Тема : Метод наименьших квадратов

$\mathbf{1^0}$. Постановка линейной задачи метода наименьших квадратов. Связь с задачей интерполяции функции обобщенным полиномом конечной длины в большом числе узлов. Среднеквадратичное уклонение. Полином наилучшего среднеквадратичного приближения.
$\mathbf{2^0}$. Нормальная система метода наименьших квадратов. Теорема о существовании единственного полинома наилучшего среднеквадратичного приближения. Случай алгебраических полиномов. Пример. $\mathbf{3^0}$. Вычислительные аспекты задачи метода наименьших квадратов: симметричность и положительная определенность матрицы нормальной системы, ее обусловленность. Зависимость обусловленности от выбора полиномиального базиса.

1^0. Пусть функция $y = f(x)$ задана некоторой таблицей приближенных значений

$$f(x_i) \approx y_i, \quad i = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

Величины y_i известны с ошибками $\varepsilon_i = y_i^0 - y_i$, где $y_i^0 = f(x_i)$. Если значения y_i получены экспериментально, то ошибки носят случайный характер. Уровень погрешности (“шумов”) при этом бывает весьма существенным.

Предположим, что для восстановления $f(x)$ используются линейные комбинации вида

$$\Phi_m(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + \ldots + a_m\varphi_m(x).$$

Здесь $\varphi_0(x)$, $\varphi_1(x)$, ..., $\varphi_m(x)$ — заданные вещественнозначные базисные функции. Коэффициенты a_0, a_1, ..., a_m — это параметры модели, которые требуется определить по исходной таблице. Как правило, $m \ll n$.

Функция $\Phi_m(x)$ называется **обобщенным полиномом**. Часто в качестве базисных выбираются степени независимой переменной. В этом случае вместо обобщенного используется обычный полином

$$P_m(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2 + \ldots + a_m x^m.$$

Если уровень неопределенности исходных данных высок, неестественно требовать совпадения значений обобщенного полинома $\Phi_m(x)$ в узловых точках x_i таблицы с числами y_i.

Иными словами, в этом случае не имеет смысла использовать обычную интерполяцию, которая в лучшем случае приводит к повторению исходных больших ошибок наблюдений, в то время как обработка экспериментальных данных требует **сглаживания ошибок** (избавления от шумов).

Отказ от точных равенств $\Phi_m(x_i) = y_i$ в точках x_i компенсируется требованием приближенных равенств $\Phi_m(x_i) \approx y_i$ при $i = 0, 1, \ldots, n$.

Система приближенных равенств при этом записывается в покомпонентном виде:

$$\begin{cases} a_0\varphi_0(x_0)+a_1\varphi_1(x_0)+\ldots+a_m\varphi_m(x_0)\approx y_0, \\ a_0\varphi_0(x_1)+a_1\varphi_1(x_1)+\ldots+a_m\varphi_m(x_1)\approx y_1, \\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots, \\ a_0\varphi_0(x_n)+a_1\varphi_1(x_n)+\ldots+a_m\varphi_m(x_n)\approx y_n. \end{cases}$$

Предлагаются различные критерии, позволяющие выбрать параметры a_0, a_1, ..., a_m так, чтобы выписанная система линейных приближенные равенства выполнялась наилучшим в каком-либо смысле образом.

Один из таких критериев, используемый чаще всего, называется **методом наименьших квадратов**.

В этом методе минимизируется **среднеквадратичное уклонение**, определяемое равенством

$$\delta(\Phi_m, \overrightarrow{y}) = \left[\frac{1}{n+1}\sum_{i=0}^{n}(\Phi_m(x_i) - y_i)^2\right]^{1/2}.$$

Величина $\delta(\Phi_m, \overrightarrow{y})$ является мерой отклонения обобщенного полинома Φ_m от вектора $\overrightarrow{y} = (y_0, y_1, \ldots, y_n)$ заданных табличных значений.

