

ХИМИКОТЕХНОЛОГИЧЕН И МЕТАЛУРГИЧЕН УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛТЕТ ПО ХИМИЧНО И СИСТЕМНО ИНЖЕНЕРСТВО
КАТЕДРА “МАТЕМАТИКА”

инж. Цветелин Цветанов Цветков

Метод на блуждаещите най-малки квадрати:
Оценки, примери и приложения

АВТОРЕФЕРАТ НА ДИСЕРТАЦИЯ

за придобиване на образователната и научна степен “доктор”

Научна специалност: 4.5 Математика (Математическо моделиране и приложение на математиката)

Научен ръководител: проф. д-р Светослав Иванов Ненов

Научно жури: проф. д-р А.Б. Дишлиев (ХТМУ),
председател, рецензент;
проф. д-р Св.И. Ненов (ХТМУ);
доц. д-р В.С. Грозданов (ЮЗУ),
рецензент;
доц. д-р Н.М. Китанов (ЮЗУ);
доц. д-р А.Т. Георгиева (ПУ).

София, 2018

Дисертационният труд е написан на 159 страници и съдържа 9 фигури. Цитирани са 283 източника. Представеният дисертационен труд е обсъден и приет за защита на заседание на катедра “Математика”.

Публичната защита на дисертационния труд ще се проведе на 22.06.2018 г. от 13 часа в Заседателна зала (зала 210), сграда “А” на ХТМУ.

Материалите са на разположение на интересуващите се на интернет страницата на ХТМУ и в отдел “Научни дейности”, стая 406, етаж 4, сграда “А” на ХТМУ.

СЪДЪРЖАНИЕ

1. Метод на най-малките квадрати	5
1.1. Класически метод	5
1.2. Матрична формулировка на класическата задача	6
1.3. Gauss алгоритъм	8
1.4. QR алгоритъм	8
1.5. SVD алгоритъм	9
2. Метод на блуждаещите най-малки квадрати	11
2.1. Някои свойства на матрицата на апроксимацията	30
2.2. Изчислителен алгоритъм	31
2.3. Оценки на нормата на матрицата апроксимацията	33
2.4. Апроксимация при експоненциално разстояние	35
2.5. Апроксимация на Levin	37
3. Приложение: Алгоритъм за определяне на цетаново число на нефтени деривати	38
3.1. Постановка на задачата	38
3.2. Апроксимация с данни: плътност и $T_{50\%}$	38
3.3. Апроксимация с данни: плътност и $T_{50\%}$, $T_{50\%}$, $T_{95\%}$ (ASTM D-86 стандарт): Backus-Gilbert подход	47
3.4. Реализация на метода	48
3.5. Верификация	51
Литература	51
Декларация: авторските права на представените в дисертацията резултати	58
Списък на публикации с автор Цветелин Цветанов Цветков, на които се основава дисертационния труд	59
Благодарности	61

Основни означения

$\mathbb{N}$	$\mathbb{N} = \{1, 2, \dots\}$
$\mathbb{N}_0$	$\mathbb{N}_0 = \{0, 1, \dots\}$
$\mathbb{R}^d$	реално d -мерно Евклидово пространство, $d \in \mathbb{N}$
$X^\perp$	перпендикулярното пространство на линейното пространство $X \subseteq \mathbb{R}^d$
$\dim(X)$	размерност на линейното пространство X
$\mathbf{A}, \mathbf{E}, \mathbf{D}, \dots$	матрици
$\mathbf{x}, \mathbf{y}, \boldsymbol{\eta}, \dots$	вектори
$\ \mathbf{x}\ $	Евклидова норма на вектор: $\ \mathbf{x}\ = \sqrt{x_1^2 + \dots + x_d^2}$, където $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d) \in \mathbb{R}^d$
$\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle$	скаларно произведение на вектори: $\langle \mathbf{x}, \mathbf{y} \rangle = x_1 y_1 + \dots + x_d y_d$, където $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d), \mathbf{y} = (y_1, \dots, y_d) \in \mathbb{R}^d$
$\mathbf{A}^t$	транспонирана матрица на $\mathbf{A}$
$\mathbf{I}_{d \times d}$	единична $(d \times d)$ -матрица
$\mathbf{0}_{d \times d}$	нулева $(d \times d)$ -матрица
$\text{null}(\mathbf{A})$	нулевото пространство (ядрото) на $(m \times d)$ -матрица $\mathbf{A}$: $\text{null}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{x} : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{0}\} \subseteq \mathbb{R}^d$
$\text{im}(\mathbf{A})$	изображението на $(m \times d)$ -матрица $\mathbf{A}$: $\text{im}(\mathbf{A}) = \{\mathbf{y} : \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d, \mathbf{y} = \mathbf{A}\mathbf{x}\} \subseteq \mathbb{R}^m$
$\text{rank}(\mathbf{A})$	ранк на матрицата $\mathbf{A}$
$\det(\mathbf{A})$	детерминанта на матрицата $\mathbf{A}$
$\text{egn}(\mathbf{A})$	собствена стойност на матрицата $\mathbf{A}$
$\sigma(\mathbf{A})$	сингуларна стойност на матрицата $\mathbf{A}$
$\ \mathbf{A}\ $	норма на матрица
$\ \mathbf{A}\ _2$	2-норма на матрица: $\ \mathbf{A}\ _2 = \sup\{\ \mathbf{A}\mathbf{x}\ : \ \mathbf{x}\ = 1\}$;

Някои специфични означения

$\mathcal{X}$	=	данни, $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, $y_i \in \mathbb{R}$;
$\{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, \dots, m\}$		
$\{p_1, \dots, p_l\}$		базисни функции, $p_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, l$;
$\mathcal{P}_l$		линейна обвивка на $\{p_1, \dots, p_l\}$;
$D = \begin{pmatrix} d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & d_m \end{pmatrix}$		диагонална матрица с размерност $(m \times m)$;
$E = \begin{pmatrix} p_1(\mathbf{x}_1) & p_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & p_l(\mathbf{x}_1) \\ p_1(\mathbf{x}_2) & p_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & p_l(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_1(\mathbf{x}_m) & p_2(\mathbf{x}_m) & \cdots & p_l(\mathbf{x}_m) \end{pmatrix}$	=	матрица с размерност $(m \times l)$;
E^t		матрица с размерност $(l \times m)$, транспонирана матрица на E ;
$A = \begin{pmatrix} D & E \\ E^t & 0 \end{pmatrix}$		блок-матрица на апроксимацията;
A_0	=	матрица с размерност $(m \times m)$;
$D^{-1} E (E^t D^{-1} E)^{-1} E^t$		
$A_1 = A_0 - I$		матрица с размерност $(m \times m)$;
$\mathbf{c} = \begin{pmatrix} p_1(\mathbf{x}) \\ p_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ p_l(\mathbf{x}) \end{pmatrix}$		вектор с размерност $(l \times 1)$;
$\mathbf{a} = D^{-1} E (E^t D^{-1} E)^{-1} \mathbf{c}$		вектор с размерност $(m \times 1)$;

1. МЕТОД НА НАЙ-МАЛКИТЕ КВАДРАТИ

1.1. Класически метод. Целта на метода на най-малките квадрати е да се определят параметрите $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$ на апроксимираща функция $f(\mathbf{x}, \alpha)$ така, че графикът на функцията да е “максимално близък” до дадени данни

$$\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, \dots, m\},$$

където $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, $y_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$.

По-горе поставихме кавички: “максимално близък”, защото в зависимост от конкретни приложни изследвания, опити или анализи на данни са известни различни дефиниции на това понятие: класически метод, глобални най-малки квадрати, обобщени глобални най-малки квадрати и др.

Класическият метод на най-малките квадрати се базира на определяне на минимума на сумата от квадратите на резидуалите r_i :

$$S(\alpha) = \sum_{i=1}^m r_i^2(\alpha),$$

където резидуалите r_i се дефинират чрез

$$r_i(\alpha) = y_i - f(\mathbf{x}_i, \alpha), \quad i = 1, \dots, m.$$

Разбира се, така поставената задача е еквивалента със задачата за определяне на решение на следната система (предполагаме, че функцията $f(\mathbf{x}_i, \alpha)$ е непрекъснато диференцируема относно α и непрекъсната относно $\mathbf{x}_i$)

$$\frac{\partial S(\alpha)}{\partial \alpha_j} = 2 \sum_{i=1}^m r_i \frac{\partial r_i}{\partial \alpha_j} = 0, \quad j = 1, \dots, n \quad (1.1)$$

или

$$\sum_{i=1}^m r_i \frac{\partial f(\mathbf{x}_i, \alpha)}{\partial \alpha_j} = 0, \quad j = 1, \dots, n. \quad (1.2)$$

В общия случай системата (1.2) се състои от n на брой нелинейни уравнения с n на брой неизвестни $\alpha = (\alpha_1, \dots, \alpha_n)$.

Ако апроксимиращата функция $f(\mathbf{x}, \alpha)$ е линейна (относно α_j):

$$f(\mathbf{x}, \alpha) = \sum_{j=1}^n \alpha_j \Phi_j(\mathbf{x})$$

където $\Phi_j(\mathbf{x})$ са дадени базисни функции, то задачата се свежда до следната линейна оптимизационна задача: Да се определи параметърът $\alpha_0 \in \mathbb{R}^n$ такъв, че

$$S(\alpha_0) = \min \left\{ \sum_{i=1}^m \left(y_i - \sum_{j=1}^n \alpha_j \Phi_j(\mathbf{x}) \right)^2 : \alpha \in \mathbb{R}^n \right\}. \quad (1.3)$$

Не е трудно да се съобрази, че при така направената хипотеза за линейност:

$$\alpha_0 = (\mathbf{X}^t \mathbf{X})^{-1} \mathbf{X}^t \mathbf{y}, \quad (1.4)$$

е решение на задачата (1.3), където $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_m)^t$ и $\mathbf{X} = (\Phi_j(\mathbf{x}_i))$ е реална $(m \times n)$ -матрица.

1.2. Матрична формулировка на класическата задача. Нека $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ и $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ са дадени матрица и вектор. Да се определи вектор $\mathbf{x}_0 \in \mathbb{R}^n$, такъв, че

$$\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}_0\|^2 = \min \left\{ \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \right\}. \quad (1.5)$$

Забележка 1.1. Ако положим $\mathbf{A} = (\Phi_j(\mathbf{x}_i))$, $\mathbf{b} = (y_1, \dots, y_m)^t$ и $\mathbf{x} = \alpha$, то не е трудно да се съобрази, че задачите (1.3) и (1.5) са еквивалентни.

Очевидно, интерес представлява случая $n < m$, т.е. дадените данни са повече от базисните функции. В този случай (брой редове по-голям от брой стълбове) е прието матрицата $\mathbf{A}$ да се нарича *тънка матрица*.

Отново чрез диференциране на нормата $\|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2$ в минимизационната задача (1.5) не е трудно да се съобрази, че всяко решение $\mathbf{x}$ на задачата (1.5) е решение и на системата (*нормална система* на задачата)

$$\mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^t \mathbf{b}. \quad (1.6)$$

Наистина:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \|\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}\|^2 &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left((\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x})^t (\mathbf{b} - \mathbf{A}\mathbf{x}) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{b}^t \mathbf{b} - \mathbf{b}^t \mathbf{A} \mathbf{x} - (\mathbf{A}\mathbf{x})^t \mathbf{b} + (\mathbf{A}\mathbf{x})^t (\mathbf{A}\mathbf{x}) \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \left(\mathbf{b}^t \mathbf{b} - \mathbf{b}^t \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{b}^t \mathbf{b} - 2\mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{b} + \mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x}) \\
&= -2\mathbf{b}^t \mathbf{A} + 2\mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A} \\
&= 2(\mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} - \mathbf{A}^t \mathbf{b})^t
\end{aligned}$$

доколкото (вж. [50, Proposition 7, Proposition 8])

$$\begin{aligned}
\mathbf{b}^t \mathbf{A} \mathbf{x} &= \langle \mathbf{b}, \mathbf{A} \mathbf{x} \rangle = \langle \mathbf{A} \mathbf{x}, \mathbf{b} \rangle = (\mathbf{A} \mathbf{x})^t \mathbf{b} = \mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{b}; \\
\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{b}) &= \mathbf{b}^t \mathbf{A}; \\
\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} (\mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x}) &= \mathbf{x}^t \left((\mathbf{A}^t \mathbf{A}) + (\mathbf{A}^t \mathbf{A})^t \right) = 2\mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A}.
\end{aligned}$$

Нека отбележим, че ако $\mathbf{A}$ е матрица с линейно независими стълбове ($\mathbf{A}$ е тънка матрица), то

$$\mathbf{x}_0 = (\mathbf{A}^t \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^t \mathbf{b} \quad (1.7)$$

Наистина, ако $\mathbf{A}$ е тънка матрица с линейно независими стълбове, то $\text{rank}(\mathbf{A}) = n$. Ето защо като използваме равенството

$$\dim(\text{im}(\mathbf{A})) + \dim(\text{null}(\mathbf{A})) = n$$

достигаем до извода $\dim(\text{null}(\mathbf{A})) = 0$. Но матриците $\mathbf{A}$ и $\mathbf{A}^t \mathbf{A}$ имат едно и също ядро:

$$\begin{aligned}
\mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0} &\Rightarrow \mathbf{x}^t \mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = 0 \Rightarrow (\mathbf{A} \mathbf{x})^t (\mathbf{A} \mathbf{x}) = 0 \Rightarrow \|\mathbf{A} \mathbf{x}\| = 0 \Rightarrow \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0}, \\
\mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0} &\Rightarrow \mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^t \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{0},
\end{aligned}$$

Ето защо квадратната матрица $\mathbf{A}^t \mathbf{A}$ има ядро с нулева размерност, т.е. тя е обратима.

Матрицата $\mathbf{A}^+ = (\mathbf{A}^t \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^t$ се нарича *псевдо-обратната матрица* на $\mathbf{A}$ или Moore-Penrose обратна на $\mathbf{A}$ (вж. [27, Example 3.3]).

Векторът

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A} \mathbf{x}_0$$

се нарича *резидуал-вектор*.

Теорема 1.1 (вж. [27], Theorem 3.5). *Валидни са следните твърдения:*

(1) Векторът $\mathbf{r}_0$ е перпендикулярен на пространството

$$\text{im} \mathbf{A} = \{\mathbf{z} : \exists \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \mathbf{z} = \mathbf{A} \mathbf{x}\} \subseteq \mathbb{R}^m.$$

- (2) Решението на линейната задача е единствено, тогава и само тогава когато $\text{rank}(\mathbf{A}) = n$.

1.3. Gauss алгоритъм. От въвеждането на метода на най-малките квадрати през 1805 година до компютърната епоха (приблизително след 1966-1967) метода се прилага чрез изследване и/или решаване на линейната системата (нормалната система на задачата)

$$\mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^t \mathbf{b}. \quad (1.8)$$

В общият случай се използват Gauss преобразования за решаването на тази система. Матрицата на нормалната системата е симетрична, т.е. възможно е да се използват симетрични Gauss елиминации.

Нека изрично отбележим неустойчивостта на задачата (1.8), т.е. “малки” промени в коефициентите на матрицата $\mathbf{A}$ може да породят (в общия случай) “големи” промяни в решението на системата (1.8). Пример: нека $m = n = 2$,

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Решението на системата (1.8) определяме от (1.7):

$$\begin{aligned} \mathbf{x}_0 &= (\mathbf{A}^t \mathbf{A})^{-1} \mathbf{A}^t \mathbf{b} \\ &= \begin{pmatrix} -\frac{1}{\varepsilon} \\ \frac{1}{\varepsilon} \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

1.4. QR алгоритъм. Известно е, че всяка реална квадратна матрица може да се представи като произведение на ортогонална матрица $\mathbf{Q}$ и горно-триъгълна матрица $\mathbf{R}$ (QR декомпозиция на матрица). Нещо повече: ако квадратната матрица е обратима, то това представяне е единствено при следното допълнително условие: диагоналните елементи на $\mathbf{R}$ да са положителни числа.

Разглеждаме уравнението (1.8), където $\mathbf{A}$ е матрица с размерност $(m \times n)$ и $n \leq m$.

Тогава (вж. например [33], [77], [34])

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{Q}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} = \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1,$$

където:

- (1) $\mathbf{Q}$ е ортогонална $(m \times m)$ -матрица ($\mathbf{Q}^t \mathbf{Q} = \mathbf{I}$);
- (2) $\mathbf{R}$ е горно-триъгълна $(m \times n)$ -матрица;
- (3) $\mathbf{Q}_1$ е ортогонална $(m \times n)$ -матрица;
- (4) $\mathbf{Q}_2$ е ортогонална $(m \times (m - n))$ -матрица;
- (5) $\mathbf{R}_1$ е горно-триъгълна $(n \times n)$ -матрица;
- (6) $\mathbf{0}$ е нулевата $((m - n) \times n)$ -матрица;

От равенството

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^t \mathbf{A} &= (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1)^t (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1) \\ &= \mathbf{R}_1^t \mathbf{Q}_1^t \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1 \\ &= \mathbf{R}_1^t \mathbf{R}_1 \end{aligned}$$

и факта $\dim(\text{null}(\mathbf{A}^t \mathbf{A})) = 0$ следва, че $\mathbf{R}_1$ е обратима матрица, т.е. горно-триъгълната матрица $\mathbf{R}_1$ има ненулеви елементи по главния диагонал.

