

УДК: 519.7

Эффективный ранг задачи оценивания элемента функционального пространства по измерению с ошибкой конечного числа ее линейных функционалов

А. И. Чуличков^а, Б. Юань^б

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет,
Россия, 119991, ГСП-2, г. Москва, Ленинские горы, МГУ им. М. В. Ломоносова, д. 1, стр. 2

E-mail: ^а achulichkov@gmail.com, ^б yuanboyuan1983@hotmail.com

Получено 12 февраля 2014 г.,
после доработки 10 апреля 2014 г.

Решена задача восстановления элемента f бесконечномерного гильбертова пространства $L^2(X)$ по результатам измерений конечного набора его линейных функционалов, искаженным (случайной) погрешностью без априорных данных об f , получено семейство линейных подпространств максимальной размерности, проекции элемента f на которые допускают оценки с заданной точностью. Эффективный ранг $\rho(\delta)$ задачи оценивания определен как функция, равная максимальной размерности ортогональной составляющей Pf элемента f , которая может быть оценена с погрешностью, не превосходящей δ . Приведен пример восстановления спектра излучения по конечному набору экспериментальных данных.

Ключевые слова: математическая модель измерения, редукция измерения, спектрометрия, оптимальные решения, сингулярное разложение, эффективный ранг

Effective rank of a problem of function estimation based on measurement with an error of finite number of its linear functionals

A. I. Chulichkov, B. Yuan

Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia

Abstract. — The problem of restoration of an element f of Euclidean functional space $L^2(X)$ based on the results of measurements of a finite set of its linear functionals, distorted by (random) error is solved. A priori data aren't assumed. Family of linear subspaces of the maximum (effective) dimension for which the projections of element f to them allow estimates with a given accuracy, is received. The effective rank $\rho(\delta)$ of the estimation problem is defined as the function equal to the maximum dimension of an orthogonal component Pf of the element f which can be estimated with a error, which is not surpassed the value δ . The example of restoration of a spectrum of radiation based on a finite set of experimental data is given.

Keywords: mathematical model of measurement, measurement reduction, spectrometry, optimum decisions, singular decomposition, effective rank

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2014, vol. 6, no.2, pp. 189–202 (Russian).

1. Введение

В экспериментальных исследованиях, как правило, результатом измерения является конечный набор чисел, каждое из которых является значением функционала некоторой искомой функции $f(\cdot): X \rightarrow R^1$, искаженным (случайной) погрешностью. По набору этих функционалов требуется оценить значения функции на области ее определения X .

Типичной является задача, в которых результат измерения имеет вид

$$\xi_i = \int_X a(x, x_i) f(x) dx + v_i, \quad i = 1, \dots, n < \infty, \quad (1.1)$$

где $a_i(\cdot) = a(\cdot, x_i)$, а $a(\cdot, \cdot): X \times X \rightarrow R^1$ — аппаратная функция измерительного прибора, на вход которого подан сигнал $f(\cdot)$, v_i — измерительная погрешность (шум), о которой известны ее статистические характеристики (как правило, с нулевым математическим ожиданием и известными ковариациями). По результату измерения (ξ_1, \dots, ξ_n) требуется восстановить функцию $f(\cdot)$. Такие задачи возникают при анализе и интерпретации данных в оптике [Болтс, 1984, Рут'ев, Чуличков, Sobolev, Antonjuk, 2004], спектрометрии [Митин, Пытьев, Шодмонкулов, 1991], радиовидении [Батова, Пирогов, Чуличков, 2013] и другие [Пытьев, 2012].