Минимум среднеквадратичного уклонения достигается при тех же значениях коэффициентов a_0, a_1, ..., a_m, что и минимум функции, задаваемой следующим равенством

$$S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}) = \sum_{i=0}^{n} \Big\{ \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i) - y_i \Big\}^2.$$

Относительно переменных $\overrightarrow{a} = (a_0, a_1, \ldots, a_m)$ минимизируемая функция является квадратичной. Ее эквивалентное задание имеет вид следующего равенства:

$$\boldsymbol{S}(\overrightarrow{\boldsymbol{a}}, \overrightarrow{\boldsymbol{y}}) = \left(\boldsymbol{P}\overrightarrow{\boldsymbol{a}} - \overrightarrow{\boldsymbol{y}}, \boldsymbol{P}\overrightarrow{\boldsymbol{a}} - \overrightarrow{\boldsymbol{y}}\right) = \|\boldsymbol{P}\overrightarrow{\boldsymbol{a}} - \overrightarrow{\boldsymbol{y}}\|_{\mathbf{2}}^{\mathbf{2}}.$$

Здесь $\boldsymbol{P}$ — это прямоугольная матрица размера $\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{m}$. Ее элементы определяются по значениям базисных функций $\varphi_{\boldsymbol{j}}(\cdot)$ в узлах интерполяции следующим образом:

$$P = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_m(x_1) \\ \varphi_0(x_2) & \varphi_1(x_2) & \cdots & \varphi_m(x_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_m(x_n) \end{pmatrix}. \qquad (P_M)$$

Функции $\delta(\Phi_m, \overrightarrow{y})$ и $S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y})$ связаны между собой следующим соотношением:

$$[\delta(\Phi_m, \overrightarrow{y})]^2 = \frac{1}{n+1} S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}).$$

Линейная задача МНК. Требуется найти такой обобщенный полином

$$\Phi_m^{\overrightarrow{y}}(x) = a_0(\overrightarrow{y})\varphi_0(x) + a_1(\overrightarrow{y})\varphi_1(x) + \ldots + a_m(\overrightarrow{y})\varphi_m(x),$$

для которого среднеквадратичное уклонение $\delta(\Phi_m^{\overrightarrow{y}}, \overrightarrow{y})$ принимает минимальное возможное значение:

$$\delta(\Phi_m^{\overrightarrow{y}}, \overrightarrow{y}) = \min_{\Phi_m} \delta(\Phi_m, \overrightarrow{y}).$$

Удовлетворяющий последнему условию обобщенный полином $\Phi_m^{\vec{y}}$ называют полиномом **наилучшего среднеквадратичного приближения**.

2^0. К решению линейной задачи МНК применяются различные подходы. Простейший из них состоит в использовании необходимого условия экстремума функции $S(\vec{a}, \vec{y})$ по переменным $\vec{a}$, состоящего в равенстве нулю в точке минимума функции ее частных производных:

$$\frac{\partial S}{\partial a_k}(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}) = 0, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, m. \qquad (NS)$$

Учитывая, что по определению

$$S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}) = \sum_{i=0}^{n} \Big\{ \sum_{j=0}^{m} a_j \varphi_j(x_i) - y_i \Big\}^2,$$

вычислим частные производные в левой части последнего равенства. Тогда получаем

$$\frac{\partial S}{\partial a_k}(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}) = \sum_{i=0}^{n} 2 \sum_{j=0}^{m} \bigl(a_j \varphi_j(x_i) - y_i\bigr) \varphi_k(x_i) = 0.$$

Изменяя порядок суммирования и сокращая на 2, приходим к системе линейных уравнений

$$\sum_{j=0}^{m} \Bigl(\sum_{i=0}^{n} \varphi_j(x_i) \varphi_k(x_i)\Bigr) a_j = \sum_{i=0}^{n} y_i \varphi_k(x_i), \qquad (NS')$$

где $\quad k = 0, 1, 2, \ldots, m.$

Эта квадратная $(m+1)\times(m+1)$ система линейных уравнений относительно вектора неизвестных $\vec{a} = (a_0, a_1, \ldots, a_m)$ называется **нормальной системой МНК**.

