оператора H. Отсюда заключаем, что матрица A симметрична и положительно определена. Ее число обусловленности совпадает с числом обусловленности матрицы G на подпространстве $U^\top\lambda = 0$ в силу использования ортогональных преобразований.

Решив эту систему уравнений, находим λ из тождества $\lambda = H^\top\nu$ следующим образом: добавляем K нулей в начало вектора ν, т. е. применяем преобразование $J_2^\top$, затем выполняем последовательность траспонированных элементарных операций, из которых состоит преобразование Q, но только в обратном порядке. Вектор μ легко находится из тождества $U\mu = z-(G+\alpha P)\lambda$ умножением его слева на J_1Q и подстановкой $\lambda = H^\top\nu$:

$$\tilde{U}\nu = J_1Qz - J_1Q(G+\alpha P)H^\top\nu. \tag{4.3}$$

Матрица этой системы верхнетреугольная, а вектор J_1Qz и матрица $J_1Q(G+\alpha P)H^\top$ “бесплатно” получаются в процессе преобразования системы (2.5) к (4.2).

Замечание. Алгоритм подстановки можно также применить для решения общей системы уравнений с седловой точкой вида:

$$\begin{pmatrix} B & U \\ U^\top & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \lambda \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} z \\ w \end{pmatrix}, \tag{4.4}$$

где B — $N\times N$-матрица, U — $N\times K$-матрица полного ранга, $K \le N$. Опять с помощью ортогонального преобразования Q сводим матрицу U к верхнетреугольной форме (4.1) и, выполнив замену переменных $\lambda = Q^\top\nu$, разобьем вектор ν на две части: ν_1, содержащий первые K компонент вектора ν, и ν_2, содержащий остальные $(N-K)$ компонент. Умножая первую группу уравнений в (4.4) слева на Q и разбивая $QBQ^\top$ на четыре блока C_{ij}, $i,j = 1,2$, с диагональными блоками C_{11} и C_{22} размеров $K\times K$ и $(N-K)\times(N-K)$ соответственно, приходим к системе уравнений:

$$\begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \tilde{U} \\ C_{21} & C_{22} & 0 \\ \tilde{U}^\top & 0 & 0 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} J_1Qz \\ J_2Qz \\ w \end{pmatrix}.$$

Из последней группы уравнений с нижнетреугольной матрицей $\tilde{U}^\top$ находим ν_1, затем из второй группы уравнений с квадратной матрицей C_{22} находим ν_2, далее из первой группы уравнений с верхнетреугольной матрицей $\tilde{U}$ находим μ и, наконец, вычисляем $\lambda = Q^\top\nu$.

5. Алгоритм сплайн-регрессии

Рассмотрим случай, когда сетка опорных узлов сплайна не совпадает с сеткой, в которой известны значения аппроксимируемой функции. В методе сплайн-регрессии будем строить сплайн вида (1.1), (1.2) по значениям z_i, заданным на сетке y_i, $i = 1,\dots,M$, $M > N$. Ясно, что система уравнений интерполяции и уравнений (1.2), скорее всего, не совместна и можно получить только приближенное решение, минимизирующее взвешенный функционал невязки $\sum_{i=1}^{M}\dfrac{(\sigma(y_i)-z_i)^2}{p_i}$. В терминах матриц требуется получить псевдорешение системы уравнений:

$$D(F\lambda + V\mu) = Dz, \tag{5.1}$$

где $D = \mathrm{diag}(p_1^{-1/2}, \ldots, p_M^{-1/2})$ — диагональная матрица весовых коэффициентов, F — $M \times N$-матрица с коэффициентами $f_{ij} = g(y_i, x_j)$, V — $M \times K$-матрица с коэффициентами $v_{ik} = u_k(y_i)$. Будем дополнительно требовать строгого выполнения условий (1.2), т. е. вектор λ должен удовлетворять линейным ограничениям $U^\top\lambda = 0$. В результате приходим к задаче наименьших квадратов с линейными ограничениями типа равенств.

Выполнив подстановку $\lambda = H^\top\nu$, избавляемся от линейных ограничений и получаем систему уравнений:

$$D(FH^\top\nu + V\mu) = Dz,$$

решение которой находим обычным методом наименьших квадратов.

Метод сплайн-регрессии имеет смысл применять, когда количество точек с измерениями слишком велико, чтобы строить сглаживающий сплайн на всей сетке измерений, а также, если сетка измерений очень неравномерна или измерения противоречивы. Возникает вопрос: как выбирать опорные узлы сплайна?

Один из способов выбора опорных узлов состоит в прореживании сетки измерений. Выберем некоторый радиус прореживания $r_0 > 0$ и потребуем, чтобы в r_0-окрестности каждого узла прореженной сетки не было других узлов из сетки измерений. Решение о выборе наилучшего узла из r_0-окрестности будем принимать на основе критерия качества измерения, рассчитанного в каждом узле. Критерием качества будет служить вероятность того, что измеренное значение функции в узле является выбросом в данных. Оценку вероятности получаем с помощью статистического теста Граббса [22].

Пусть ξ_i, $i = 1, \ldots, n$, — выборка из n значений случайной величины, распределенной по нормальному закону, и $\tilde\xi$ — одно из значений в этой выборке. Требуется оценить вероятность $\tau(\tilde\xi)$ того, что это значение является выбросом в данных. Обозначим $Z = (\tilde\xi - \bar\xi)/s$, где $\bar\xi$ и s — среднее значение и стандартное отклонение, полученные на этой выборке. Тогда Z будет выбросом в данных с уровнем значимости $\alpha > 0$ в одностороннем тесте Грабсса, если

$$Z^2 > \frac{(n-1)^2}{n} \frac{t^2_{\alpha/n,n-2}}{n - 2 + t^2_{\alpha/n,n-2}},$$

где $t_{\alpha/n,n-2}$ — решение уравнения $t_{n-2}(x) = 1 - \alpha/n$, $t_{n-2}(x)$ — функция распределения Стьюдента с $(n-2)$ степенями свободы. Нас в этой формуле интересует расчет уровня значимости α по Z и n.