В настоящей статье для оценивания функции $f(\cdot)$ используется математический аппарат редукции измерений, данный в теории измерительно-вычислительных систем [Пытьев, 1989, Чуличков, 2000, Пытьев, 2012]. Функция $f(\cdot)$ рассматривается как представитель класса эквивалентных функций, являющихся элементом лебегова пространства $L^2(X)$. Оценка $f(\cdot)$ ищется в классе линейных оценок, иная информация об $f(\cdot)$, кроме присутствующей в измерении (1), не привлекается. В этих условиях оценить функцию $f(\cdot)$ с конечной погрешностью не удастся [Чуличков, Юань, Каримов, Кливаденко, 2012], можно указать лишь конечномерные линейные подпространства $L^2(X)$, проекция на которое может быть оценена с конечной погрешностью. Таким подпространством максимальной размерности является линейная оболочка $L \subset L^2(X)$ элементов $a_i(\cdot) \in L^2(X)$, $i = 1, \dots, n$. Однако оценка проекции $f(\cdot)$ на L сопровождается неприемлемо большой погрешностью. Поэтому в настоящей работе предлагается построить семейство $L_1, \dots, L_k = L$ линейных подпространств размерности $1, 2, \dots, k$, каждое из которых обладает следующим свойством: оценка проекции $f \in L_2(X)$ на подпространство L_m размерности m , $1 \leq m \leq k$, обладает минимальной погрешностью среди всех линейных подпространств пространства $L^2(X)$ размерности m . Здесь $k \leq n$ — размерность линейного подпространства $L \subset L^2(X)$, равная числу линейно независимых элементов $a_i(\cdot) \in L^2(X)$, $i = 1, \dots, n$.

В работе построено это семейство подпространств, исследованы его свойства путем построения функции, ставящей в соответствие требуемой точности оценивания δ , $\delta > 0$, максимальную размерность $\rho(\delta)$ проекции $f(\cdot)$ на подпространство $L_{\rho(\delta)} \subset L^2(X)$, допускающую оценку с данной погрешностью. Для этого используются подходы, данные в работе [Пытьев, 2012]. Функция $\rho(\cdot)$ носит название эффективного ранга задачи линейного оценивания.

В следующем разделе ставится и решается задача оптимального оценивания проекций функции $f \in L_2(X)$ на линейные подпространства, допускающие оценку с конечной погрешностью, для ситуации, когда измерения линейных функционалов сопровождаются некоррелированными погрешностями одинаковой дисперсии. Далее эти результаты обобщаются на погрешность с произвольными ковариациями. В этих разделах погрешность оценки вычисляется как средний квадрат нормы разности оценки и оцениваемой функции, и используется норма пространства $L_2(X)$. Однако часто на практике достаточно оценить значения изучаемой функ-

ции в конечном числе точек ее области определения, при этом контролировать погрешность оценивания как среднюю сумму квадратов отклонения значений оценки и оцениваемой функции во всех выбранных точках области X . Эта задача решена в разделе 4 на основе подходов, данных в разделах 2 и 3. В последнем разделе приведен пример применения предложенного метода к решению задачи восстановления спектра электромагнитного излучения по конечному набору измерений, выполненных на спектрометре с широкой аппаратной функцией.

2. Оценка функции по измерению ее линейных функционалов с некоррелированной погрешностью одинаковой дисперсии

Модель измерения, постановка задачи оценивания. Пусть в эксперименте получены данные согласно схеме

$$\xi_i = (a_i, f) + \nu_i, \quad i = 1, \dots, n < \infty, \quad (2.1)$$

здесь f, a_1, \dots, a_n — элементы гильбертова пространства $L^2(X)$, ν_i — погрешность i -го измерения. Будем считать числа ξ_1, \dots, ξ_n и ν_1, \dots, ν_n координатами векторов $\vec{\xi}$ и $\vec{\nu}$ n -мерного евклидова пространства R^n соответственно, тогда (2.1) можно записать в векторном виде

$$\vec{\xi} = Af + \vec{\nu},$$

где линейный оператор $A: L^2(X) \rightarrow R^n$ каждому элементу $z \in L^2(X)$ ставит в соответствие вектор $Az \in R^n$ с координатами $(Az)_i = (a_i, z)$, $i = 1, \dots, n$. Соответственно, сопряженный ему оператор $A^*: R^n \rightarrow L^2(X)$ любому вектору $\vec{y} = (y_1, \dots, y_n) \in R^n$ ставит в соответствие элемент: $A^*y = \sum_{j=1}^n a_j y_j \in L^2(X)$.

