ИПМ им.М.В.Келдыша РАН • Электронная библиотека

Препринты ИПМ • Препринт № 2 за 2009 г.

Лаврик Д.А., Пергамент А.Х.

Регуляризованные алгоритмы статистического оценивания функций

Рекомендуемая форма библиографической ссылки: Лаврик Д.А., Пергамент А.Х. Регуляризованные алгоритмы статистического оценивания функций // Препринты ИПМ им. М.В.Келдыша. 2009. № 2. 20 с. URL: http://library.keldysh.ru/preprint.asp?id=2009-2

Ордена Ленина
ИНСТИТУТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ
имени М.В. Келдыша
Российской Академии наук

Д.А. Лаврик, А.Х. Пергамент

Регуляризованные алгоритмы статистического оценивания функций

Москва – 2009

Д.А. Лаврик, А.Х.Пергамент. Регуляризованные алгоритмы статистического оценивания функций. Препринт Института прикладной математики им. М.В. Келдыша РАН, 2009, 22 страницы, 13 рисунков, библиография: 16 наименований.

Предложены и исследованы регуляризованные алгоритмы решения задач фильтрации. При этом используются оптимальные с информационной точки зрения приближенные M - параметрические линейные представления искомых функций. Параметры определяются методом максимального правдоподобия. Число параметров определяется на основе критерия χ^2. Представлены результаты одномерных и двумерных расчетов модельных задач.

D.A. Lavrik, A.K. Pergament. The Regularized Algorithms of Statistical Estimation of Functions. Preprint, Inst. Appl. Mathem., Russian Academy of Sciences, 2009, 22 Pages, 13 Figures, 16 References.

The regularized algorithms of filtration are supported and investigated. Hereby optimal of the information point of view M – parametric approximations of required function are used. The approximation parameters are determined by a maximum likelihood method. The number of parameters is defined by χ^2 criterion. The results of 1D and 2D modeling problems are represented.

1. **Введение**

Одной из основных задач численного анализа является задача интерполяции многомерных функций по приближенно заданным исходным данным. Это задача актуальна при построении геологических моделей по данным наблюдений. Исходные данные при этом заданны с погрешностью на произвольно расположенной системе точек.

Эту задачу можно рассматривать, как вариант задачи фильтрации, а именно, рассматривается задача определения функции из соотношения

$$\xi = u + \Delta, \tag{1.1}$$

где u - искомая функция, Δ - погрешность исходных данных. В дальнейшем предполагается, что Δ - гауссовский стационарный случайный процесс с нулевым средним и корреляционным оператором B. Оператор B симметричный, неотрицательно определенный и ядерный. В дальнейшем предполагается, что оператор B невырожденный. На любом конечном отрезке $\left[X\right]$ такой оператор имеет полную систему собственных функций

$$\lambda_\nu B\psi_\nu = \psi_\nu,$$

где λ_ν - характеристические числа, $\lambda_\nu > 0$, а так как оператор ядерный, то ряд $\sum_{\nu=0}^{\infty} 1/\lambda_\nu$ сходится. Согласно общей теореме Карунена [1] о представлении гаусовских случайных процессов на любом конечном отрезке $\left[X\right]$ справедливо

$$\Delta(x) = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{\Delta_\nu}{\sqrt{\lambda_\nu}} \psi_\nu\left(x\right), \tag{1.2}$$

где $\left\{\Delta_\nu\right\}$ - гауссовские случайные величины такие, что $M\Delta_\nu = 0$, $M\Delta_\nu\Delta_\mu = \delta_{\nu\mu}$ и ряд (1.2) сходится в среднем квадратичном.

Интерес представляет случай, когда гладкость функции $\xi\left(x\right)$ существенно меньше, чем гладкость $u\left(x\right)$. У. Гренандер [2] показал, что условие

$$\sum_{\nu=0}^{\infty} \lambda_\nu u_\nu^2 < \infty, \tag{1.3}$$

где $u_\nu = \int u\left(x\right)\psi_\nu\left(x\right)dx$, необходимо и достаточно для взаимной абсолютной непрерывности (эквивалентности) мер, определяемых случайными процессами $\xi\left(x\right)$, $\Delta\left(x\right)$.

При вышеперечисленных условиях реализация случайного процесса $\xi(x) \in L_2\left[0, X\right]$. Учитывая условие (1.3) помимо, пространства $L_2\left[0, X\right]$ введем пространство $Y[0, X]$ с нормой

$$\left\|y\right\|_Y^2 = \sum_{\nu=0}^{\infty} \lambda_\nu y_\nu^2 \tag{1.4}$$

где y_ν, как и выше, коэффициенты разложения функции y по базису $\{\psi_\nu\}$.

С одной стороны такая постановка соответствует условиям реальных задач, поскольку искомая функция, как правило, является гладкой, а реализация случайного процесса ξ в лучшем случае непрерывна. С другой стороны, если меры, соответствующие случайным процессам ξ и Δ, не эквивалентны, а ортогональны, то для среднего значения процесса ξ функции u существует оценка, дисперсия которой стремится к нулю при $X \to \infty$. Эта постановка отличается от рассмотренной в работе А.П. Петрова [4], где функции u и ξ принадлежат одному и тому же Гильбертову пространству H, в данном случае $L_2[0,X]$. В данной работе решается задача построения статистической оценки $\hat{u}$, которая обладает достаточной гладкостью, а именно принадлежит пространству $Y[0,X]$ и при определенных свойствах погрешности Δ сходится по вероятности к точному значению.

2. **Постановка задачи**

Как указано выше, на отрезке $[0,X]$ наблюдается случайная функция $\xi(x)$, равная сумме полезного сигнала $u(x)$ и случайного шума $\Delta(x)$. Рассматривается случай, когда отсчеты функции $\Delta(x)$, заданные на некоторой сетке с шагом $h = 1/N$ статистически независимы. Такой процесс представляет собой преобразование от обобщенного случайного процесса с постоянной спектральной плотностью σ^2 (белый шум).
Спектральная плотность такого шума

$$N_k(\omega) = \frac{\sigma^2}{2\pi}\frac{\sin^2 \omega h}{\omega^2 h^2} \tag{2.1}$$

Для достаточно большой длины рассматриваемого промежутка собственные функции оператора B мало отличаются от $e^{i\omega x}$. Ввиду этого из (2.1) следует, что величины в соотношении (1.2) $\lambda_\nu = O(\nu^2)$ при $\nu \to \infty$, и ряд $\sum_{\nu=0}^{\infty} 1/\lambda_\nu$ сходится, т.е. оператор B для такого шума ядерный. Дисперсия δ^2 случайного процесса $\Delta(x)$ постоянна и равна $\delta^2 = \sigma^2/2h$. Реализации этого случайного процесса с вероятностью I непрерывные, но не дифференцируемые функции [5]. Необходимое и достаточное условие для эквивалентности мер, соответствующий случайным процессам Δ и ξ, приводит для $\lambda_\nu = O(\nu^2)$ к следующему: $u \in W_2^l[0,X]$ т.е. среднее значение случайного процесса u - функция, имеющая интегрируемую с квадратом производную порядка $l = 1$. В дальнейшем рассматривается случай $N \to \infty$, $h \to 0$, так что величина σ^2 остается постоянной, т.е. $\sigma^2 = O(h)$. Предлагается следующий способ статистического оценивания функции ξ из соотношения (1.1). Исходя из априорной информации относительно гладкости функции ξ, задается приближенное оптимальное с информационной точки зрения $(M+1)$ параметрическое представление для искомой функции. Например, если функция ξ обладает производными до порядка r включительно, то это представление в виде соответствующих сплайнов [6],[7],[8]. Неизвестные параметры определяются методами статистического оценивания, например, методом максимального правдоподобия. Для определения числа параметров M используются критерии проверки статистических гипотез.

Поскольку ниже рассматриваются гауссовские случайные процессы, то метод максимального правдоподобия сводится к методу наименьших квадратов, а для проверки статистических гипотез используется критерий χ^2.

Минимальное допустимое число $M_{\min}$, для которого удовлетворяется критерий χ^2, зависит от отношения $\delta^2/\sqrt{N}$ и тем больше, чем меньше это число.

Погрешность определения $\hat{u}$ складывается из ошибки статистического оценивания и ошибки аппроксимации. Если значение δ не слишком мало, а N не очень велико, то ошибка аппроксимации значительна. Увеличение M такое, что погрешность аппроксимации становится много меньше δ, приводит к плохо обусловленным линейным системам для определения параметров методом наименьших квадратов. В этом случае метод максимального правдоподобия приводит к классической схеме метода регуляризации А.Н. Тихонова [9].