Обозначая $Y = \frac{Z^2 n}{(n-1)^2}$, получаем

$$1 - \frac{\alpha}{n} < t_{n-2}\left(\sqrt{\frac{Y(n-2)}{1-Y}}\right).$$

Отсюда выводим, что оценка вероятности выброса в данных равна $1 - \alpha$, т. е. полагаем

$$\tau(\tilde\xi) = \max\left\{1 - n\left(1 - t_{n-2}\left(\sqrt{\frac{Y(n-2)}{1-Y}}\right)\right), 0\right\}.$$

В этой формуле предполагается, что $n > 2$ (при $n = 2$ полагаем $\tau(\tilde\xi) = 0$). Нетрудно проверить, что $Y = 1$ в экстремальном случае, когда все остальные ξ_i, кроме $\tilde\xi$, равны между собой. При этом $\tau(\tilde\xi) = 1$. В других случаях $0 \le Y < 1$ и $\tau(\tilde\xi) < 1$.

Формально тест Граббса нельзя применять к оцениванию вероятности выброса в данных, полученных на сетке узлов в $\mathbb{R}^d$, но нас в этом тесте не интересует точное значение вероятности выброса, а представляет интерес сравнение вероятностей для разных узлов с целью выбора лучшего из них.

Тест Граббса применяем к измерениям, узлы которых попали в r_1-окрестность каждого узла y_i, и по этой выборке вычисляем вероятность выброса в узле y_i. Радиус оценивания $r_1 > r_0$ выбираем достаточно большим, а радиус r_0 варьируем, что позволяет прореживать сетку с разной степенью детальности. Эксперименты, проведенные автором для аппроксимации универсальной характеристики гидротурбины (на данный момент неопубликованные), позволили заключить, что поведение сплайна, построенного методом сплайн-регрессии с прореживанием сетки по данному алгоритму, достаточно близко к поведению сглаживающего сплайна, имеющего аналогичный уровень взвешенного квадратичного отклонения, однако результаты сглаживания все-таки несколько лучше по сравнению со сплайн-регрессией.

Отметим, что сплайн, построенный методом сплайн-регрессии, содержит меньше коэффициентов, чем сглаживающий сплайн. Поэтому такое решение более надежно и его предсказательная способность выше, чем у сглаживающего сплайна[5].

6. Сплайн-аппроксимация с внешним дрейфом

Расширим векторное пространство тренда $\mathcal{P}$, добавив в него некоторые линейно независимые базисные функции. Расширенное векторное пространство обозначим через $\mathcal{Q}$. Ясно, что если функция $g(x,y)$ условно положительно определена и симметрична относительно $\mathcal{P}$, то она также будет условно положительно определена и симметрична относительно $\mathcal{Q}$. Тем самым $g(x,y)$ будет воспроизводящим ядром пространства $\mathcal{N}_g(\Omega,\mathcal{Q})$, и можно будет строить все виды сплайнов с трендом $\mathcal{Q}$. Очевидно также соотношение между $\mathcal{N}_g(\Omega,\mathcal{P}) = G_g(\Omega,\mathcal{P}) + \mathcal{P}$ и $\mathcal{N}_g(\Omega,\mathcal{Q}) = G_g(\Omega,\mathcal{Q}) + \mathcal{Q}$:

$$G_g(\Omega,\mathcal{P}) \supset G_g(\Omega,\mathcal{Q}), \qquad \mathcal{P} \subset \mathcal{Q},$$

т. е. сплайновая часть естественного пространства сужается при расширении тренда.

Обычно $\mathcal{P}$ состоит из полиномов определенной степени, а в его расширение $\mathcal{Q}$ можно добавить достаточно произвольные функции. Например, если можно построить грубую оценку приближаемой функции с помощью каких-либо методов, функцию грубой оценки или набор таких функций можно добавить в базис тренда. Можно также добавить функции, описывающие разрыв в данных, т. е. открывается возможность приближения функции с разрывами с помощью РБФ-сплайнов со специальным расширением тренда. Такие сплайны называем *сплайнами с внешним дрейфом* по аналогии с двойственным методом кригинга с внешним дрейфом (см., например, [24]).

[5]В методах машинного обучения стараются использовать аппроксимацию с минимальным количеством варьируемых коэффициентов. При увеличении сложности аппроксиматора (количества варьируемых коэффициентов), конечно, удается лучше приблизить значения функции на обучающей выборке, но при этом может проявиться эффект “переаппроксимации” (overfitting), когда точность аппроксимации на тестовой выборке сильно ухудшается. Поэтому, если два аппроксиматора дают близкие по точности результаты, то предпочтительнее использовать тот, который имеет меньшую сложность. С другой стороны, если есть несколько принципиально различных аппроксиматоров, то путем комбинирования этих аппроксиматоров можно получить более надежный аппроксиматор. Именно такой подход использовался командой, выигравшей приз компании Netflix [23]. Две лидирующие команды объединили свои алгоритмы и добились необходимой точности предсказания.

7. Условная полная монотонность

Далее будем считать, что граница области Ω определения приближаемой функции не существенна для приближения, поэтому полагаем $\Omega = \mathbb{R}^d$. Обозначим через P_n^d векторное пространство алгебраических полиномов в $\mathbb{R}^d$ степени n по совокупности переменных. Положим $P_{-1}^d = \{0\}$. При $d = 1$ будем писать просто P_n.

Функцию $g(x, y)$ при выполнении условий (2.1) и $\mathcal{P} = P_{m-1}^d$, $m \in \mathbb{Z}_+$, называют *условно положительно определенной порядка* m. Из п. 6 следует, что условная положительная определенность также будет иметь место при любом целом $n > m$.

Функцию $\phi \in C[0, \infty)$ также называют *условно положительно определенной в* $\mathbb{R}^d$, если соответствующая ей радиальная базисная функция $g(x, y) = \phi(|x - y|)$ условно положительно определена в $\mathbb{R}^d$. Симметричность радиальной базисной функции очевидна.