Будем считать известными элементы $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$, вектор $\vec{\xi}$ известен как результат измерений (2.1), вектор $\vec{\nu}$ является случайным вектором R^n , его математическое ожидание равно нулю, $\mathbf{E}\vec{\nu} = 0$, а все координаты некоррелированы и имеют одинаковую дисперсию $\mathbf{E}\nu_i\nu_j = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ \sigma^2, & i = j, \end{cases} \quad i, j = 1, \dots, n$, значение которой σ^2 известно. Элемент $f \in L^2(X)$ априори произволен.

Требуется по результатам измерений (2.1) и заданной математической модели оценить элемент $f \in L^2(X)$. Будем использовать линейные оценки, т. е. такие, которые имеют вид $R_\infty \vec{\xi}$, где $R_\infty \in R^n \rightarrow L^2(X)$ — линейный оператор. Величина погрешности этой оценки определится значением $\sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \|R_\infty \vec{\xi} - f\|^2 \right\}$. Однако при отсутствии априорных данных об элементе f невозможно построить его оценку с конечной погрешностью. Действительно, обозначим $L \subset L^2(X)$ линейную оболочку элементов $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$, и P — оператор ортогонального проецирования на L . Тогда, представив в (2.1) $f = Pf + (I - P)f$ и учитывая, что $(a_i, f) = (a_i, Pf) + (a_i, (I - P)f) = (a_i, Pf)$, заметим, что проекция $(I - P)f$ элемента f на ортогональное дополнение $L^\perp \subset L^2(X)$ не контролируется измерениями (2.1) и при заданном результате ξ_1, \dots, ξ_n может принимать любые значения. Тем самым, $\sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \|R_\infty \vec{\xi} - f\|^2 \right\} = +\infty$ при любом $R_\infty \in R^n \rightarrow L^2(X)$.

Поэтому будем оценивать лишь составляющую $Pf \in L$.

Оценку $R\bar{\xi}$, $R \in R^n \rightarrow L \subset L^2(X)$, проекции $Pf \in L$ построим, выбирая линейный оператор $R = R_*$, где R_* минимизирует погрешность оценки $H(R) = \sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \|R\bar{\xi} - Pf\|^2 \right\}$:

$$R_* = \arg \min_{R \in R^n \rightarrow L} \sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \|R\bar{\xi} - Pf\|^2 \right\}. \quad (2.2)$$

Определение 1. Оценка $R_*\bar{\xi}$, где $R_* \in R^n \rightarrow L$ есть решение задачи (2.2), назовем оптимальной в среднем квадратичном (с. к.) оценкой проекции $Pf \in L$ по измерениям (2.1).

Решение задачи оценивания. Построим ортонормированные базисы пространств R^n и L , для чего рассмотрим конечномерный самосопряженный линейный оператор $B = AA^* : R^n \rightarrow R^n$, матричные элементы его матрицы равны $B_{ij} = (a_i, a_j)$, $i, j = 1, \dots, n$, и решим полную задачу на собственные значения

$$B\bar{e}_i = \beta_i^2 \bar{e}_i,$$

где собственные числа упорядочены по невозрастанию, $\beta_1^2 \geq \beta_2^2 \geq \dots \geq \beta_k^2 > \beta_{k+1}^2 = \dots = \beta_n^2 = 0$, а собственные векторы $\{\bar{e}_i\} \subset R^n$ образуют ортонормированный базис R^n . Ему соответствует ортонормированный базис $\{g_i\} \subset L$, где $A^*\bar{e}_i = \beta_i g_i$, $i = 1, \dots, k$, причем, если $k < n$, то векторы a_1, \dots, a_n линейно зависимы и размерность их линейной оболочки L равна $k < n$ [Чуличков, 2000]. По сути, базисы $\{\bar{e}_i\} \subset R^n$ и $\{g_i\} \subset L$ являются сингулярными базисами линейного оператора $A : L^2(X) \rightarrow R^n$, а числа β_1, \dots, β_n — его сингулярными числами.