3. Фильтрация

Задача фильтрации – это также задача типа (1.1), т.е. задача статистического оценивания функции u из соотношения

$$\xi(x) = u(x) + \Delta(x), \tag{3.1}$$

где $\xi(x)$ - зарегистрированная величина. Далее предполагается, что u не только принадлежит $W_2^1(0,1)$, что следует из требования абсолютной непрерывности случайных мер, но, кроме того, и $u \in C^r[0,1]$. Если при этом u принадлежит ограниченно-компактному множеству $\Theta^{\bar{r}}[L,I] \subset C^r[0,1]$, где L - константа, входящая в условие Гельдера для производной порядка r, т.е

$$\left|u^{(r)}(x') - u^{(r)}(x)\right| \le L\left|x - x'\right|^{\alpha},$$

I - единичный отрезок, $\bar{r} = r + \alpha$, то колмогоровский поперечник таких множеств $\Im_n\left(\Theta^{\bar{r}}, C\right)$ есть величина порядка $A_{\bar{r}} L n^{-r}$ [6],[7]. Оптимальным способом приближения функции, принадлежащих таким компактам, является приближения в виде сплайнов. Если желательно иметь сплайн, аппроксимирующий функцию вместе с производными до порядка $p \le r$ включительно, то целесообразно воспользоваться формулами гладкого восполнения из работы [8]. Такие сплайны аппроксимируют функцию из компакта $\Theta^{\bar{r}}\left[L,I\right]$ с точностью порядка $M^{-(p+\gamma)}$, где $\gamma = \alpha$, если $p = r, \gamma = 1$, если $p < r$. Обозначим сплайн-функцию $S_M\left(x_i \mid u\right), x_i = i/N, i = 0,1,2,..,N$. Иногда для сплайн-функции будет применяться обозначение $S_M\left(x_i \mid u_j\right)$, где $\left\{u_j\right\}, j = 0,1,2,..,M$ - совокупность значений функции в узлах сетки с шагом $H = 1/M$. При фильтрации значения $\left\{u_j\right\}$ определяются по методу наименьших квадратов из условия

$$\min_{u_j} \sum_{i=0}^{N} \left[\xi_i - S_M\left(x_i \mid u_j\right)\right]^2. \qquad \textbf{(3.2)}$$

Введем оператор T, действующий из линейного пространства R_M размерности $M+1$ в линейное пространство R_N размерности $N+1$, так что

$$S_M\left(x_i \mid u_j\right) = \sum_{j=0}^{M} T_{ij} u_j, i = 0,1,2,..,N.$$

Введем норму в пространстве R_N таким образом, чтобы она была разностным аналогом норма в $L_2\left[0, X\right]$, а именно

$$\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} \xi_i^2 = \left\|\xi\right\|_{R_N}^2$$

Норма в пространстве R_M может быть введена точно так же. Используя оператор T, норму в пространстве R_M для функции $S_M\left(x_i \mid u\right)$ можно представить в виде

$$\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N} \left|S_M\left(x_i \mid u\right)\right|^2 = \left(Tu, Tu\right),$$

где u рассматривается как элемент R_M.

Корреляционный оператор B порождает билинейную форму $\left(Bu, v\right)$. Так как оператор B ядерный, то его характеристические числа растут не медленнее, чем $v^{1+\varepsilon}$, т.е. билинейная форма определена для $\forall u, v \in L_2\left[0, X\right]$. Учитывая норму в пространстве R_N билинейную форму – аналог билинейной формы в пространстве $L_2\left[0, X\right]$ следует представить в виде

$$\left(Bu, v\right)_{R_N} = \frac{1}{N}\sum_{i,l=0}^{N} B\left(x_i, x_l\right) u_i u_l.$$

Для шума со спектральной плотностью (2.1) $B\left(x_i, x_l\right) = \delta^2 \delta_{il}$, где δ^2 - дисперсия погрешности.

Симметричный оператор T^*T имеет систему собственных функций $\{f_i\}$, принадлежащих пространству R_M. Система собственных функций $\{f_j^*\}, j=0,1,2,..,M$ оператора TT^* принадлежит пространству R_N. Рассмотрим свойства коэффициентов разложения случайных векторов $\{\Delta(x_i)\}, i=0,1,2,..,N$ по системе $\{f_j^*\}$. Пусть $\Delta^j = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\Delta(x_i)f_j^*(x_i)$. Математическое ожидание $M\Delta^j\Delta^k$ легко вычисляется и равно $\delta_{jk}\delta^2/N$. Это означает, что и в этом представлении корреляционная матрица диагональная и ее характеристические числа равны N/δ^2. Таким образом, функции $\{f_j^*\}, j=0,1,2,..,M$ являются собственными функциями оператора B. Это множество функций может быть дополнено линейными комбинациями собственных функций $\{\psi_\nu\}, \nu = M+1,..,N$ оператора B. Тогда, например, для $\forall u \in C[0,X]$ справедливо

$$\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left[u_i - S_M(x_i \mid u)\right]^2 = \sum_{i=M+1}^{N}\left(u^i\right)^2,$$

где u^i - коэффициенты разложения вектора $\{u(x_i)\}, i=0,..,N$ по системе $\{f_i^*\}$. Оценка u, определяемая из соотношения (3.2), есть

$$\tilde{u}_M^\delta = \left(T^*T\right)^{-1}T^*\xi. \tag{3.3}$$

Здесь и далее $\tilde{u}_M^\delta$ - решения, полученные методом наименьших квадратов, u_T - среднее значение процесса $\xi(x)$. Обозначим $\Phi[\xi,u]$ функционал из выражения (3.2). Тогда

$$\frac{1}{N}\Phi\left[\xi,\tilde{u}_M^\delta\right] = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left[\xi_i - S_M\left(x_i \mid \tilde{u}_M^\delta\right)\right]^2.$$

Для достаточно больших N в силу того, что $\Delta(x)$ имеет нулевое средние, а сплайн-функция $S_M(x_i \mid u)$ линейна относительно значений u, функционал имеет следующий вид

$$\frac{1}{N}\Phi\left[\xi,\tilde{u}_M^\delta\right] = \frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left[u_{i,T} - S_M\left(x_i \mid \left(T^*T\right)^{-1}T^*u_T\right)\right]^2 + \tag{3.4}$$
$$\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left[\Delta_i - S_M\left(x_i \mid \left(T^*T\right)^{-1}T^*\Delta\right)\right]^2.$$

Учитывая, что $S_M(x_i \mid u) = Tu$ легко убедиться, что первый член по порядку превышает погрешность аппроксимации $M^{-2(p+\gamma)}$. Второй член есть сумма $\sum_{i=0}^{N}\left(\Delta^i\right)^2$, где Δ^i - коэффициенты разложения вектора $\{\Delta(x_i)\}, i=0,1,2,..,N$ по системе функций $\{f_i^*\}$. Все величины Δ^i статистически независимы и распределены по Гауссу с нулевым средним и дисперсией δ^2/N, т.к. в таком представлении оператор B диагональный и имеет характеристические числа, равные N/δ^2.

Если бы погрешность аппроксимации равнялась нулю, то случайная величина $\Phi\left[\xi,\tilde{u}_M^\delta\right]$ имела бы распределение χ^2 с $N-M$ степенями свободы. Это обстоятельство позволяет использовать критерий χ^2 для выбора значений M [10]. Допустимыми считаются такие M, что

$$\frac{1}{N}\Phi\left[\xi,\tilde{u}_M^\delta\right]\le\frac{\delta^2}{N}D_\beta, \tag{3.5}$$

где D_β - критическое значение, соответствующие уровню значимости β. При этом модель $\tilde{u}_M^\delta$ является формально сопоставимой с данными ξ [14]. Значение M, удовлетворяющие (3.5), не единственно. Выбирается минимальное из допустимых. В результате получается оценка для M

$$\frac{1}{M^{2(p+\gamma)}}\approx\frac{\delta^2}{\sqrt{N}L} \tag{3.6}$$

Таким образом справедлива

Лемма. При $N\to\infty$ число параметров сплайна M, есть величина, удовлетворяющая соотношению (3.6) для $\Theta^{\bar{r}}\left[L,I\right]$ и $\Delta(x)$, являющегося реализацией случайного процесса (2.1).