Ето защо, може последователно да преобразуваме уравнението (1.8):

$$\begin{aligned} (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1)^t (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1) \mathbf{x} &= (\mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1)^t \mathbf{b}, \\ \mathbf{R}_1^t \mathbf{Q}_1^t \mathbf{Q}_1 \mathbf{R}_1 \mathbf{x} &= \mathbf{R}_1^t \mathbf{Q}_1^t \mathbf{b}, \\ \mathbf{R}_1^t \mathbf{R}_1 \mathbf{x} &= \mathbf{R}_1^t \mathbf{Q}_1^t \mathbf{b}, \\ \mathbf{R}_1 \mathbf{x} &= \mathbf{Q}_1^t \mathbf{b}, \end{aligned}$$

или

$$\mathbf{x}_0 = \mathbf{R}_1^{-1} \mathbf{Q}_1^t \mathbf{b}. \quad (1.9)$$

1.5. SVD алгоритъм. Да разгледаме отново системата (1.8):

$$\mathbf{A}^t \mathbf{A} \mathbf{x} = \mathbf{A}^t \mathbf{b}. \quad (1.10)$$

Нека

$$\mathbf{A} = \mathbf{U} \mathbf{\Sigma} \mathbf{V}^t = \begin{pmatrix} \mathbf{U}_1 & \mathbf{U}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{\Sigma}_1 & \mathbf{0}_{12} \\ \mathbf{0}_{21} & \mathbf{0}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{V}_1^t \\ \mathbf{V}_2^t \end{pmatrix} \quad (1.11)$$

е сингуларната декомпозиция на матрицата $\mathbf{A}$ (вж. теорема А.3.1 и забележка А.3.2). Нека отбележим, че:

- (1) $\mathbf{A}$ е $(m \times n)$ -матрица с линейно независими стълбове (следователно $\text{rank}(\mathbf{A}) = n \leq m$);
- (2) $\mathbf{U}$ е ортогонална $(m \times m)$ -матрица, т.е. $\mathbf{U} \mathbf{U}^t = \mathbf{U}^t \mathbf{U} = \mathbf{I}$;
 - (а) $\mathbf{U}_1$ е $(m \times s)$ -матрица;
 - (б) $\mathbf{U}_2$ е $(m \times (m - s))$ -матрица;

- (3) V е ортогонална $(n \times n)$ -матрица, т.е. $VV^t = V^tV = I$;
- (а) V_1 е $(n \times s)$ -матрица;
- (б) V_2 е $(n \times (n - s))$ -матрица;
- (4) Σ е диагонална $(n \times n)$ -матрица;
- (а) Σ_1 е $(s \times s)$ -матрица, с елементи по главния диагонал: $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_s > 0$ – ненулевите сингуларни стойности на матрицата A ;;
- (б) 0_{12} , 0_{21} и 0_{22} са нулеви матрици с размерности $(s \times (n - s))$, $((n - s) \times s)$ и $((n - s) \times (n - s))$.

От (1.10) и (1.11), последователно получаваме

$$\begin{aligned}(U\Sigma V^t)^t (U\Sigma V^t) x &= (U\Sigma V^t)^t b, \\ V\Sigma^t U^t U\Sigma V^t x &= V\Sigma^t U^t b, \\ V\Sigma^2 V^t x &= V\Sigma U^t b, \\ \Sigma^2 V^t x &= \Sigma U^t b,\end{aligned}$$

или

$$\begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0_{12} \\ 0_{21} & 0_{22} \end{pmatrix}^2 \begin{pmatrix} V_1^t \\ V_2^t \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} \Sigma_1 & 0_{12} \\ 0_{21} & 0_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_1^t \\ U_2^t \end{pmatrix} b.$$

Извършвайки матричните умножения в горното равенство, получаваме

$$\Sigma_1^2 V_1^t x = \Sigma_1 U_1^t b$$

Но Σ_1 е квадратна диагонална матрица с положителни елементи по главния диагонал. Следователно

$$\Sigma_1 V_1^t x = U_1^t b$$

Ето защо

$$x_0 = V_1 \Sigma_1^{-1} U_1^t b. \quad (1.12)$$

В таблица 1.1 е приведен анализ на броя на матричните операции за трите разгледани алгоритъма: директно решаване на системата (1.10) – формула (1.7), QR метод – формула (1.9) и SVD метод – формула (1.12).

Нека отбележим също така, че съществуват множество методи за анализ на системата (1.2) в общия случай: Регулация по Тихонов, Lasso метод, и др.

Формула	Брой операции		
	обратна матрица	матрично произведение	транспонирана матрица
(1.7)	1	3	1
(1.9)	1*	3	1
(1.12)	0**	3	2

Таблица 1.1. Броят на матрични операции. Забележка: * матрицата $\mathbf{R}_1$ е триъгълна; ** матрицата $\mathbf{\Sigma}_1$ е диагонална

Съществуват различни обобщения на метода на най-малките квадрати: тегловни методи, глобални най-малки квадрати, нелинейни методи, метод на блуждаещите най-малки квадрати, обратни задачи и др.

2. МЕТОД НА БЛУЖДАЕЩИТЕ НАЙ-МАЛКИ КВАДРАТИ

Едни от първите публикации свързани с метода на блуждаещите най-малки квадрати принадлежат на Shepard (1968), McLain (1974), Barnhill (1977), Grodon и Wixom (1978), Lancaster (1979).

За да илюстрираме метода ще приведем три примера в $\mathbb{R}$.

Пример 2.1. Разглеждаме данните представени в таблица 2.1

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_i	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1
y_i	0.34	0.49	0.68	0.92	1.1	1.4	1.7	2	2.4	2.7

Таблица 2.1. Стойности на функцията $f(x) = \sin\left(\frac{x}{10} + 0.5\right)^2 e^{\frac{x}{10}}$ в точките $x_i = \frac{i}{10}$, $i = 1, \dots, 10$ и точност 10^{-2}

В таблица 2.2 са представени полиномите от 2-ра, 3-та и 4-та степен, които апроксимират данните по метод на най-малките квадрати и съответните средноквадратични грешки.

степен на полином	полином	средноквадратична грешка
$n = 2$	$1.3181x^2 + 1.2075x + 0.2013$	0.0068
$n = 3$	$-0.3108x^3 + 1.8311x^2 + 0.971x + 0.228$	0.0066
$n = 4$	$-2.2727x^4 + 4.6892x^3 - 1.828x^2 + 1.971x + 0.1499$	0.0059

Таблица 2.2. Метод на най-малките квадрати: полиноми от 2-ра, 3-та и 4-та степен

Разбира се, полиномите в таблица 2.2 са получени чрез минимизиране на израза

$$\sum_{i=0}^{10} (y_i - p_n(x_i))^2,$$

относно коефициентите на съответния полином (p_n е полином от степен $n = 1, 2, 3$).

Нека $x \in [0, 1]$ е фиксирана точка.

При метода на блуждаещите най-малки квадрати минимизираме сумата

$$\sum_{i=1}^{10} W(|x - x_i|) (y_i - p_n(x_i))^2, \quad (2.1)$$

където:

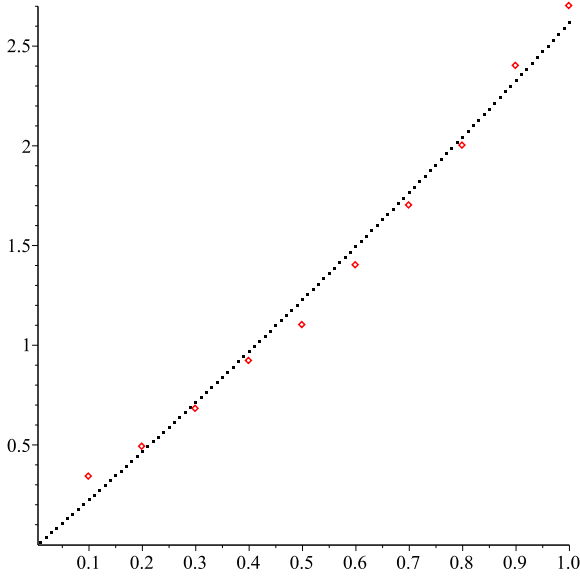
- (1) W е тегловна функция. Обикновено се избира $W(r) = r^2 \exp(-\alpha r^2)$, $W(r) = \exp(-\alpha r^2)$, $W(r) = \|r\|^{-\alpha}$ (където α е положителна константа), вж: [73].
- (2) $p_n(\cdot)$ е полином от степен n .

За да пресметнем стойността на апроксимиращата функция $\hat{p}(x)$ във фиксираната точка x :

- (1) Определяме коефициентите на полинома $p_n(\cdot)$ като минимум на сумата (2.1).
- (2) Полагаме $\hat{p}(x) = p_n(x)$.

Да разгледаме по-подробно случая $n = 1$, $p_1(x) = ax + b$ и нека $W(r) = e^{-\alpha r^2}$, където $\alpha \geq 0$ е реален параметър.

Нека α е фиксирано неотрицателно число.



Фигура 2.1. $\alpha = 1$

За всяка фиксирана точка $x \in [0, 1]$, определяме коефициентите на полинома $p_1(x)$ като минимум на сумата

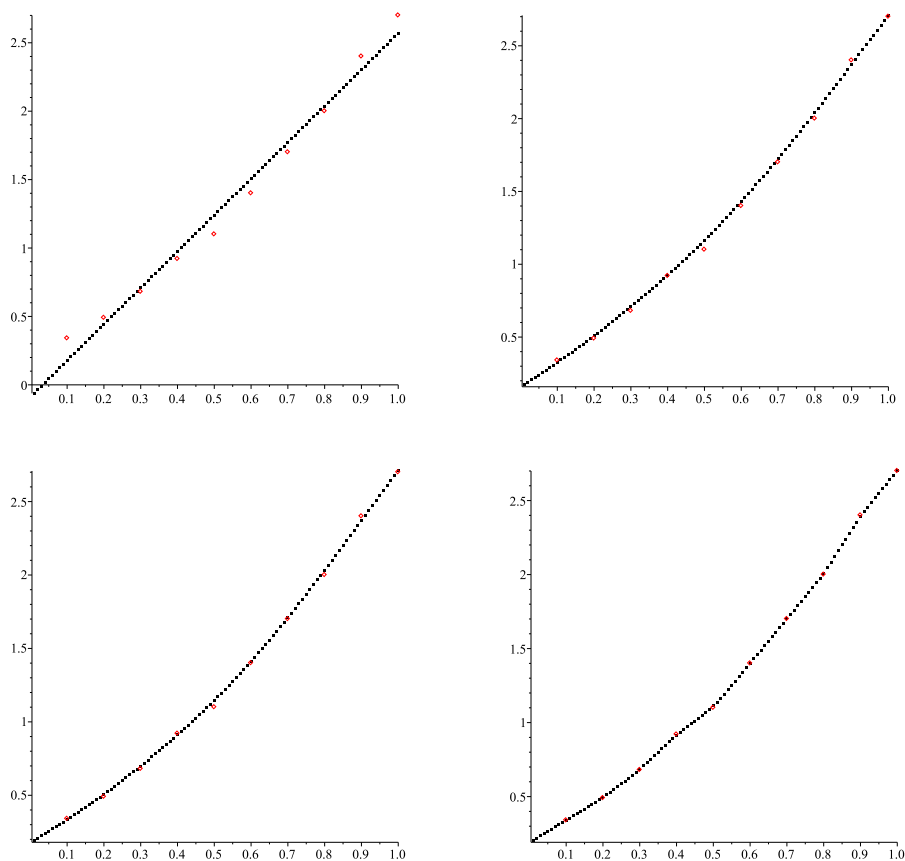
$$\sum_{i=1}^{10} e^{-\alpha(x-x_i)^2} (y_i - p_1(x_i))^2. \quad (2.2)$$

Не е трудно да онагледим получената апроксимация $\hat{p}(x) = \hat{p}(x, \alpha)$ при $x \in [0, 1]$. За целта използваме програмния софтуер Maple. Графикът, представен на фигура 2.1 е генериран със стъпка $h = 0.01$, т.е. за всяка фиксирана точка $x = ih$, $i = 0, \dots, 100$ е определен минимумът на израза (2.2) в точката x .

Графики на апроксимиращата функция, при различни стойности на параметъра α са представени на фигура 2.2.

Не е трудно да се съобрази, че:

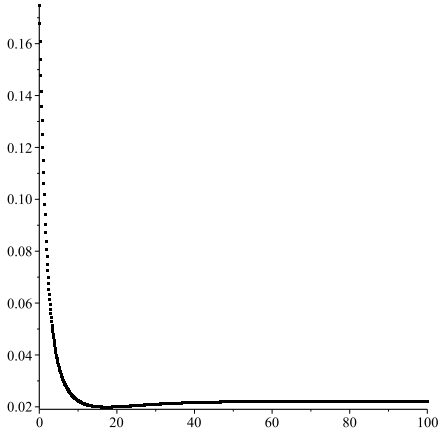
- (1) Средноквадратичната грешка клони към нула при $\alpha \rightarrow \infty$.
- (2) При достатъчно “големи” стойности на параметъра $\alpha \geq 0$, модулът от разликата между междинни стойности (стойности на аргумента



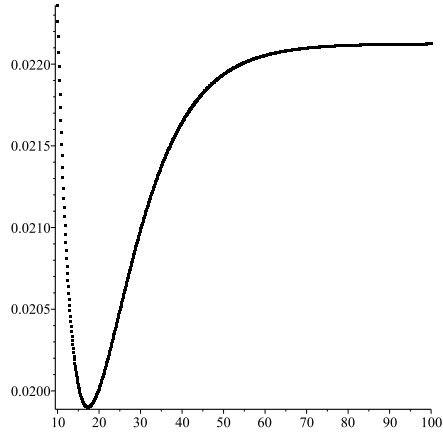
Фигура 2.2. График на $\hat{p}(x)$ в интервала $[0, \dots, 10]$ при $\alpha = 0$ (метод на най-малките квадрати), $\alpha = 10$, $\alpha = 20$ и $\alpha = 100$, съответно

x които не участват в таблица 2.1) на функцията $f(x)$ и апроксимираната стойност е “голям” въпреки, че средноквадратичната грешка е “малка”, вж фигура 2.2.

За да анализираме поведението на средноквадратичната грешка като функция на параметъра α и за да определим доколко избраният модел (в повечето случай степента на полинома) е адекватен относно разглежданите данни въвеждаме ново понятие *блуждаеща средноквадратична грешка*:



Фигура 2.3



Фигура 2.4

За всяко $i = 1, \dots, 10$ заедно с данните представени в таблица 2.1 разглеждаме 10 на брой, различни таблици от 9 на брой данни. Всяка от тези таблици се конструира от данните в таблица 2.1 посредством премахване на i -ят “стълб”, т.е. данна с индекс i . За всяка от така получените таблици съставяме целевата функция

$$\sum_{j=1, j \neq i}^{10} e^{-\alpha(x_j - x)^2} (y_j - p_1(x_j))^2, \quad i = 1, \dots, 10. \quad (2.3)$$

Нека $\hat{p}_{1i}(x, \alpha)$ е апроксимиращата функция (получена чрез полином от първа степен), по метод на блуждаещите най-малки квадрати, $i = 1, \dots, 10$.

Естествено е да определим параметъра α като решение на минимизационната задача

$$\Phi(\alpha) = \sum_{i=1}^{10} (y_i - \hat{p}_{1i}(x_i, \alpha))^2 \longrightarrow \min. \quad (2.4)$$

Отново чрез използване на Maple, може да представим дискретни точки от графика на функцията $\Phi(\alpha)$, например за всички цели числа $\alpha = i$ от 0 до 100, вж. фигура 2.3; на фигура 2.4 са представени дискретни точки от графика на $\Phi(\alpha)$ в интервала $[10, 100]$.

Минимумът на функцията $\Phi(\alpha)$ се достига (приблизително) при $\alpha = 17.3$ и той е $\Phi(17.3) = 0.01$.

Средноквадратичната грешка при $\alpha = 17.3$ е приблизително 0.0021.

x	$f(x) = \sin^2\left(\frac{x}{10} + 0.5\right) e^{\frac{x}{10}}$	$\hat{p}_1(x, 10)$	$\hat{p}_1(x, 20)$	$\hat{p}_1(x, 100)$
0.35	0.78287	0.81299	0.80310	0.79991
0.51	1.14802	1.18893	1.16988	1.13789
0.86	2.23244	2.23746	2.23605	2.23902

Таблица 2.3

Функцията $\Phi(\alpha)$ е растяща при $\alpha > 17.3$. Следователно за по-големи стойности на параметъра α , задачата е ”по-зависима” от всички стойности на данните в таблица 2.1. В този случай не може да очакваме резултатите в ”междинни” точки да са достатъчно близки до реалните стойности, вж. таблица 2.3.

Забележка 2.1. Възможно е да се формулират други критерии за изследване на поведението на апроксимацията по метода на блуждаещите най-малки квадрати. Ще разгледаме по-подробно тази задача в глава 5.

Пример 2.2. Разглеждаме данните $\mathcal{X} = \{(x_i, y_i) : i = 1, \dots, 100\}$, дефинирани чрез

$$x_i = i, \quad y_i = \sin\left(\frac{2\pi x_i}{100}\right) + \frac{R_i}{100},$$

където $R(x_i)$ е случайно генерирано число в интервала $[0, 10]$, $i = 1, \dots, 100$. Изчисленията в този пример са извършени чрез софтуерният продукт Maple 18; за случайно генериране на числа е използван пакетът RandomTools; точността на изчисления е 10^{-10} .

Графикът на данните е представен на фигура 2.5.

Ако разгледаме класическата задача за интерполация по метод на най-малките квадрати с апроксимираща функция

$$f(x, \alpha_1, \alpha_2, \alpha_3, \alpha_4) = \alpha_1 \sin(\alpha_2 x + \alpha_3) + \alpha_4,$$

получаваме следната система

$$\frac{\partial}{\partial \alpha_i} \sum_{i=1}^m (\alpha_1 \sin(\alpha_2 x_i + \alpha_3) + \alpha_4 - y_i)^2 = 0, \quad i = 1, 2, 3, 4.$$

Системата е нелинейна и за определяне на приближено решение сме използвали GlobalOptimization Toolbox 18.0. Получаваме

$$\begin{aligned}\tilde{\alpha}_1 &= 1.00060585782252, & \tilde{\alpha}_2 &= 25.1955949629266, \\ \tilde{\alpha}_3 &= 81.6777273341817, & \tilde{\alpha}_4 &= 0.0570899539094581\end{aligned}$$

и средноквадратична грешка

$$\frac{1}{m} \sqrt{\sum_{i=1}^m (\tilde{\alpha}_1 \sin(\tilde{\alpha}_2 x_i + \tilde{\alpha}_3) + \tilde{\alpha}_4 - y_i)^2} = 0.00288615674338672410.$$

За да приложим метода на блуждаещите най-малки квадрати, аналогично на пример 2.1, нека $n = 1$, $p_1(x) = ax + b$ и нека $W(r) = e^{-\alpha r^2}$, където $\alpha \geq 0$ е реален параметър.

