АЛГОРИТМ ОПТИМАЛЬНОГО АВТОМАТИЧЕСКОГО ГАУСС-АНАЛИЗА НАБЛЮДАТЕЛЬНЫХ ДАННЫХ

Л. Н. Иванов

Предложена методика среднеквадратичной аппроксимации наблюдательных данных набором гауссиан. Минимизация среднего квадрата невязки достигается посредством варьирования всех трех параметров каждой из гауссиан. Определение приращений значений параметров на очередном шаге минимизации производилось методом, родственным методу Ньютона—Рафсона, что обеспечило существенное ускорение процедуры по сравнению с методом наискорейшего спуска. Для работы алгоритма не требуется задания предварительно определенных приближенных значений параметров. Используется прием, позволяющий разрешать иерархию гауссиан с тем же результатом, какой получается при анализе кривой, осуществляемом наблюдателем вручную.

The method of the mean square problem approximation of the observational data by complex of gaussians is developed. Variations of all gaussian's parameters made by means of Newton—Raffson method for reaching the error minimum. The algorithm need no a priori information about any parameters of the gaussians. The algorithm distingwishes a superposition of the gaussians as well as an observer do.

Укрупнение информации — одна из важных проблем, встречающихся при анализе наблюдательных данных во многих областях экспериментальной науки. С этой целью часто применяется представление реализации в виде набора гауссиан. При этом количество параметров, описывающих гауссианы, как правило, оказывается существенно меньшим, чем количество точек реализации. Избыточность можно использовать для повышения надежности определения параметров. Нередко оказывается, что компоненты такого разбиения представляют самостоятельный интерес, так как им можно поставить в соответствие отдельные физические объекты [1].

Наблюдатель, исходя из интуитивного представления о природе объекта, довольно просто производит качественное разбиение реализации на гауссовы компоненты. Для того чтобы добиться соответствия между автоматическим и ручным разбиением, следует формализовать этот интуитивный подход. Наибольшие трудности возникают при анализе иерархии гауссиан (пример такой записи показан на рис. 2).

В общем виде задачу гаусс-анализа можно сформулировать следующим образом. Пусть задана некоторая кривая $f(x)$, $x \in [0, l]$. Предполагается, что нулевой фон исключен на предыдущей стадии обработки наблюдений. Как правило, кривая имеет дискретное представление $\{f_j\}$, $j=1, \ldots, n$. Требуется определить набор N гауссиан вида

$$f_i = a_i \exp\left[-\frac{(x-x_i)^2}{d_i}\right], \quad d_i = \sigma_i^2, \tag{1}$$

которые в сумме приближенно выражали бы функцию f. Оптимальность приближения определяется обращением в минимум функционала

$$I = \int_0^1 \left(f - \sum_{i=1}^{N} f_i\right)^2 dx. \tag{2}$$

Можно выделить следующие характерные этапы решения поставленной задачи.

1. Нахождение начального приближения для значений величин a_i, d_i, x_i для каждого i.

2. Минимизация функционала I с фиксированным количеством гауссиан.

3. Определение величины N_0 — оптимального количества гауссиан, исходя из известного уровня шумов.

Могут ставиться модифицированные задачи:

а) задано количество гауссиан, подобрать их оптимальные параметры.
б) оптимизация ограниченного числа параметров гауссиан, если задано количество гауссиан, а значения некоторых параметров фиксированы.

В настоящей статье последняя модификация рассматриваться не будет в силу достаточной очевидности ее осуществления на базе решения общей задачи.

Начальное приближение для значений параметров гауссиан. Как будет видно из дальнейшего описания, достаточно рассмотреть проблему предварительного определения параметров для случая одной гауссианы. Пусть

$$f_k = \max_j f_j, \quad j = 1, \ldots, n, \tag{3}$$

где k — номер узла, где достигается максимальное значение f_j.

По пяти последовательным точкам, выбранным так, что k-й узел лежит посередине, приводится среднеквадратичная парабола [2]:

$$\varphi(x) = ax^2 + bx + c. \tag{4}$$

Через ее коэффициенты можно определить следующее.

1. Положение вершины параболы x_k, которое принимаем за начальное положение вершины гауссианы.

2. Максимальное значение функции $\varphi(x_k) = a_k$, его принимаем за начальное значение амплитуды гауссианы.