Действительно, уклонение

$$\frac{1}{N}\Phi\left[u_T,\tilde{u}_M^\delta\right]=\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left[u_{i,T}-S_M\left(x_i\,|\left(T^*T\right)^{-1}T^*\xi\right)\right]^2$$

при $N\to\infty$ имеет вид

$$\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left[u_{i,T}-S_M\left(x_i\,|\left(T^*T\right)^{-1}T^*u_T\right)\right]^2+\frac{1}{N}\sum_{i=0}^{N}\left(S_M\left(x_i\,|\left(T^*T\right)^{-1}T^*\Delta\right)\right)^2$$

Первый член есть, как и выше, погрешность аппроксимации, а второй сумма $\sum_{i=0}^{M}\left(\Delta^i\right)^2$, т.е. при $N\to\infty$ величина порядка δ^2M/N, что весьма естественно, т.к. имеется $N+1$ независимых расчетов и оценивается $M+1$ параметров.

Величина $\frac{1}{N}\Phi\left[u_T,\tilde{u}_M^\delta\right]$ для непрерывных функций u_T и $\tilde{u}_M^\delta$ есть интегральная сумма, которая в пределе стремится к норме разности функций $u_T-\tilde{u}_M^\delta$ в метрике L_2, т.е.

$$\left\|u_T-\tilde{u}_M^\delta\right\|_{L_2}^2\approx\frac{L^2}{M^{2(p+\gamma)}}+\frac{\delta^2M}{N}+O\left(\frac{1}{N^\gamma}\right), \tag{3.7}$$

т.к. $M\approx\left(\frac{\delta^2}{\sqrt{N}}\right)^{-\frac{1}{2(p+\gamma)}}$, то при $N\to\infty$

$$\left\| u_T - \tilde{u}_M^{\delta} \right\|_{L_2}^2 \square \frac{\delta^2}{\sqrt{N}} + \frac{\delta^{2-\frac{1}{p+\gamma}}}{N^{1-\frac{1}{4(p+\gamma)}}} + O\left(\frac{1}{N^{\gamma}}\right). \qquad \textbf{(3.8)}$$

Из полученного соотношения следует утверждение леммы.

Т.к. $\tilde{u}_M^{\delta}$ - сплайн-функция, полученная с помощью формул гладкого восполнения, то разность производных также можно оценить, это величина порядка $M\left\| u_T - \tilde{u}_M^{\delta} \right\|_{L_2}$. Таким образом, производные $\tilde{u}_M^{\delta}$ первого порядка остаются ограниченными в совокупности. Отсюда следует, что сходимость оценки $\tilde{u}_M^{\delta}$ к u_T имеет место не только в метрике L_2, но и в метрике C.

Изложенный подход к решению задач фильтрации есть вариант метода регуляризации, где роль параметра регуляризации играет число M. В полном согласии с общими представлениями о регуляризации [9],[11], первый член выражения (3.7) убывает с ростом M, а второй – растет. Существует M такое, что погрешность фильтрации минимальна. Эта величина $M_{opt} \square \left(\frac{\delta^2}{NL^2}\right)^{-\frac{1}{2(p+\gamma+1)}}$, что отличается от M из соотношения (3.6). Таким образом, применение критерия χ^2 не обеспечивает наиболее оптимального выбора параметра регуляризации, хотя при больших N можно получить весьма высокую точность. [13].

Для $p \geq 2$, не слишком малых δ и не очень больших N ошибка аппроксимации превышает ошибку оценивания. Попытки увеличить M могут привести к плохой обусловленности задачи (3.2) и росту ошибки статистического оценивания. В этом случае целесообразно применить классическую схему регуляризации в варианте, изложенном в работе [12].

4. **Описание алгоритма**

4.1 **Одномерный случай**

Пусть в качестве данных задачи рассматриваются заданные на некоторой нерегулярной сетке значения функции $u(x)$ на произвольном отрезке $[a,b]$. Тогда $\hat{u}(x) = u(x) + delta \times random$ - это решение с разыгранной ошибкой $delta$, $random$ - генератор случайных числе распределенных по Гауссу с единичной дисперсией и математическим ожиданием равным нулю.

Задача заключается в том, чтобы зашумленную функцию $\hat{u}(x)$ максимально приблизить к реальной кривой путем фильтрации (сглаживания) определенным образом. Для функций конечной гладкости оптимально использовать интерполяцию сплайнами, так как $\forall \varepsilon > 0$

существует такое разбиение отрезка $[a,b]$ $M(\varepsilon)$, такое что $\forall M \gg N$ $\min\left\|\hat{u}(x)-u(x)\right\|<\varepsilon$, где N - число значений функции.

Ниже рассматриваются сплайны интерполяционного типа, значения которых совпадает со значениями аппроксимируемой функции в узлах интерполяции. Интерполяция как средство построения аппроксимации сплайнами эффективна только тогда, когда имеются достаточно точные значения функции. В противном случае следует использовать другие методы аппроксимации. Пусть известны значения функции u в точках $\{x_0, x_1, .., x_N\}$, причем $u_\delta(x)=u(x)+\Delta(x)$, где $\Delta(x)$- погрешность, относительно которой известно, что $M\Delta(x)=0$, $D\Delta(x)=\delta^2$.

Представим функцию $u(x)$ в виде сплайна $S_M(x_i \mid u_j)$, где $u_j(x)$, $j=0,1,..,M$ - набор значений функции в узлах сетки, которые не совпадают со значениями $x_i, i=0,1,..,N$, причем $N \gg M$. Тогда неизвестные значения $\{u_j\}$ могут быть найдены методом наименьших квадратов

$$\min_{u_j}\sum_{i=0}^{N}\left[u_\delta(x_i)-S_M(x_i \mid u_j)\right]^2 \qquad \textbf{(4.1)}$$

Сплайн – это линейное преобразование функции $u(x)$, т.е.

$$S_M(x_i \mid u_j)=\sum_{j=0}^{M}T_{ij}u_j$$

Следовательно, величины u_j, $j=0,1,..,M$ могут быть найдены из решения линейной системы $T^*Tu=T^*u_\delta$

$$\sum_{m,j}T_{mi}T_{mj}u_j=\sum_{k=0}^{N}T_{ki}u_{\delta,k}$$

Точность такой оценки, как было показано выше, равна

$$\frac{\delta^2 M}{N}+\frac{L^2}{M^{2\bar{r}}}$$

Для функций удовлетворяющих условию Гельдера

$$\left|u^{(r)}(x)-u^{(r)}(x')\right|<L\left|x-x'\right|^\alpha$$

$u^{(r)}$- производная порядка r, $\bar{r}=r+\alpha$. При $M\to\infty$, $N\to\infty$, так что $\frac{N}{M}\to\infty$, погрешность статистического оценивания стремится к нулю. Пусть сплайны аппроксимируют функцию вместе с производными до второго порядка включительно, при этом точность аппроксимации производной заметно меньше, чем точность аппроксимации функции.

В настоящей работе используется интерполяция посредством B-*сплайнов* k-го порядка. С вычислительной точки зрения B-*сплайны* удобно применять в качестве базисных функций для представления сплайнов.

На отрезке $[a,b]$, $a,b\in R$, $a<b$ зададим сетку $\Delta_M : a=x_0<x_1<...<x_M<x_{M+1}=b$. Пусть P_k - множество многочленов степени не выше k, $k\ge 0$, и $C^{(q)}=C^{(q)}[a,b]$- множество непрерывных на $[a,b]$ функций, имеющих непрерывную q-ю производную. Введем определение: Функцию $S_k(x)=S_{k,q}(x,\Delta_M)$- называют полиномиальным сплайном степени k дефекта $q\,(1\le q\le k)$ с узлами Δ_M, если

1. $S_k(x)\in P_k$ на $[x_i,x_{i+1}]\,(i=0,1,..,M)$;
2. $S_k(x)\in C^{r-q}[a,b]$.

Точки x_i называют узлами сплайна.

Введем обозначение:

$$B_{k-1}(x)=B_{k-1}(x_q,x_{q+1},..,x_{q+k},x)=k\sum_{s=q}^{q+k}\frac{(x_s-x)_+^{k-1}}{\omega_q'(x_s)} \qquad \textbf{(4.1)}$$

где $(x_q<x_{q+1}<..<x_{q+k})$, $(x_s-x)_+^{k-1}=\left[\max(0,x-x_s)\right]^{k-1}$, $\omega(x)=(x-x_0)(x-x_1)...(x-x_M)$. Функцию $B_{k-1}(x)$ называют B*-сплайном* степени $k-1$ относительно узлов $x_q,x_{q+1},..,x_{q+k}$. Опишем некоторые свойства B*-сплайнов*:

1. $B_{k-1}(x)$ имеет малый носитель, т.е. $B_{k-1}(x)=0$ для $x\notin(x_q,x_{q+k})$,
2. $B_{k-1}(x)>0$ при $x\in(x_q,x_{q+k})$.