За всяка фиксирана точка $x \in [0, 100]$, определяме коефициентите на полинома $p_1(x)$ като минимум на сумата

$$\sum_{i=1}^{10} e^{-\alpha(x-x_i)^2} (y_i - p_1(x_i))^2. \quad (2.5)$$

Графиките, представени на фигури 2.6 са генерирани със стъпка $h = 0.1$ (т.е. за всяка фиксирана точка $x = ih$, $i = 0, \dots, 1000$ е определен минимумът на израза (2.5) в точката x) при $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.05$, $\alpha = 0.2$ и $\alpha = 1$, съответно.

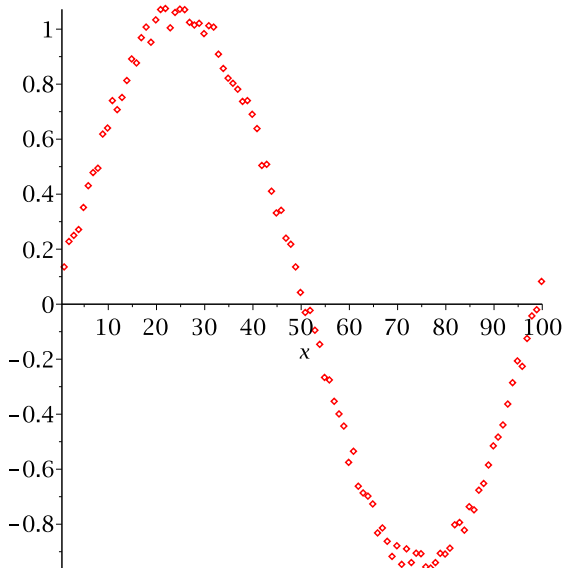
За да анализираме поведението на средноквадратичната грешка като функция на параметъра α използваме блуждаеща средноквадратична грешка: За всяко $i = 0, \dots, 100$ заедно с изходните данни разглеждаме 100 на брой, различни таблици от 99 на брой данни. Всяка от тези таблици се конструира от изходните данни посредством премахване на i -ят “стълб”, т.е. данна с индекс i . За всяка от така получените таблици съставяме целевата функция

$$\sum_{j=1, j \neq i}^{10} e^{-\alpha(x_j - x)^2} (y_j - p_1(x_j))^2, \quad i = 1, \dots, 100. \quad (2.6)$$

Нека $\hat{p}_{1i}(x, \alpha)$ е полиномът от първа степен, получен по метод на блуждаещите най-малки квадрати, $i = 1, \dots, 100$.

В този случай блуждаещата средноквадратична грешка е

$$\Phi(\alpha) = \sum_{j=1}^{100} (y_i - \hat{p}_{1i}(x_i))^2. \quad (2.7)$$



Фигура 2.5

Отново чрез използване на Maple, може да представим дискретни точки от графика на функцията $\Phi(\alpha)$, например за всички числа $\alpha = i/10000$, $i = 0, \dots, 100$.

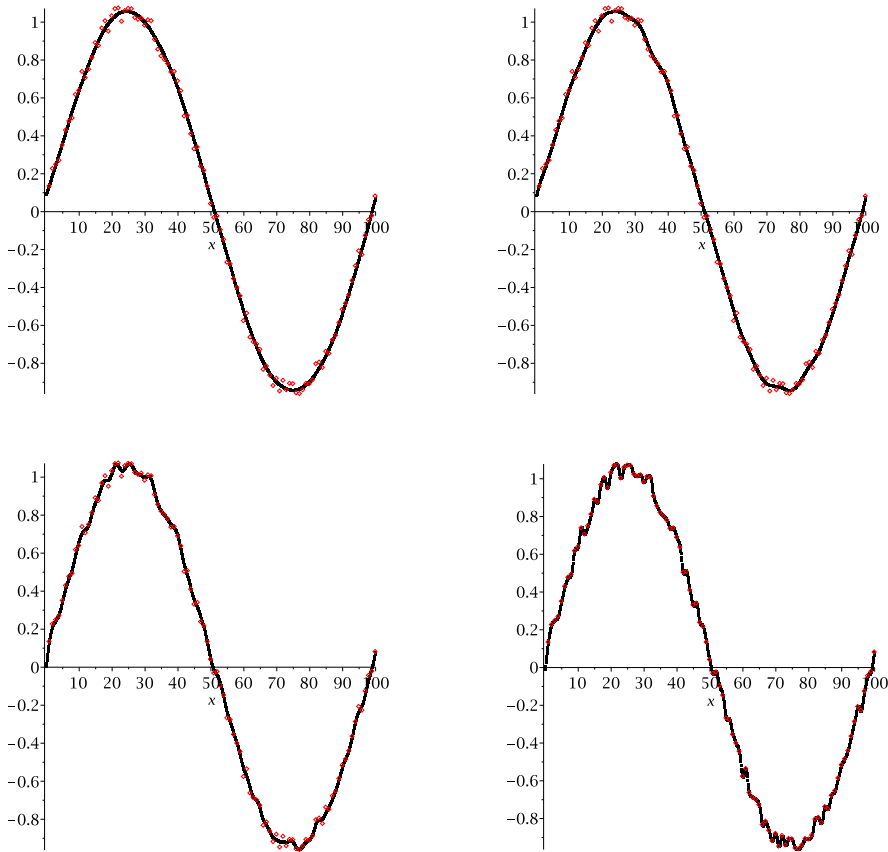
На фигура 2.7 са представени графиките на функцията $\Phi(\alpha)$ в интервала $[0, 0.01]$ и $[0.002, \dots, 0.01]$, съответно.

Минимума на функцията $\Phi(\alpha)$ се достига приблизително при $\alpha = 0.006$ и $\Phi(0.006) = 0.096571358549965$.

Ето защо може да изберем $\alpha = 0.006$, т.е. да използваме тегловна функция функцията $W(r) = e^{-0.006r^2}$. В този случай получаваме средноквадратична грешка 0.0000737137437577742. На фигура 2.8 са представени дадените данни и апроксимиращата функция.

Пример 2.3. Разглеждаме данните представени в таблица 2.4

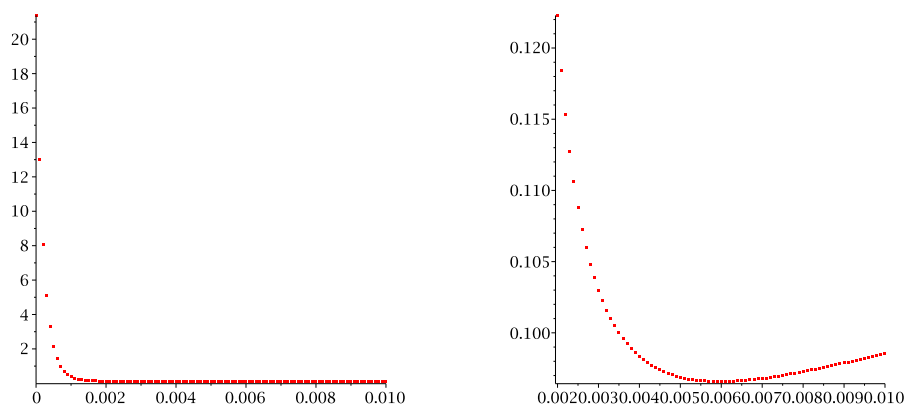
Нека $n = 1$, $p_1(x) = ax + b$ и нека $W(r) = e^{-\alpha r^2}$, където $\alpha \geq 0$ е реален параметър. Аналогично на предходните примери на фигури 2.9 са представени графиките на апроксимиращите функции по метода на блуждаещите



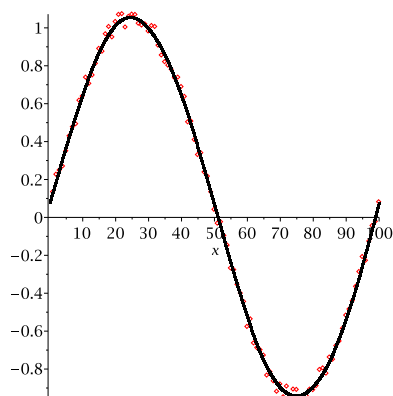
Фигура 2.6. График на $\hat{p}(x)$ в интервала $[0, \dots, 100]$ при $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.05$, $\alpha = 0.2$ и $\alpha = 1$, съответно

i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
x_i	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
y_i	2.3	1.6	1	0.83	0.83	0.95	1.1	1.1	1	0.95

Таблица 2.4. Стойности на функцията $f(x) = \exp\left(\frac{\sin(x)}{x}\right)$ в точките $x_i = i$, $i = 1, \dots, 10$ и точност 10^{-2}



Фигура 2.7. График на $\Phi(\alpha)$ в интервала $[0, 0.01]$ и $[0.002, \dots, 0.01]$, съответно

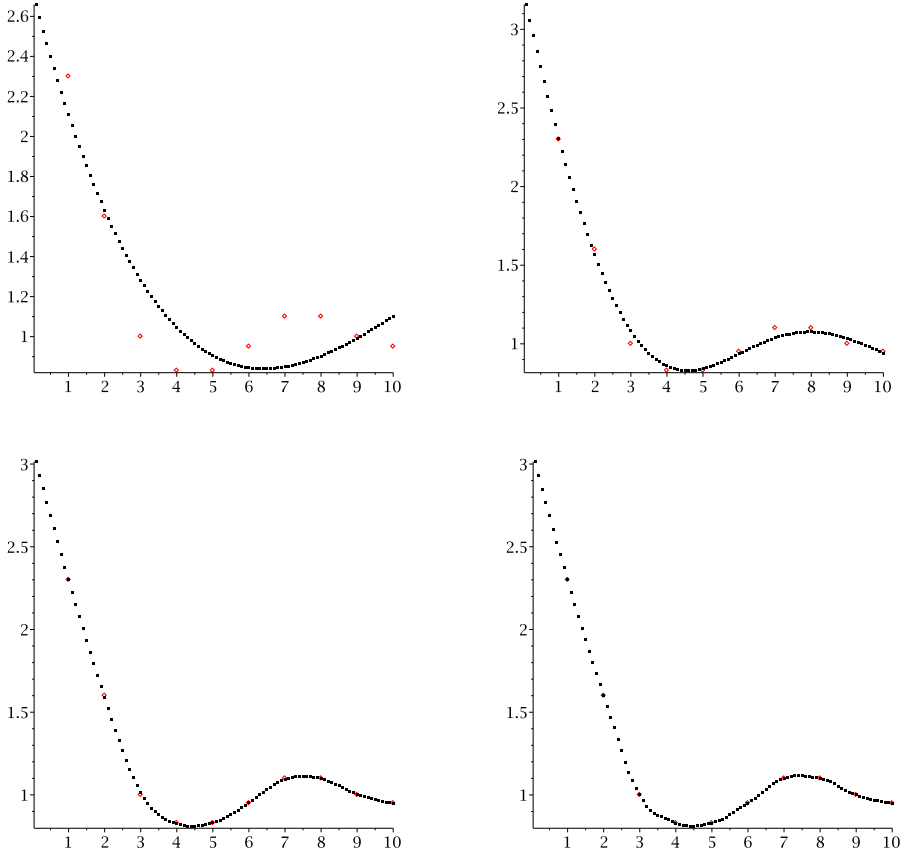


Фигура 2.8

най-малки квадрати, генерирани със стъпка $h = 0.1$ при $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.05$, $\alpha = 0.2$ и $\alpha = 1$, съответно.

На фигура 2.10 е представен графикът на функцията $\Phi(\alpha)$ в интервала $[0, 10]$. В този случай функцията $\Phi(\alpha)$ няма екстремум.

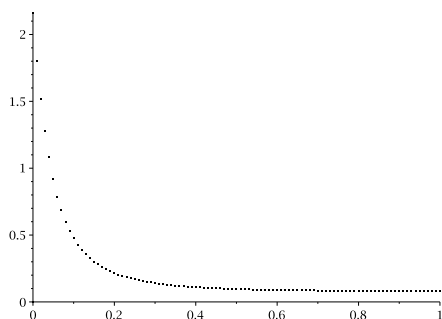
Нека $n = 2$, $p_1(x) = ax^2 + bx + c$ и нека $W(r) = e^{-\alpha r^2}$, където $\alpha \geq 0$ е реален параметър. В този случай функцията $\Phi(\alpha)$ има екстремум, вж. фигура 2.11.



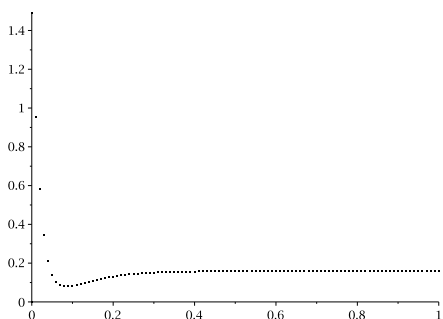
Фигура 2.9. График на $\hat{p}(x)$ в интервала $[0, \dots, 10]$ при $\alpha = 0.01$, $\alpha = 0.1$, $\alpha = 0.5$ и $\alpha = 1$, съответно

Нека $n = 1$, $p_1(x) = 1$ и нека $W(r) = e^{-\alpha r^2} - 1$, където $\alpha \geq 0$ е реален параметър. Очевидно $W(0) = 0$, т.е. тегловните функции се анулират при $x = x_i$. В този случай апроксимацията е интерполационна, т.е. графикът на апроксимиращата функция съдържа точките с координати (x_i, y_i) , $i = 1, \dots, 10$. График на интерполационната апроксимация и данните е представен на фигура 2.12.

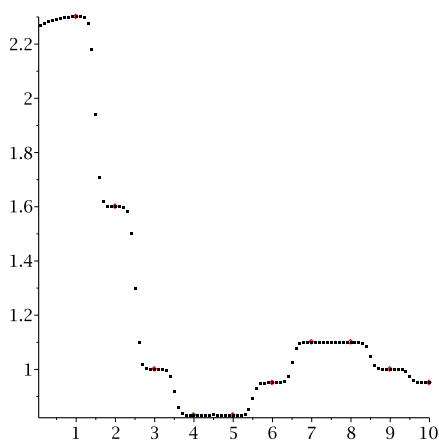
От приведените по-горе примери следват следните основни въпроси и задачи:



Фигура 2.10



Фигура 2.11



Фигура 2.12

- (1) Метод за определяне на коефициентите в линейната апроксимация по метод на блуждаещите най-малки квадрати. Формулиране на условия за интерполационна апроксимация.
- (2) Оценка на коефициентите в линейната апроксимация по метод на блуждаещите най-малки квадрати.
- (3) Оценка на апроксимацията на дадена непрекъсната функция (вкл. брой точки необходими за апроксимиране със зададена точност).
- (4) Изследване на свойства на блуждаеща средноквадратична грешка.

Да разгледаме общата задача в реално d -мерно пространство. Нека $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_m\} \subset \mathbb{R}^d$ са дадени (несъвпадащи: $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}_j$ ако $i \neq j$) точки в $\mathbb{R}^d$ и нека:

- (1) $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$ е дадена непрекъсната функция.
- (2) $\{p_1, \dots, p_l\}$ са дадени непрекъснати, линейно независими функции и нека $\mathcal{P}_l$ е линейната им обвивка; $p_i : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, l$.
- (3) $W : (0, \infty) \rightarrow (0, \infty)$ е непрекъснато диференцируема и неотрицателна функция; съществува границата $W(+0) \leq \infty$.

Обикновено функцията $W(\cdot)$ се нарича *обратна теглова функция*. В настоящият дисертационен труд винаги с W ще означаваме обратната теглова функция. Ще използваме и означението $W(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = W(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|)$.

Функцията

$$w(r) = \begin{cases} \frac{1}{W(r)}, & \text{ако } (r > 0) \text{ или } (r = 0, \text{ и } W(0) < \infty); \\ 0, & \text{ако } (r = 0 \text{ и } W(0) = \infty) \end{cases}$$

се нарича *теглова функция*. Ще използваме и означението $w(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = w(\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|)$.

Примери за теглови функции $W(r)$ и $w(r)$, $r \geq 0$:

$$\begin{aligned} W(r) &= e^{-\alpha^2 r^2} && \text{exp-weight,} \\ W(r) &= r^{-\alpha^2} && \text{Shepard weights,} \\ w(r) &= r^2 e^{\alpha^2 r^2} && \text{McLain weight,} \\ w(r) &= e^{\alpha^2 r^2} - 1 && \text{see Levin's works.} \end{aligned}$$

Дефиниция 2.1. Нека $\mathbf{x}$ е фиксирана точка.

Казваме, че числото $\hat{L}(f)(\mathbf{x})$ е апроксимация на числото $f(\mathbf{x})$ по метода на *блуждаещите най-малките квадрати*, ако $\hat{L}(f)(\mathbf{x})$ минимизира (относно всички $p \in \mathcal{P}_l$) изрази

$$\sum_{i=1}^m W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})(p(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_i))^2$$

т.е.

$$\hat{L}(f)(\mathbf{x}) = \min \left\{ \sum_{i=1}^m W(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})(p(\mathbf{x}_i) - f(\mathbf{x}_i))^2 : p \in \mathcal{P}_l \right\}. \quad (2.8)$$

Казваме, че функцията $\hat{L}(f)$ е апроксимация на функцията f по метода на блуждаещите най-малките квадрати, ако за всяко $\mathbf{x}$, $\hat{L}(f)(\mathbf{x})$ е апроксимация на числото $f(\mathbf{x})$ по метода на блуждаещите най-малките квадрати.