Запишем общий вид линейного оператора $R \in R^n \rightarrow L$, указав правило его действия на любой вектор базиса $\{\bar{e}_i\} \subset R^n$: $R\bar{e}_m = r_m \in L$, $m = 1, \dots, n$, или в ортонормированном базисе $\{g_i\} \subset L$

$$R\bar{e}_m = r_m = \sum_{j=1}^k (r_m, g_j) g_j, \quad m = 1, \dots, n. \quad (2.3)$$

Отсюда, представляя $Pf = \sum_{m=1}^k (f, g_m) g_m$, получим

$$Af = \sum_{m=1}^n (APf, \bar{e}_m) \bar{e}_m = \sum_{m=1}^n (Pf, A^*\bar{e}_m) \bar{e}_m = \sum_{m=1}^k \beta_m (f, g_m) \bar{e}_m,$$

и, наконец,

$$R\bar{\xi} - Pf = (RA - P)f + R\bar{v} = \sum_{m=1}^k (f, g_m) \sum_{j=1}^k (\beta_m (r_m, g_j) g_j - g_m) + \sum_{m=1}^n r_m v_m,$$

что позволяет записать величину погрешности $H(R)$ оценки $R\bar{\xi}$ для любого $R \in R^n \rightarrow L$ как

$$H(R) = \sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \|R\bar{\xi} - Pf\|^2 \right\} = \sup_{f \in L} \left\| \sum_{m=1}^k (f, g_m) \sum_{j=1}^k (\beta_m (r_m, g_j) g_j - g_m) \right\|^2 + \sigma^2 \sum_{m=1}^n \|r_m\|^2. \quad (2.4)$$

Поскольку $f \in L$ произволен, то числа (f, g_m) , $m = 1, \dots, n$, могут принимать любые значения, и поэтому точная верхняя грань в первом слагаемом правой части (2.4) равна $+\infty$, если не выполнены равенства

$$\sum_{j=1}^k (\beta_m (r_m, g_j) g_j - g_m) = 0, \quad m = 1, \dots, n,$$

что верно тогда и только тогда, когда

$$(r_m, g_j) = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ \frac{1}{\beta_m}, & m = j \leq k, \end{cases} \quad m=1, \dots, n, \quad j=1, \dots, k. \quad (2.5)$$

Нетрудно заметить, что линейный оператор R_* , определенный формулами (2.3) и (2.5) единственным образом, является оператором $A^{-1} : R^n \rightarrow L$, псевдообратным конечномерному сужению $[A] : L \rightarrow R^n$ оператора $A : L^2(X) \rightarrow R^n$ на $L \rightarrow R^n$, [Пытьев, 2012, Чуличков, 2000].

При выполнении (2.5) оценка элемента Pf равна

$$Pf \hat{=} R_* \bar{\xi} = \sum_{m=1}^k \frac{(\bar{\xi}, \bar{e}_m)}{\beta_m} g_m, \quad (2.6)$$

а ее погрешность равна

$$H(R_*) = \sigma^2 \sum_{m=1}^n \left\| \sum_{j=1}^k (r_m, g_j) g_j \right\|^2 = \sum_{m=1}^k \frac{\sigma^2}{\beta_m^2}. \quad (2.7)$$

Из (2.7) видно, что в погрешность оценивания больший вклад вносят те составляющие $\frac{(\bar{\xi}, \bar{e}_m)}{\beta_m} g_m$ сигнала $R_* \bar{\xi}$ в (2.6), для которых сингулярные числа β_m малы.

Сформулируем полученные результаты.

Лемма 1. При заданной модели измерения (2.1) оптимальная в с. к. оценка проекции $Pf \in L$ по измерениям (2.1) дается формулой (2.6), а сопутствующая ей погрешность — формулой (2.7).

Утверждение леммы 1 можно получить как частный случай решения задачи редукции в бесконечномерных гильбертовых пространствах [Пытьев, 1989], однако представление этого решения в сингулярных базисах $\{\bar{e}_i\} \subset R^n$ и $\{g_i\} \subset L$ удобно для исследования оценок (2.6), проведенного в следующем пункте.

Эффективный ранг оценки. Часто на практике погрешность (2.7) оптимальной в с. к. линейной оценки (2.5) неприемлемо велика. Один из способов снижения погрешности оценки состоит в сокращении размерности оцениваемой проекции элемента f уменьшением числа слагаемых в сумме в (2.6) путем удаления тех из них, которым соответствуют наибольшие слагаемые в погрешности (2.7).