Как уже упоминалось, B*-сплайны* удобно применять в качестве базисных функций для представления сплайнов. Введем дополнительные узлы $a>x_{-1}>x_{-2}>..>x_{-k}$ и $b<x_{M+2}<x_{M+3}<..<x_{M+1+k}$, например, можно положить $x_i=a+i(x_1-a), i=-1,-2,..,-k$,
$x_i=b+(b-x_M)(i-M-1), i=M+2,M+3,..,M+k+1,$ и используя представление (4.1) построить сплайны

$$B_{i,k}(x)=B_k(x_i,x_{i+1},..,x_{i+k+1},x),$$

где $i=-k,-k+1,..,M$.

Так как функции $B_{i,k}$ линейно независимы (это следует из свойств 1 и 2) и на отрезке $[a,b]$ являются сплайнами степени k с узлами в точках сетки Δ_M, то любой сплайн $S_k(x)$ из $S_{k,q=1}(x,\Delta_M)$ можно единственным образом представить в виде [3]:

$$S_k(x)=\sum_{i=-k}^{M}c_iB_{i,k}(x),\ a\le x\le b.$$

Для вычисления B*-сплайна* воспользуемся рекуррентными соотношениями [15]:

$$B_{i,1}(x)=\begin{cases}1 & x_i \le x \le x_{i+1},\\ 0 & x_i > x > x_{i+1},\end{cases}$$

$$B_{i,k}(x)=\frac{x-x_i}{x_{i+k-1}-x_i}B_{i,k-1}(x)+\frac{x_{i+k}-x}{x_{i+k}-x_{i+1}}B_{i+1,k-1}(x).$$

Принимая во внимание выше написанное, метод наименьших квадратов будет описываться следующим выражением:

$$\min_{c_j}\sum_i\left(u_\delta(x_i)-\sum_j c_j B_{j,k}(x_i)\right)^2.$$

Преобразуем выражение

$$\sum_i\left(u_\delta(x_i)-\sum_j c_j B_{j,k}(x_i)\right)^2=$$

$$\sum_i\left[u_\delta(x_i)^2-2u_\delta(x_i)\sum_j c_j B_{j,k}(x_i)+\sum_j c_j B_{j,k}(x_i)\sum_m c_m B_{m,k}(x_i)\right].$$

Для того чтобы найти минимум ищем производную

$$\frac{\partial}{\partial c_l}:-2\sum_i u_\delta(x_i)\sum_j \delta_{j,l}B_{j,k}(x_i)+2\sum_i \delta_{j,l}B_{j,k}(x_i)\sum_m c_m B_{m,k}(x_i)=0,$$

где $\delta_{j,l}=\dfrac{\partial c_j}{\partial c_l}$, после преобразования получаем

$$\sum_i u_\delta(x_i)B_{l,k}(x_i)=\sum_i B_{l,k}(x_i)\sum_m c_m B_{m,k}(x_i)$$

$$\sum_m c_m\sum_i B_{l,k}(x_i)B_{m,k}(x_i)=\sum_i u_\delta(x_i)B_{l,k}(x_i)$$

отсюда можно выделить матрицу A и вектор b

$$A_{lm}=\sum_i B_{l,k}(x_i)B_{m,k}(x_i),\ b_l=\sum_i u_\delta(x_i)B_{l,k}(x_i)$$

в результате получаем систему линейных алгебраических уравнений

$$A_{lm}c_m=b_l,\ 1\le l\le M, 1\le m\le M,$$

где M взято с учетом дополнительных узлов сетки Δ_M.

Матрица A будет k- диагональной, симметричной и положительно определенной. Поэтому можно применить разложение Холецкого для решения СЛАУ [16]. Матрица A представляется в виде $A=L^TL$, где L- верхняя треугольная матрица. Затем находится решение $\overline{c}$ системы $L^T\overline{c}=b$ методом Гаусса и, наконец, из системы $Lc=\overline{c}$ получаем решение c для первоначальной системы уравнений $Ac=b$. Тогда для любого $x\in[a,b]$ может быть приближенно получено значение функции $u(x)$

$$u(x)\approx\sum_{j=1}^M c_j B_{j,k}(x).$$

4.2 **Двумерный случай**

Двумерный случай отличается от одномерного в следующем. Для двумерной функции существует ‘проклятие размерности’, т.е. эффективная гладкость ρ определяется из условия [Бабенко К.И.], где $\overline{p}_1, \overline{p}_2$ - эффективная гладкость по каждой переменной, равная порядку производной $p+\alpha$, где α - показатель Гельдера. Если $\overline{p}_1 = \overline{p}_2 = \overline{p}$, то $\rho = \dfrac{\overline{p}}{2}$. Следовательно, точность аппроксимации двумерными сплайнами есть $O\left(\dfrac{1}{M^{2r-1}}\right)$.

Точность оценки метода правдоподобия в двумерном случае есть величина

$$\frac{\delta^2 M}{N} + \frac{L^2}{M^{2r-1}}$$

где $M = M_1 \times M_2$ сетка на которой строиться сплайн аппроксимация функции $u(x,y)$, $N = N_1 \times N_2$ число значений функции. При тех же самых параметрах ошибка аппроксимации будет больше в двумерном случае.

5. **Графики**

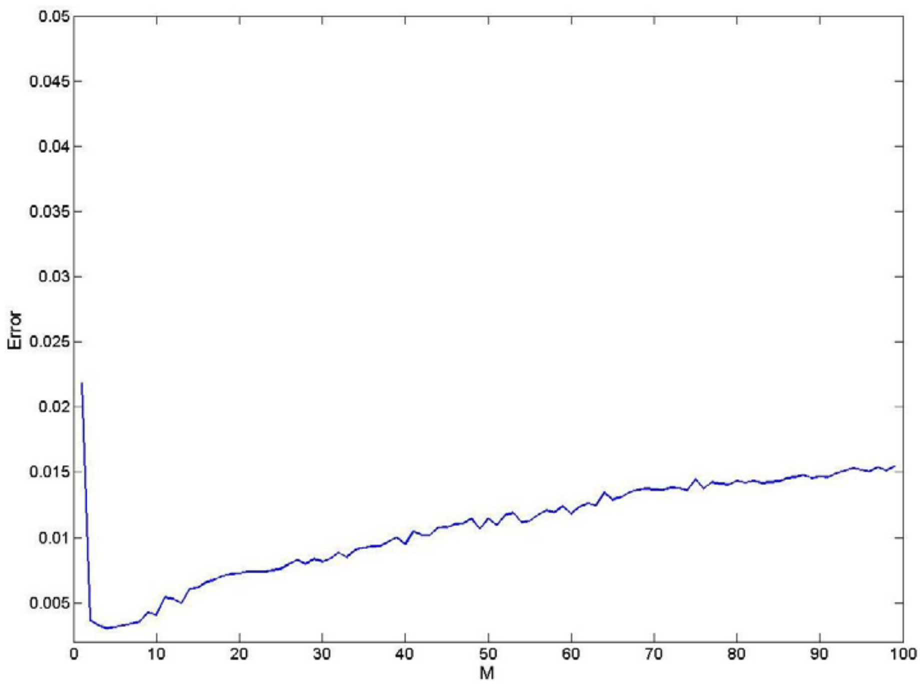


Рис.1 1

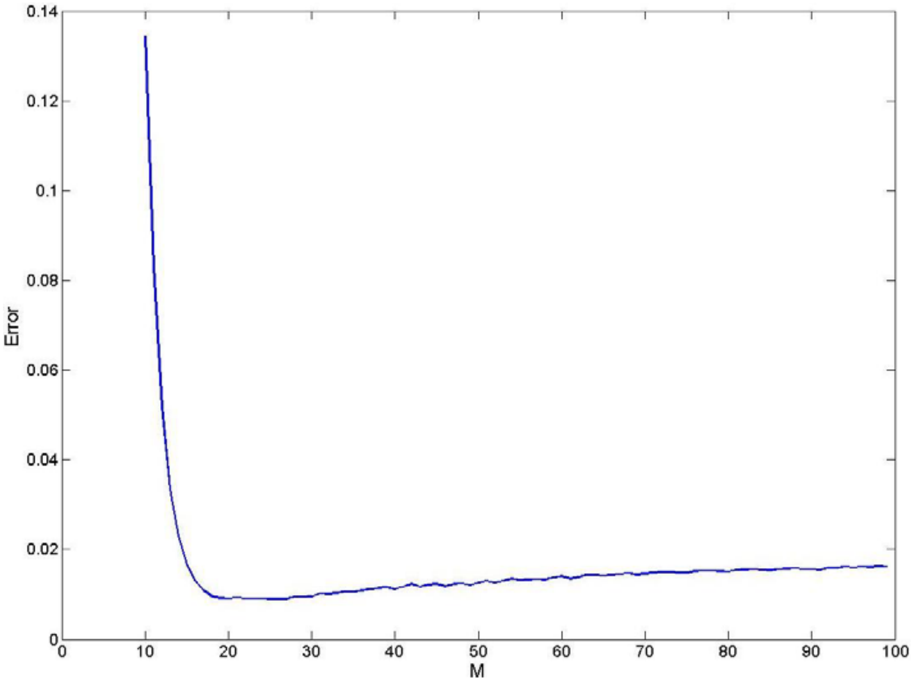


Рис.1 2

На рисунках 1.1 и 1.2 показана зависимость погрешности от параметра M для функций $\sin(x)$ и $\sin(8x)$ на интервале $[0,\pi]$, $delta = 0.1$. Соответственно константа L в условии Гельдера для этих функций равна 1 и 8. Из рисунков видно, что с ростом L растет, минимизирующее погрешность, M. При выборе оптимального M для каждой функции погрешность меняется незначительно с ростом L. Зато при одинаковом M ошибка меняется существенно с ростом L. Все это подтверждает полученную оценку (3.7).