За да определим коефициентите $\{a_1, \dots, a_m\}$ в линейната апроксимация

$$\hat{L}(f) = \sum_{i=1}^m a_i f(\mathbf{x}_i),$$

разглеждаме задачата за минимизиране на квадратичната форма

$$\mathcal{Q} = \sum_{i=1}^m w(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) a_i^2, \quad (2.9)$$

при условия

$$\sum_{i=1}^m a_i p_j(\mathbf{x}_i) = p_j(\mathbf{x}), \quad j = 1, \dots, l. \quad (2.10)$$

Полагаме:

$$\begin{aligned} \mathbf{E} = (p_j(\mathbf{x}_i)) &= \begin{pmatrix} p_1(\mathbf{x}_1) & p_2(\mathbf{x}_1) & \cdots & p_l(\mathbf{x}_1) \\ p_1(\mathbf{x}_2) & p_2(\mathbf{x}_2) & \cdots & p_l(\mathbf{x}_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ p_1(\mathbf{x}_m) & p_2(\mathbf{x}_m) & \cdots & p_l(\mathbf{x}_m) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{D} &= 2 \begin{pmatrix} w(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w(\mathbf{x}_m, \mathbf{x}) \end{pmatrix}, \\ \mathbf{a} &= \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\lambda} = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \vdots \\ \lambda_l \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \begin{pmatrix} p_1(\mathbf{x}) \\ p_2(\mathbf{x}) \\ \vdots \\ p_l(\mathbf{x}) \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Ще казваме, че са валидни условията (H2) ако

H2.1. $w(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})$ са неотрицателни и диференцируеми функции, $w(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) >$

0 при $\mathbf{x}_i \neq \mathbf{x}$, $i = 1, \dots, m$.

H2.2. $\det(\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E}) \neq 0$.

H2.3. $1 \leq l < m$.

Валидна е следната теорема (вж. [73])

Теорема 2.1. *Нека са изпълнени условията (H2).*

Тогава:

(1) Апроксимацията, дефинирана чрез (2.9) и (2.10) е

$$\hat{L}(f) = \sum_{i=1}^m a_i f(\mathbf{x}_i), \quad (2.11)$$

където

$$\mathbf{a} = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1} \mathbf{c}. \quad (2.12)$$

- (2) Ако $w(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i) = 0$ за всяко $i = 1, \dots, m$, то апроксимацията е интерполационна, т.е. от $\mathbf{x} = \mathbf{x}_i$ за някое $i = 1, \dots, m$ следва, че $\hat{L}(f)(\mathbf{x}) = f(\mathbf{x})$.
- (3) Задачата за определяне на апроксимация по метода на блуждаещите най-малките квадрати (2.8) (вж. дефиниция 2.1) съвпада с определената апроксимация (2.11).

По-надолу ще покажем, че модула на разликата на дадената функция и нейната апроксимация $|f(\mathbf{x}) - \hat{L}(f)(\mathbf{x})|$ се определя от нормата на вектора $\mathbf{a}(\mathbf{x})$. За целта ще разгледаме отделно интерполационна и неинтерполационна апроксимация.

1. Нека $\hat{L}(f)(\mathbf{x})$ е интерполационна апроксимация на функцията $f(\mathbf{x})$ по метода на блуждаещите най-малки квадрати. За всяка точка $\mathbf{x}$ нека $k_0 = k_0(\mathbf{x}) = 1, \dots, m$ е най-малкото цяло число което се определя от равенството

$$\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_{k_0}\| = \min \{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\| : i = 1, \dots, m\},$$

т.е. нека $\mathbf{x}_{k_0}$ е “най-близка” точка до $\mathbf{x}$.

Тогава (интерполацията е интерполационна, т.е. $\hat{L}(f)(\mathbf{x}_{k_0}) = f(\mathbf{x}_{k_0})$)

$$\begin{aligned}
 |f(\mathbf{x}) - \hat{L}(f)(\mathbf{x})| &= \left| f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_{k_0}) + \hat{L}(f)(\mathbf{x}_{k_0}) - \sum_{i=1}^m a_i(\mathbf{x})f(\mathbf{x}_i) \right| \\
 &\leq |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_{k_0})| + \left| \sum_{i=1}^m a_i(\mathbf{x}_{k_0})f(\mathbf{x}_i) - \sum_{i=1}^m a_i(\mathbf{x})f(\mathbf{x}_i) \right| \\
 &= |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_{k_0})| + \sum_{i=1}^m |f(\mathbf{x}_i)| |a_i(\mathbf{x}_{k_0}) - a_i(\mathbf{x})|.
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

От доказателството на теорема 3.1.1 (вж. също така забележка 3.2.1 от дисертационния труд) следва, че

$$\mathbf{a}(\mathbf{x}_{k_0}) = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad k_0\text{-ти ред} \quad , \tag{2.14}$$

Ето защо

$$|a_i(\mathbf{x}_{k_0}) - a_i(\mathbf{x})| \leq \|\mathbf{a}(\mathbf{x})\| + 1, \quad i = 1, \dots, m$$

или

$$\begin{aligned}
 |f(\mathbf{x}) - \hat{L}(f)(\mathbf{x})| &\leq |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_{k_0})| + \sum_{i=1}^m |f(\mathbf{x}_i)| |a_i(\mathbf{x}_{k_0}) - a_i(\mathbf{x})| \\
 &\leq |f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_{k_0})| + (\|\mathbf{a}(\mathbf{x})\| + 1) \sum_{i=1}^m |f(\mathbf{x}_i)|.
 \end{aligned} \tag{2.15}$$

За оценка на модула $|f(\mathbf{x}) - f(\mathbf{x}_{k_0})|$ може да използваме например теоремата за средните стойности (при допълнително условие за диференцируемост на функцията f).

Ето защо е необходимо да се получат оценки “от горе” на нормата $\|\mathbf{a}(\mathbf{x})\|$.

2. Нека $\hat{L}(f)(\mathbf{x})$ е неинтерполационна апроксимация на функцията $f(\mathbf{x})$ по метода на блуждаещите най-малки квадрати, т.е. нека $w(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i) \neq 0$, $i = 1, \dots, m$.

По-надолу, за простота на изложението ще предполагаме, че $d = 1$. Не е трудно да се съобрази, че аналогични разсъждения са валидни и за функции дефинирани в многомерно пространство.

Ще предполагаме, че са изпълнени следните условия:

НЗ.1. Валидни са условията (Н2).

НЗ.2. $p_1(x) = 1, p_2(x) = x, \dots, p_{l+1}(x) = x^l$ са мономи от степен не по-голяма от l , т.е. $\mathcal{P}_{l+1}$ е пространството от всички полиноми от степен не по-голяма от l в $\mathbb{R}$.

НЗ.3. $\{x_1, \dots, x_m\} \subset [a, b]$ и $a = x_1 < x_2 < \dots < x_m = b$.

НЗ.4. $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ е $(l+1)$ пъти непрекъснато диференцируема функция.

Нека са изпълнени условията (НЗ). Нека с

$$\hat{L}(f)(x) = \sum_{i=1}^m a_i f(x_i)$$

означим апроксимацията на $f(x)$ по метода на блуждаещите най-малки квадрати.

Тогава, функцията $\hat{L}(f)(x)$ минимизира квадратичната форма

$$\mathcal{Q} = \sum_{i=1}^m W(x_i, x) a_i^2$$

при допълнителни условия:

$$\sum_{i=1}^m a_i p_j(x_i) = p_j(x), \quad j = 1, \dots, l+1. \quad (2.16)$$

Ето защо, ако

$$p(x) = b_1 + b_2 x + \dots + b_{l+1} x^l \in \mathcal{P}_l \quad (2.17)$$

е произволен полином, $b_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, l+1$, то от факта, че $\{p_1, \dots, p_{l+1}\}$ е стандартния базис в $\mathcal{P}_l$ следва, че може да препишем (2.17) във вида

$$p(x) = b_1 p_1(x) + b_2 p_2(x) + \dots + b_{l+1} p_{l+1}(x). \quad (2.18)$$

От друга страна, за всеки от базистните полиноми $\{p_1, \dots, p_{l+1}\}$ апроксимацията е точна, т.е. валидни са равенства (2.16). Следователно

$$\begin{aligned}
 p(x) &= b_1 \left(\sum_{i=1}^m a_i p_1(x_i) \right) + b_2 \left(\sum_{i=1}^m a_i p_2(x_i) \right) + \dots + b_{l+1} \left(\sum_{i=1}^m a_i p_{l+1}(x_i) \right) \\
 &= b_1 a_1 p_1(x_1) + b_1 a_2 p_1(x_2) + \dots + b_1 a_m p_1(x_m) \\
 &\quad + b_2 a_1 p_2(x_1) + b_2 a_2 p_2(x_2) + \dots + b_2 a_m p_2(x_m) \\
 &\quad + \dots \\
 &\quad + b_{l+1} a_1 p_{l+1}(x_1) + b_{l+1} a_2 p_{l+1}(x_2) + \dots + b_{l+1} a_m p_{l+1}(x_m) \\
 &= a_1 (b_1 p_1(x_1) + b_2 p_2(x_1) + \dots + b_{l+1} p_{l+1}(x_1)) \\
 &\quad + a_2 (b_1 p_1(x_2) + b_2 p_2(x_2) + \dots + b_{l+1} p_{l+1}(x_2)) \\
 &\quad + \dots \\
 &\quad + a_m (b_1 p_1(x_m) + b_2 p_2(x_m) + \dots + b_{l+1} p_{l+1}(x_m)) \\
 &= a_1 \left(\sum_{j=1}^{l+1} b_j p_j(x_1) \right) + a_2 \left(\sum_{j=1}^{l+1} b_j p_j(x_2) \right) + \dots + a_m \left(\sum_{j=1}^{l+1} b_j p_j(x_m) \right).
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

Ето защо за всеки полином

$$p(x) = b_1 + b_2 x + \dots + b_l x^l$$

е валидно равенството

$$p(x) = a_1 p(x_1) + a_2 p(x_2) + \dots + a_m p(x_m).$$

Следователно за всеки полином $p \in \mathcal{P}_l$, са валидни следните неравенства

$$\begin{aligned}
 |f(x) - \hat{L}(f)(x)| &= \left| f(x) - p(x) + p(x) - \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) \right| \\
 &\leq |f(x) - p(x)| + \left| p(x) - \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) \right| \\
 &= |f(x) - p(x)| + \left| \sum_{i=1}^m a_i p(x_i) - \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) \right|.
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

Въвеждаме функционалната норма

$$|f - p|_\infty = \max \{|f(x) - p(x)| : a \leq x \leq b\}.$$

Очевидно, за всяко $x \in [a, b]$:

$$|f(x) - p(x)| \leq |f - p|_\infty,$$

От неравенството на Cauchy–Schwarz, непосредствено получаваме:

$$\begin{aligned} \left| \sum_{i=1}^m a_i p(x_i) - \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) \right|^2 &= \left| \sum_{i=1}^m a_i (p(x_i) - f(x_i)) \right|^2 \\ &\leq \left(\sum_{i=1}^m a_i^2 \right) \left(\sum_{i=1}^m (p(x_i) - f(x_i))^2 \right) \\ &= \|\mathbf{a}\|^2 \sum_{i=1}^m (p(x_i) - f(x_i))^2. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Тогава, от неравенствата $(p(x_i) - f(x_i))^2 \leq |f - p|_\infty^2$, $i = 1, \dots, m$, следва, че

$$\sum_{i=1}^m (p(x_i) - f(x_i))^2 \leq \sum_{i=1}^m |f - p|_\infty^2 \leq m |f - p|_\infty^2,$$

или за всеки полином $p \in \mathcal{P}_l$, от (2.20) и (2.21) следва, че

$$\begin{aligned} |f(x) - \hat{L}(f)(x)| &\leq |f - p|_\infty + \|\mathbf{a}\| \sqrt{m} |f - p|_\infty \\ &= (1 + \|\mathbf{a}\| \sqrt{m}) |f - p|_\infty. \end{aligned} \quad (2.22)$$

Нека $x \in [a, b]$ е фиксирана точка. Нека $k_0 = 1, \dots, m$ и нека

$$|x - x_{k_0}| = \min \{|x - x_i| : i = 1, \dots, m\}.$$

Полагаме

$$C = \max \left\{ |f^{(l+1)}(x)| : x \in [a, b] \right\}$$

и нека отбележим, че всички производни на полиномиалната функция $p(x)$ от ред по-голям от l са нули.

Доколкото неравенствата (2.20)-(2.22) са валидни за всеки полином $p \in \mathcal{P}_l$, то те са валидни и за полинома на MacLaurin за функцията f . Ето защо за оценка на нормата $|f - p|_\infty$ може да приложим теоремата на Teylor:

$$|f - p|_\infty \leq \frac{C}{(l+1)!} |x - x_{k_0}|^{l+1}.$$

Последно

$$|f(x) - \hat{L}(f)(x)| \leq (1 + \|\mathbf{a}\| \sqrt{m}) \frac{C}{(l+1)!} |x - x_{k_0}|^{l+1}.$$

Отново достигаем до извода, че е необходима оценка “от горе” на нормата $\|\mathbf{a}(\mathbf{x})\|$.

Основна цел на материала изложен в глава 3 е получаване на такъв тип оценки.

2.1. Някои свойства на матрицата на апроксимацията. От постановката на задачата, следва, че свойствата на апроксимацията $\hat{L}$ се определят от вида и свойствата на матрицата $\mathbf{D}^{-1}\mathbf{E}(\mathbf{E}^t\mathbf{D}^{-1}\mathbf{E})^{-1}$.

В настоящата секция ще докажем някои свойства (симетричност, граници на собствените стойности, граници на сингуларните стойности, граници на норми) на следните матрици:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_0 &= \mathbf{D}^{-1}\mathbf{E}(\mathbf{E}^t\mathbf{D}^{-1}\mathbf{E})^{-1}\mathbf{E}^t, & \mathbf{A}_1 &= \mathbf{A}_0 - \mathbf{I}, \\ \mathbf{A}_2 &= \mathbf{E}(\mathbf{E}^t\mathbf{D}^{-1}\mathbf{E})^{-1}\mathbf{E}^t = \mathbf{D}\mathbf{A}_0, & \mathbf{A}_3 &= \mathbf{A}_2 - \mathbf{I} \end{aligned}$$

Дефиниция 2.2. Матрицата $\mathbf{A}_1$ ще наричаме *матрица на апроксимацията* $\hat{L}$.

Матрицата $\mathbf{A}_1\mathbf{D}^{-1}$ ще наричаме *симетрична матрица на апроксимацията* $\hat{L}$.

Лема 2.1. Нека са изпълнени условията (H2).

Тогава $\mathbf{A}_1 = -\mathbf{U}^t\mathbf{A}^{-1}\mathbf{U}\mathbf{D}$, където

$$\mathbf{U} = \begin{pmatrix} \mathbf{I}_{m \times m} \\ \mathbf{0}_{l \times m} \end{pmatrix},$$

и $\mathbf{I}_{m \times m}(\mathbf{0}_{l \times m})$ е единичната $(m \times m)$ -матрица (нулевата $(l \times m)$ -матрица).

За да получим оценки на собствените стойности на матриците $\mathbf{A}_1$ и $\mathbf{A}_1\mathbf{D}^{-1}$ ще използваме резултати от [133], които са формулирани по-долу.

Лема 2.2. Нека са изпълнени условията (H2). Нека $\text{egn}_i(\mathbf{D})$, $i = 1, \dots, m$ са собствените стойности на матрицата $\mathbf{D}$, такива, че

$$\text{egn}_1(\mathbf{D}) \geq \dots \geq \text{egn}_m(\mathbf{D}) > 0.$$

Тогава:

- (1) Матриците $\mathbf{A}$ и $\mathbf{A}_1\mathbf{D}^{-1}$ са симетрични.
- (2) 0 е l -кратна собствена стойност на матрицата $\mathbf{A}_1$.

- (3) -1 е $(m-l)$ -кратна собствена стойност на матрицата $\mathbf{A}_1$.
 (4) 0 е l -кратна собствена стойност на матрицата $\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}$.
 (5) Всички собствени стойности на матрицата $\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}$ са неотрицателни числа:

(5a) Ако $1 \leq k \leq m-l$, то

$$\frac{1}{\text{egn}_{m-l+1-k}(\mathbf{D})} \leq \text{egn}_k(\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}) \leq \frac{1}{\text{egn}_{m+1-k}(\mathbf{D})}.$$

(5b) Ако $m-l+1 \leq k \leq m$, то

$$\text{egn}_k(-\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}) = 0.$$

- (6) Матрицата $\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}$ е симетрична и положително семи-дефинитна.

Забележка 2.2. Матрицата $\mathbf{A}_1$ не е симетрична (в общият случай).

Наистина нека

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} e^{(x-1)^2} & 0 \\ 0 & e^{(x-2)^2} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{E} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Тогава

$$\mathbf{A}_1 = \begin{pmatrix} e^{-(x-1)^2} \frac{e^{2x^2-6x+5}}{e^{(x-2)^2} + e^{(x-1)^2}} - 1 & e^{-(x-1)^2} \frac{e^{2x^2-6x+5}}{e^{(x-2)^2} + e^{(x-1)^2}} \\ e^{-(x-2)^2} \frac{e^{2x^2-6x+5}}{e^{(x-2)^2} + e^{(x-1)^2}} & e^{-(x-2)^2} \frac{e^{2x^2-6x+5}}{e^{(x-2)^2} + e^{(x-1)^2}} - 1 \end{pmatrix}.$$

Забележка 2.3. В формулировката на лема 2.2 условието (H2.2) може да бъде заменено с

- (1) $1 \in \mathcal{P}$.
 (2) $\text{rank}(\mathbf{E}) = l$.

Забележка 2.4. Ако $l = m$, то всички собствени стойности на матриците $\mathbf{A}_1$ и $\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}$ са нули. Но матрицата $\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1}$ е симетрична. Следователно съществува унитарна матрица $\mathbf{U}$ ($\mathbf{U}^t \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{U}^t = \mathbf{I}$) такава, че

$$\mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1} = \mathbf{U} \mathbf{0} \mathbf{U}^t,$$

т.е. в този случай $\mathbf{A}_1 = \mathbf{A}_1 \mathbf{D}^{-1} = \mathbf{0}$.

2.2. Изчислителен алгоритъм. Нека са изпълнени условията (H1).