Через $\mathcal{R}_m^d$ обозначим множество всех функций $\phi \in C[0, \infty)$, условно положительно определенных порядка m в $\mathbb{R}^d$. Ясно, что $\mathcal{R}_{m_1}^{d_1} \subset \mathcal{R}_m^d$ при $m_1 \le m$, $d_1 \ge d$. Обозначим

$$\mathcal{R}_m^\infty = \bigcap_{d=1}^{\infty} \mathcal{R}_m^d.$$

Непустота множества $\mathcal{R}_m^\infty$ будет следовать из дальнейшего изложения.

Функции из $\mathcal{R}_m^\infty$ можно использовать для построения сплайнов с любым количеством переменных с использованием полиномиального тренда одной и той же степени $m - 1$. Например, при $m = 2$ тренд будет состоять из линейных функций, и размерность пространства P_1^d линейно зависит от d. Тем самым с использованием таких сплайнов удается избежать “проклятия размерности”, при котором сложность приближающей функции экспоненциально растет при увеличении d.

Носитель функций из $\mathcal{R}_m^\infty$ нелокален [3, следствие 9.3], поэтому при вычислении значения сплайна по формуле (1.1) приходится выполнять суммирование по всем опорным узлам. При конечном d в $\mathcal{R}_m^d$ существуют функции с локальным носителем, эффективный алгоритм построения которых описан, например, в [3].

Функцию $f : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}$ называют *условно вполне монотонной*[6] *порядка* m, если $f \in C^\infty(0, \infty)$ и $(-1)^k f^{(k)} \ge 0$ для всех $k \ge m$. Обозначим множество таких функций через $\mathcal{M}_m$, $m \in \mathbb{Z}_+$. Между множествами $\mathcal{R}_m^\infty$ и $\mathcal{M}_m$ есть тесная связь:

- $f \in \mathcal{M}_m \setminus P_m$ и $|f(0)| < \infty \implies f(r^2) \in \mathcal{R}_m^\infty$;
- $\phi \in \mathcal{R}_m^\infty \implies \phi(\sqrt{\cdot}\,) \in \mathcal{M}_m \setminus P_m$.

Достаточные условия принадлежности множеству $\mathcal{R}_m^\infty$, а также необходимые условия при $m = 0$ были получены в [25]. Позднее необходимые условия были доказаны для всех m (см. подробнее в [3]).

Если $f \in \mathcal{M}_m$, то $bf(a^2(t + c^2)) + p_{m-1}(t)$ также принадлежит $\mathcal{M}_m$ при $a \ne 0$, $b > 0$, $p_{m-1} \in P_{m-1}$. Отсюда следует правило порождения функции $\phi \in \mathcal{R}_m^\infty$:

$$f \in \mathcal{M}_m \setminus P_m \quad \implies \quad \phi(r) = bf(a^2(r^2 + c^2)) + p_{m-1}(r^2) \quad \implies \quad \phi \in \mathcal{R}_m^\infty, \tag{7.1}$$

причем $c \ne 0$, если функция f неограничена в нуле.

В аппроксимации РБФ-сплайнами часто используют следующие функции при построении радиальных базисов:

[6] Мы используем термины “вполне монотонный” и “полная монотонность” как синонимы аналогично терминам “вполне непрерывный” и “полная непрерывность”. На английском им соответствуют термины “completely monotone” и “complete monotonicity”.

- Мультиквадрик: $\phi(r) = (-1)^{\lfloor\nu\rfloor+1}(r^2+c^2)^\nu$, $\nu \in \mathbb{R}_+ \setminus \mathbb{Z}_+$;
- Обратный мультиквадрик: $\phi(r) = (r^2+c^2)^\nu$, $\nu < 0$;
- Полигармоническая РБФ [26, 27]: $\phi(r) = (-1)^{n+1} r^{2n} \ln r$, $n \in \mathbb{N}$;
- Степенная РБФ [26, 27]: $\phi(r) = (-1)^{\lfloor\nu\rfloor+1} r^{2\nu}$, $\nu \in \mathbb{R}_+ \setminus \mathbb{Z}_+$;
- РБФ DMM-сплайна [28, 29]: $\phi(r) = (-1)^{n+1}(r^2+c^2)^n \ln(r^2+c^2)$, $n \in \mathbb{Z}_+$.

Все перечисленные РБФ порождаются с помощью следующего семейства условно вполне монотонных функций:

$$f_\nu(t) = \begin{cases} \Gamma(-\nu)t^\nu, & \nu \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Z}_+, \\ (-1)^{\nu+1} t^\nu \ln t, & \nu \in \mathbb{Z}_+, \end{cases} \qquad f_\nu \in \mathcal{M}_{(\lfloor\nu\rfloor+1)_+}. \tag{7.2}$$

Здесь и далее $\Gamma(a)$ — гамма-функция. Напомним, что $(k)_+ = \max(k, 0)$. При $\nu \leq 0$ функция f_ν неограничена в нуле, поэтому при порождении РБФ параметр Харди c в этом случае должен быть ненулевым.

8. Комбинирование радиальных базисных функций

Пусть $\phi_i \in \mathcal{R}^{d_i}_{m_i}$, $i = 1, \ldots, n$, и $\phi = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i$ при условиях $a_i > 0$. Тогда $\phi \in \mathcal{R}^d_m$, где $m = \max_i m_i$, $d = \min_i d_i$. Некоторые линейные комбинации РБФ с неположительными коэффициентами также приводят к условно положительно определенным РБФ. Например, радиальные базисы сплайнов с натяжением и регуляризованных сплайнов [30, 31] можно получить путем вычитания нескольких РБФ.

Доказательство условной положительной определенности радиальных базисов некоторых сплайнов с натяжением и регуляризованных сплайнов из [30] было получено в [32] и обобщено в [33], а в [34] удалось обобщить и алгоритм получения радиальных базисов вполне регуляризованных сплайнов из [31].

Результаты обобщения далее приводятся по [34] и излагаются в терминах порождающих условно вполне непрерывных функций.

Ядра пространств Соболева и их обобщение. Рассмотрим семейство функций

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

Здесь $K_\nu(x)$ — модифицированная функция Бесселя второго рода порядка ν [35]. Функция h_ν порождает воспроизводящее ядро пространства Соболева $H^k(\mathbb{R}^d)$ при $\nu = k - d/2$, известное как РБФ Whittle–Matérn [36].