Действительно, поскольку $\bar{\xi} = \sum_{m=1}^k \beta_m (f, g_m) \bar{e}_m + \sum_{m=1}^k (\bar{v}, \bar{e}_m) \bar{e}_m$, то из (2.6) следует

$$Pf \hat{=} R_* \bar{\xi} = \sum_{m=1}^k (f, g_m) g_m + \sum_{m=1}^k \frac{(\bar{v}, \bar{e}_m)}{\beta_m} g_m = Pf + R_* \bar{v}, \quad \text{то есть оценка } R_* \bar{\xi} \text{ есть сумма истинного}$$

значения проекции Pf и случайного вектора $R_* \bar{v}$, определяющего погрешность оценки $Pf \hat{=}$, обладающего нулевым математическим ожиданием. Координаты вектора $R_* \bar{v}$ в ортонормированном базисе $\{g_i\} \subset L$ равны $\frac{(\bar{v}, \bar{e}_m)}{\beta_m}$, некоррелированы и обладают дисперсиями $\frac{\sigma^2}{\beta_m^2}$,

$m=1, \dots, k$, то есть являются координатами случайного вектора $R_* \bar{v}$ в его собственном базисе Карунена–Лозва. Этот базис обладает следующим свойством: для $m \leq k$ средний квадрат дли-

ны проекции вектора $R_*\vec{v}$ на любое m -мерное подпространство $\tilde{L}_m \subset L$ не меньше среднего квадрата длины его проекции на линейную оболочку векторов базиса Карунена–Лоэва, для которых дисперсия координат вектора $R_*\vec{v}$ максимальна [Пытьев, 2012]; в частности, на этом свойстве основан метод главных компонент. В рассматриваемом случае $\beta_1^2 \geq \beta_2^2 \geq \dots \geq \beta_k^2 > \beta_{k+1}^2 = \dots = \beta_n^2 = 0$, поэтому дисперсии координат вектора $R_*\vec{v}$ в базисе $\{g_l\} \subset L$ упорядочены согласно неравенству $\frac{\sigma^2}{\beta_1^2} \leq \frac{\sigma^2}{\beta_2^2} \leq \dots \leq \frac{\sigma^2}{\beta_k^2}$. Следовательно, m -мерное линейное подпространство пространства L , проекция $R_*\vec{v}$ на которое имеет минимальный средний квадрат длины, есть $L_m = \left\{ x = \sum_{l=1}^m \phi_l g_l, \phi_l \in (-\infty, \infty), l = 1, \dots, m \right\}$. Если мы хотим отыскать линейное подпространство L размерности m , в котором составляющая погрешности $R_*\vec{v}$ оценки $P\hat{f}$ минимально, то таким подпространством будет L_m , $1 \leq m \leq k$.

Таким образом, с каждым значением размерности m связана минимальная погрешность оптимальной в с. к. линейной оценки m -мерной проекции $P_m f \subset L$ элемента $f \in L^2(X)$ по измерениям (2.1). И наоборот, задав погрешность δ , можно определить максимальную размерность проекции $P_m f \subset L$ элемента $f \in L_2(X)$, оптимальная в с. к. линейная оценка которой сопровождается погрешностью не большей, чем δ . Следуя работе [Пытьев, 2012], определим понятие эффективного ранга задачи (2.2) следующим образом:

Определение 2. Эффективным рангом задачи линейного наилучшего в с. к. оценивания вектора $f \in L^2(X)$ по измерениям (2.1) назовем функцию, для каждого $\delta > 0$ определяющую максимальную размерность $\rho(\delta)$ проекции элемента $f \in L^2(X)$, которую можно оценить с погрешностью, не большей δ .

Для заданного $\delta > 0$ значение $\rho(\delta)$ эффективного ранга дается формулой

$$\rho(\delta) = \max \left\{ m : \sum_{l=1}^m \frac{\sigma^2}{\beta_l^2} \leq \delta \right\}.$$

Алгоритм вычисления эффективного ранга $\rho(\delta)$ состоит в следующем:

1. На первом шаге полагаем $S = \frac{\sigma^2}{\beta_1^2}$, $m = 0$.
2. Если $S > \delta$, то $\rho(\delta) = p$. Алгоритм заканчивает работу.
3. Если $S \leq \delta$, то $m = m + 1$. Если $m = k$, то эффективный $\rho(\delta) = k$, алгоритм заканчивает свою работу. Иначе $S = S + \frac{\sigma^2}{\beta_m^2}$, и алгоритм возвращается к пункту 2.