Разглеждаме матричното произведение $B = D^{-1}E(E^t D^{-1}E)^{-1}$ което участва в конструкцията на апроксимация по метод на блуждаещите най-малки квадрати.

Основната цел на материалът, изложен в настоящата секция е да конструираме декомпозиция на матрицата B посредством теоремата за сингуларна декомпозиция.

Нека

$$D^{-\frac{1}{2}}E = U\Sigma V^t \quad (2.23)$$

е сингуларната декомпозиция на матрицата $D^{-\frac{1}{2}}E$.

Забележка 2.5. Матриците $D^{-1}E$ и Σ са с размерност $(m \times l)$. Освен това $l \leq m$, т.е.

$$\Sigma = \begin{pmatrix} \Sigma_1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

където Σ_1 е квадратна и неособена $(l \times l)$ -матрица. Нека също така да отбележим, че

$$\Sigma^t \Sigma = \Sigma_1^2.$$

Тогава (D е диагонална матрица с положителни елементи по главния диагонал):

$$\begin{aligned} E^t D^{-1} E &= (E^t D^{-\frac{1}{2}}) (D^{-\frac{1}{2}} E) \\ &= (D^{-\frac{1}{2}} E)^t (D^{-\frac{1}{2}} E) \\ &= (U \Sigma V^t)^t (U \Sigma V^t) \\ &= V \Sigma^t U^t U \Sigma V^t \\ &= V \Sigma^t \Sigma V^t \\ &= V \Sigma_1^2 V^t. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Ето защо сингуларната декомпозиция на симетричната матрица $E^t D^{-1} E$ е

$$E^t D^{-1} E = V \Sigma_1^2 V^t. \quad (2.25)$$

Освен това

$$(E^t D^{-1} E)^{-1} = (V \Sigma_1^2 V^t)^{-1}$$

$$=V\Sigma_1^{-2}V^t. \quad (2.26)$$

Окончателно, получаваме:

$$D^{-1}E(E^tD^{-1}E)^{-1}=D^{-1}EV\Sigma_1^{-2}V^t. \quad (2.27)$$

Нека отбележим, че в така получената формула не присъства матричната операция “обръщане на матрица” (изключение – квадратните диагонални матрици D и Σ_1).

Не е трудно да опростим представянето (2.27):

$$\begin{aligned} D^{-1}E(E^tD^{-1}E)^{-1} &= D^{-1}EV\Sigma_1^{-2}V^t \\ &= D^{-\frac{1}{2}}\left(D^{-\frac{1}{2}}E\right)V\Sigma_1^{-2}V^t \\ &= D^{-\frac{1}{2}}U\Sigma V^tV\Sigma_1^{-2}V^t \\ &= D^{-\frac{1}{2}}U\Sigma\Sigma_1^{-2}V^t \\ &= D^{-\frac{1}{2}}U\begin{pmatrix}\Sigma_1^{-1} \\ 0 \end{pmatrix}V^t. \end{aligned} \quad (2.28)$$

2.3. Оценки на нормата на матрицата апроксимацията. Нека $\|\tilde{A}\|_2$ е нормата на реалната матрицата $\tilde{A}$ (в общия случай правоъгълна), дефинирана чрез

$$\|\tilde{A}\|_2^2 = \max_{\|\eta\|=1} \|\tilde{A}\eta\|^2 = \text{egn}_{\max}(\tilde{A}^t\tilde{A}) = \sigma_{\max}^2(\tilde{A}),$$

където $\text{egn}_{\max}(\tilde{A}^t\tilde{A})$ и $\sigma_{\max}(\tilde{A})$ са максималната собствена стойност на $\tilde{A}^t\tilde{A}$ и максималната сингуларна стойност на $\tilde{A}$, вж. приложение А. Ако не е уговорено противното, ще използваме означението $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$.

Нека с $d_1, \dots, d_m$ означим елементите по главния диагонал на диагоналната матрица D , $d_i > 0$, $i = 1, \dots, m$. По-надолу ще използваме означенията $\sigma_{\max}(D) = \max\{d_1, \dots, d_m\}$ и $\sigma_{\min}(D) = \min\{d_1, \dots, d_m\}$ (очевидно $d_1, \dots, d_m$ са всички сингуларни стойности на D).

Следствие 2.1. Нека са изпълнени условията (H2). Тогава ако $\text{egn}_{\min}(D)$, $i = 1, \dots, m$ е минималната собствена стойност на матрицата D и ако $\text{egn}_{\min}(D) \neq 0$, то

$$\|A_1D^{-1}\| \leq \frac{1}{\sigma_{\min}(D)}.$$

Твърдението на следствие 2.1 не е удачно да се прилага за интерполационна апроксимация. В този случай матрицата $\mathbf{D}$ притежава произволно близки до нула елементи, при $\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{x}_i$. Ето защо оценката за нормата на симетричната матрица на апроксимацията, приведена в следствие 2.1, не е адекватна в този случай.

Лема 2.3. *Валидни са неравенствата*

$$\frac{\sigma_{\max}(\mathbf{E})}{\sqrt{\sigma_{\max}(\mathbf{D})}} \leq \sigma_{\max}(\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{E}) = \|\mathbf{D}^{-\frac{1}{2}} \mathbf{E}\| \leq \frac{\sigma_{\max}(\mathbf{E})}{\sqrt{\sigma_{\min}(\mathbf{D})}}.$$

Лема 2.4. *Валидни са следните неравенства:*

$$\|\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E}\| = \sigma_{\max}(\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E}) \leq \frac{\sigma_{\max}^2(\mathbf{E})}{\sigma_{\min}(\mathbf{D})}, \quad (2.29)$$

$$\frac{\sigma_{\min}^2(\mathbf{E})}{\sigma_{\max}(\mathbf{D})} \leq \sigma_{\min}(\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E}). \quad (2.30)$$

Следствие 2.2. *Валидно е неравенството:*

$$\|(\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1}\| = \sigma_{\max}((\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1}) \leq \frac{\sigma_{\max}(\mathbf{D})}{\sigma_{\min}^2(\mathbf{E})}. \quad (2.31)$$

Следствие 2.3. *Валидно е неравенството:*

$$\|\mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1}\| = \sigma_{\max}(\mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1}) \leq \frac{k(\mathbf{E})k(\mathbf{D})}{\sigma_{\max}(\mathbf{E})}, \quad (2.32)$$

където $k(\mathbf{E})$ ($k(\mathbf{D})$) е условият номер на матрицата $\mathbf{E}$ ($\mathbf{D}$).

По-надолу ще докажем още една оценка за нормата на матрицата

$$\mathbf{A}_0 = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1} \mathbf{E}^t.$$

Нека отбележим, че доказаните по-горе оценки се отнасят за правоъгълната $(m \times l)$ -матрица $\mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1}$, докато матрицата $\mathbf{A}_0$ е квадратна $(m \times m)$ -матрица.

Лема 2.5. Нека $\tilde{\mathbf{A}}$ и $\tilde{\mathbf{B}}$ са матрици с размерност $(m \times n)$ и $(n \times n)$, съответно. Нека $\tilde{\mathbf{B}}$ е неособена матрица. Тогава

$$\sigma_{\max}(\tilde{\mathbf{B}})\sigma_{\min}(\tilde{\mathbf{A}}) \leq \sigma_{\max}(\tilde{\mathbf{A}}\tilde{\mathbf{B}}) \leq \sigma_{\max}(\tilde{\mathbf{A}})\sigma_{\max}(\tilde{\mathbf{B}}). \quad (2.33)$$

Лема 2.6. Нека са изпълнени условията (H2). Тогава:

$$\begin{aligned} 1 \leq \|\mathbf{A}_0\| &\leq k(\mathbf{E})k(\mathbf{D}), & \text{ако } \text{rank}(\mathbf{E}) = l, \\ \|\mathbf{A}_1\| &\leq 1 + k(\mathbf{E})k(\mathbf{D}), & \text{ако } \text{rank}(\mathbf{E}) = l. \end{aligned}$$

Теорема 2.2. Нека са изпълнени условията (H2). Тогава:

$$\begin{aligned} 1 \leq \|\mathbf{A}_0\| &\leq \frac{\sigma_{\max}(\mathbf{E})}{\sigma_{\min}(\mathbf{E}^t)}, & \text{ако } \text{rank}(\mathbf{E}) = l, \\ \|\mathbf{A}_1\| &\leq 1 + \frac{\sigma_{\max}(\mathbf{E})}{\sigma_{\min}(\mathbf{E}^t)}, & \text{ако } \text{rank}(\mathbf{E}) = l. \end{aligned}$$

2.4. Апроксимация при експоненциално разстояние. Подхода, описан в секция 3.2 при

$$l > 1 \text{ и } w(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = e^{\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}, \quad \alpha \geq 0 \quad (2.34)$$

ще наричаме *апроксимация при експоненциално разстояние* или *апроксимация при експоненциални теглови функции* на данни, $\alpha \in \mathbb{R}$.

Очевидно, ако $\alpha = 0$, то задачата за апроксимиране по метода на блуждаещите най-малки квадрати с теглови функции (2.34) съвпада с класическата задача за апроксимиране по метода на най-малките квадрати.

Разглеждаме данните

$$\mathcal{X} = \{(\mathbf{x}_i, y_i) : i = 1, \dots, m\},$$

където $\mathbf{x}_i \in \mathbb{R}^d$, $y_i \in \mathbb{R}$, $i = 1, \dots, m$.

Нека l е фиксирано число, $1 \leq l \leq m$. Ще предполагаме, че са изпълнени условията (H2).

Нека с $a_i = a_i(\alpha, \mathbf{x})$ означим коефициентите на апроксимацията по метода на блуждаещите най-малки квадрати и теглови функции (2.34):

$$\mathbf{a}(\alpha, \mathbf{x}) = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1} \mathbf{c}(\mathbf{x}),$$

където

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}(\alpha, \mathbf{x}) = 2 \begin{pmatrix} w(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_m) \end{pmatrix}$$

Полагаме

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\|^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_m\|^2 \end{pmatrix}.$$

Тогава

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{D}}{d\alpha} &= 2 \begin{pmatrix} \frac{dw(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_1)}{d\alpha} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{dw(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_2)}{d\alpha} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{dw(\alpha, \mathbf{x}, \mathbf{x}_m)}{d\alpha} \end{pmatrix} \\ &= 2 \begin{pmatrix} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\|^2 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|^2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_m\|^2 \end{pmatrix} \\ &\quad \times \begin{pmatrix} e^{\alpha\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_1\|^2} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{\alpha\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_2\|^2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & e^{\alpha\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_m\|^2} \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{H}\mathbf{D}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{I} = \mathbf{D}\mathbf{D}^{-1} &\Rightarrow 0 = (\mathbf{I})' = (\mathbf{D}\mathbf{D}^{-1})' = (\mathbf{D})' \mathbf{D}^{-1} + (\mathbf{D}) (\mathbf{D}^{-1})', \\ &\Rightarrow (\mathbf{D}) (\mathbf{D}^{-1})' = -(\mathbf{D})' \mathbf{D}^{-1}, \\ &\Rightarrow (\mathbf{D}^{-1})' = -\mathbf{D}^{-1} (\mathbf{D})' \mathbf{D}^{-1}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{D}^{-1}}{d\alpha} &= -\mathbf{D}^{-1} \frac{d\mathbf{D}}{d\alpha} \mathbf{D}^{-1} \\ &= -\mathbf{D}^{-1} \mathbf{H} \mathbf{D} \mathbf{D}^{-1} \\ &= -\mathbf{D}^{-1} \mathbf{H} = -\mathbf{H} \mathbf{D}^{-1}. \end{aligned}$$

Теорема 2.3. Нека са изпълнени условията (H2).

Тогава за всеки две неотрицателни числа $\alpha_1, \alpha_2, 0 \leq \alpha_1 \leq \alpha_2$ е валидно неравенството

$$\|\mathbf{a}(\alpha_1, \mathbf{x})\| \geq \|\mathbf{a}(\alpha_2, \mathbf{x})\|.$$

2.5. Апроксимация на Levin. Подхода, описан в секция 3.2 при

$$l > 1 \text{ и } w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = e^{\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2} - 1 \quad (2.35)$$

ще наричаме *Levin подход* за апроксимиране на данни, $\alpha \geq 0$.

Подробно изследване на апроксимация по метод на най-малките квадрати с така въведената теглова функция е приведено в [73]. В тази статия са показани различни предимства на въведените теглови функции в сравнение с класическите функции при експоненциално разстояние, вж. секция 3.8.

Ще докажем още едно свойство на апроксимацията с теглови функции (2.35).

За целта разглеждаме семейство от апроксимации с теглови функции

$$w(\alpha, \beta, \mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = e^{\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2} - \beta \quad (2.36)$$

където $\alpha \geq 0$ е фиксирано число и $\beta \in [0, 1]$.

Нека с $a_i = a_i(\alpha, \beta, \mathbf{x})$ означим коефициентите на апроксимацията по метода на булждаещите най-малки квадрати и теглови функции (2.36):

$$\mathbf{a}(\alpha, \beta, \mathbf{x}) = \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E})^{-1} \mathbf{c}(\mathbf{x}),$$

където

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}(\alpha, \beta, \mathbf{x}) = 2 \begin{pmatrix} w(\alpha, \beta, \mathbf{x}, \mathbf{x}_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w(\alpha, \beta, \mathbf{x}, \mathbf{x}_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w(\alpha, \beta, \mathbf{x}, \mathbf{x}_m) \end{pmatrix}$$

Очевидно

$$\begin{aligned} \frac{d\mathbf{D}}{d\beta} &= 2 \begin{pmatrix} \frac{dw(\alpha, \beta, \mathbf{x}_1, \mathbf{x})}{d\beta} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{dw(\alpha, \beta, \mathbf{x}_2, \mathbf{x})}{d\beta} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \frac{dw(\alpha, \beta, \mathbf{x}_m, \mathbf{x})}{d\beta} \end{pmatrix} \\ &= -2\mathbf{I}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\frac{dD^{-1}}{d\beta} &= -D^{-1} \frac{dyD}{d\beta} D^{-1} \\ &= 2D^{-1} D^{-1} = 2D^{-2}.\end{aligned}$$

Теорема 2.4. Нека са изпълнени условията (H2).

Тогава за всеки две числа $\beta_1, \beta_2 \in [0, 1]$, за които $\beta_1 \leq \beta_2$, е валидно неравенството

$$\|\mathbf{a}(\alpha, \beta_1, \mathbf{x})\| \geq \|\mathbf{a}(\alpha, \beta_2, \mathbf{x})\|.$$

3. ПРИЛОЖЕНИЕ: АЛГОРИТЪМ ЗА ОПРЕДЕЛЯНЕ НА ЦЕТАНОВО ЧИСЛО НА НЕФТЕНИ ДЕРИВАТИ

3.1. Постановка на задачата. Дадени са данни за 140 дизелови горива: цетаново число (в интервал 10-70), плътност при 15°C и дисталационни характеристики (съгласно стандарт ASTM D-86): $T_{10\%}$, $T_{50\%}$, $T_{90\%}$. Необходимо е да се получи метод за приближено пресмятане на цетановото число чрез плътността и дисталационните характеристики на горивата.

Данните за горивата са представени от доц. д-р Д. Стратиев, гл. технолог на ЛУКОЙЛ Нефтохим Бургас, вж таблица приведена в дисертационния труд.

3.2. Апроксимация с данни: плътност и $T_{50\%}$.

3.2.1. Метод на най-малките квадрати. За конструирането на полиноми по метод на най-малките квадрати ще използваме програмната среда Maple.

