«Оптика атмосферы», **3**, № 1 (1990)

УДК 551.501 : 519.24

К.Т. Протасов

ЛИНЕЙНЫЕ МОДЕЛИ МНОГОМЕРНЫХ ПОЛЕЙ В БАЗИСЕ КАРУНЕНА–ЛОЭВА

В рамках линейной модели случайных векторных полей векторного аргумента, примерами которых, в частности, могут быть ансамбли многозональных изображений, решается задача нахождения базиса Карунена–Лоэва по экспериментальным данным и предлагается итеративный алгоритм приближенного решения указанной задачи.

При обработке многомерной экспериментальной информации широко используются линейные модели представления данных в ортогональных базисах. Среди всех таких базисов наиболее предпочтительным является базис Карунена–Лоэва (известный в литературе по метеорологии, гидрологии, океанологии, физике атмосферы и океана как базис эмпирических ортогональных функций [1–5]), при этом аппроксимирующий ряд имеет наименьшее число компонент, сохраняя высокую точность аппроксимации данных [6–8].

Наметившиеся тенденции к увеличению размерности регистрируемой информации (в частности, появление многозональной аэрокосмической съемки) и возникающие при этом проблемы совместной обработки данных делают актуальной задачу синтеза линейных моделей многомерных наблюдений, описываемых случайными векторными полями. В связи с этим в работе рассматривается достаточно общая задача представления векторных полей векторного аргумента, нахождения соответствующего базиса Карунена–Лоэва по экспериментальным данным, предлагается итеративный алгоритм приближенного решения указанной задачи. Будем полагать, что случайное (для простоты и без потери общности — центрированное) векторное поле $\xi(\mathbf{u}) = (\xi^1(\mathbf{u}),\ldots,\xi^s(\mathbf{u}))^{\text{т}}$ векторного аргумента $\mathbf{u} = (u^1,\ldots u^\nu)^{\text{т}}$, и ($s$, ν — соответственно, размерность функции $\xi(.)$ и размерность аргумента $\mathbf{u}$, т — знак транспонирования) представлено в области определения

$$D = \{\mathbf{u} : u_a^i \leqslant u^i \leqslant u_b^i,\ i = 1,\ldots,\ \nu\}$$

совокупностью N реализаций $\xi_1(\mathbf{u}),\ldots,\ \xi_N(\mathbf{u})$.

Представим векторное поле следующим образом (вообще говоря, не единственным [7])

$$\boldsymbol{\xi}(\mathbf{u}) = \lim_{\kappa\to\infty}\sum_{i=1}^{\kappa} X^i \boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{u}), \tag{1}$$

где предел понимается в смысле сходимости по норме в пространстве реализаций случайного вектора поля; $\{\boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{u})\}_\kappa$ — векторные базисные функции векторного аргумента. Случайные коэффициенты $\{X^i\}_\kappa$ определяются из условия минимума среднеквадратического с весом уклонения

$$\mathrm{E}_\kappa^2 = M\left\|\psi^{1/2}(\mathbf{u})\,(\boldsymbol{\xi}(\mathbf{u}) - \sum_{i=1}^{\kappa} X^i\boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{u}))\right\|^2, \tag{2}$$

где M — знак оператора математического ожидания; $\psi(\mathbf{u})$ — весовая скалярная функция, неслучайная на D; $\|\cdot\|$ — евклидова норма в пространстве наблюдений.

Если на базисные функции $\{\boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{u})\}_\kappa$ наложить условия ортонормируемости

$$(\boldsymbol{\Phi}_i,\ \boldsymbol{\Phi}_j)_\psi = \int\limits_D \psi(\mathbf{u})\,\boldsymbol{\Phi}_i^{\text{т}}(\mathbf{u})\,\boldsymbol{\Phi}_j(\mathbf{u})\,d\mathbf{u} = \delta_{ij}, \tag{3}$$

где δ_{ij} (i, $j = 1,\ldots,\ \kappa$) — символ Кронекера, $d\mathbf{u} = du^1\times\ldots\times du^\nu$, а $(.,.)_\psi$ — знак скалярного с весом произведения, то коэффициенты представления $\{X^i\}_\kappa$, минимизирующие (2), будут иметь вид:

$$X^i = (\boldsymbol{\xi},\ \boldsymbol{\Phi}_i)_\psi = \int\limits_D \psi(\mathbf{u})\,\boldsymbol{\xi}^{\text{т}}(\mathbf{u})\,\boldsymbol{\Phi}_i(\mathbf{u})\,d\mathbf{u},\ \ i = 1,\ldots,\ \kappa. \tag{4}$$

Существование предела в (1) и полной ортонормированной последовательности базисных функций $\{\mathbf{\Phi}_i(\mathbf{u})\}_\infty$ обеспечивается рассмотрением лишь процессов $\xi(\mathbf{u})$, удовлетворяющих следующему условию: для каждого фиксированного набора значений компонент вектора $\mathbf{u} \in D$ $M[\xi^{\mathrm{T}}(\mathbf{u})\xi(\mathbf{u})] < \infty$. Базисные функции $\{\mathbf{\Phi}_i(\mathbf{u})\}_\kappa$ можно также найти из условий минимума среднеквадратического критерия качества (2) аппроксимации векторного поля $\xi(\mathbf{u})$ отрезком ряда (1) из κ членов.