3. Начальную дисперсию гауссианы d_k. Она определяется из условия, что гауссиана касается упомянутой параболы в вершине и имеет там то же значение второй производной, что и парабола. Тогда

$$d_k = -a_k/a. \tag{5}$$

В дополнении 1 процедура определения начальных параметров описана подробнее.

Метод минимизации функционала *I*. Значения функционала I зависят от $3N$ параметров, если ищется разбиение на N гауссовых компонент. Предположим, что предварительные значения этих параметров известны. Уточнение этих значений (а значит и поиск минимума функционала I) можно производить различными способами [3], но почти в каждом из них требуется вычисление производных I по параметрам. Эти производные определяются по формулам:

$$\frac{\partial I}{\partial a_i} = -2I_{1i}/a_i; \quad \frac{\partial I}{\partial x_i} = -4(I_{2i} - x_i I_{1i})/d_i; \quad \frac{\partial I}{\partial d_i} = -2(I_{3i} - 2x_i I_{2i} + x_i^2 I_{1i})/d_i^2, \tag{6}$$

где

$$I_{mi} = \int_0^l \left(f - \sum_{i=1}^N f_i\right) f_i x^{m-1} dx, \quad m = 1, 2, 3. \tag{7}$$

Интегралы в (7) вычислялись приближенно по методу Симпсона.

Практика показала, что нахождение минимума функционала I методом наискорейшего спуска или близкими ему методами — дело безнадежное, так как уже при трех гауссианах требуется совершить десятки (если не сотни) тысяч шагов, а значит, затраты машинного времени становятся недопустимо большими. Причина этого кроется в очень большом разбросе значений больших полуосей поверхностей уровня функционала I в пространстве параметров, иными словами, задача является плохо обусловленной. Поэтому был разработан метод, родственный методу Ньютона—Рафсона [3].

Суть его заключается в том, что в окрестности минимума величина I как функция параметров гауссиан может быть приближенно представлена параболоидом. В точке минимума все первые производные $\partial I/\partial \alpha_i$ обращаются в 0, здесь α_i — некоторый параметр i-й гауссианы. Форма параболоида определяется вторыми производными $\partial^2 I/\partial \alpha_i \partial \beta_j$, взятыми в точке минимума, β_j имеет смысл, аналогичный α_i. На основании формулы (2) получим выражение

$$\frac{\partial^2 I}{\partial \alpha_i \partial \beta_j} = -2 \int_0^l \left(f - \sum_{1=1}^{N} f_i \right) \frac{\partial^2 f_i}{\partial \alpha_i \partial \beta_j} dx + 2 \int_0^l \frac{\partial f_i}{\partial \alpha_i} \cdot \frac{\partial f_j}{\partial \beta_j} dx. \tag{8}$$

Очевидно, при $i \neq j$ первое слагаемое равно 0. Так как производные должны быть взяты в точке минимума I, т. е. при тех искомых значениях параметров, которые задают наилучшее в смысле метода наименьших квадратов представление функции f в виде суммы гауссиан, то, не допуская большой погрешности, будем полагать первое слагаемое равным 0 всегда. Если функция f стремится к 0 на концах промежутка $[0, l]$, то во втором слагаемом формулы (8) формально можно распространить интегрирование на промежуток $(-\infty, +\infty)$ и вычислить значения определенного интеграла аналитически. Процедура такого вычисления вторых производных изложена в Дополнении 2.

При заданной форме параболоида и вычисленных по формулам (6), (7) компонентах вектора градиента можно вычислить составляющие вектора, указывающего направление от точки, заданной текущими значениями параметров, к точке, где достигается минимальное значение на параболоиде. Задача сводится к решению системы $3N$ линейных уравнений вида

$$\frac{\partial I}{\partial \alpha_i} = \sum \frac{\partial^2 I}{\partial \alpha_i \partial \beta_j} \delta\beta_j, \tag{9}$$

где величины α_i, β_j принимают поочередно значения всех параметров всех гауссиан; $\delta\beta_j$ — искомые компоненты вектора, указывающего направление на точку минимума I. Матрица системы (9) симметричная, положительноопределенная. Система решалась методом Халецкого [4], модифицированным для случая симметричной матрицы.