Въвеждаме експерименталните данни:

```
restart: with(plots): with(Statistics):

#Density
Xdensity := <.8409, .8209, .8421, .8332, .8361, .8773, .8011, .8441,
.8416, .8341, .9427, 1.0130, .9667, .8554, .8594, .8437, .8492,
.8379, .8003, .8283, .8365, .8464, .8553, .8633, .8728, .8018,
.8265, .8348, .8472, .8566, .8640, .8708, .8728, .7968, .8120,
.8224, .8312, .8444, .8532, .8601, .8659, .7964, .8086, .8215,
.8343, .8502, .8509, .8570, .8745, .7982, .8215, .8333, .8477,
.8516, .8579, .8723, .8092, .8594, .8036, .8470, .8577, .8056,
```

```
.8390, .8617, .8903, .8042, .8042, .8448, .8408, .8619, .8559,
.8341, .9113, .7902, .8859, .8715, .8329, .9305, .8811, .8697,
.8912, .8650, .8773, .8639, .8540, .9002, .8438, .8170, .8557,
.8727, .8917, .9137, .9471, .8722, .8230, .8392, .8570, .8647,
.8996, .8884, .8764, .8640, .8486, .8331, .8181, .8683, .8532,
.8380, .8931, .8825, .8641, .8522, .829, .836, .806, .827, .820,
.811, .821, .829, .827, .841, .814, .817, .814, .818, .826, .826,
.826, .826, .826, .837, .807, .814, .834, .844, .838, .842,
.8390, .8349>:
```

```
#ASTM D86 distillation, 50 %
```

```
Xfifty := <245, 239, 275, 242, 259, 290, 200, 282, 284, 214, 246, 322,
268, 300, 285, 279, 275, 272, 185.5, 225.5, 245.5, 265.5, 285.5,
305.5, 345.5, 185.5, 225.5, 245.5, 265.5, 285.5, 305.5, 325.5, 345.5,
185.5, 205.5, 225.5, 245.5, 265.5, 285.5, 305.5, 325.5, 185.5, 205.5,
225.5, 245.5, 265.5, 285.5, 305.5, 325.5, 185.5, 225.5, 245.5, 265.5,
285.5, 305.5, 325.5, 210, 311, 206, 280, 303, 209, 267, 317, 333, 204,
205, 274, 270, 310, 308, 250, 240, 164, 320, 308, 261.2, 307.5, 292.9,
286.4, 276.3, 272.3, 281.5, 275.9, 269.3, 297.3, 279.0, 274.0, 292.0,
297.0, 299.0, 303.0, 310.0, 286.0, 255.0, 295.5, 320.5, 329.0, 273.0,
275.0, 276.5, 279.5, 221.0, 220.0, 220.0, 251.0, 250.0, 250.0, 285.0,
285.0, 291.0, 263.0, 274, 283, 242, 279, 272, 268, 265, 269, 256,
254, 260, 261, 252, 245, 278, 272, 272, 281, 270, 269, 296, 231,
288, 280, 279, 281, 279.0, 276.3>:
```

```
#Cetane number
```

```
Y := <44.1, 49.2, 51.0, 45.8, 47.4, 44.5, 41.5, 53.0, 53.5, 35.5,
49.3, 51.1, 50.0, 49.8, 49.0, 48.0, 53.0, 47.5, 51.0, 47.2, 47.0,
51.0, 43.5, 49.3, 50.4, 51.6, 54.8, 55.3, 54.0, 43.1, 49.3, 50.6,
51.5, 53.1, 53.5, 54.1, 53.1, 42.9, 45.5, 47.6, 49.4, 51.2, 52.7,
53.5, 54.4, 40.4, 43.7, 45.9, 48.1, 49.3, 52.2, 53.3, 54.2, 41.2,
44.1, 47.7, 48.6, 51.6, 52.0, 52.6, 44.8, 43.3, 46.0, 46.7, 50.5,
50.5, 49.5, 50.4, 47.0, 50.0, 13.0, 12.0, 10.0, 14.0, 42.0, 42.0,
52.7, 28.3, 36.9, 40.9, 33.2, 37.5, 34.6, 38.1, 40.4, 32.1, 50.6,
65.1, 47.9, 47.2, 38.0, 37.3, 28.1, 45.0, 56.0, 57.0, 57.0, 58.0,
30.0, 34.0, 40.0, 44.0, 34.3, 39.7, 44.8, 35.0, 39.1, 44.6, 35.1,
39.8, 44.2, 45.5, 57.1, 54.0, 52.7, 57.0, 59.0, 62.3, 56.8, 57.4,
52.6, 47.0, 61.0, 60.1, 58.7, 56.0, 56.4, 56.4, 56.5, 56.4, 56.1,
50.0, 70.0, 54.0, 59.0, 48.0, 51.0, 50.0, 58.0, 59.2>:
```

```
m := 140: #= op(Xdensity)[1]=op(Xfifty)[1]=op(Y)[1]
```

```
ExperimentalData := Array(1 .. m, 1 .. 3):
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 1] := Xdensity:
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 2] := Xfifty:
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 3] := Y:
```

За да конструираме полином от първа степен, използваме вградената процедура `Fit`:

```
Fit(a*x+b*y+c, ExperimentalData, [x, y],
    output = [leastquaresfunction], summarize=embed)[1]
```

Изчисляваме грешката при приложениия метод на най-малките квадрати чрез:

```
LSMerror := 0:
```

```
for i from 1 to 140 do
```

```
    LSMerror := LSMerror+(Y[i]-F(Xdensity[i], Xfifty[i]))^2
```

```
end do:
```

```
(1/140)*sqrt(LSMerror):
```

Аналогично не е трудно да определим броя на резидуалите със стойност по-голяма от 1.

В таблица 3.1 са приведени полиноми от различна степен, които апроксимират зададените данни по метод на най-малките квадрати, както и съответните средно-квадратични грешки.

степен на полином	полином	средноквадратична грешка
$n = 1$	$-188.264x + 0.113y + 176.656$	0.691
$n = 2$	$-4908.683x + 2.404y + 1945.647 + 3066.129x^2 - 2.564xy - 0.005y^2$	0.563
$n = 3$	$15027.949x - 21.57y - 1640.072 - 33407.434x^2 + 21024.12x^3 - 70.019x^2y + 0.064xy^2 + 85.866xy - 0.056y^2$	0.531

Таблица 3.1. Метод на най-малките квадрати: полиноми от 1-ра, 2-та и 3-та степен

Ще се спрем по-подробно на анализ на резултата при $n = 3$: Общия вид на апроксимиращ полином от трета степен е

$$x^3 a_{330} + x^2 y a_{321} + x y^2 a_{312} + y^3 a_{303} + x^2 a_{220} + x y a_{211} + y^2 a_{202} + x a_{110} + y a_{101} + a_0.$$

След прилагане на съответната команда Fit в Maple получаваме:

$$\begin{aligned} a_{330} &= 18979.2, & a_{321} &= -52.7362, & a_{312} &= 0.0140505, & a_{303} &= 0.0000240376, \\ a_{220} &= -32679.4, & a_{211} &= 83.2918, & a_{202} &= -0.0326075, \\ a_{110} &= 14698.9, & a_{101} &= -26.6347, \\ a_0 &= -1096.35. \end{aligned}$$

Не е трудно да пресметнем:

- (1) сума от квадратите на резидуалите: 5478.87;
- (2) максимална стойност на резидуал: 37.066;
- (3) минимална стойност на резидуал: 0.0353;
- (4) 109 резидуала са по-големи от 1;
- (5) грешка по метода на най-малките квадрати: 0.5287100790.

Ето защо (съгласно изискванията за адекватност на метода: резидуали по-малки от 1) метода не е приложим за конкретната задача.

Данните и получения апроксимиращ полином от трета степен са изобразени на фигура 3.1.

3.2.2. *Backus-Gilbert подход*. Подхода, описан в секция 3.2 при

$$l = 1, \quad p_1(\mathbf{x}) = 1, \quad w(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \exp\left(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2\right), \quad \mathbf{x}, \mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^2$$

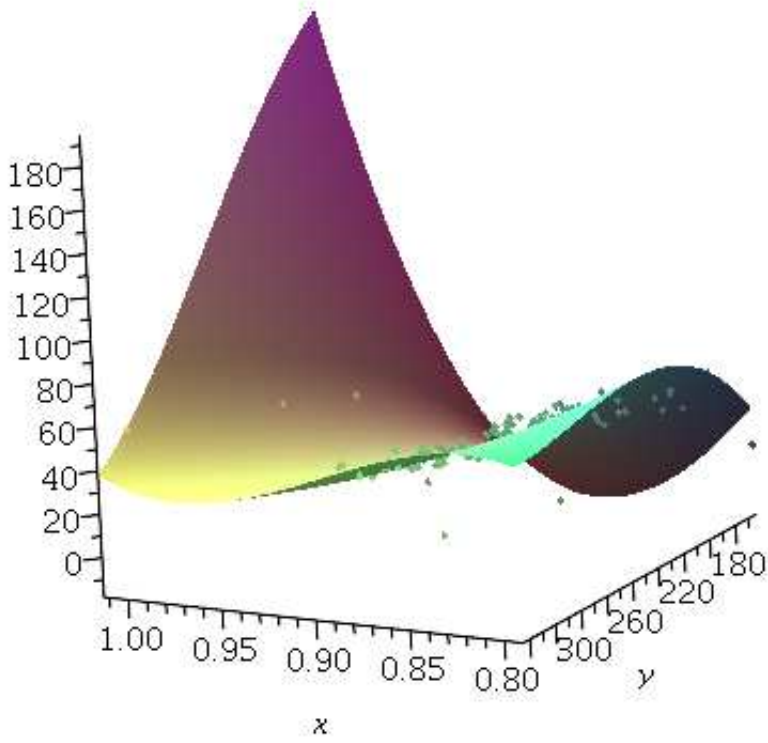
се нарича *Backus-Gilbert подход* за апроксимиране на данни.

В настоящата подсекция ще приложим подхода на Backus-Gilbert при теглова функция

$$w(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \exp\left(\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2\right),$$

където α е неотрицателен параметър.

По-надолу ще използваме данните `Xdensity[i]`, `Xfifty[i]` и `Y[i]` въведени в предишната подсекция. Освен това въвеждаме следните вектори



Фигура 3.1. Апроксимиращ полином от трета степен

и матрици:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y[1] \\ Y[2] \\ \vdots \\ Y[140] \end{pmatrix}; \quad \mathbf{x}_i = \begin{pmatrix} Xdensity[i] \\ Xfifty[i] \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 140;$$

$$\mathbf{E} = (p_1(\mathbf{x}_i)) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 140;$$

$$D = 2 \begin{pmatrix} w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{140}) \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{140} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1); \quad \mathbf{c} = (p_1(x)) = (1).$$

Коефициентите $\{a_1, \dots, a_m\}$ на линейната апроксимация

$$\hat{L}(f) = \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) = \langle \mathbf{a}, \mathbf{y} \rangle$$

се определят чрез

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= D^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t D^{-1} \mathbf{E})^{-1} \mathbf{c} \\ &= D^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t D^{-1} \mathbf{E})^{-1}. \end{aligned}$$

В този случай:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}^t D^{-1} \mathbf{E} &= \sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)}, \\ D^{-1} \mathbf{E} (\mathbf{E}^t D^{-1} \mathbf{E})^{-1} &= \begin{pmatrix} \frac{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)}}{\frac{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1)}{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)}}} \\ \frac{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)}}{\frac{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2)}{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)}}} \\ \vdots \\ \frac{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)}}{\frac{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{140})}{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)}}} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

Ето защо

$$\hat{L}(f) = \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) = \sum_{i=1}^{140} \frac{\sum_{j=1}^{140} \frac{1}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)}}{w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)} f(x_i).$$

Пресмятаме коефициентите на апроксимацията използвайки пакета Maple:

```
a := MatrixInverse(DD) . E .
      MatrixInverse(Transpose(E) . MatrixInverse(DD) . E)
```

За да изчислим резултата, например при $\alpha = 2$, $x = 0.87$, $y = 297$, използваме следния код

```
X := Array(1 .. m, 1 .. 3);
X[1 .. m, 1] := Xdensity;
X[1 .. m, 2] := Xfifty;
```

```
E := Matrix(m, 1, 1);
```

```
alpha := 2; x := .87; y := 297;
```

```
DD := Matrix(m, m, shape = diagonal);
for i from 1 to m do
  DD[i, i] := exp(alpha*((x-XX[i, 1])^2+(y-XX[i, 2])^2))
end do;
a := MatrixInverse(DD) . E .
      MatrixInverse(Transpose(E) . MatrixInverse(DD) . E)
```

```
DotProduct(a, y)
```

Резултатът е 42.44.

Една от “близките” данни: Xdensity[90]=0.8727; Xfifty[90]=297 с дадена стойност: Y[90]=47.2.

Ако приложим изчисленията, описани по-горе, но при $\alpha = 0.1$, получаваме резултат 48.38.

В настоящата подсекция ще приведем някои факти за така построената апроксимация по метода на Backus-Gilbert.

1. Ако $\alpha = 0$, то метода на Backus-Gilbert съвпада с класическия метод на най-малките квадрати. В този случай

$$\begin{aligned} \mathbf{a} &= \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} \left(\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1} \mathbf{E} \right)^{-1} \mathbf{c} \\ &= \frac{1}{2} \mathbf{E} \left(\frac{1}{2} \mathbf{E}^t \mathbf{E} \right)^{-1} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{1}{2} \mathbf{E} \left(\frac{1}{2} m \right)^{-1} \\
&= \frac{1}{m} \mathbf{E}
\end{aligned}$$

и

$$\hat{L}(f) = \frac{1}{m} \sum_{i=1}^m f(x_i).$$

За разглежданите данни (в този случай): $\hat{L}(f) = 47.465$.

2. Очевидно, ако съществува $\mathbf{D}^{-1}$, то функцията

$$\mathbf{a}(\alpha) = \mathbf{D}^{-1}(\alpha) \mathbf{E} \left(\mathbf{E}^t \mathbf{D}^{-1}(\alpha) \mathbf{E} \right)^{-1}$$

е диференцируема.

4. Не е трудно да докажем следното равенство

$$\lim_{\alpha \rightarrow \infty} E(\alpha) = 0.$$

където

$$E(\alpha) = \sum_{i=1}^m \exp(-\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2) (b - y_i)^2.$$

3. В таблица 3.2 са приведени някои стойности на средноквадратичните отклонения:

$$R(\alpha) = \sum_{i=1}^m \left(\hat{L}(f)(\mathbf{x}_i) - y_i \right)^2.$$

α	R
0	12924.2985
0.01	10550.5112
0.5	5913.39789
1	4813.2640
2	3955.3306
3	3626.7414
4	3461.9958
500	1842.9923

Таблица 3.2. Някои стойности на $R(\alpha)$

От първите три реда на таблица 3.2 следва, че функцията $R(\alpha)$ има минимум в интервала $[0, 0.5]$. В интервала $[1, \infty)$ функцията е намаляваща.

3.2.3. *McLain подход*. Подхода, описан в секция 3.2 при

$$l > 1 \text{ и } w(y, x) = |\mathbf{x} - \mathbf{x}_i|^2 e^{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2}$$

се нарича *McLain подход* за апроксимиране на данни, $\alpha \in \mathbb{R}$, вж. [88] и [89].

Нека $l = 1$. В настоящата подсекция ще приложим подхода на Backus-Gilbert при теглова функция

$$w(y, x) = (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^2 e^{\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|^2},$$

където α е неотрицателен параметър.

По-надолу ще използваме данните `Xdensity[i]`, `Xfifty[i]` и `Y[i]` въведени в подсекция 3.2.1. Освен това въвеждаме следните вектори и матрици:

$$\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}, \mathbf{y} = \begin{pmatrix} Y[1] \\ Y[2] \\ \vdots \\ Y[140] \end{pmatrix}; \quad \mathbf{x}_i = \begin{pmatrix} \text{Xdensity}[i] \\ \text{Xfifty}[i] \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 140;$$

$$\mathbf{E} = (p_1(\mathbf{x}_i)) = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ \vdots \\ 1 \end{pmatrix}, \quad i = 1, \dots, 140;$$

$$\mathbf{D} = 2 \begin{pmatrix} w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_1) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_2) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & w(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{140}) \end{pmatrix};$$

$$\mathbf{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_{140} \end{pmatrix}; \quad \boldsymbol{\lambda} = (\lambda_1); \quad \mathbf{c} = (p_1(x)) = (1).$$

Коефициентите $\{a_1, \dots, a_m\}$ на линейната апроксимация

$$\hat{L}(f) = \sum_{i=1}^m a_i f(x_i) = \langle \mathbf{a}, \mathbf{y} \rangle$$

се определят чрез

$$\begin{aligned} a &= D^{-1} E (E^t D^{-1} E)^{-1} c \\ &= D^{-1} E (E^t D^{-1} E)^{-1}. \end{aligned}$$

Пресмятаме коефициентите на апроксимацията използвайки пакета Maple:

```
a := MatrixInverse(DD) . E .
      MatrixInverse(Transpose(E) . MatrixInverse(DD) . E)
```

За да изчислим резултата, например при $\alpha = 2$, $x = 0.87$, $y = 297$, използваме следния код

```
X := Array(1 .. m, 1 .. 3);
X[1 .. m, 1] := Xdensity;
X[1 .. m, 2] := Xfifty;

E := Matrix(m, 1, 1);

alpha := 2; x := .87; y := 297;

DD := Matrix(m, m, shape = diagonal);
for i from 1 to m do
  DD[i, i] := ((x-XX[i, 1])^2+(y-XX[i, 2])^2)
             *exp(alpha*((x-XX[i, 1])^2+(y-XX[i, 2])^2))
end do;
a := MatrixInverse(DD) . E .
      MatrixInverse(Transpose(E) . MatrixInverse(DD) . E)

DotProduct(a, y)
```

Резултатът е 42.44.

Една от “близките” данни: $X_{\text{density}}[90]=0.8727$; $X_{\text{fifty}}[90]=297$ с дадена стойност: $Y[90]=47.2$.

Ако приложим изчисленията, описани по-горе, но при $\alpha = 0.1$, получаваме резултат 48.38.

3.3. Апроксимация с данни: плътност и $T_{50\%}$, $T_{50\%}$, $T_{95\%}$ (ASTM D-86 стандарт): Backus-Gilbert подход.

3.4. Реализация на метода. Отново разглеждаме подхода, описан в секция 3.2 при

$$l = 1, \quad p_1(\mathbf{x}) = 1, \quad w(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \exp\left(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2\right), \quad \mathbf{x}, \mathbf{x}^* \in \mathbb{R}^4,$$

където променливите $x_1, \dots, x_4$ асоциираме съответно с плътност и дестилации при 10%, 50% и 90% на съответния нефтен продукт.

В настоящата подсекция ще приложим подхода на Backus-Gilbert при теглова функция

$$w(\mathbf{x}, \mathbf{x}^*) = \exp\left(\alpha \|\mathbf{x} - \mathbf{x}^*\|^2\right),$$

където α е неотрицателен параметър.