В матричном виде нормальная система (NS') записывается в следующем виде:

$$P^T P\vec{a} = P^T\vec{y}.$$

Здесь P — это матрица, определяемая равенством

$$P = \begin{pmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_m(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_m(x_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \varphi_0(x_n) & \varphi_1(x_n) & \cdots & \varphi_m(x_n) \end{pmatrix},$$

а P^T — к ней транспонированная.

Произведение $\Gamma = P^T P$ — это матрица Грама, элементы которой получаются как спе-

циального типа скалярное произведение столб-
цов матрицы P:

$$\gamma_{ij} = \sum_{k=0}^{n} \varphi_i(x_k)\varphi_j(x_k), \qquad \Gamma = (\gamma_{ij}).$$

Полагая $\overrightarrow{b} = P^T\overrightarrow{y}$, получаем для минимизи-
рующего среднеквадратичное уклонение век-
тора коэффициентов $\overrightarrow{a} = (a_0, a_1, \dots, a_m)$ си-

стему линейных уравнений

$$\Gamma \vec{a} = \vec{b}. \qquad (NS'')$$

Лемма. *Пусть вектор $\vec{a}$ является решением системы (NS''). Тогда для любого вектора $\vec{a}' = \vec{a} + \overrightarrow{\Delta a}$ справедливо равенство*

$$S(\vec{a}', \vec{y}) = S(\vec{a}, \vec{y}) + \|P\overrightarrow{\Delta a}\|_2^2.$$

Доказательство. Пусть $\vec{a}$ — это решение нормальной системы МНК. Тогда для любого вектора $\overrightarrow{a}' = \overrightarrow{a} + \overrightarrow{\Delta a}$ справедливы равенства

$$S(\overrightarrow{a}', \overrightarrow{y}) = \|P(\overrightarrow{a} + \overrightarrow{\Delta a}) - \overrightarrow{y}\|_2^2 =$$
$$= (P(\overrightarrow{a} + \overrightarrow{\Delta a}) - \overrightarrow{y}, P(\overrightarrow{a} + \overrightarrow{\Delta a}) - \overrightarrow{y}) =$$
$$= (P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y} + P\overrightarrow{\Delta a}, P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y} + P\overrightarrow{\Delta a}) =$$
$$= (P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y}, P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y}) + 2(P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y}, P\overrightarrow{\Delta a}) + (P\overrightarrow{\Delta a}, P\overrightarrow{\Delta a}).$$

Выражение в правой части допускает запись в следующей эквивалентной форме:

$$\|P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y}\|_2^2 + 2(P^T P\overrightarrow{a} - P^T\overrightarrow{y}, \overrightarrow{\Delta a}) + \|P\overrightarrow{\Delta a}\|_2^2.$$

Используя введенные ранее матрицу $\boldsymbol{\Gamma = P^T P}$ и вектор $\overrightarrow{\boldsymbol{b}} = \boldsymbol{P^T} \overrightarrow{\boldsymbol{y}}$, получаем

$$\boldsymbol{S(\overrightarrow{a}', \overrightarrow{y}) = \|P\overrightarrow{a} - \overrightarrow{y}\|_2^2 + 2(\Gamma\overrightarrow{a} - \overrightarrow{b}, \overrightarrow{\Delta a}) + \|P\overrightarrow{\Delta a}\|_2^2.}$$

Но по условию $\boldsymbol{\Gamma\overrightarrow{a} = \overrightarrow{b}}$ и поэтому второго слагаемого в последней строке полученного равенства не будет:

$$\boldsymbol{(\Gamma\overrightarrow{a} - \overrightarrow{b}, \overrightarrow{\Delta a}) = 0.}$$

Таким образом, получаем требуемое соотношение

$$S(\overrightarrow{a}', \overrightarrow{y}) = S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}) + \|P\overrightarrow{\Delta a}\|_2^2.$$