Обобщение здесь заключается в распространении представления h_ν на любые ν, в том числе и на отрицательные. Функции h_ν принадлежат $\mathcal{M}_0$ для всех $\nu \in \mathbb{R}$ и ограничены в нуле при $\nu > 0$.

Обобщение сплайнов с натяжением и регуляризованных сплайнов. Рассмотрим вспомогательное семейство функций

$$\tilde{h}_\nu(t) = \begin{cases} \dfrac{\Gamma(-\nu)t^\nu}{2^{\nu+1}}, & \nu \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Z}_+, \\ (-1)^{\nu+1} \dfrac{t^\nu[\ln(t/4) - \psi(1) - \psi(\nu+1)]}{\nu!\, 2^{\nu+1}}, & \nu \in \mathbb{Z}_+, \end{cases}$$

где $\psi(n) = -\gamma + \sum_{k=1}^{n-1} k^{-1}$ — логарифмическая производная гамма-функции, γ — константа Эйлера. Сравнивая $\tilde{h}_\nu$ с f_ν из (7.2), нетрудно заметить, что они различаются на положительный множитель, а при $\nu \in \mathbb{Z}_+$ еще добавлена константа, не влияющая на свойства условной полной монотонности. Ясно, что $\tilde{h}_\nu \in \mathcal{M}_{(\lfloor\nu\rfloor+1)_+}$ и $\tilde{h}_\nu$ ограничены в нуле при $\nu > 0$.

Зададим двухпараметрическое семейство функций $h_{\nu,n}$, $\nu \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{Z}_+$, по формулам:

$$h_{\nu,0}(t) = \tilde{h}_\nu(t) - h_\nu(t);$$

$$h_{\nu,n}(t) = \frac{\tilde{h}_{\nu+n}(t)}{n!\,2^n} - h_{\nu,n-1}(t), \quad n = 1, 2, \dots .$$

Функции $h_{\nu,n}$ принадлежат $\mathcal{M}_{(\lfloor\nu\rfloor+n+1)_+}$ и ограничены в нуле при $\nu+n+1 > 0$. Функции $h_{1-d/2,0}$ при $d = 1, 2$ порождают радиальный базис *сплайна с натяжением*, а $h_{1-d/2,1}$ при $d = 2, 3$ — радиальный базис *регуляризованного сплайна* в $\mathbb{R}^d$, предложенных в [30].

Экспоненциальные интегральные ядра и их обобщение. Рассмотрим семейство функций

$$g_\nu(t) = t^\nu \Gamma(-\nu, t), \quad \nu \in \mathbb{R}.$$

Здесь $\Gamma(a, t) = \int_t^\infty e^{-x} x^{a-1}\, dx$ — неполная гамма-функция. При $\nu \in \mathbb{Z}$ получаем известные экспоненциальные интегральные функции [35, пп. 5.1.45, 5.1.46]:

$$g_n(t) = \begin{cases} \alpha_{-n-1}(t), & n < -1, \\ E_{n+1}(t), & n > -1, \end{cases} \qquad g_{-1}(t) = \alpha_0(t) = E_0(t) = \frac{e^{-t}}{t}.$$

Опять же обобщение здесь состоит в распространении данного представления на произвольные $\nu \in \mathbb{R}$. Как и h_ν, функции g_ν принадлежат $\mathcal{M}_0$ для всех $\nu \in \mathbb{R}$ и ограничены в нуле при $\nu > 0$.

Обобщение вполне регуляризованных сплайнов. Рассмотрим вспомогательное семейство функций

$$\tilde{g}_\nu(t) = \begin{cases} \Gamma(-\nu) t^\nu, & \nu \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{Z}_+, \\ (-1)^{\nu+1} \dfrac{t^\nu [\ln t - \psi(\nu+1)]}{\nu!}, & \nu \in \mathbb{Z}_+, \end{cases}$$

аналогичное семейству f_ν, и положим

$$g_{\nu,0}(t) = \tilde{g}_\nu(t) - g_\nu(t);$$

$$g_{\nu,n}(t) = g_{\nu+1,n-1}(t) - g_{\nu,n-1}(t), \quad n = 1, 2, \dots .$$

Функции $g_{\nu,n}$ принадлежат $\mathcal{M}_{(\lfloor\nu\rfloor+n+1)_+}$ и ограничены в нуле при любых $\nu \in \mathbb{R}$, $n \in \mathbb{Z}_+$. Функции $g_{1-d/2,0}$ порождают радиальный базис *вполне регуляризованного сплайна* в $\mathbb{R}^d$ при $d = 2, 3$, предложенного в [31].

9. Сравнение радиальных базисных функций

При выборе подходящей радиальной базисной функции и базиса тренда РБФ-сплайна существенную роль играют требования к гладкости решения, а также важно знать свойства вариационного функционала $\|f\|_G^2$, минимизируемого РБФ-сплайном. В таблице приведен вид вариационного функционала для некоторых известных РБФ-сплайнов с использованием обозначения

$$\|D^k f\|_Y^2 = \sum_{|\alpha|=k} \frac{k!}{\alpha!} \|D^\alpha f\|_Y^2, \quad k \in \mathbb{Z}_+.$$

Например, сплайн тонких пластин [37], минимизирующий норму второй производной в $L_2(\mathbb{R}^2)$, получается с помощью функции $f_1(r^2)$ ($m = d = 2$). Кубическому сплайну в $\mathbb{R}^1$ соответствует функция $f_{3/2}(r^2)$ ($m = 2$, $d = 1$). Сплайн Whittle–Matérn, минимизирующий норму в пространстве Соболева, получается с помощью функции h_ν. Сплайны с натяжением и регуляризованные сплайны получаются с помощью функции $h_{\nu,n}$ и минимизируют взвешенную сумму норм двух соседних производных, причем вклад каждой из производных можно регулировать с помощью управляющего параметра. Особый случай представляет вполне регуляризованный сплайн, генерируемый функцией $g_{\nu,0}$. Его естественное пространство состоит из бесконечно дифференцируемых функций. Использование ненулевого параметра Харди c в формуле (7.1) также порождает естественное пространство бесконечно дифференцируемых функций.