Въвеждаме експерименталните данни:

```
restart: with(plots): with(Statistics):

#Density
Xdensity := <.8409, .8209, .8421, .8332, .8361, .8773, .8011, .8441,
.8416, .8341, .9427, 1.0130, .9667, .8554, .8594, .8437, .8492,
.8379, .8003, .8283, .8365, .8464, .8553, .8633, .8728, .8018,
.8265, .8348, .8472, .8566, .8640, .8708, .8728, .7968, .8120,
.8224, .8312, .8444, .8532, .8601, .8659, .7964, .8086, .8215,
.8343, .8502, .8509, .8570, .8745, .7982, .8215, .8333, .8477,
.8516, .8579, .8723, .8092, .8594, .8036, .8470, .8577, .8056,
.8390, .8617, .8903, .8042, .8042, .8448, .8408, .8619, .8559,
.8341, .9113, .7902, .8859, .8715, .8329, .9305, .8811, .8697,
.8912, .8650, .8773, .8639, .8540, .9002, .8438, .8170, .8557,
.8727, .8917, .9137, .9471, .8722, .8230, .8392, .8570, .8647,
.8996, .8884, .8764, .8640, .8486, .8331, .8181, .8683, .8532,
.8380, .8931, .8825, .8641, .8522, .829, .836, .806, .827, .820,
.811, .821, .829, .827, .841, .814, .817, .814, .818, .826, .826,
.826, .826, .826, .837, .807, .814, .834, .844, .838, .842,
.8390, .8349>:

%ASTM D86 distillation, 10 %
Xten := (200, 196, 209, 193, 202, 252, 179, 243, 250, 185, 228,
229, 182, 234, 272, 196, 268, 174, 231, 235, 230, 275, 182, 222,
242, 262, 282, 302, 342, 182, 222, 242, 262, 282, 302, 322, 342,
182, 202, 222, 242, 262, 282, 302, 322, 182, 202, 222, 242, 262,
282, 302, 322, 182, 222, 242, 262, 282, 302, 322, 172, 175, 180,
```

245, 240, 261, 289, 260, 314, 297, 208, 220, 300, 228, 210, 128,
 196.0, 258.1, 220.7, 206.5, 196.7, 194.9, 207.6, 203.4, 196.7,
 221.3, 230.0, 253.0, 245.0, 248.0, 257.0, 266.0, 280.0, 257.0,
 219.0, 243.5, 270.0, 288.5, 236.0, 239.0, 241.5, 245.0, 165.0,
 166.0, 166.0, 176.0, 178.0, 177.0, 201.0, 211.0, 209.0, 221.0,
 200, 221, 179, 217, 214, 211, 212, 213, 210, 210, 213, 213, 208,
 206, 228, 228, 227, 229, 228, 219, 234, 213, 235, 224, 220, 223,
 214.0, 240.2):

%ASTM D86 distillation, 50 %

Xfifty := <245, 239, 275, 242, 259, 290, 200, 282, 284, 214, 246, 322,
 268, 300, 285, 279, 275, 272, 185.5, 225.5, 245.5, 265.5, 285.5,
 305.5, 345.5, 185.5, 225.5, 245.5, 265.5, 285.5, 305.5, 325.5, 345.5,
 185.5, 205.5, 225.5, 245.5, 265.5, 285.5, 305.5, 325.5, 185.5, 205.5,
 225.5, 245.5, 265.5, 285.5, 305.5, 325.5, 185.5, 225.5, 245.5, 265.5,
 285.5, 305.5, 325.5, 210, 311, 206, 280, 303, 209, 267, 317, 333, 204,
 205, 274, 270, 310, 308, 250, 240, 164, 320, 308, 261.2, 307.5, 292.9,
 286.4, 276.3, 272.3, 281.5, 275.9, 269.3, 297.3, 279.0, 274.0, 292.0,
 297.0, 299.0, 303.0, 310.0, 286.0, 255.0, 295.5, 320.5, 329.0, 273.0,
 275.0, 276.5, 279.5, 221.0, 220.0, 220.0, 251.0, 250.0, 250.0, 285.0,
 285.0, 291.0, 263.0, 274, 283, 242, 279, 272, 268, 265, 269, 256,
 254, 260, 261, 252, 245, 278, 272, 272, 281, 270, 269, 296, 231,
 288, 280, 279, 281, 279.0, 276.3>:

%ASTM D86 distillation, 90 %

Xninety := (311, 315, 337, 324, 332, 336, 229, 335, 324, 254, 333,
 323, 231, 316, 347, 337, 341, 230, 320, 338, 324, 350, 198, 238,
 258, 278, 292, 318, 358, 198, 238, 258, 278, 292, 318, 338, 358,
 198, 218, 238, 258, 278, 292, 318, 338, 198, 218, 238, 258, 278,
 292, 318, 338, 198, 238, 258, 278, 292, 318, 338, 252, 232, 234,
 329, 291, 345, 352, 370, 360, 351, 265, 273, 348, 328, 359, 246,
 328.0, 342.1, 338.2, 336.4, 332.1, 329.5, 333.0, 331.5, 329.3, 339.1,
 329.0, 308.0, 346.0, 346.0, 345.0, 349.0, 351.0, 330.0, 322.0, 349.0,
 366.5, 369.0, 312.5, 315.0, 317.0, 318.0, 304.0, 303.0, 302.0, 328.0,
 328.0, 328.0, 340.0, 342.0, 341.0, 312.0, 356, 365, 345, 360, 359,
 351, 349, 351, 343, 346, 328, 330, 324, 319, 323, 324, 325, 326, 326,
 326, 346, 269, 345, 339, 350, 344, 342.0, 324.6)

```
#Cetane number
```

```
Y := <44.1, 49.2, 51.0, 45.8, 47.4, 44.5, 41.5, 53.0, 53.5, 35.5,
49.3, 51.1, 50.0, 49.8, 49.0, 48.0, 53.0, 47.5, 51.0, 47.2, 47.0,
51.0, 43.5, 49.3, 50.4, 51.6, 54.8, 55.3, 54.0, 43.1, 49.3, 50.6,
51.5, 53.1, 53.5, 54.1, 53.1, 42.9, 45.5, 47.6, 49.4, 51.2, 52.7,
53.5, 54.4, 40.4, 43.7, 45.9, 48.1, 49.3, 52.2, 53.3, 54.2, 41.2,
44.1, 47.7, 48.6, 51.6, 52.0, 52.6, 44.8, 43.3, 46.0, 46.7, 50.5,
50.5, 49.5, 50.4, 47.0, 50.0, 13.0, 12.0, 10.0, 14.0, 42.0, 42.0,
52.7, 28.3, 36.9, 40.9, 33.2, 37.5, 34.6, 38.1, 40.4, 32.1, 50.6,
65.1, 47.9, 47.2, 38.0, 37.3, 28.1, 45.0, 56.0, 57.0, 57.0, 58.0,
30.0, 34.0, 40.0, 44.0, 34.3, 39.7, 44.8, 35.0, 39.1, 44.6, 35.1,
39.8, 44.2, 45.5, 57.1, 54.0, 52.7, 57.0, 59.0, 62.3, 56.8, 57.4,
52.6, 47.0, 61.0, 60.1, 58.7, 56.0, 56.4, 56.4, 56.5, 56.4, 56.1,
50.0, 70.0, 54.0, 59.0, 48.0, 51.0, 50.0, 58.0, 59.2>:
```

```
m := 140: #= op(Xdensity)[1]=op(Xfifty)[1]=op(Y)[1]
```

```
ExperimentalData := Array(1 .. m, 1 .. 5):
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 1] := Xdensity:
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 2] := Xten:
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 3] := Xfifty:
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 4] := Xninety:
```

```
ExperimentalData[1 .. m, 5] := Y:
```

```
EE := Matrix(m, 1, 1):
```

```
cc := Matrix(1, 1, 1):
```

```
alpha := .1:
```

```
x1 := Xdensity[90]:
```

```
x2 := Xten[90]:
```

```
x3 := Xfifty[90]:
```

```
x4 := Xninety[90]:
```

```
y := Xfifty[90]:
```

```
DD := Matrix(m, m, shape = diagonal):
```

```
for i from 1 to m do
```

```
  DD[i, i] := exp(alpha*((x1-ExperimentalData[i, 1])^2
    +(x2-ExperimentalData[i, 2])^2
    +(x3-ExperimentalData[i, 3])^2
```

```

+(x4-ExperimentalData[i, 4]^2)):
end do:

aa := MatrixInverse(DD) . EE .
      . MatrixInverse(Transpose(EE) . MatrixInverse(DD) . EE)
      . cc:
DotProduct(Y, aa);

```

3.5. Верификация. При $\alpha = 0.1$ получаваме резултат 47.61 (съответното цетаново число е 47.2). В този случай: сумата от абсолютните стойности на резидуалите е 70.348; 12 резидуала са със стойност по-голяма от 1.

Ако положим $\alpha = 10$: сумата от абсолютните стойности на резидуалите е 27.886; 7 резидуала са със стойност по-голяма от 1 (резултат, който може да бъде очакван съгласно теорема 2.3).

Ако положим $\alpha = 10\,000$ (и дефинираме броя на значещи цифри използвани от Maple: `Digits:=100`): сумата от абсолютните стойности на резидуалите е 25.06; 5 резидуала са със стойност по-голяма от 1 (очакван резултат съгласно теорема 2.3).

Ако отстраним данните с индекси 50, 51, 54, 55, 56, то получаваме сума от абсолютните стойности на резидуалите е 17.18 и 0 на брой резидуали с стойност по-голяма от 1.

ЛИТЕРАТУРА

- [1] G. Alefeld and N. Schneider. On square roots of M -matrices. *Linear Algebra and Appl.*, 42:119–132, 1982.
- [2] Marc Alexa, Johannes Behr, Daniel Cohen-Or, Shachar Fleishman, David Levin, and Claudio T. Silva. Computing and rendering point set surfaces. *IEEE TVCG*, 9(1), 2003.
- [3] E. J. Allen, J. Baglama, and S. K. Boyd. Numerical approximation of the product of the square root of a matrix with a vector. *Linear Algebra and Appl.*, 310:167–181, 2000.
- [4] Steven C. Althoen and Renate McLaughlin. Gauss-jordan reduction: a brief history. *The American Mathematical Monthly*, 94(2):201–213, 1987.
- [5] Dale Anderson. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. CRC Press, 2012.
- [6] G.E. Backus and F. Gilbert. The resolving power of gross earth data. *Geophysical Journal of the Royal Astronomical Society*, 16:169–205, 1968.
- [7] G.E. Backus and F. Gilbert. Uniqueness in the inversion of inaccurate gross earth data. *Philosophical Transactions of the Royal Society of London A*, 266:123–192, 1970.
- [8] Erwin H. Bareiss. Sylvester's identity and multistep integer-preserving gaussian elimination. *Mathematics of Computation*, 22(102):565–578, 1968.

- [9] M. S. Bartlett. An inverse matrix adjustment arising in discriminant analysis. *Ann. Math. Stat.*, 22(1):pp. 107–111, 1951.
- [10] Adi Ben-Israel and Thomas N. E. Greville. *Generalized Inverses: Theory and Applications*. Wiley, New York, 1974.
- [11] Arne Bjerhammar. Application of calculus of matrices to method of least squares; with special references to geodetic calculations. *Trans. Roy. Inst. Tech. Stockholm*, 49, 1951.
- [12] Åke Björck. The calculation of linear least squares problems. *Acta Numerica*, 2004:1–53, 2004.
- [13] Richard A. Brualdi and Herbert J. Ryser. *Combinatorial Matrix Theory*. Cambridge University Press, New York, 1991.
- [14] Richard L. Burden. *Numerical analysis*. Pacific Grove, CA, Australia, 7 edition, 2001.
- [15] Ç. K. Koç and B. Bakkaloğlu. Halley’s method for the matrix sector function. *IEEE Trans. Automat. Control*, 40(5):944–949, 1995.
- [16] S. D. Conte and C. de Boor. *Elementary Numerical Analysis: An Algorithmic Approach*. McGraw-Hill, third edition, 1980.
- [17] Philip I. Davies and Nicholas J. Higham. A Schur-Parlett algorithm for computing matrix functions. Numerical Analysis Report No. 404, Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, England, July 2002.
- [18] B.P. Demidovich. *Problems in mathematical analysis*. Gordon & Beach, 1989.
- [19] Eugene D. Denman and Alex N. Beavers Jr. The matrix sign function and computations in systems. *Appl. Math. Comput.*, 2:63–94, 1976.
- [20] Luca Dieci. Considerations on computing real logarithms of matrices, Hamiltonian logarithms, and skew-symmetric logarithms. *Linear Algebra and Appl.*, 244(1-3):35–54, September 1996.
- [21] Luca Dieci. Real Hamiltonian logarithm of a symplectic matrix. *Linear Algebra and Appl.*, 281(1-3):227–246, September 1998.
- [22] Luca Dieci, Benedetta Morini, and Alessandra Papini. Computational techniques for real logarithms of matrices. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17(3):570–593, July 1996.
- [23] Luca Dieci, Benedetta Morini, Alessandra Papini, and Aldo Pasquali. On real logarithms of nearby matrices and structured matrix interpolation. *Applied Numerical Mathematics: Transactions of IMACS*, 29(1):145–165, January 1999.
- [24] Luca Dieci and Alessandra Papini. Conditioning and Padé approximation of the logarithm of a matrix. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21(3):913–930, 2000.
- [25] Luca Dieci and Alessandra Papini. Padé approximation for the exponential of a block triangular matrix. *Linear Algebra and Appl.*, 308(1-3):183–202, March 2000.
- [26] Angel Dishliev, Katya Dishlieva, and Svetoslav Nenov. *Finite Difference Methods and Applications in CAE software*. Dynamic Publishers, Atlanta, Georgia, USA, 2017.
- [27] Angel Dishliev, Katya Dishlieva, and Svetoslav Nenov. *Linear Systems and Applications in CAE Software*. Dynamic Publishers, Atlanta, Georgia, USA, 2017.
- [28] G. Fasshauer. Approximate moving least-squares approximation: A fast and accurate multivariate approximation method. *Curve and Surface Fitting: Saint-Malo*, pages 139–148, 2002.

- [29] Walter Gander. The singular value decomposition. 2008.
- [30] Feliks Ruvimovich Gantmakher. *The Theory of Matrices*, volume 1. Chelsea Publishing Company, New York, 1959.
- [31] Feliks Ruvimovich Gantmakher. *The Theory of Matrices*, volume 2. Chelsea Publishing Company, New York, 1959.
- [32] Dominik Göddeke and Robert Strzodka. Cyclic reduction tridiagonal solvers on GPUs applied to mixed precision multigrid. *IEEE Transactions on Parallel and Distributed Systems*, 22(1):22–32, January 2011.
- [33] Gene H. Golub and Charles F. Van Loan. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, Baltimore, 3 edition, 1996.
- [34] Gene H. Golub and John H. Welsch. Calculation of Gauss quadrature rules. *Mathematics of Computation*, 23(106):221–s10, 1969.
- [35] Anne Greenbaum. *Iterative Methods for Solving Linear Systems*. SIAM, Philadelphia, 1997.
- [36] Andreas Griewank. *Evaluating derivatives: principles and techniques of algorithmic differentiation*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, 2008.
- [37] Douglas Wilhelm Harder and Richard Khoury. Numerical analysis for engineering.
- [38] Philip Hartman. *Ordinary Differential Equations*, volume 38 of *Classics in Applied Mathematics*. SIAM, second edition, 2002.
- [39] Nicholas J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. SIAM, Philadelphia, USA, 2 edition, 1961.
- [40] Nicholas J. Higham. How accurate is gaussian elimination? *Numerical Analysis*, 228:137–154, 1989. Proceedings of the 13-th Dundee Conference.
- [41] Nicholas J. Higham. The matrix sign decomposition and its relation to the polar decomposition. *Linear Algebra and Appl.*, 212/213:3–20, 1994.
- [42] Nicholas J. Higham. A new `sqrtn` for MATLAB. Numerical Analysis Report No. 336, Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, England, January 1999.
- [43] Nicholas J. Higham. Evaluating Padé approximants of the matrix logarithm. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 22(4):1126–1135, 2001.
- [44] Nicholas J. Higham. *Accuracy and Stability of Numerical Algorithms*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, second edition, 2002.
- [45] Nicholas J. Higham and Matthew I. Smith. Computing the matrix cosine. Numerical Analysis Report No. 411, Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, England, September 2002.
- [46] Leslie Hogben, editor. *Handbook of Linear Algebra*. CRC Press, 2006.
- [47] Roger A. Horn and Charles R. Johnson. *Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 1985.
- [48] Roger A. Horn and Charles R. Johnson. *Topics in Matrix Analysis*. Cambridge University Press, 1991.
- [49] W. D. Hoskins and D. J. Walton. A faster, more stable method for computing p th roots of positive definite matrices. *Linear Algebra and Appl.*, 26:139–163, 1979.

- [50] Randal J. Barnes. *Matrix Differentiation (and some other stuff)*. third edition, 2010.
- [51] Faryar Jabbari. *Linear System Theory II*. University of California, Irvine, Chapter 3, 2015. Chapter 3: Eigenvalue, singular values, pseudo-inverse, The Henry Samueli School of Engineering.
- [52] Jr. J.D. Anderson. *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*. McGraw Hill, 1994.
- [53] B. Kågström. Numerical computation of matrix functions. Report UMINF-58.77, Department of Information Processing, University of Umeå, Sweden, 1977.
- [54] Dan Kalman. A singularly valuable decomposition: The svd of a matrix.
- [55] C. S. Kenney and A. J. Laub. The matrix sign function. *IEEE Trans. Automat. Control*, 40(8):1330–1348, 1994.
- [56] C. S. Kenney and A. J. Laub. Small-sample statistical condition estimates for general matrix functions. *SIAM J. MATRIX ANAL. APPL.*, 15(1):36–61, January 1994.
- [57] C. S. Kenney and A. J. Laub. A Schur-Fréchet algorithm for computing the logarithm and exponential of a matrix. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 19(3):640–663, July 1998.
- [58] Charles Kenney and Alan J. Laub. Condition estimates for matrix functions. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 10(2):191–209, 1989.
- [59] Charles Kenney and Alan J. Laub. Padé error estimates for the logarithm of a matrix. *Int. J. Control*, 50(3):707–730, 1989.
- [60] Charles Kenney and Alan J. Laub. Rational iterative methods for the matrix sign function. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 12(2):273–291, 1991.
- [61] Charles S. Kenney and Alan J. Laub. A hyperbolic tangent identity and the geometry of Padé sign function iterations. *Numerical Algorithms*, 7:111–128, 1994.
- [62] D. E. Knuth. *The Art of Computer Programming, Volume 2, Seminumerical Algorithms*. Third Edition, Addison Wesley, Reading, MA, 1998.
- [63] A.I. Kostrikin and Yu.I. Manin. *Linear Algebra and Geometry*. CRC Press, 1988.
- [64] Géraud P Krawezik and Gene Poole. Accelerating the ansys direct sparse solver with gpus. In *Proc. Symposium on Application Accelerators in High Performance Computing (SAAHPC)*. NCSA, Urbana-Champaign, IL, 2009.
- [65] Marek Kuczma. *An Introduction to the Theory of Functional Equations and Inequalities: Cauchy's Equation and Jensen's Inequality*. Springer Science & Business Media, Birkhäuser Verlag, second edition, 2009.
- [66] Joseph Louis Lagrange. *Mécanique analytique*. Jacques Philippe Marie Binet, Jean Guillaume Garnier, Paris, Ve Courcier, 1811.
- [67] P. Lancaster and K. Salkauskas. Surfaces generated by moving least squares methods. *Mathematics of Computation*, 37:141–158, 1981.
- [68] Leon S. Lasdon. *Optimization Theory for Large Systems*. reprint of the 1970 Mineola, New York, Dover Publications, Inc. pp. xiii+523, macmillan edition, 2002.
- [69] Lieven De Lathauwer, Bart De Moor, and Joos Vandewalle. A multilinear singular value decomposition. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 21(4):1253–1278, March 2000.
- [70] Alan J. Laub. *Computational Matrix Analysis*. SIAM, 2012.
- [71] David C. Lay. *Linear Algebra and its Applications*. Addison-Wesley, MA, 1994.