Следовательно, значение рассматриваемой квадратичной функции на любом возмущенном векторе $\overrightarrow{a}'$ не меньше ее значения на решении $\overrightarrow{a}$ системы (NS''). $\square$

Теорема. *Пусть порождающие функции* φ_0, φ_1, ..., φ_m *линейно независимы. Тогда полином наилучшего среднеквадратичного приближения* $\Phi_m^{\overrightarrow{y}}(x)$ *существует и единствен.*

Доказательство. Матрица Γ — это матрица Грама линейно независимой системы φ_0, φ_1, ..., φ_m. Ее определитель, как известно, не равен нулю. Поэтому решение системы $\Gamma\overrightarrow{a} = \overrightarrow{b}$ существует и единственно.

Это означает, что если полином наилучшего среднеквадратичного приближения $\Phi_m^{\overrightarrow{y}}(x)$ существует, то его коэффициенты

$$\overrightarrow{a} = (a_0, a_1, \ldots, a_m)$$

определяются однозначно.

Пусть $\overrightarrow{a}' \neq \overrightarrow{a}$, тогда $\overrightarrow{\Delta a} \neq 0$ и по предыдущей лемме имеем

$$S(\overrightarrow{a}', \overrightarrow{y}) = S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}) + \|P\overrightarrow{\Delta a}\|_2^2 > S(\overrightarrow{a}, \overrightarrow{y}).$$

Это означает, что вектор $\vec{a}$ доставляет функции $S(\vec{a}', \vec{y})$ минимум. □

Замечание. *Если* $m = n$, *а функции* φ_0, φ_1, …, φ_m *линейно независимы, то полином наилучшего среднеквадратичного приближения, найденный методом наименьших квадратов, совпадает с интерполяционным полиномом, построенным по узлам* x_0, x_1, …, x_n.

При использовании МНК, как правило, предполагается, что $m \ll n$. В этом случае метод обладает сглаживающими свойствами.

Часто для приближения по МНК используется система алгебраических степеней

$$1, \quad x, \quad x^2, \quad \ldots, \quad x^m,$$

причем число интерполяционных условий не меньше, чем число базисных мономов, то есть $m \leq n$.

В силу линейной независимости рассматриваемых степенных функций по доказанной теореме алгебраический полином наилучшего среднеквадратичного приближения в этом случае существует и единствен.

Для степенных функций $\varphi_{\boldsymbol{k}}(x) \equiv x^{\boldsymbol{k}}$ нормальная система ($\boldsymbol{NS''}$) записывается в следующем покомпонентном виде:

$$\sum_{j=0}^{m}\Big(\sum_{i=0}^{n} x_i^{j+k}\Big)a_j = \sum_{i=0}^{n} y_i x_i^k, \qquad k = 0, 1, \ldots, m.$$

Если $m = 1$, то эта система принимает вид

$$\begin{cases} (n+1)a_0 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i)a_1 = \sum\limits_{i=0}^{n} y_i, \\ (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i)a_0 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2)a_1 = \sum\limits_{i=0}^{n} x_i y_i. \end{cases}$$

Среднеквадратичное приближение при этом осуществляется линейной функцией — полиномом $a_0 + a_1 x$.

В случае $m = 2$ имеем

$$\begin{cases} (n+1)a_0 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i)a_1 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2)a_2 = \sum\limits_{i=0}^{n} y_i, \\ (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i)a_0 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2)a_1 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^3)a_2 = \sum\limits_{i=0}^{n} y_i x_i, \\ (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^2)a_0 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^3)a_1 + (\sum\limits_{i=0}^{n} x_i^4)a_2 = \sum\limits_{i=0}^{n} y_i x_i^2. \end{cases}$$

Приближение осуществляет квадратичная функция — полином наилучшего среднеквадратичного приближения

$$P_2(x) = a_0 + a_1 x + a_2 x^2.$$

Задача. *Пусть функция $y = f(x)$ задана следующей таблицей:*

x	0.0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
y	0.21	0.23	0.31	0.29	0.42	0.35	0.58	0.61	0.59	0.66

Требуется аппроксимировать $f(x)$ полиномами первой и второй степени, построенными по методу наименьших квадратов.