Заметим, что вторые производные вычислялись с погрешностью: во-первых, вместо неизвестных параметров, задающих минимум I, в (8) подставлялись их текущие значения, во-вторых, бралось только второе слагаемое в выражении (8). Вследствие этого необходимо произвести уточнение параметров итеративно. Оказалось, что описанный процесс сходится быстро. Так, в случае разбиения на три гауссианы (рис. 1) решение всей задачи потребовало менее 100 шагов.

Как говорилось во введении, желательно, чтобы разбиение на гауссовы компоненты, осуществленное автоматически, соответствовало тому разбиению, которое производит наблюдатель, пользуясь интуитивным представлением о природе объекта. Такое соответствие обеспечивает алгоритм п о с л е д о в а т е л ь н о й   о п т и м и з а ц и и гауссовых разбиений, когда N-я компонента добавляется только после того, как произведена минимизация невязки с использованием $N-1$ компонент. При этом, если для определения начальных значений параметров первой гауссианы по методу, изложенному в предыдущем разделе, используется сама функция $f(x)$, то для N-й гауссианы берем

$$\tilde{f}_N = f(x) - \sum_{i=1}^{N-1} f_i^{N-1},$$

где f_i^{N-1} — означают гауссианы, параметры которых оптимальны в смысле достижения минимума функционала I при наличии $N-1$ компонент разбиения.

Результаты испытания алгоритма. В целях отладки алгоритма производилось разложение на гауссовы компоненты реализации, представленной на рис. 1. Эта реализация образована суммой трех гауссиан с сильным взаимным наложением, она генерировалась предварительно и подавалась на обработку программой гаусс-анализа в виде массива, содержащего 100 чисел. Согласно избранной методике, проводилась последовательная оптимизация параметров гауссиан, представляющих заданную кривую в количестве одной, двух и, наконец, трех штук. Результаты счета представлены в табл. 1. Вычисления потребовали 60 сек. машинного времени на ЭВМ М-222 Вычислительного центра САО АН СССР. Минимизация функционала невязки (1) была достигнута за 90 шагов, причем решение системы вида (9) потребовалось 35 раз. Параметры тройки гауссиан, приведенные в табл. 1, совпадают с заданными с точностью 4 знаков.

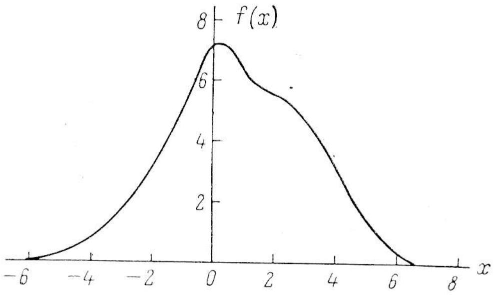

Рис. 1.

Гаусс-анализ реализации, приведенной на рис. 2, состоящей из шести гауссиан, потребовал примерно 350 сек. машинного времени. Минимизация функционала (1) достигнута за 175 шагов. Параметры шести гауссиан, приведенные в табл. 2, практически совпадают с заданными.

Исследовалась также устойчивость работы программы гаусс-анализа относительно влияния шумов. На рис. 3 приведена реализация, та же, что и на рис. 1, но искаженная аддитивным шумом. Шум генерировался датчиком некоррелированных случайных чисел, равномерно распределенных в промежутке [—0.5, +0.5]. Варьируя коэффициент, с которым шум добавлялся к реализации, меняли отношение сигнал—шум в желаемых пределах. В табл. 3 приведены результаты анализа при амплитуде шума 0.5. Из сравнения табл. 1. и 3 видно, как при увеличении количества компонент постепенно падает надежность их определения.

Как известно из теории метода наименьших квадратов [5], погрешности определяемых значений параметров гауссиан можно определить по формуле

ТАБЛИЦА 1

Количество компонент	K	x_k	a_k	σ_k
1	1	0.793	6.894	3.376
2	1	0.919	6.363	3.498
	2	—0.191	1.445	0.793
3	1	0.000	4.999	3.000
	2	0.000	2.000	1.000
	3	3.000	3.001	2.000

ТАБЛИЦА 2

Количество компонент	K	x_k	a_k	σ_k
6	1	0.000	5.000	3.000
	2	—6.000	2.000	0.250
	3	4.000	2.000	0.250
	4	2.000	2.000	0.250
	5	—4.000	2.000	0.250
	6	—2.000	2.000	0.250