Функционал	$\phi(r)$	Ограничения	Сплайн
$\|D^m f\|_{L_2}^2$	$f_{m-d/2}(r^2)$	$m - d/2 > 0$	Сплайн в $L_2^m(\mathbb{R}^d)$
$\|D^m f\|_{\tilde{H}^s}^2$	$f_{m+s-d/2}(r^2)$	$m > m+s-d/2 > 0$	Сплайн в $D^{-m}\tilde{H}^s(\mathbb{R}^d)$ [37]
$\|f\|_{L_2}^2 + \|D^m f\|_{L_2}^2$	$h_{m-d/2}(r^2)$	$m - d/2 > 0$	Сплайн в $H^m(\mathbb{R}^d)$
$\varphi^2\|D^1 f\|_{L_2}^2 + \|D^2 f\|_{L_2}^2$	$h_{1-d/2,0}((\varphi r)^2)$	$2 - d/2 > 0$	Сплайн с натяжением [30]
$\|D^2 f\|_{L_2}^2 + \tau^2\|D^3 f\|_{L_2}^2$	$h_{1-d/2,1}((r/\tau)^2)$	$3 - d/2 > 0$	Регуляризованный сплайн [30]
$\sum_{k=1}^\infty \frac{\|D^k f\|_{L_2}^2}{\varphi^{2k}(k-1)!}$	$g_{1-d/2,0}((\varphi r/2)^2)$	—	Вполне регуляризованный сплайн [31]

Скорость сходимости сплайнов при сгущении сетки узлов определяется порядком гладкости радиальной базисной функции в нуле. Зададим линейный оператор $\mathcal{T}_\nu$, сопоставляющий функции f остаточный член ее разложения в нуле в ряд Тейлора степени меньшей ν:

$$\mathcal{T}_\nu f(t) = f(t) - \sum_{k\in\mathbb{Z}_+,\ k<\nu} \frac{f^{(k)}(0)}{k!}\, t^k.$$

Отметим, что $\mathcal{T}_\nu f = f$ при $\nu \le 0$.

Будем использовать обозначения $u \approx v$, если $\lim_{t\to 0} \dfrac{u(t)}{v(t)} = C \ne 0$ и $u \sim v$, если $C = 1$ в этой формуле. Согласно [33],

$$\mathcal{T}_\nu h_\nu \sim \tilde{h}_\nu, \quad \mathcal{T}_{\nu+n+1} h_{\nu,n} \sim \frac{\tilde{h}_{\nu+n+1}}{(n+1)!\,2^{n+1}}, \quad \mathcal{T}_\nu g_\nu \sim \tilde{g}_\nu.$$

Поскольку $f_\nu \approx \tilde{h}_\nu \approx \tilde{g}_\nu$, функции $h_\nu(r^2)$, $g_\nu(r^2)$, $f_\nu(r^2)$, $h_{\nu-n-1,n}(r^2)$ порождают сплайны с близкими свойствами сходимости. Их различия проявляются в минимально необходимом порядке m полиномиального тренда:

- $m = 0$ для h_ν и g_ν,
- $m = (\lfloor\nu\rfloor + 1)_+$ для f_ν,
- $m = (\lfloor\nu\rceil)_+$ для $h_{\nu-n-1,n}$;

а также поведением на бесконечности: $h_\nu(r^2) \approx r^{\nu-1/2}e^{-r}$, $g_\nu(r^2) \approx e^{-r^2}/r^2$, остальные функции не имеют экспоненциального убывания.

10. Подготовка данных для приближения РБФ-сплайнами

В заключение приведем рекомендации по подготовке данных для приближения РБФ-сплайнами. При подготовке данных важно учитывать тип ошибок измерения значений приближаемой функции: значения могут быть измерены с *абсолютной ошибкой* $z \pm \varepsilon$ или с *относительной ошибкой* $z(1 \pm \varepsilon)$.

Практически все методы приближения минимизируют норму вектора абсолютной ошибки приближения, поэтому, если приближаемые значения измерены с относительной ошибкой, то необходимо подходящим образом задавать веса в функционале (2.6). Можно также применить *калибровку* приближаемой функции, переводящую относительную ошибку в абсолютную, например $z \mapsto \tilde{z} = \ln z$. После построения сплайна по калиброванным значениям значения исходной функции вычисляем с помощью обратного преобразования, например $\tilde{z} \mapsto z = \exp \tilde{z}$.

Если значения приближаемой функции не могут выходить из определенного диапазона, то желательно использовать калибровку, устраняющую ограничения. Например, к КПД физического процесса, имеющему диапазон $[0, 100]$, можно применить калибровку $z \mapsto \tilde{z} = \operatorname{tg} \pi(z/100 - 0.5)$.

Независимые переменные, измеренные с относительной ошибкой, тоже необходимо преобразовать к виду с абсолютной ошибкой измерения. Например, зависимость вида $S = aP^b$ с неизвестными параметрами a и b, в которой S и P заданы с относительной ошибкой, можно преобразовать к виду $\ln S = \ln a + b \ln P$, в котором переменные $\ln P$ и $\ln S$ уже измерены с абсолютной ошибкой.

Далее обычно выполняют аффинное преобразование системы координат так, чтобы привести независимые переменные к единому масштабу и поместить начало координат в границы “облака” точек сетки. Необходимость приведения переменных к единому масштабу связана с тем, что “влияние” базисной функции РБФ-сплайна распространяется радиально, а сдвиг начала координат в границы облака точек сетки может существенно повлиять на точность вычисления базисных функций тренда сплайна. Конечно, масштабирование требуется, только если независимые переменные имеют разную природу.

Обычно применяют *геометрическое* или *статистическое* масштабирование. При геометрическом масштабировании параллелепипед, охватывающий множество узлов сетки, переводят в куб с центром в начале координат. При статистическом масштабировании независимые переменные трансформируют так, чтобы среднее значение каждой координаты узлов трансформированной сетки было нулевым, а среднеквадратичное отклонение было равным единице. Такое масштабирование позволяет в дальнейшем осознанно выбирать параметры радиальной базисной функции. Например, параметр Харди $c = 0.01$ будет означать 1 % от среднеквадратичного разброса координат сетки в случае статистического масштабирования.