Решение. Вычислим суммы в нормальных системах, соответствующих двум первым значениям $m = 1$ и $m = 2$. Получим

$$\sum_{i=0}^{9} x_i = 4.5, \quad \sum_{i=0}^{9} x_i^2 = 2.85, \quad \sum_{i=0}^{9} x_i^3 = 2.025,$$

$$\sum_{i=0}^{9} x_i^4 = 1.5333,$$

$$\sum_{i=0}^{9} y_i = 4.25, \quad \sum_{i=0}^{9} y_i x_i = 2.356, \quad \sum_{i=0}^{9} y_i x_i^2 = 1.6154.$$

Для коэффициентов полинома наилучшего среднеквадратичного приближения $P_1(x) =$

$a_0 + a_1 x$ имеем систему линейных уравнений

$$\begin{cases} 10a_0 + 4.5a_1 = 4.25, \\ 4.5a_0 + 2.85a_1 = 2.356. \end{cases}$$

Ее решение: $a_0 \approx 0.183$, $a_1 \approx 0.538$.

При этом

$$\delta_1 = \left[\frac{1}{10} \sum_{i=0}^{9} (P_1(x_i) - y_i)^2 \right]^{1/2} \approx 0.0486.$$

Для $m = 2$ имеем систему

$$\begin{cases} 10a_0 + 4.5a_1 + 2.85a_2 = 4.25, \\ 4.5a_0 + 2.85a_1 + 2.025a_2 = 2.356, \\ 2.85a_0 + 2.025a_1 + 1.5333a_2 = 1.6154. \end{cases}$$

Ее решение: $a_0 \approx 1.194$, $a_1 \approx 0.452$, $a_2 \approx 0.0947$.

Среднеквадратичное отклонение при этом определяется равенством

$$\delta_2 = \left[\frac{1}{10}\sum_{i=0}^{9}\left(P_2(x_i) - y_i\right)^2\right]^{1/2} \approx 0.0481.$$

Отметим, что средняя погрешность в исходных данных заведомо превышает 0.01.

По этой причине приближение полиномами первой и второй степени дают практически эквивалентный результат. Но в силу большей простоты следует предпочесть линейное приближение $f(x) \approx P_1(x)$. $\square$

3^0. Метод вычисления параметров

$$(a_0, a_1, a_2, \ldots, a_m)$$

как решения нормальной системы весьма привлекателен: задача сведена к системе линейных алгебраических уравнений с квадратной матрицей. Матрица $\mathbf{\Gamma}$ этой системы симметрична и положительно определена.

Тем не менее, если не выбирать исходные базисные функции

$$\boldsymbol{\varphi_0(x), \quad \varphi_1(x), \quad \varphi_2(x), \quad \ldots, \quad \varphi_m(x)}$$

специальным образом, то уже при $\boldsymbol{m > 5}$ нормальная система оказывается плохо обусловленной.

Это происходит, во-первых, из-за того, что функции φ_0, φ_1, ..., φ_m. хотя и являются линейно независимыми, но при этом могут оказаться в совокупности очень близки к линейно зависимой системе.

Во-вторых, при переходе к нормальной системе $P^T P \vec{a} = P^T \vec{y}$ происходит симметризация матрицы системы, но при этом обусловленность решаемой СЛАУ еще более ухудшается.

Простейший пример ‘‘почти линейно зависимой’’ системы дает система $1, x, x^2, \ldots, x^m$ при больших m.

В определенном смысле ‘‘наиболее линейно независимой’’ является система функций φ_0, φ_1, ..., φ_m, ортогональная в скалярном произведении, присутствующем в определении элементов матрицы Грама Γ.