Решение указанной вариационной задачи на условный, в смысле ограничений (3), вводимых в функционал (2) с помощью множителей Лагранжа, экстремум приводит к однородному интегральному уравнению Фредгольма второго рода

$$\int\limits_D \psi(\mathbf{v})\, M\left[\xi(\mathbf{u})\,\xi^{\mathrm{T}}(\mathbf{v})\right] \mathbf{\Phi}(\mathbf{v})\, d\mathbf{v} = \lambda \mathbf{\Phi}(\mathbf{u}), \tag{5}$$

где λ — множитель Лагранжа, а индекс базисных функций и λ ввиду эквивалентности всех уравнений опущены.

Искомый базис $\{\Phi_i(\mathbf{u})\}_\kappa$, соответствующий κ наибольшим собственным значениям $\{\lambda_i\}_\kappa$, находится решением уравнения (5), однако в общем случае это не простая задача.

Имея в распоряжении совокупность реализаций $\xi_1(\mathbf{u}),\dots,\xi_N(\mathbf{u})$ объема N, „достаточно полно” характеризующих генеральную совокупность всех реализаций, порождаемых случайным полем $\xi(\mathbf{u})$, естественно воспользоваться следующей выборочной оценкой корреляционной функции

$$M\left[\xi(\mathbf{u})\,\xi^{\mathrm{T}}\mathbf{v})\right] \simeq \frac{1}{N}\sum_{j=1}^{N} \xi_j(\mathbf{u})\,\xi_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{v}). \tag{6}$$

В этом случае задача (5) существенно упрощается (случай вырожденного ядра в (5) [9]). Действительно, подставляя (6) в интегральное уравнение (5), получим

$$\int\limits_D \psi(\mathbf{v}) \sum_{j=1}^{N} \xi_j(\mathbf{u})\,\xi_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{v})\,\hat{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{v})\, d\mathbf{v} = \Delta\,\hat{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{u}), \tag{7}$$

где $\Delta = N\hat{\lambda}$, а $\hat{\lambda}$, $\hat{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{u})$ — оценки соответствующих λ, $\mathbf{\Phi}(\mathbf{u})$.

Введем следующие обозначения:

$$\int\limits_D \psi(\mathbf{v})\xi_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{v})\,\hat{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{v})\, d\mathbf{v} = c^j,\ j = 1,\dots,\ N,$$

тогда из (7) получим выражение для базисных функций

$$\hat{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{u}) = \frac{1}{\Delta}\sum_{j=1}^{N} c^j \xi_j(\mathbf{u}), \tag{8}$$

где коэффициенты $\{c^j\}_N$ пока неопределены. Подставив параметризованное выражение (8) базисной функции $\hat{\mathbf{\Phi}}(\mathbf{u})$ в уравнение (7), получим равенство

$$\frac{1}{\Delta}\sum_{j=1}^{N} \xi_j(\mathbf{u}) \sum_{i=1}^{N} c^i \int\limits_D \psi(\mathbf{v})\,\xi_j^{\mathrm{T}}(\mathbf{v})\,\xi_i(\mathbf{v})\, d\mathbf{v} = \sum_{j=1}^{N} c^j \xi_j(\mathbf{u}). \tag{9}$$

Вычислим в этом выражении скалярное произведение $(\xi_j,\ \xi_l)_\psi$ по реализациям случайного поля $\xi_1(\mathbf{u}),\dots,\xi_N(\mathbf{u})$, обозначив его a_{ji} тогда (9) примет вид

$$\sum_{j=1}^{N} \xi_j(\mathbf{u}) \left\{\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{N} c^i a_{ji} - c^j\right\} = 0. \tag{10}$$

В силу линейной независимости реализаций случайного поля в вероятностном смысле и в силу свойства линейно независимых элементов пространства со скалярным произведением, равенство (10) имеет место при условии

$$\frac{1}{\Delta}\sum_{i=1}^{N} c^i a_{ji} - c^j = 0,\ j = 1,\dots,\ N. \tag{11}$$

Используя матричную запись, (11) будет иметь следующий вид:

$$(a_{ji})\mathbf{c} = \mathbf{c}\boldsymbol{\Delta}, \tag{12}$$

где $\mathbf{c} = (c^1,\ldots,c^N)^{\mathrm{т}}$; (a_{ji}) — матрица $N\times N$ Грама; $\Delta = (\Delta^i\delta_{ij})$.