Если количество узлов сетки достаточно велико, то при проведении экспериментов полезно разбить его на две части: *обучающую* и *тестовую* выборки. Эксперименты по приближению функции при этом проводят на обучающей выборке, а тестовую выборку используют для анализа качества приближения (*метод перекрестной проверки*). Например, такой подход может быть полезен при масштабировании сетки: экспериментируя с разными параметрами масштабирования, выбираем такие, при которых отклонение интерполяционного сплайна, построенного на обучающей выборке, будет минимально на тестовой выборке.

В задачах, связанных со статистической или медицинской информацией, число независимых переменных может быть очень велико и приближение РБФ-сплайнами, построенное с учетом всех переменных, имеет практически нулевой предсказательный потенциал, т. е. оно приближает данные только в малой окрестности узлов сетки, а вне узлов точность приближения стремится к нулю. В таких задачах стремятся построить как можно более простое приближение, например с помощью линейной регрессии.

Чтобы уменьшить сложность РБФ-сплайнов, надо в первую очередь уменьшить число независимых переменных, например, отбрасывая переменные, слабо коррелирующие с целевым признаком. Также полезен корреляционный анализ независимых переменных, при котором из нескольких сильно коррелирующих между собой переменных оставляется только одна, а остальные отбрасываются. Наконец, с помощью *метода главных компонент* [38] можно выполнить приведение системы координат трансформированной сетки к главным направлениям и, отбрасывая второстепенные направления, уменьшить размерность пространства независимых переменных. После уменьшения числа независимых переменных имеет смысл использовать сплайн-регрессию с выбором опорных узлов сплайна, например с помощью алгоритма, описанного в п. 5.

Литература

1. **Schaback R.** Native Hilbert spaces for radial basis functions. I // New Developments in Approximation Theory / M.W. Muller, M.D. Buhmann, D.H. Mache, M. Felten. — Basel: Birkhauser, 1999. — P. 255–282. — (ISNM Int. Series Numer. Math.; 132).
2. **Madych W.R., Nelson S.A.** Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions. II // Math. Comput. — 1990. — Vol. 54. — P. 211–230.
3. **Wendland H.** Scattered Data Approximation. — Cambridge: Cambridge University Press, 2005. — (Cambridge Monographs on Appl. and Comput. Math.; 17).
4. **Powell M.J.D.** The Theory of Radial Basis Function Approximation. — Cambridge, 1990. — (Preprint / DAMTP; NA11).
5. **Schaback R., Wendland H.** Characterization and construction of radial basis functions // Multivariate Approximation and Applications / N. Din, D. Leviatan, D. Levin, A. Pinkus. — Cambridge: Cambridge University Press, 2001. — P. 1–24.
6. **Роженко А.И.** Теория и алгоритмы вариационной сплайн-аппроксимации / Отв. ред. А.М. Мацокин. — Новосибирск: Изд-во ИВМиМГ СО РАН, 2005.
7. **Ковалков А.В.** Об одном алгоритме построения сплайнов с дискретными ограничениями типа неравенств // СЕРДИКА. Българско математическо списание. — 1983. — Т. 9, № 4. — С. 417–424.
8. **Роженко А.И., Федоров Е.А.** Об алгоритме сглаживания сплайном с двусторонними ограничениями // Сиб. журн. вычисл. математики / РАН. Сиб. отд-ние. — Новосибирск, 2016. — Т. 19, № 3. — С. 331–342; Перевод: Rozhenko A.I., Fedorov E.A. On the algorithm of smoothing by a spline with bilateral constraints // Num. Anal. and Appl. — 2016. — Vol. 9, № 3. — P. 257–266.
9. **Atteia M.** Fonctions “spline” et noyaux reproduissants d’Aronszain–Bergman // RAIRO. — 1970. — Vol. 4, № 3. — P. 31–43.
10. **Bezhaev A.Yu.** Reproducing mappings and vector spline-functions // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 2. — P. 91–109.
11. **Василенко В.А.** Теория сплайн-функций. — Новосибирск: Изд-во НГУ, 1978.
12. **Fasshauer G.E.** Green’s functions: taking another look at kernel approximation, radial basis functions, and splines // Approximation Theory XIII: San Antonio 2010 / M. Neamtu, L. Schumaker. — Springer, 2012. — P. 37–63. — (Springer Proc. in Math.; 13).
13. **Anselone P.M., Laurent P.J.** A general method for the construction of interpolating or smoothing spline-functions // Numer. Math. — 1968. — Vol. 12. — P. 66–82.

14. **Reinsch C.H.** Smoothing by spline functions. II // Numer. Math. — 1971. — Vol. 16, № 5. — P. 451–454.

15. **Гордонова В.И., Морозов В.А.** Численные алгоритмы выбора параметра в методе регуляризации // Журн. вычисл. матем. и мат. физики. — 1973. — Т. 13, № 3. — С. 539–545.

16. **Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A.** Variational Spline Theory. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1993. — (Bull. Novosibirsk Computing Center, Num. Anal.; Special issue 3); Другое издание: Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A. Variational Theory of Splines. — Kluwer: Academic/Plenum Publishers, 2001.

17. **Rozhenko A.I.** On optimal choice of spline-smoothing parameter // Bull. Novosibirsk Computing Center. Series Num. Anal. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1996. — Iss. 7. — P. 79–86.

18. **Rozhenko A.I.** A new method for finding an optimal smoothing parameter of the abstract smoothing spline // J. Approx. Theory. — 2010. — Vol. 162. — P. 1117–1127. — doi:10.1016/j.jat.2009.08.002.

19. **Мокшин П.В., Роженко А.И.** О поиске оптимального параметра сглаживающего сплайна // Сиб. журн. индустр. матем. — 2015. — Т. XVIII, № 2(62). — С. 63–73.