В случае ортогональных базисных функций матрица $\mathbf{\Gamma}$ диагональна, а потому решение системы $\mathbf{\Gamma}\overrightarrow{\boldsymbol{a}} = \overrightarrow{\boldsymbol{b}}$ легко вычисляется:

$$\begin{cases} \boldsymbol{a_k = \dfrac{b_k}{\gamma_{kk}}}, \\ \boldsymbol{b_k = \sum\limits_{i=0}^{n} y_i \varphi_k(x_i)}, \\ \boldsymbol{\gamma_{kk} = \sum\limits_{i=0}^{n} \varphi_k^2(x_i)}, \end{cases} \qquad \boldsymbol{k = 0, 1, 2, \ldots, n.}$$

Однако выбор ортогональной системы далеко не всегда возможен. Поэтому часто используются системы базисных функций, для которых матрица Грама лишь близка к диагональной.

При аппроксимации на отрезке $[-1, 1]$ пример такой системы дают **полиномы Чебышёва**

$$\boldsymbol{T_0(x), \quad T_1(x), \quad T_2(x), \quad \ldots, \quad T_m(x).}$$

Полиномы Чебышёва определяются следующими рекуррентными соотношениями:

$$T_0(x) = 1,\ T_1(x) = x,$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x).$$

Найденный по базисным функциям $T_0(x)$, $T_1(x)$, ..., $T_m(x)$ полином наилучшего среднеквадратичного приближения

$$\widetilde{P_m}(x) = \widetilde{a_0}T_0(x) + \widetilde{a_1}T_1(x) + \ldots + \widetilde{a_m}T_m(x)$$

допускает также стандартное разложение по степеням x.

Однако задача отыскания коэффициентов $\widetilde{a_0}$, $\widetilde{a_1}$, …, $\widetilde{a_m}$ в разложении по полиномам Чебышёва обладает гораздо лучшей обусловленностью и по этой причине предпочтительнее с вычислительной точки зрения.

Тема : Дискретное преобразование Фурье

$\mathbf{1^0}$. Аналог разложения в ряд Фурье функции, известной лишь в конечном числе узлов. $\mathbf{2^0}$. Система для коэффициентов разложения в покомпонентном и матричном виде, ее симметризация. $\mathbf{3^0}$. Лемма об ортогональности базисных функций в дискретном скалярном произведении. Определение прямого и обратного дискретного преобразования Фурье. $\mathbf{4^0}$. Расчетные формулы для быстрого преобразования Фурье. Подсчет и сравнение количества арифметических операций. $\mathbf{5^0}$. Задача тригонометрической интерполяции и ее чувствительность к погрешностям в исходных данных.

1^0. В приложениях широко используются различные варианты преобразования Фурье функций непрерывного аргумента — важной операции математического анализа. Не менее часто применяется представление функций, непрерывных и периодических, в виде сходящихся тригонометрических рядов Фурье.

Как известно, всякая непрерывно дифференцируемая периодическая с периодом 1

функция $f = f(x)$ разложима в сходящийся ряд Фурье:

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} \alpha_k e^{i2\pi kx}. \qquad (FS)$$

Символ i в степени экспоненты — это, как обычно, мнимая единица. Коэффициенты разложения (FS) вычисляются по формулам

$$\alpha_k = \int_0^1 f(x) e^{-i2\pi kx} dx, \qquad (CF)$$

где $k = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \ldots$.

Однако, функция $f = f(x)$ зачастую бывает известна лишь в конечном числе точек отрезка $[0, 1]$. Предположим, например, что это равноотстоящие точки

$$x_j = \frac{j}{N}, \quad j = 0, 1, 2, \ldots, N-1.$$

В этом случае аналогом разложения в ряд Фурье ($\boldsymbol{FS}$) служат равенства:

$$\boldsymbol{f(x_j) = \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{2\pi k \frac{j}{N} i}, \quad 0 \le j < N.} \qquad (\boldsymbol{SDF})$$

Это разложение справедливо тогда и только тогда когда тригонометрический полином

$$\boldsymbol{S_N(x) = \sum_{k=0}^{N-1} a_k e^{i2\pi k x}} \qquad (\boldsymbol{TP_N})$$

интерполирует функцию $f(x)$ на отрезке $[0, 1]$ по ее значениям в узлах x_j, $0 \leq j < N$.