ТАБЛИЦА 3

Количество компонент	K	x_k	a_k	σ_k	Количество компонент	K	x_k	a_k	σ_k
1	1	0.794	6.898	3.392	3	1	0.416	6.013	3.136
2	1	0.916	6.405	3.496		2	—0.059	1.357	0.841
	2	—0.224	1.372	0.786		3	3.379	1.864	1.668

$$\Delta\alpha_i = \varepsilon_0 \sqrt{\frac{D_{ii}}{D}}, \quad i = 1, \ldots, 3N,$$

где D_{ii} — алгебраическое дополнение i-го диагонального элемента матрицы системы (9); D — определитель этой системы; ε_0 — среднеквадратическое

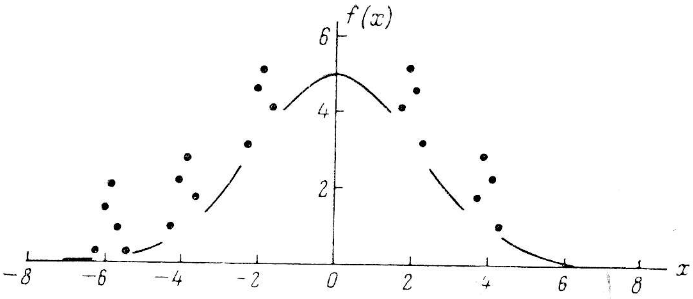

Рис. 2.

значение шума. При вычислении коэффициентов матрицы здесь нужно использовать найденные значения параметров.

В настоящее время изложенный алгоритм воплощен в программах, написанных на языках АЛГОЛ-60 (ТА-1М) и ФОРТРАН (Ф-20). Макси-

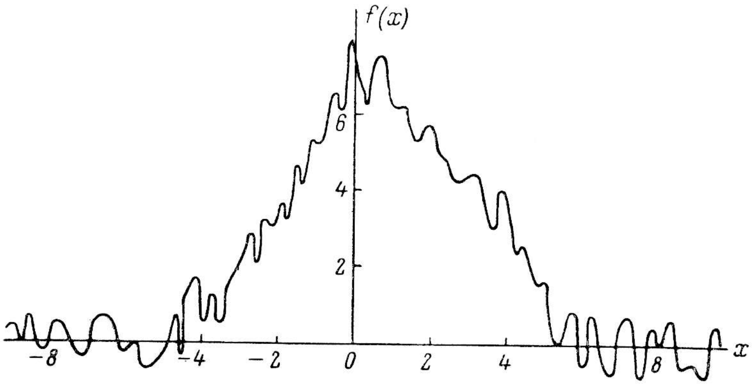

Рис. 3.

мальная длина обрабатываемой реализации 200 чисел для Алгол-программы и 300 чисел для Фортран-программы. Максимальное количество гауссиан равно 12 и 14 соответственно.

Дополнение 1. Начальное приближение для значений параметров гауссианы.

1. Определяется величина $f_k = \max_j f_j$, $j = 1, \ldots, n$, k — номер узла, где достигается максимальное значение f_j.

2. Вычисляются коэффициенты среднеквадратичной параболы

$$\varphi(x) = ax^2 + bx + c, \qquad (\text{Д}1.1)$$

проведенной по пяти точкам в окрестности k-го узла (номера узлов $k-2$, $k-1$, k, $k+1$, $k+2$). Для этого используется разложение функции $\varphi(x)$ по полиномам Чебышева, ортогональным на дискретном множестве точек

$$\varphi(x) = a_0\varphi_0(x) + a_1\varphi_1(x) + a_2\varphi_2(x). \qquad (\text{Д}1.2)$$

В нашем случае

$$\varphi_0(x) \equiv 1; \quad \varphi_1(x) = \frac{(x-x_k)}{2\Delta x}; \quad \varphi_2(x) = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{x-x_k}{\Delta x}\right)^2 - 2\right], \qquad (\text{Д}1.3)$$

где Δx — расстояние между узлами.