20. **Иванова Е.Д.** Ускорение сходимости алгоритма выбора параметра сглаживания методом асимптотических оценок: выпускная квалификационная работа магистра / Новосибирский государственный университет. Механико-математический факультет. Кафедра вычислительной математики. — Новосибирск, 2011.

21. **Роженко А.И.** Абстрактная теория сплайнов: Учеб. пособие. — Новосибирск: Изд. центр НГУ, 1999.

22. Grubbs' test for outliers. — https://en.wikipedia.org/wiki/Grubbs'_test_for_outliers.

23. Netflix Prize. — https://en.wikipedia.org/wiki/Netflix_Prize.

24. **Дюбрул О.** Использование геостатистики для включения в геологическую модель сейсмических данных. — Zeist: Europ. Assoc. of Geoscientists & Engineers (EAGE), 2002; Перевод: Dubrule O. Geostatistics for Seismic Data Integration in Earth Models. — Tulsa: Society of Exploration Geophysicists & European Association of Geoscientists and Engineers, 2003.

25. **Micchelli C.A.** Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions // Constr. Approx. — 1986. — Vol. 2. — P. 11–22.

26. **Duchon J.** Fonctions-spline à ènergie invariante par rotation. — Grenoble, 1976. — (Preprint / RR; 27).

27. **Игнатов М.И., Певный А.Б.** Натуральные сплайны многих переменных. — Л.: Наука. Ленингр. отд-ние, 1991.

28. **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.

29. **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 // Central European J. Math. — 2013. — Vol. 11, № 4. — P. 779–786.

30. **Mitáš L., Mitášová H.** General variational approach to the interpolation problem // Comput. Math. Appl. — 1988. — Vol. 16, № 12. — P. 983–992.

31. **Mitášová H., Mitáš L.** Interpolation by regularized splines with tension: I. Theory and implementation // Mathematical Geology. — 1993. — Vol. 25, iss. 6. — P. 641–655.

32. **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; Перевод: Rozhenko A.I., Shaidorov T.S. On spline approximation with a reproducing kernel method // Num. Anal. and Appl. — 2013. — Vol. 6, № 4. — P. 314–323.

33. **Роженко А.И.** О новом семействе условно положительно определенных радиальных базисных функций // Тр. ИММ УрО РАН. — 2013. — Т. 19, № 2. — С. 256–266.
34. **Rozhenko A.I.** On new families of radial basis functions // Constructive Theory of Functions / K. Ivanov, G. Nikolov, and R. Uluchev, eds. Marin Drinov Academic Publishing House, 2014. — P. 217–233. — http://www.math.bas.bg/mathmod/Proceedings_CTF/CTF–2013/files_CTF–2013/17–Rozhenko.pdf.
35. 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.
36. **Matérn B.** Spatial Variation. 2nd ed. — Berlin: Springer, 1986. — (Lect. Notes Stat.; 36).
37. **Duchon J.** Spline minimizing rotation-invariant seminorms in Sobolev spaces // Constructive Theory of Functions of Several Variables. — Berlin: Springer, 1977. — P. 85–100. — (Lect. Notes Math.; 571).
38. Метод главных компонент. — https://ru.wikipedia.org/wiki/Метод_главных_компонент; Principal Component Analysis. — https://en.wikipedia.org/wiki/Principal_component_analysis.

Поступила в редакцию 8 ноября 2017 г., в окончательном варианте 10 февраля 2018 г.

Литература в транслитерации

1. **Schaback R.** Native Hilbert spaces for radial basis functions. I // New Developments in Approximation Theory / M.W. Muller, M.D. Buhmann, D.H. Mache, M. Felten. — Basel: Birkhauser, 1999. — P. 255–282. — (ISNM Int. Series Numer. Math.; 132).
2. **Madych W.R., Nelson S.A.** Multivariate interpolation and conditionally positive definite functions. II // Math. Comput. — 1990. — Vol. 54. — P. 211–230.
3. **Wendland H.** Scattered Data Approximation. — Cambridge: Cambridge University Press, 2005. — (Cambridge Monographs on Appl. and Comput. Math.; 17).
4. **Powell M.J.D.** The Theory of Radial Basis Function Approximation. — Cambridge, 1990. — (Preprint / DAMTP; NA11).
5. **Schaback R., Wendland H.** Characterization and construction of radial basis functions // Multivariate Approximation and Applications / N. Din, D. Leviatan, D. Levin, A. Pinkus. — Cambridge: Cambridge University Press, 2001. — P. 1–24.
6. **Rozhenko A.I.** Teoriya i algoritmy variacionnoy splayn-approksimacii / Otv. red. A.M. Matsokin. — Novosibirsk: Izd-vo IVMiMG SO RAN, 2005.
7. **Kovalkov A.V.** Ob odnom algoritme postroeniya splaynov s diskretnymi ogranicheniyami tipa neravenstv // SERDIKA. B"lgarsko matematichesko spisanie. — 1983. — T. 9, № 4. — S. 417–424.
8. **Rozhenko A.I., Fedorov E.A.** Ob algoritme sglazhivaniya splaynom s dvustoronnimi ogranicheniyami // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2016. — T. 19, № 3. — S. 331–342; Perevod: Rozhenko A.I., Fedorov E.A. On the algorithm of smoothing by a spline with bilateral constraints // Num. Anal. and Appl. — 2016. — Vol. 9, № 3. — P. 257–266.
9. **Atteia M.** Fonctions “spline” et noyaux reproduissants d’Aronszain–Bergman // RAIRO. — 1970. — Vol. 4, № 3. — P. 31–43.
10. **Bezhaev A.Yu.** Reproducing mappings and vector spline-functions // Sov. J. Numer. Anal. Math. Modelling. — 1990. — Vol. 5, № 2. — P. 91–109.
11. **Vasilenko V.A.** Teoriya splayn-funkciy. — Novosibirsk: Izd-vo NGU, 1978.

12. **Fasshauer G.E.** Green's functions: taking another look at kernel approximation, radial basis functions, and splines // Approximation Theory XIII: San Antonio 2010 / M. Neamtu, L. Schumaker. — Springer, 2012. — P. 37–63. — (Springer Proc. in Math.; 13).