2^0. Рассмотрим следующую задачу о коэффициентах разложения (SDF).

Задача (DDF). *Найти по известным значениям функции в узлах*

$$f_j = f(x_j), \qquad j = 0, 1, \ldots, N-1,$$

коэффициенты $(\boldsymbol{a_0, a_1, \ldots, a_{N-1}})$ *разложения* $(\boldsymbol{SDF})$.

Введем следующие необходимые для решения задачи $(\mathbf{DDF})$ обозначения:

$$\boldsymbol{\varphi_k(x) \equiv e^{i2\pi kx}, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, N-1.}$$

Тогда сопутствующий задаче тригонометрический полином имеет вид

$$S_N(x) = \sum_{k=0}^{N-1} a_k \varphi_k(x).$$

Условия (SDF) при этом записываются в виде системы линейных уравнений относительно неизвестных $(a_0, a_1, \ldots, a_{N-1})$ следующим образом:

$$\begin{cases} \varphi_0(x_0)a_0 + \varphi_1(x_0)a_1 + \ldots + \varphi_{N-1}(x_0)a_{N-1} = f_0, \\ \varphi_0(x_1)a_0 + \varphi_1(x_1)a_1 + \ldots + \varphi_{N-1}(x_1)a_{N-1} = f_1, \\ \cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots\cdots, \\ \varphi_0(x_{N-1})a_0 + \varphi_1(x_{N-1})a_1 + \\ +\varphi_2(x_{N-1})a_2 + \ldots + \varphi_{N-1}(x_{N-1})a_{N-1} = f_{N-1}. \end{cases}$$

В матричном виде эта система принимает следующий вид:

$$P\overrightarrow{a} = \overrightarrow{f}. \qquad (SDF')$$

Здесь квадратная матрица $\boldsymbol{P}$ задается равенством

$$\boldsymbol{P} = \begin{bmatrix} \varphi_0(x_0) & \varphi_1(x_0) & \cdots & \varphi_{N-1}(x_0) \\ \varphi_0(x_1) & \varphi_1(x_1) & \cdots & \varphi_{N-1}(x_1) \\ \varphi_0(x_2) & \varphi_1(x_2) & \cdots & \varphi_{N-1}(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_0(x_{N-1}) & \varphi_1(x_{N-1}) & \cdots & \varphi_{N-1}(x_{N-1}) \end{bmatrix},$$

вектор-столбец неизвестных $\overrightarrow{a}$ покомпонентно записывается следующим образом

$$\overrightarrow{a} = \uparrow (a_0, a_1, a_2, \ldots a_{N-1}),$$

а вектор-столбец правой части имеет вид

$$\overrightarrow{f} =\uparrow (f_0, f_1, f_2, \ldots, f_{N-1}).$$

Вместе с матрицей P рассмотрим ей сопряженную P^*, на которую умножим систему (SDF') слева. Тогда получим

$$P^*P\overrightarrow{a} = P^*\overrightarrow{f}. \qquad (SDF'')$$

Произведение $P^*P \equiv \Gamma = (\gamma_{jk})$ представляет собой матрицу Грама для функций φ_0, φ_1, $\ldots$,

φ_{N-1}, то есть в поэлементном виде матрица $\Gamma = P^* P$ записывается следующим образом:

$$\begin{pmatrix} (\varphi_0, \varphi_0) & (\varphi_1, \varphi_0) & \cdots & (\varphi_{N-1}, \varphi_0) \\ (\varphi_0, \varphi_1) & (\varphi_1, \varphi_1) & \cdots & (\varphi_{N-1}, \varphi_1) \\ (\varphi_0, \varphi_2) & (\varphi_1, \varphi_2) & \cdots & (\varphi_{N-1}, \varphi_2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ (\varphi_0, \varphi_{N-1}) & (\varphi_1, \varphi_{N-1}) & \cdots & (\varphi_{N-1}, \varphi_{N-1}) \end{pmatrix}.$$

Здесь

$$(\gamma_{jk}) = (\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{i=0}^{N-1} \varphi_k(x_i)\overline{\varphi_j(x_i)}.$$

Сосчитаем элементы γ_{jk} точно.