Таким образом, определив структуру базисных функций в виде линейной комбинации реализаций случайного процесса, коэффициенты этих линейных комбинаций получаются в результате решения полной проблемы собственных значений для положительно определенной матрицы Грама (a_{ji}) порядка N, а это уже практически реализуемая задача с помощью численных методов алгебры.

Нетрудно проверить, подставив выражение (8) в (3), что для нормировки функций $\{\hat{\boldsymbol{\Phi}}_i(\mathbf{u})\}_\kappa$, с учетом полученных значений $\{c^i\}_N$, в формуле для базисных функций (9) нужно произвести замену Δ на $\sqrt{\Delta}$.

Построение линейных моделей (1), с использованием оптимального в среднеквадратическом смысле базиса Карунена—Лоэва, требует решения уравнений (12), как правило, численными методами. Однако трудности практической реализации ограничивают широкое применение этого базиса, так как в этом случае необходимо решать полную проблему собственных значений для положительно определенных матриц, когда их порядок превосходит 10^2. Это заставляет отказаться от прямых методов решения задачи нахождения базиса Карунена—Лоэва (12) и конструировать итеративные алгоритмы, которые, уменьшая число операций при получении приближенного результата, лишь в асимптотике приводят к оптимальному решению. Другим преимуществом итеративных алгоритмов является тот факт, что они позволяют найти в первую очередь «самые важные» базисные функции, число которых может быть небольшим.

Одним из способов преодоления указанной трудности ценой отказа от оптимальности в среднеквадратическом смысле является алгоритм построения приспособленного базиса [10], использующий идею ортогонализации последовательности линейно-независимых функций при условии, что выбор очередной функции подчинен определенному критерию. При этом осуществляется равномерное приближение процесса его линейным многообразием небольшой размерности. Итеративность процедуры построения этого базиса позволяет использовать алгоритм для преобразования пространств больших размерностей до 10^5.

Далее предлагается итеративный алгоритм построения базиса, приспособленного в среднеквадратическом смысле (базис ИСК). В данном случае выбор очередной базисной функции основан на минимизации среднеквадратического критерия качества (2).

Аппроксимируем реализации исходного описания $\xi(\mathbf{u})$ элементами линейной оболочки G_κ, заданной ортонормированным базисом $\{\varphi_j(\mathbf{u})\}_\kappa$ следующим образом. За очередную базисную функцию $\varphi_j(\mathbf{u})$ $j=1,\ldots,\kappa$) возьмем ту из s_j ортонормированных функций $\varphi_{s_j}(\mathbf{u})$, полученных процессом ортогонализации Грама — Шмидта [12] выборочных функций $\xi_1(\mathbf{u}),\ldots,\xi_N(\mathbf{u})$

$$\varphi_{s_j}(\mathbf{u}) = \frac{\overset{*}{\varphi}_{s_j}(\mathbf{u})}{\|\overset{*}{\varphi}_{s_j}(\mathbf{u})\|},\quad \overset{*}{\varphi}_{s_j}(\mathbf{u}) = \xi_{s_j}(\mathbf{u}) - \sum_{i=1}^{j-1}(\xi_{s_j},\ \varphi_i)\,\varphi_i(\mathbf{u}), \tag{13}$$

для которой

$$\lambda_j = M\,[(\xi,\ \varphi_j)^2] = \max_{\{s_j\}} M\,[(\xi,\ \varphi_{s_j})^2], \tag{14}$$

$$s_j = 1,\ldots,\ N;\quad j = 1,\ldots,\ \kappa;\ \kappa \leqslant N,$$

где в качестве математического ожидания используется выборочная оценка, ассоциированная с (6).

Процесс отыскания базисных функций заканчивается на κ-м шаге, как только будет достигнута заданная точность $\mathbf{E}_\kappa^2$ аппроксимации случайного векторного поля линейной комбинацией r-базисных элементов из G_κ, при этом по теореме проектирования элементов $\xi(\mathbf{u})$ Гильбертова пространства на G_κ имеем

$$\xi(\mathbf{u}) \simeq \sum_{j=1}^{\kappa} X^j\varphi_j(\mathbf{u}), \tag{15}$$

где $\{X^j\}_\kappa$ — набор случайных чисел, определяемых по формуле

$$X^j = (\xi, \varphi_j),\quad j = 1,\ldots,\kappa \tag{16}$$

Точность аппроксимации в выражении (15) определяется (практически используются оценки $M[\cdot]$ по той же выборке) следующим образом:

$$\mathrm{E}_{\kappa}^{2} = M\,[(\xi,\ \xi)] - \sum_{j=1}^{\kappa} \lambda_j, \tag{17}$$