Таким образом, функция $\rho(\delta)$, $\delta > 0$, есть целочисленная кусочно-постоянная функция, равная нулю для $0 < \delta < \frac{\sigma^2}{\beta_1^2}$, монотонно возрастающая, имеет разрывы, равные единице, в точ-

ках $\frac{\sigma^2}{\beta_1^2}, \frac{\sigma^2}{\beta_2^2} + \frac{\sigma^2}{\beta_1^2}, \dots, \sum_{l=1}^k \frac{\sigma^2}{\beta_l^2}$.

Задавшись приемлемым уровнем погрешности $\delta_0 > 0$, вычислим эффективный ранг $\rho(\delta_0)$. Значение $\rho(\delta_0)$ равно максимальной размерности проекции искомого вектора, которую можно

оценить с погрешностью, не большей $\delta_0 > 0$. Оценка этой составляющей равна

$$P_{\rho(\delta_0)} \hat{f} = R_{*\rho(\delta_0)} \bar{\xi} = \sum_{l=1}^{\rho(\delta_0)} \frac{(\bar{\xi}_l, \bar{e}_m)}{\beta_m} g_m, \quad (2.8)$$

а ее погрешность равна

$$H(R_{*\rho(\delta_0)}) = \sum_{l=1}^{\rho(\delta_0)} \frac{\sigma^2}{\beta_m^2}. \quad (2.9)$$

3. Оценка функции по измерению ее линейных функционалов со случайной погрешностью с заданным корреляционным оператором общего вида

Рассмотренный в предыдущем разделе случай с равноточными измерениями (2.1) является частным, хотя и достаточно важным. В общем случае вектор $\vec{v} \in R^n$ погрешности измерений обладает следующими свойствами: его математическое ожидание равно нулю, $\mathbf{E} \vec{v} = 0$, и заданы ковариации его координат: $\mathbf{E} v_i v_j = \Sigma_{ij}$, $i, j = 1, \dots, n$, определяющие квадратную самосопряженную положительно определенную матрицу Σ . Она является матрицей корреляционного оператора случайного вектора $\vec{v} \in R^n$. Чтобы привести эту модель случайной погрешности к рассмотренной в предыдущем разделе, проведем стандартную операцию «выбеливания» шума \vec{v} . Для этого определим самосопряженный положительно определенный квадратный корень $\Sigma^{-1/2} : R^n \rightarrow R^n$ из $\Sigma^{-1} : R^n \rightarrow R^n$ как матрицу, удовлетворяющую условию $\Sigma^{-1/2} \Sigma^{-1/2} = \Sigma^{-1}$, здесь Σ^{-1} — матрица, обратная Σ (в частности, если погрешности измерений v_1, v_2, \dots, v_n в (2.1) некоррелированы и обладают различными дисперсиями $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2$, то матрицы Σ и $\Sigma^{-1/2}$ диагональные, $\Sigma = \text{diag}(\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2)$, $\Sigma^{-1/2} = \text{diag}(\sigma_1^{-1/2}, \sigma_2^{-1/2}, \dots, \sigma_n^{-1/2})$). Если подействовать на вектор $\vec{v} \in R^n$ матрицей $\Sigma^{-1/2}$, получим случайный вектор $\vec{\mu} = \Sigma^{-1/2} \vec{v} \in R^n$ с нулевым математическим ожиданием и единичной матрицей ковариаций [Пытьев, 2012], т. е. координаты вектора $\vec{\mu}$ являются некоррелированными и имеют дисперсии, равные единице.