Лемма. *Справедливы равенства*

$$(\varphi_k, \varphi_j) = N\delta_k^j = \begin{cases} 0, & j \neq k, \\ N, & j = k, \end{cases}$$

где $0 \le k < N$, $0 \le j < N$.

Доказательство. Пусть $\omega = e^{\frac{2\pi i}{N}} \equiv \exp\{\frac{2\pi i}{N}\}$.

Тогда

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{l=0}^{N-1} \varphi_k(x_l)\overline{\varphi_j(x_l)} =$$

$$= \sum_{l=0}^{N-1} \omega^{kl}\omega^{-jl} = \sum_{l=0}^{N-1} \left[\omega^{(k-j)}\right]^l.$$

Если $k = j$, то $\omega^{(k-j)} = \omega^0 = 1$. Следовательно, справедливо равенство

$$(\varphi_k, \varphi_k) = \sum_{l=0}^{N-1} (1) = N.$$

Если $k \neq j$, то комплексное число $q = \omega^{k-j}$ не равно 1. Поэтому справедливы равенства

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \sum_{l=0}^{N-1} q^l = \frac{1 - q^N}{1 - q} = \frac{1 - \omega^{(k-j)N}}{1 - q}.$$

Воспользуемся здесь равенством

$$\omega^N = (e^{\frac{2\pi}{N}i})^N = e^{2\pi i} = 1.$$

Тогда получим

$$(\varphi_k, \varphi_j) = \frac{1 - (\omega^N)^{(k-j)}}{1-q} = \frac{1-1}{1-q} = 0.$$

$\square$

В связи с доказанной леммой говорят, что функции φ_0, φ_1, ..., φ_{N-1} ортогональны на конечном множестве точек x_0, x_1, ..., x_{N-1}.

Таким образом, матрица Грама Γ ортогональных на конечном множестве точек x_0, x_1, ..., x_{N-1} функций φ_0, φ_1, ..., φ_{N-1} диагональна и имеет вид

$$\Gamma = \begin{bmatrix} N & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & N & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 0 & N & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & N \end{bmatrix}; \qquad \det\Gamma = N^N.$$

Система (SDF'') при этом записывается в виде следующих равенств

$$a_k = \frac{1}{N}\sum_{l=0}^{N-1} f_l e^{-\frac{2\pi kl}{N}i}, \qquad 0 \le k < N.$$

Воспользовавшись обозначением $\omega = e^{\frac{2\pi}{N}i}$ перепишем эти равенства и систему (SDF'') в следующем "парном" варианте:

$$f(x_j) = \sum_{k=0}^{N-1} a_k \omega^{kj}, \quad 0 \le j < N, \qquad (IDF)$$

$$a_k = \frac{1}{N} \sum_{l=0}^{N-1} f(x_l) \omega^{-kl}, \quad 0 \le k < N. \qquad (DDF)$$

Операцию преобразования по формулам (DDF)

вектора

$$\overrightarrow{\boldsymbol{f_N}} = (\boldsymbol{f_0}, \boldsymbol{f_1}, \boldsymbol{f_2}, \ldots, \boldsymbol{f_{N-1}})$$

в вектор $\overrightarrow{\boldsymbol{a_N}} = (\boldsymbol{a_0}, \boldsymbol{a_1}, \ldots, \boldsymbol{a_{N-1}})$ называют прямым дискретным преобразованием Фурье.

Операцию же по формулам ($\boldsymbol{IDF}$), переводящую вектор $\overrightarrow{\boldsymbol{a_N}}$ в вектор $\overrightarrow{\boldsymbol{f_N}}$, называют обратным дискретным преобразованием Фурье.