где λ_j — упорядочены по убыванию ($\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \ldots \geq \lambda_\kappa$) в силу построения и максимально, насколько это позволяет набор $\{\xi_j(\mathbf{u})\}_N$, «исчерпывают» среднеквадратическую ошибку $\mathbf{E}_\kappa^2$ аппроксимации ансамбля $\{\xi(\mathbf{u})\}$ линейным многообразием из G_κ. Как известно, оптимальный в среднеквадратическом смысле базис $\{\Phi_j(\mathbf{u})\}_\kappa$ с соответствующим спектром собственных значений $\{\lambda_j\}_\kappa$ разложения Карунена–Лоэва находится оптимизацией критерия (17) по $\{\varphi_j(\mathbf{u})\}$ с учетом ортонормируемости последних. К тому же базису $\{\mathbf{\Phi}_j(\mathbf{u})\}_\kappa$ приводит задача последовательной максимизации положительно определенной квадратичной формы (14) на сферах единичного радиуса в подпространствах, ортогональных функциям $(\mathbf{\Phi}_j(\mathbf{u})\}_\kappa$, получаемым процедурой (13), $j = 1,\ldots,\kappa$, $\mathbf{\Phi}_0 \equiv 0$. Последнее обстоятельство указывает на то, что ПСК-базис $\{\varphi_j(\mathbf{u})\}_\kappa$, получаемый алгоритмом (13), (14), асимптотически с ростом N становится базисом Карунена–Лоэва при некоторых предположениях относительно ансамбля $(\xi(\mathbf{u})\}$. Действительно, фактически рассматриваемый алгоритм основан на стохастических принципах поиска экстремума [11] лишь с той особенностью, что «пробными» функциями в данном случае являются элементы выборки. Поэтому для сходимости процедуры поиска необходимо [11], чтобы функция распределения выборочных значений была положительной в «направлении» искомых решений. Если этот факт априорно не установлен, то о качестве полученного решения можно судить по величине оценки ошибки аппроксимации (17):

$$\widetilde{\mathrm{E}}_{\kappa}^{2} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^{N} \left[(\xi_j,\ \xi_j) - \sum_{i=1}^{\kappa} (\xi_j,\ \varphi_i)^2 \right].$$

Следует заметить, что алгоритмы, полученные для непрерывных полей, справедливы для полей, заданных отдельными отсчетами в дискретной регулярной или стохастической (но фиксированной) сети наблюдений, однако в этих случаях интегрирование заменяется соответствующим суммированием по множеству точек, в которых регистрируют реализации поля. Несложно выполнить и другие модификации алгоритмов, связанные с представлением полей в области D с переменными границами, скользящими границами или выделить в линейной модели (1) временную переменную в виде

$$\xi(\mathbf{u},\ t) = \sum_{i=1}^{\kappa} X^i(t)\, \Phi_i(\mathbf{u}).$$

1. Багров Н.А. //Метеорология и гидрология. 1978. № 12. С. 5.
2. Фортус М.И. //Метеорология и гидрология. 1980. № 4. С. 113.
3. Артемьев А.О. //Океанология. 1987. Т. 27. Вып. 2. С. 204.
4. Фортус М.И. 1975. Т. 11. № 11. С. 1107.
5. Обухов А.М. //Известия АН СССР. Серия геофизич. I960. № 3. С. 432.
6. Ватанабе С. Автоматический анализ сложных изображений. М.: Мир, 1969. С. 254–275.
7. Ван Трис Г. Теория обнаружения, оценок и модуляции. Т. 1. М.: Сов. радио, 1972. 744 с.
8. Фукунага К. Введение в статистическую теорию распознавания образов. М.: Наука, 1979. 368 с.
9. Верлань А.Ф., Сизиков В.С. Методы решения интегральных уравнений с программами для ЭВМ. Киев: Наук, думка. 1978. 292 с.
10. Распознавание образов и медицинская диагностика //Под ред. Ю.И. Неймарка. М.: Наука, 1972. С. 328.
11. Соболь И.М. Численные методы Монте-Карло. М.: Наука. 1973. С. 311.
12. Шилов Г.Е. Математический анализ. Специальный курс. М.: Наука, 1960. С. 275.

Институт оптики атмосферы СО АН СССР,
Томск

Поступила в редакцию
9 ноября 1988 г.

K.T. Protasov. **Linear models of multidimensional fields in the Karunen–Loev basis.**

An iteration algorithm is suggested in the paper for approximate solution of the problem on defining the Karunen–Loev basis using experimental data within the framework of a linear model of the random vector fields of the vector argument. An example of such fields can be presented by an ensemble of multizonal images.