Коэффициенты этого разложения вычисляются по формулам:

$$a_0 = \frac{1}{5}(f_{k-2} + f_{k-1} + f_k + f_{k+1} + f_{k+2}); \quad a_1 = \frac{2}{5}\left(-f_{k-2} - \frac{1}{2}f_{k-1} + \frac{1}{2}f_{k+1} + f_{k+2}\right);$$

$$a_2 = \frac{2}{7}\left(f_{k-2} - \frac{1}{2}f_{k-1} - f_k - \frac{1}{2}f_{k+1} + f_{k+2}\right).$$

Отсюда и по формулам (Д1.3) получим для коэффициентов формулы (Д1.1):

$$a = \frac{a_2}{2\Delta x^2}; \quad b = \frac{a_1}{2\Delta x} - \frac{a_2 x_k}{\Delta x^2};$$

$$c = a_0 - \frac{a_1 x_k}{2\Delta x} + \frac{a_2 x_k^2}{2\Delta x^2} - a_2.$$

3. Искомое начальное приближение для параметров гауссианы: положение центра гауссианы $x_i = -b/2a$; амплитуда $a_i = c - b^2/4a$; квадрат полуширины $d_i = -a_i/a$. Величина d_i определяется из условия равенства первых и вторых производных в вершинах параболы и гауссианы.

Дополнение 2. Вычисление элементов матрицы системы линейных алгебраических уравнений (9).

1. Введем вспомогательные величины

$$I_k^{ij} = \int\limits_{-\infty}^{\infty} x^k \exp\left[-\frac{(x-x_i)^2}{d_i} - \frac{(x-x_j)^2}{d_j}\right] dx,$$

где k — степень, в которую возведена переменная x; i, j — индексы, обозначающие принадлежности параметра к i-й или j-й гауссиане.

2. Посредством величин I_k^{ij} искомые коэффициенты $\dfrac{\partial^2 I}{\partial \alpha_i \partial \beta_j}$ выражаются следующим образом:

$$\frac{\partial^2 I}{\partial a_i \partial a_j} = 2I_0^{ij}; \quad \frac{\partial^2 I}{\partial a_i \partial x_j} = 4\frac{a_j}{d_j}[I_1^{ij} - x_j I_0^{ij}]; \quad \frac{\partial^2 I}{\partial a_i \partial d_j} = 2\frac{a_j}{d_j^2}[I_2^{ij} - 2x_j I_1^{ij} + x_j^2 I_0^{ij}];$$

$$\frac{\partial^2 I}{\partial x_i \partial x_j} = 8\frac{a_i a_j}{d_i d_j}[I_2^{ij} - (x_i + x_j) I_1^{ij} + x_i x_j I_0^{ij}];$$

$$\frac{\partial^2 I}{\partial d_i \partial x_j} = 4\frac{a_i a_j}{d_i^2 d_j}[I_3^{ij} - (2x_i + x_j) I_2^{ij} + x_i(2x_j + x_i) I_1^{ij} - x_i^2 x_j I_0^{ij}];$$

$$\frac{\partial^2 I}{\partial d_i \partial d_j} = 2\frac{a_i a_j}{d_i^2 d_j^2}[I_4^{ij} - 2(x_i + x_j) I_3^{ij} + (x_i^2 + 4x_i x_j + x_j^2) I_2^{ij} -$$

$$- 2x_i x_j (x_i + x_j) I_1^{ij} + x_i^2 x_j^2 I_0^{ij}].$$

3. Для вычисления I_k^{ij} предлагается итерационная формула:

$$I_n^{ij} = \frac{n-1}{2}\frac{d_i d_j}{d_i + d_j} I_{n-2}^{ij} + \frac{x_i d_j + x_j d_i}{d_i + d_j} I_{n-1}^{ij},$$

$$n = 2,\ 3,\ 4,$$

причем

$$I_0^{ij} = \sqrt{\frac{\pi d_i d_j}{d_i + d_j}} \exp\left[-\frac{(x_i - x_j)^2}{d_i + d_j}\right];$$

$$I_1^{ij} = \frac{x_i d_j + x_j d_i}{d_i + d_j} I_0^{ij}.$$

Список литературы

1. Takakubo K., Wan Woerden H. — Bull. Astr. Inst. Netherlands, 1966, 18, p. 488.
2. Корн Т., Корн Г. Справочник по математике. М., «Наука», 1973, с. 684—686.
3. Полак Э. Численные методы оптимизации. М., «Мир», 1974. 375 с.
4. Демидович Б. П., Марон И. А. Основы вычислительной математики. М., Физматиздат, 1974. 375 с.
5. Агекян Т. А. Теория вероятностей для астрономов и физиков. М., «Наука», 1974. 264 с.