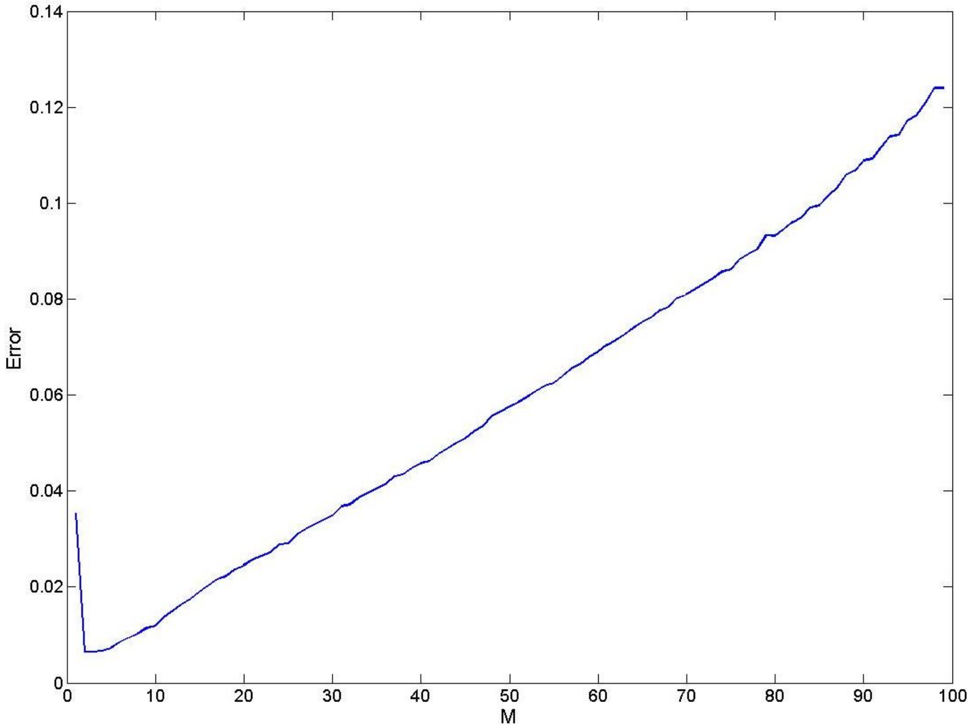


Рис.1 3

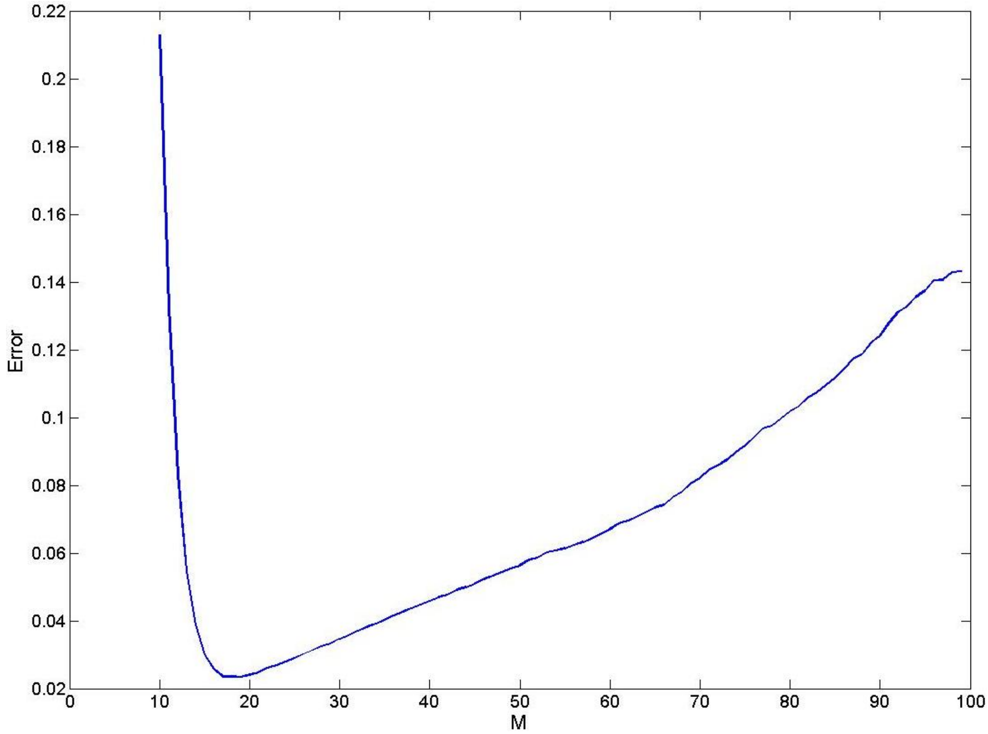


Рис.1 4

Рисунки 1.3 и 1.4 показывают тоже самое для двумерного случая. Функции $\sin(x)\sin(y)$ и $\sin(8x)\sin(8y)$ на плоскости $[0,\pi][0,\pi]$.

Продемонстрируем, как восстанавливается функция в двумерном случае. Функция $\sin(2x)\sin(2y)$ на $[0,\pi][0,\pi]$, $M=5, N=1000, delta=0.1$.