- [72] Stephen J. Leon. *Linear Algebra with Applications*. Macmillan, New York, 4 edition, 1994.
- [73] D. Levin. The approximation power of moving least-squares.
- [74] D. Levin. Mesh-independent surface interpolation.
- [75] D. Levin. Stable integration rules with scattered integration points. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 112:181–187, 1999.
- [76] MultiMedia LLC. C++ code of bareiss algorithm, 1999.
- [77] C. F. Van Loan. A study of the matrix exponential. Technical Report 10, Numerical Analysis, University of Manchester, England, 1975.
- [78] C. F. Van Loan. On the limitation and application of the Padé approximation to the matrix exponential. In E. B. Saff and R. S. Varga, editors, *Padé and Rational Approximation*. Academic Press, New York, 1977.
- [79] C. F. Van Loan. Computing integrals involving the matrix exponential. *IEEE Trans. Automat. Control*, AC-23:395–404, 1978.
- [80] Charles Van Loan. The sensitivity of the matrix exponential. *SIAM J. Numer. Anal.*, 14(6):971–981, December 1977.
- [81] Erdogan Madenci and Ibrahim Guven. *The Finite Element Method and Applications in Engineering Using ANSYS*. Springer, second edition edition, 2015.
- [82] M. Marcus and H. Minc. *A Survey of Matrix Theory and Matrix Inequalities*. Dover, New York, 1992.
- [83] Roy Mathias. Evaluating the Fréchet derivative of the matrix exponential. *Numerische Mathematik*, 63(2):213–226, November 1992.
- [84] Roy Mathias. Condition estimation for matrix functions via the Schur decomposition. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 16(2):565–578, April 1995.
- [85] Roy Mathias. A chain rule for matrix functions and applications. *SIAM J. Matrix Anal. Appl.*, 17(3):610–620, July 1996.
- [86] George Matsaglia and George P. H. Styan. Equalities and inequalities for ranks of matrices. *Linear and Multilinear Algebra*, 2(3), 1974.
- [87] A. McCurdy, K. C. Ng, and B. N. Parlett. Accurate computation of divided differences of the exponential function. *Mathematics of Computation*, 43(168):501–528, October 1984.
- [88] D. H. McLain. Drawing contours from arbitrary data points. *The Computer Journal*, 17(4):318–324, 1974.
- [89] D. H. McLain. Two dimensional interpolation from random data. *The Computer Journal*, 19(2):178–181, 1976.
- [90] Jorma K. Merikoski and Ravinder Kumar. Inequalities for spreads of matrix sums and products. *Applied Mathematics E-Notes*, 4:150–159, 2004.
- [91] Carl Meyer. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra Book and Solutions Manual*. SIAM: Society for Industrial and Applied Mathematics, 2001.
- [92] Carl D. Meyer. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. Society for Industrial & Applied Mathematics, 2000. Section 5.2.

- [93] Cleve Moler and Charles van Loan. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. *SIAM Rev.*, 20:801–836, 1978.
- [94] E. H. Moore. On the reciprocal of the general algebraic matrix. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 26(9):394–395, 1920.
- [95] Jean-Michel Muller, Nicolas Brisebarre, Florent de Dinechin, Claude-Pierre Jeannerod, Vincent Lefèvre, Guillaume Melquiond, Nathalie Revol, Damien Stehlé, and Serge Torres. *Handbook of Floating-Point Arithmetic*. Birkhäuser Boston, 2010. ACM G.1.0; G.1.2; G.4; B.2.0; B.2.4; F.2.1., ISBN 978-0-8176-4704-9.
- [96] Igor Najfeld and Timothy F. Havel. Derivatives of the matrix exponential and their computation. *Adv. in Appl. Math.*, 16(3):321–375, 1995.
- [97] Svetoslav Nenov. B-spline curve as a minimum of quadratic form and its derivatives, i. *Communications in Applied Analysis*, 20:239–251, 2016.
- [98] Svetoslav Nenov and Tsvetelin Tsvetkov. Matrices associated with moving least-squares approximation and corresponding inequalities. *Advances in Pure Mathematics*, 5:856–864, 2015.
- [99] Svetoslav Nenov and Tsvetelin Tsvetkov. Some comparison results for moving least-square approximations. *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, 109:141–152, 2016.
- [100] K. C. Ng and B. N. Parlett. Development of an accurate algorithm for $\text{EXP}(Bt)$, Part I, programs to swap diagonal block, Part II. CPAM Technical Report 294, University of California, Berkeley, CA, 1988.
- [101] Kwok Choi Ng. *Contributions to the Computation of the Matrix Exponential*. PhD thesis, University of California, Berkeley, 1984.
- [102] B. N. Parlett. Computation of functions of triangular matrices. Memorandum ERL-M481, Electronics Research Laboratory, College of Engineering, University of California, Berkeley, Berkeley, CA, 1974.
- [103] B. N. Parlett. A recurrence among the elements of functions of triangular matrices. *Linear Algebra and Appl.*, 14:117–121, 1976.
- [104] Beresford N. Parlett and Kwok Choi Ng. Development of an accurate algorithm for $\exp(Bt)$. Technical Report PAM-294, Center for Pure and Applied Mathematics, University of California, Berkeley, August 1985.
- [105] Roger Penrose. A generalized inverse for matrices. *Proceedings of the Cambridge Philosophical Society*, 51:406–413, 1955.
- [106] Kaare Brandt Petersen and Michael Syskind Pedersen. *The Matrix Cookbook*. February 16, Version, 2006.
- [107] G. Piazza and T. Politi. An upper bound for the condition number of a matrix in spectral norm. *Journal of Computational and Appl. Math.*, 143:141–144, 2002.
- [108] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*. Cambridge U. P., Cambridge, 3 edition, 2007.
- [109] N.J. Pullman. *Matrix Theory and Its Applications*. Marcel Dekker, Inc., New York, 1976.
- [110] V. Rajaraman. *Computer Oriented Numerical Methods*. Prentice Hall, 2006.

- [111] T. Rumak. *Estimation of functions by means of the first order partial differential inequalities*, volume XXVI. Annales Polonici Mathematici, 1972.
- [112] Siegfried M. Rump. Verified bounds for singular values, in particular for the spectral norm of a matrix and its inverse. *BIT*, 51(2), 2011.
- [113] Alexander A. Samarskii. *The theory of difference schemes*. Marcel Dekker, Inc., New York, 2001.
- [114] Ivan Selesnick. Least squares with examples in signal processing, 2013.
- [115] Steven M. Serbin and Sybil A. Blalock. An algorithm for computing the matrix cosine. *SIAM J. Sci. Statist. Comput.*, 1(2):198–204, 1980.
- [116] Donald Shepard. A two-dimensional interpolation function for irregularly-spaced data. In *Proceedings of the 1968 ACM National Conference*, pages 517–524, 1968.
- [117] J. Sherman and W. Morrison. Adjustment of an inverse matrix corresponding to a change in one element of a given matrix. *Annals of Mathematical Statistics*, 21(1):124–127, 1950.
- [118] L. S. Shieh, Y. T. Tsay, and C. T. Wang. Matrix sector functions and their applications to systems theory. *IEE Proc.*, 131(5):171–181, 1984.
- [119] Matthew I. Smith. A Schur algorithm for computing matrix p th roots. Numerical Analysis Report No. 392, Manchester Centre for Computational Mathematics, Manchester, England, July 2001.
- [120] Gilbert Strang. *Linear Algebra and Its Applications*. Brooks/Cole Publishing Co., 4 edition, 2005.
- [121] Gilbert Strang. *Introduction to Linear Algebra*. Wellesley-Cambridge Press and SIAM, 5 edition, 2016.
- [122] Dicho Stratiev, Ivaylo Marinov, Rosen Dinkov, Ivelina Shishkova, Ilian Velkov, Ilshat Sharafutdinov, Svetoslav Nenov, Tsvetelin Tsvetkov, Sotir Sotirov, Magdalena Mitkova, et al. Opportunity to improve diesel-fuel cetane-number prediction from easily available physical properties and application of the least-squares method and artificial neural networks. *Energy & Fuels*, 29(3):1520–1533, 2015.
- [123] Jacek Szarski.
- [124] L.H. Thomas. Elliptic problems in linear differential equations over a network. *Watson Sci. Comput. Lab Report, Columbia University, New York*, 1949.
- [125] Ramazan Turkmen and Haci Civciv. Some bounds for the singular values of matrices. *Applied Mathematical Sciences*, 1(49):2443–2449, 2007.
- [126] L. Richard Turner. Inverse of the vandermonde matrix with application. *NASA Technical Note*, TN D-3547, 1966.
- [127] Felix Kwok Walter Gander, Martin Gander. *Scientific Computing. An Introduction using Maple and Matlab*. Texts in Computational Science and Engineering Free Preview. Springer, 2014.
- [128] Robert C. Ward. Numerical computation of the matrix exponential with accuracy estimate. *SIAM J. Numer. Anal.*, 14(4):600–610, September 1977.
- [129] James Hardy Wilkinson. *Rounding Errors in Algebraic Processes*. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, NJ, USA, 1963.

- [130] James Hardy Wilkinson. *The Algebraic Eigenvalue Problem*. Oxford University Press/Clarendon Press, 1965.
- [131] SN Yeralan, T Davis, and S Ranka. Sparse qr factorization on gpu architectures. *University of Florida, Tech. Rep.*, 2013.
- [132] Yu Yi-Sheng and A. Gu Dun-he. note on a lower bound for the smallest singular value. *Linear Alg. and Its Appl.*, 253:25–38, 1997.
- [133] L. z. Lu and C. E. M. Pearce. Some new bounds for singular values and eigenvalues of matrix products. *Annals of Operations Research*, 98:141–148, 2000.
- [134] F. Zhang. *Matrix Theory: Basic Results and Techniques*. Springer, New York, USA, 2 edition, 2011.
- [135] И.И. Ляшко, А.К. Боярчук, and Я.Г. Гай. *Математический Анализ в Примерах и Задачах. Введение в Анализ, Производная, Интеграл*. Вища Школа, 1974.
- [136] И.И. Ляшко, А.К. Боярчук, Я.Г. Гай, and Г.П. Головач. *Справочное Пособие по Высшей Математике (антиДемидович)*. Едиториал УРСС, 2003.
- [137] И.И. Ляшко, А.К. Боярчук, Я.Г. Гай, and Г.П. Головач. *Математический Анализ. Введение в Анализ, Производная, Интеграл*. Вища Школа, 2013.
- [138] И.И. Ляшко, А.К. Боярчук, Я.Г. Гай, and Г.П. Головач. *Математический Анализ в Примерах и Задачах. Кратные и Криволинейные Интегралы*. Вища Школа, 2013.
- [139] И.И. Ляшко, А.К. Боярчук, Я.Г. Гай, and Г.П. Головач. *Математический Анализ в Примерах и Задачах. Ряды, Функции Векторного Аргумента*. Вища Школа, 2013.
- [140] А.Н. Тихонов. Об устойчивости обратных задач. *Доклады Академии Наук СССР*, 39(5):195–198, 1943.
- [141] А.Н. Тихонов and В.Я. Арсенин. *Методы решения некорректных задач*. Наука, Москва, 1979.

ДЕКЛАРАЦИЯ: АВТОРСКИТЕ ПРАВА НА ПРЕДСТАВЕНИТЕ В ДИСЕРТАЦИЯТА РЕЗУЛТАТИ

- (1) Резултатите и сведенията от глава 1 са получени предварително от други изследователи. Представеният материал се базира на различни литературни източници, които са надлежно посочени в изложението на материала и в последната секция на глава 1.
- (2) Резултатите представени в глава 2 са базирани на различни литературни източници, които са надлежно посочени в изложението на материала и в последната секция на глава 2.
- (3) Резултатите от глава 3 са базирани на различни литературни източници и изследвания на автора.
- (4) Резултатите в глава 4 са публикувани за първи път в

Dicho Stratiev, Ivaylo Marinov, Rosen Dinkov, Ivelina Shishkova, Ilian Velkov, Ilshat Sharafutdinov, Svetoslav Nenov, Tsvetelin Tsvetkov, Sotir Sotirov, Magdalena Mitkova, Nikolay Rudnev, Opportunity to improve diesel-fuel cetane-number prediction from easily available physical properties and application of the least-squares method and artificial neural networks, *Energy & Fuels*, **29**, No. 3 (2015), 1520-1533; DOI: 10.1021/ef502638c. Impact Factor на списанието: 3.091.

СПИСЪК НА ПУБЛИКАЦИИ С АВТОР ЦВТЕЛИН ЦВЕТАНОВ ЦВЕТКОВ, НА
КОИТО СЕ ОСНОВАВА ДИСЕРТАЦИОННИЯ ТРУД

- [A] Dicho Stratiev, Ivaylo Marinov, Rosen Dinkov, Ivelina Shishkova, Ilian Velkov, Ilshat Sharafutdinov, Svetoslav Nenov, Tsvetelin Tsvetkov, Sotir Sotirov, Magdalena Mitkova, Nikolay Rudnev, Opportunity to improve diesel-fuel cetane-number prediction from easily available physical properties and application of the least-squares method and artificial neural networks, *Energy & Fuels*, **29**, No. 3 (2015), 1520-1533; DOI: 10.1021/ef502638c.
- [B] Svetoslav Nenov, Tsvetelin Tsvetkov, Matrices associated with moving least-squares approximation and corresponding inequalities, *Advances in Pure Mathematics*, **5** (2015), 856-864, DOI: 10.4236/apm.2015.514080.

Забелязани цитати на статия [A] (12 цитата):

Цитати в списания с Impact Factor (6 цитата):

- [1] D. Karonis, I. Zahos-Siagos, D. Filimon, F. Vasileiou, A multivariate statistical analysis to evaluate and predict ignition quality of marine diesel fuel distillates from their physical properties, *Fuel Processing Technology*, **166**, 299-311, DOI: 10.1016/j.fuproc.2017.06.021.
- [2] L. Xin, Xx Liu, Xb Chen, X. Feng, Y. Liu, C. Yang, Efficient Conversion of Light Cycle Oil into High-Octane-Number Gasoline and Light Olefins over a Mesoporous ZSM-5 Catalyst, *Energy & Fuels*, **31**, No. 7, 6968-6976, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7600852.
- [3] F.M. de Oliveira, L.S. de Carvalho, L.S.G Teixeira, C.H. Fontes, K.M.G. Lima, A.B.F. Camara, H.O.M. Araujo, R.V. Sales, Predicting cetane index, flash point, and content sulfur of diesel biodiesel blend using an

- artificial neural network model, *Energy & Fuels*, **31**, No. 4, 3913-3920, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.7b00282.
- [4] A.G.A. Jameel, N. Naser, A.H. Emwas, S. Dooley, S.M. Sarathy, Predicting fuel ignition quality using H-1 NMR spectroscopy and multiple linear regression, *Energy & Fuels*, **30**, No. 11, 9819-9835, DOI: 10.1021/acs.energyfuels.6b01690.
- [5] F. Allegrini, A.C. Olivieri, Sensitivity, prediction uncertainty, and detection limit for artificial neural network calibrations, *Analytical Chemistry*, **88**, No. 15, 7807-7812, DOI: 10.1021/acs.analchem.6b01857.
- [6] D. Yordanov, Z. Mustafa, R. Milina, Z. Tsonev, Multi-criteria optimisation process of the oil extraction from spent coffee ground by various solvents, *Oxidation Communications*, **39**, No. 2, 1478-1487.
- [7] Mostafa Mostafaei, ANFIS models for prediction of biodiesel fuels cetane number using desirability function, *Fuel*, **216** (2018), 665-672, doi: 10.1016/j.fuel.2017.12.025.

Цитати в други списания (6 цитата):

- [1] S. Sotirov, E. Sotirova, P. Melin, O. Castilo, K. Atanassov, Modular neural network preprocessing procedure with intuitionistic fuzzy inter-criteria analysis method, *Advances in Intelligent Systems and Computing*, **400**, Springer International Publishing Switzerland, DOI: 10.1007/978-3-319-26154-6_14.
Забележка. Поне един от авторите на цитата участва в авторския колектив на [A].
- [2] E. Nikolaychuk, D. Stratiev, I. Velkov, A. Veli, S. Sotirov, M. Mitkova, Conversion of heavy oil distillation data from astm d-1160 to ASTM D-5236, *Petroleum & Coal*, **57**, No. 3 (2015), 266-279.
Забележка. Поне един от авторите на цитата участва в авторския колектив на [A].
- [3] Svetoslav I. Nenov, B-Spline curve as a minimum of quadratic form and its derivatives, I, *Communications in Applied Analysis*, **20** (2016), 239-251.
Забележка. Поне един от авторите на цитата участва в авторския колектив на [A].

- [4] Svetoslav I. Nenov, AN upper estimate for the largest singular value of a special matrix, II, *International Journal of Pure and Applied Mathematics*, **115**, No. 4 (2017), 867-872.

Забележка. Поне един от авторите на цитата участва в авторския колектив на [A].

- [5] A. Altynov, I.A. Bogdanov, M.V. Kirgina, B.V. Sakhnevich, Determination of operational characteristics of diesel fuel: A study on computational methods, In: *Strategic Technology (IFOST), 2016 11th International Forum on*, IEEE Xplore, 23 March 2017.

БЛАГОДАРНОСТИ

Издавам благодарности на моят научен ръководител проф. д-р Светослав Ненов за постановката на дисертационната тема и за проявената помощ и загриженост при реализиране на изследванията.

Благодаря на всички членове на катедра математика към ХТМУ-София за постоянната подкрепа по време на изготвянето на настоящият дисертационен труд.