13. **Anselone P.M., Laurent P.J.** A general method for the construction of interpolating or smoothing spline-functions // Numer. Math. — 1968. — Vol. 12. — P. 66–82.

14. **Reinsch C.H.** Smoothing by spline functions. II // Numer. Math. — 1971. — Vol. 16, № 5. — P. 451–454.

15. **Gordonova V.I., Morozov V.A.** Chislennye algoritmy vybora parametra v metode regulyarizacii // Zhurn. vychisl. matem. i mat. fiziki. — 1973. — T. 13, № 3. — S. 539–545.

16. **Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A.** Variational Spline Theory. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1993. — (Bull. Novosibirsk Computing Center, Num. Anal.; Special issue 3); Другое издание: Bezhaev A.Yu., Vasilenko V.A. Variational Theory of Splines. — Kluwer: Academic/Plenum Publishers, 2001.

17. **Rozhenko A.I.** On optimal choice of spline-smoothing parameter // Bull. Novosibirsk Computing Center. Series Num. Anal. — Novosibirsk: NCC Publisher, 1996. — Iss. 7. — P. 79–86.

18. **Rozhenko A.I.** A new method for finding an optimal smoothing parameter of the abstract smoothing spline // J. Approx. Theory. — 2010. — Vol. 162. — P. 1117–1127. — doi:10.1016/j.jat.2009.08.002.

19. **Mokshin P.V., Rozhenko A.I.** O poiske optimal'nogo parametra sglazhivayushchego splayna // Sib. zhurn. industr. matem. — 2015. — T. XVIII, № 2(62). — S. 63–73.

20. **Ivanova E.D.** Uskorenie skhodimosti algoritma vybora parametra sglazhivaniya metodom asimptoticheskih ocenok: vypusknaya kvalifikacionnaya rabota magistra / Novosibirskiy gosudarstvennyy universitet. Mekhaniko-matematicheskiy fakul'tet. Kafedra vychislitel'noy matematiki. — Novosibirsk, 2011.

21. **Rozhenko A.I.** Abstraktnaya teoriya splaynov: Ucheb. posobie. — Novosibirsk: Izd. centr NGU, 1999.

22. Grubbs' test for outliers. — https://en.wikipedia.org/wiki/Grubbs'_test_for_outliers.

23. Netflix Prize. — https://en.wikipedia.org/wiki/Netflix_Prize.

24. **Dyubrul O.** Ispol'zovanie geostatistiki dlya vklyucheniya v geologicheskuyu model' seysmicheskih dannyh. — Zeist: Europ. Assoc. of Geoscientists & Engineers (EAGE), 2002; Perevod: Dubrule O. Geostatistics for Seismic Data Integration in Earth Models. — Tulsa: Society of Exploration Geophysicists & European Association of Geoscientists and Engineers, 2003.

25. **Micchelli C.A.** Interpolation of scattered data: distance matrices and conditionally positive definite functions // Constr. Approx. — 1986. — Vol. 2. — P. 11–22.

26. **Duchon J.** Fonctions-spline à ènergie invariante par rotation. — Grenoble, 1976. — (Preprint / RR; 27).

27. **Ignatov M.I., Pevnyy A.B.** Natural'nye splayny mnogih peremennyh. — L.: Nauka. Leningr. otd-nie, 1991.

28. **Volkov Yu.S., Miroshnichenko V.L.** Postroenie matematicheskoy modeli universal'noy harakteristiki radial'no-osevoy gidroturbiny // Sib. zhurn. industr. matem. — 1998. — T. 1, № 1. — S. 77–88.

29. **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 // Central European J. Math. — 2013. — Vol. 11, № 4. — P. 779–786.

30. **Mitáš L., Mitášová H.** General variational approach to the interpolation problem // Comput. Math. Appl. — 1988. — Vol. 16, № 12. — P. 983–992.

31. **Mitášová H., Mitáš L.** Interpolation by regularized splines with tension: I. Theory and implementation // Mathematical Geology. — 1993. — Vol. 25, iss. 6. — P. 641–655.

32. **Rozhenko A.I., Shaydorov T.S.** O postroenii splaynov metodom vosproizvodyashchih yader // Sib. zhurn. vychisl. matematiki / RAN. Sib. otd-nie. — Novosibirsk, 2013. — T. 16, № 4. — S. 365–376; Perevod: Rozhenko A.I., Shaidorov T.S. On spline approximation with a reproducing kernel method // Num. Anal. and Appl. — 2013. — Vol. 6, № 4. — P. 314–323.

33. **Rozhenko A.I.** O novom semeystve uslovno polozhitel'no opredelennyh radial'nyh bazisnyh funkciy // Tr. IMM UrO RAN. — 2013. — T. 19, № 2. — S. 256–266.

34. **Rozhenko A.I.** On new families of radial basis functions // Constructive Theory of Functions / K. Ivanov, G. Nikolov, and R. Uluchev, eds. Marin Drinov Academic Publishing House, 2014. — P. 217–233. — http://www.math.bas.bg/mathmod/Proceedings_CTF/CTF–2013/files_CTF–2013/17–Rozhenko.pdf.

35. Spravochnik po special'nym funkciyam s formulami, grafikami i matematicheskimi tablicami / Per. s angl. pod red. V.A. Ditkina i L.N. Karmazinoy; Pod red. M. Abramovica i I. Stigan. — M.: Nauka, 1979; Handbook of Mathematical Functions with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables / M. Abramowitz, I.A. Stegun, eds. — New York: Dover Publications, 1972.

36. **Matérn B.** Spatial Variation. 2nd ed. — Berlin: Springer, 1986. — (Lect. Notes Stat.; 36).

37. **Duchon J.** Spline minimizing rotation-invariant seminorms in Sobolev spaces // Constructive Theory of Functions of Several Variables. — Berlin: Springer, 1977. — P. 85–100. — (Lect. Notes Math.; 571).

38. Метод главных компонент. — https://ru.wikipedia.org/wiki/Метод_главных_компонент; Principal Component Analysis. — https://en.wikipedia.org/wiki/Principal_component_analysis.