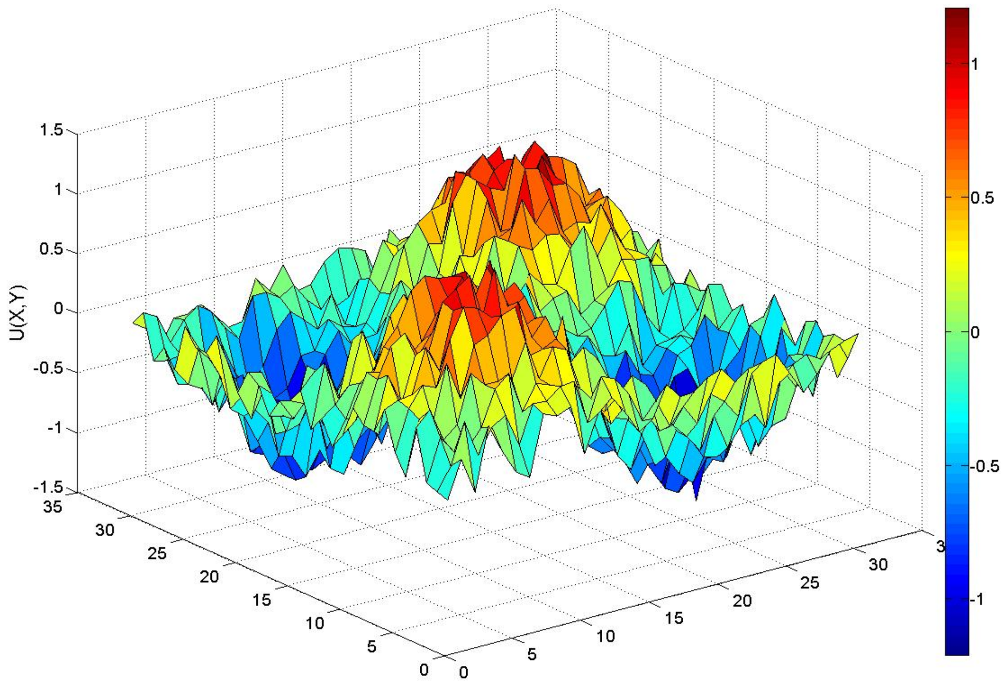
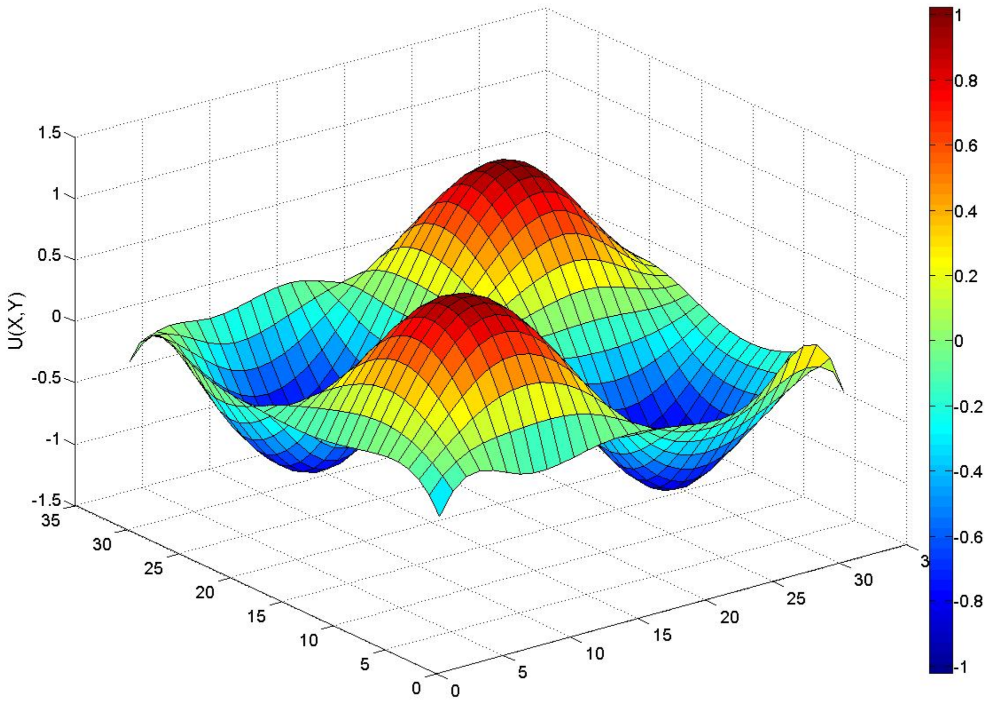
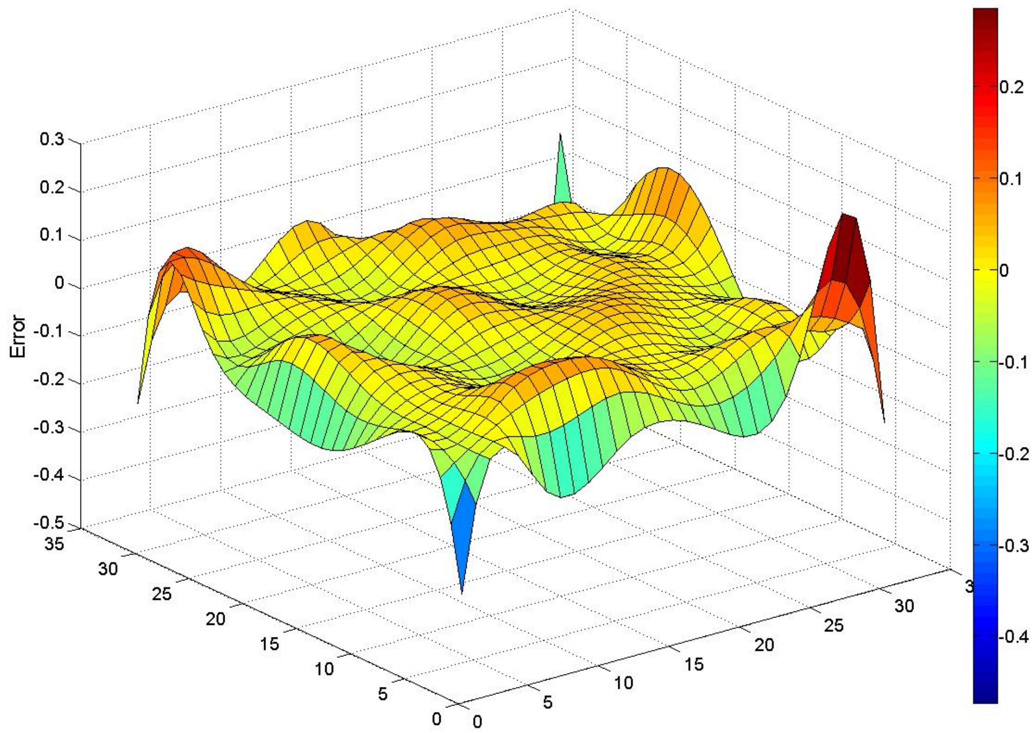


Рис.1 5



1.5
1
0.5
0
-0.5
-1
-1.5
U(X,Y)
35
30
25
20
15
10
5
0
0
5
10
15
20
25
30
1
0.8
0.6
0.4
0.2
0
-0.2
-0.4
-0.6
-0.8
-1

Рис.1 6



0.3
0.2
0.1
0
-0.1
-0.2
-0.3
-0.4
-0.5
Error
35
30
25
20
15
10
5
0
0
5
10
15
20
25
30
0.2
0.1
0
-0.1
-0.2
-0.3
-0.4

Рис.1 7

Рисунок 1.5 – Зашумленная поверхность
Рисунок 1.6 – Поверхность сплайна
Рисунок 1.7 – Погрешность

Показывать графики восстановления функции при оптимально выбранных параметрах, т.е M при котором погрешность минимальна и $M \ll N$, и не слишком большой *delta* не представляет интерес т.к. погрешность минимальна. Интересен случай, когда параметры выбраны не оптимальным образом.

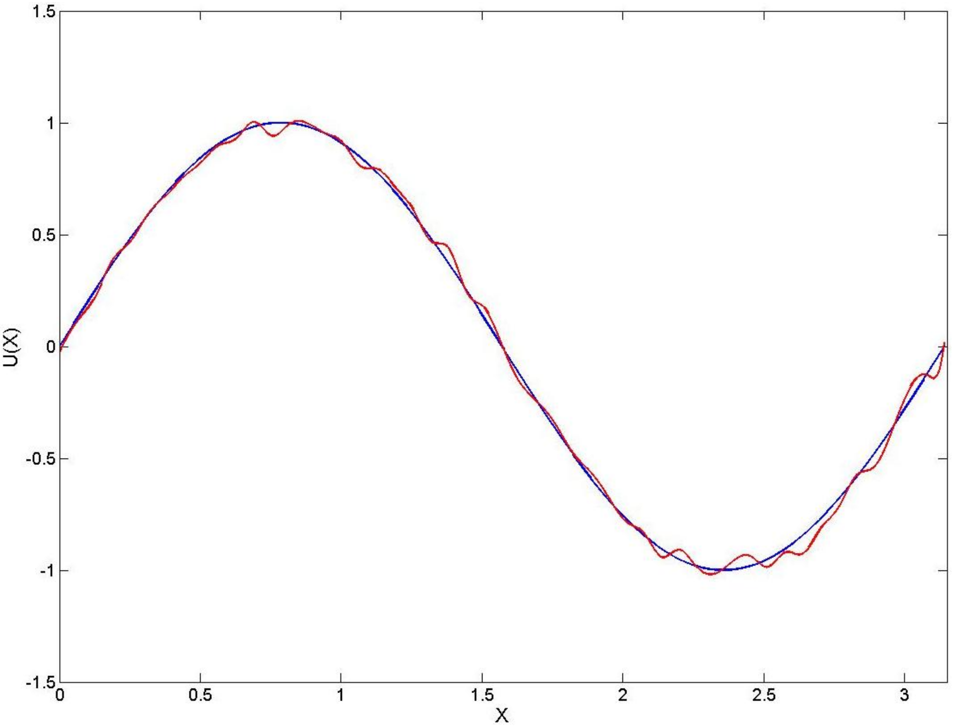


Рис.1 8

На рисунке 1.8 представлено восстановление функции $\sin(2x)$ на интервале $[0,\pi]$, $M = 50, N = 1000, delta = 0.1$. Видно, что функция восстанавливается не лучшим образом относительно исходной функции, т.к. получается не гладкая функция. Увеличение параметра M может привести к плохо обусловленной системе линейных уравнений. Для обеспечения гладкости восстановленной функции используем алгоритм регуляризации (по А.Н. Тихонову). Метод наименьших квадратов с регуляризацией выглядит следующим образом:

$$\min_{u_j} \sum_{i=0}^{N} \left[u_\delta(x_i) - S_M(x_i \mid u_j) \right]^2 + \alpha \sum_{i=0}^{N} \left(\frac{\partial^2 S_M(x_i \mid u_j)}{\partial x^2} \right)^2 .$$

В данном случае использован регуляризатор второго порядка.

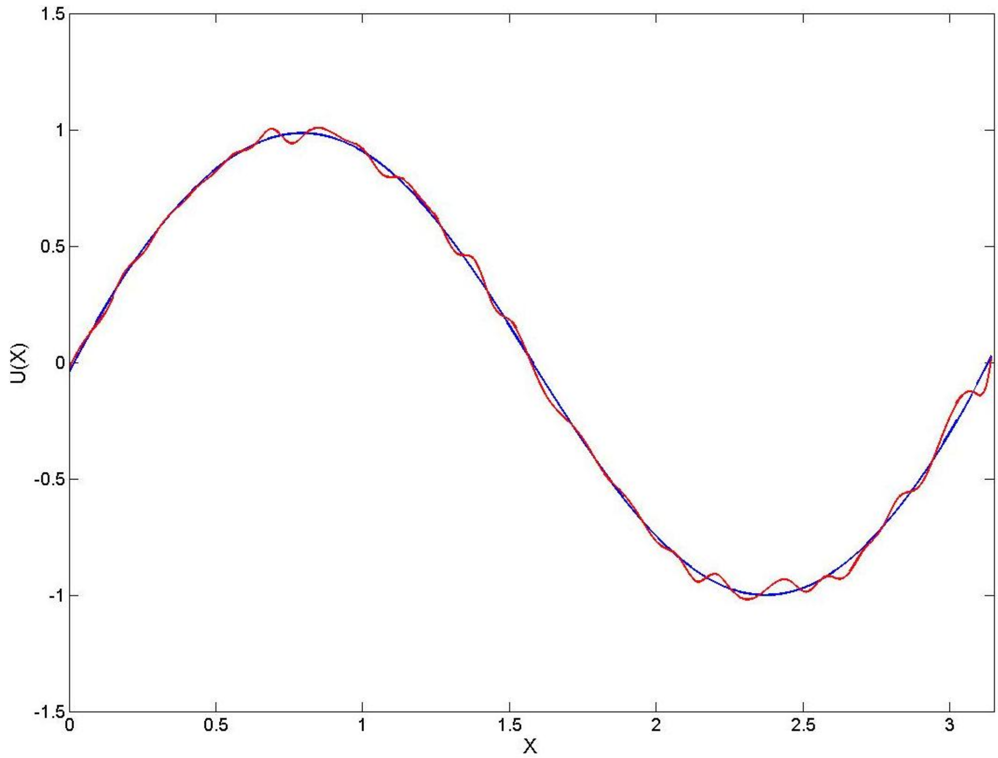


Рис.1 9

На рисунке 1.9 показаны метод наименьших квадратов без регуляризации и с регуляризацией ($\alpha = 0.01$) при тех же параметрах что и на рисунке 1.8. Видно, что для достаточно больших M алгоритм с регуляризацией сглаживает функцию достаточно хорошо.

Исследовались различные регуляризаторы с различной степенью сглаживания. В качестве критерия выбора регуляризатора используется близость гистограмм полученного решения к некоторой эталонной гистограмме. Результаты исследования представлены виде гистограмм, на конкретном примере. Взята функция на интервале $[0,2]$. Интервал разбивается на части. Рассматривается, сколько значений функций попадут в каждую часть после розыгрыша ошибки. Потом показывается, сколько значений восстановленной функции попадут в каждую часть интервала.

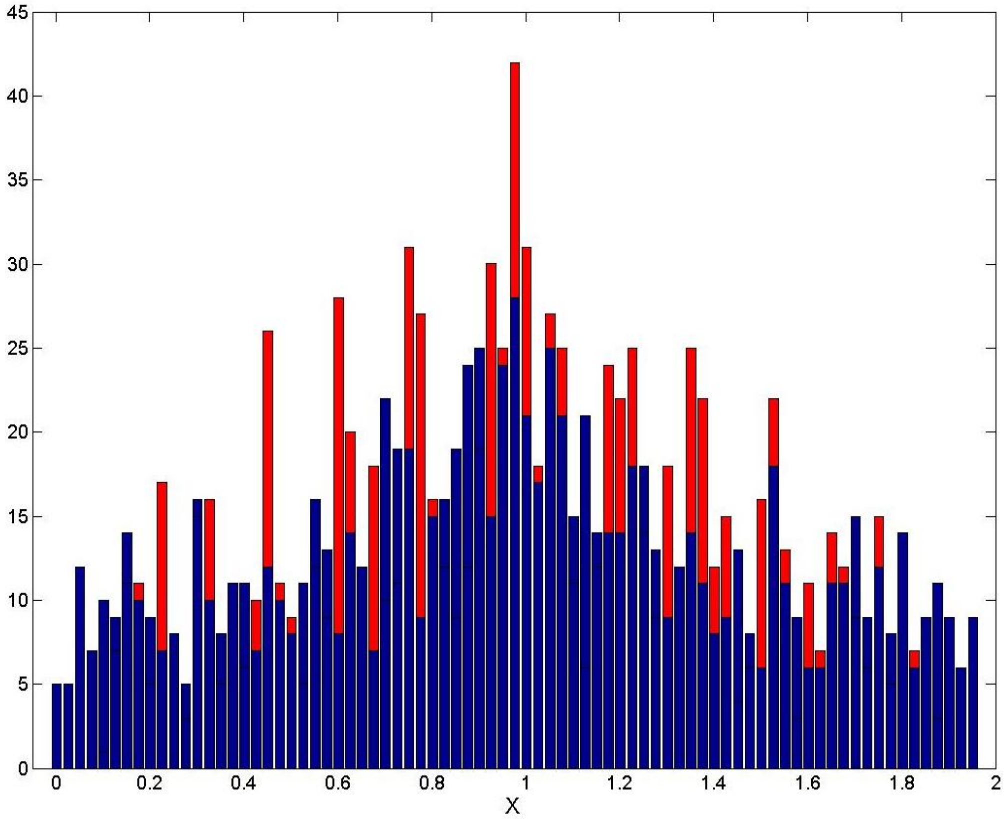


Рис.1 10

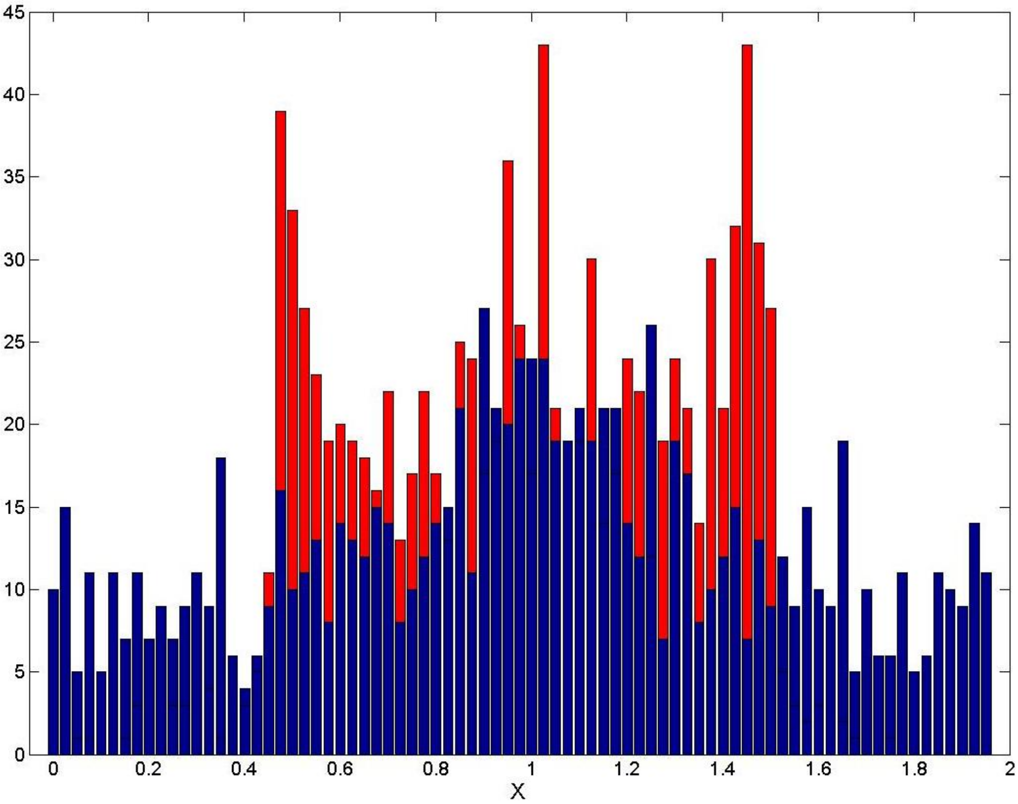


Рис.1 11

На рисунках 1.10 и 1.11 используется регуляризатор второго порядка. Параметры регуляризации следующие $\alpha = 0.001$ на 1.10 и $\alpha = 0.1$ на 1.11. Видно, что при увеличении α функция плохо восстанавливается на границе, происходит усреднение данных.

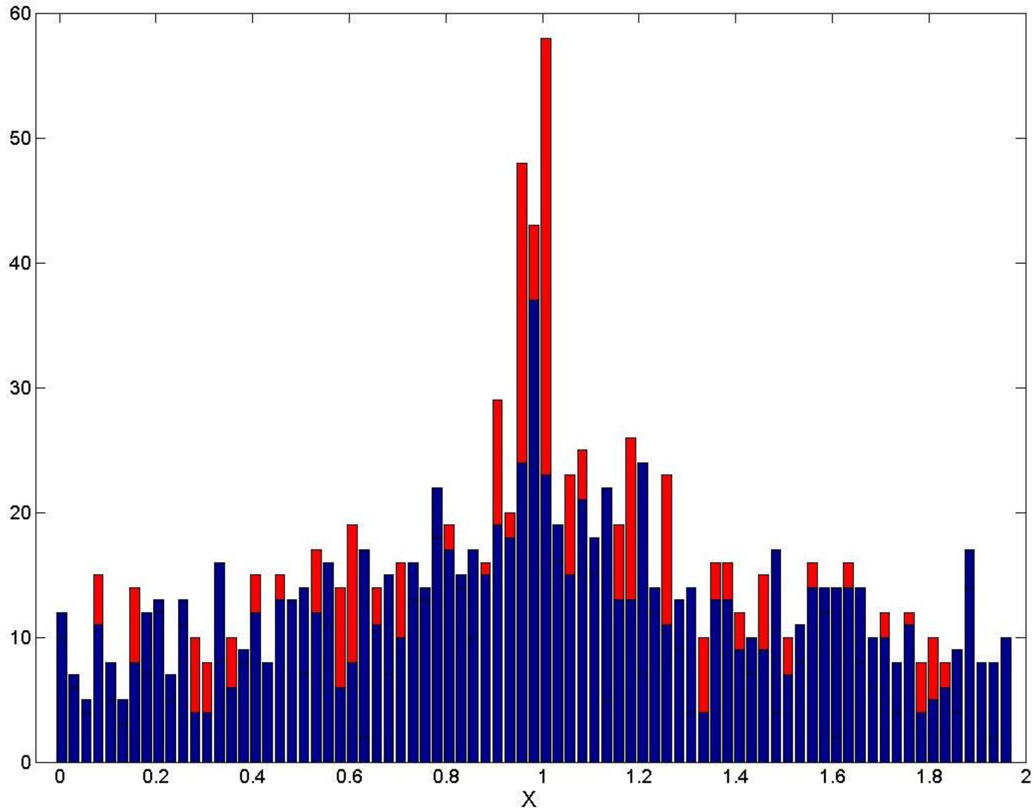


Рис.1 12

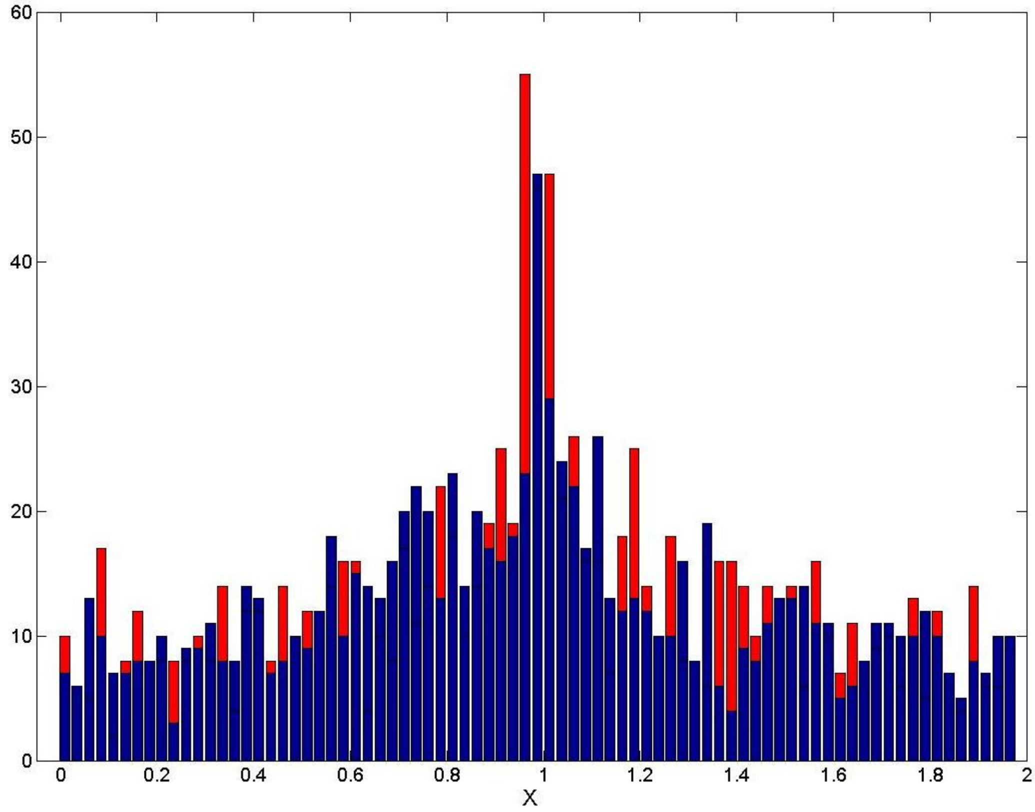


Рис.1 13

На рисунках 1.12 и 1.13 используется регуляризатор нулевого порядка с такими же параметрами. Видно, что результат гораздо лучше.

6. Заключение

1. В настоящей работе на основе оптимальных с информационной точки зрения приближенных представлений искомых функций линейными формами для ограниченно компактных множеств построены регуляризованные алгоритмы решения задач фильтрации.

2. Использован критерий проверки статистических гипотез для определения оптимального числа параметров сплайн-аппроксимации, которое является фактически параметром регуляризации данной задачи.

3. Реализован алгоритм интерполяции на основе многомерной сплайн аппроксимации.

4. Степень сглаживания может быть выбрана на основе исследования гистограмм. Для данного класса задач оптимальным оказался регуляризатор нулевого порядка по А.Н. Тихонову.

5. Написанная программа может быть использована при проведении геологического моделирования

Литература

1. Karhunen K. Zur Spektraltheorie stocgastischer Prozesse. Ann. Acad. Sci Fennicae, Ser. A1, 34, 1946.
2. Гренандер У. Случайные процессы и статистические выводы. М., Изд-во иностр. лит., 1961.
3. Стечкин С.Б., Субботин Ю.Н. Сплайны в вычислительной математике. М., Наука, 1976.
4. Петров А.П. Оценки линейных функционалов для решения некоторых обратных задач. – Ж. вычисл. матем. и матем. физ., 1967, т.7, №3, с.648-654.
5. Крамер Г., Лидбеттер М. Стационарные случайные процессы. Свойтсва выборочных функций и их приложения. М., Мир, 1969.
6. Бабенко К.И. Об одном подходе к оценке качества вычислительных алгоритмов. – Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1974, №7.
7. Бабенко К.И. О некоторых свойствах вычислительных алгоритмов. – Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1977, №29.
8. Рябенький В.С. Локальные формулы гладкого восполнения и гладкой интерполяции функции по их значениям в узлах неравномерной прямоугольной сетки. – Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1974, №21.
9. Тихонов А.Н. О регуляризации некорректно поставленных задач. – Докл. АН СССР, 1963, т.153, №1, с.49-52.
10. Леман Э. Проверка статистических гипотез. М., Наука, 1979.

11. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. М., Наука, 1979.
12. Пергамент А.Х., Тельковская О.В. Метод регуляризации и метод максимального правдоподобия при решении интегральных уравнений I-го рода. – Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1979, №111.
13. Марченко Н.А., Пергамент А.Х. Некотрые вопросы теории приближений и задачи фильтрации. – Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1979, №178.
14. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я., Думова А.А. и др. О многоцелевой проблемно-ориентированной системе обработки результатов экспериментов. – Препринт Ин. прикл. матем. им. М.В.Келдыша АН СССР, 1976, №142.
15. Де Бор К., Практическое руководство по сплайнам. М., Радио и Связь, 1985.
16. Голуб Ж., Ван Лоун Ч., Матричные вычисления. М., Мир, 1999.