Если теперь подействовать матрицей $\Sigma^{-1/2}$ на обе части равенства $\bar{\xi} = Af + \vec{v}$ и обозначить $\vec{\eta} = \Sigma^{-1/2} \bar{\xi}$, $Q = \Sigma^{-1/2} A$, то равенство (2.1) запишется в эквивалентном виде

$$\vec{\eta} = Qf + \vec{\mu}. \quad (3.1)$$

Измерение (3.1) описывается математической моделью, в которой элемент $f \in L^2(X)$ априори произволен, заданы линейный оператор $D : L^2(X) \rightarrow R^n$ и вектор $\vec{\eta}$, а вектор $\vec{\mu}$ — случайный вектор R^n с математическим ожиданием $\mathbf{E} \vec{\mu} = 0$, все его координаты некоррелированы и имеют дисперсию, равную единице: $\mathbf{E} \mu_i \mu_j = \begin{cases} 0, & i \neq j, \\ 1, & i = j, \end{cases} i, j = 1, \dots, n$. Таким образом, задача оценивания $f \in L^2(X)$ свелась к задаче, рассмотренной в предыдущем разделе.

Используя этот факт, сформулируем общие утверждения, позволяющие строить оптимальные оценки проекций элемента $f \in L^2(X)$ на конечномерные линейные подпространства $L^2(X)$ по измерениям, проведенным по схеме (2.1), в которой погрешность $\vec{v} = (v_1, \dots, v_n)$ имеет невырожденную матрицу ковариации Σ . Пусть M_* есть некоторое конечномерное линейное подпространство $L^2(X)$ и требуется построить линейную оценку $\tilde{R} \bar{\xi}$ проекции $P_* f$

элемента $f \in L^2(X)$ на M_* , определив линейный оператор $\tilde{R} \in R^n \rightarrow M_* \subset L^2(X)$ из задачи на минимум

$$\tilde{R} = \arg \min_{R \in R^n \rightarrow M_*} \sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \left\| R \tilde{\xi} - P_* f \right\|^2 \right\}. \quad (3.2)$$

Теорема 1. Пусть $\{\vec{d}_i\} \subset R^n$ — ортонормированный базис из собственных векторов оператора $D = \Sigma^{-1/2} A A^* \Sigma^{-1/2} : R^n \rightarrow R^n$, отвечающих собственным числам, упорядоченным по невозрастанию, так, что $D_i \vec{d}_i = \gamma_i^2 \vec{d}_i$, $\gamma_1^2 \geq \gamma_2^2 \geq \dots \geq \gamma_k^2 > \gamma_{k+1}^2 = \dots = \gamma_n^2 = 0$, M — линейная оболочка элементов $\Sigma^{-1/2} a_1, \dots, \Sigma^{-1/2} a_n$ и $q_i = \gamma_i A^* \Sigma^{-1/2} \vec{d}_i$, $i = 1, \dots, k$, и тогда:

1. линейное подпространство M есть k -мерное линейное подпространство $L^2(X)$, $\{q_i\}$ — его ортонормированный базис;
2. линейная оценка $\tilde{R} \tilde{\xi}$ проекции $P_* f$ элемента $f \in L^2(X)$ на M_* , где $\tilde{R} \in R^n \rightarrow M_*$ есть решение задачи (3.2), обладает конечной погрешностью тогда и только тогда, когда $M_* \subseteq M$;
3. последовательность вложенных линейных подпространств $M_1 \subset M_2 \subset \dots \subset M_k = M$, где M_m определено как линейная оболочка базисных элементов q_1, \dots, q_m , обладает следующим экстремальным свойством: погрешность линейной оценки $\tilde{R}_m \tilde{\xi}$ проекции $P_m f$ элемента $f \in L^2(X)$ на M_m , где $\tilde{R}_m \in R^n \rightarrow M_m$ есть решение задачи

$$\tilde{R}_m = \arg \min_{R \in R^n \rightarrow M_m} \sup_{f \in L^2(X)} \left\{ \mathbf{E} \left\| R \tilde{\xi} - P_m f \right\|^2 \right\},$$

минимальна среди всех оценок проекции $\Pi_m f$ элемента $f \in L^2(X)$ на любое линейное подпространство $L^2(X)$ той же размерности m , $m = 1, 2, \dots, k$;

4. оценки $\tilde{R}_m \tilde{\xi}$ и их погрешности даются формулами

$$\tilde{R}_m \tilde{\xi} = \sum_{l=1}^m \frac{(\Sigma^{-1/2} \xi, \vec{d}_l)}{\gamma_l} q_l, \quad H(\tilde{R}_m) = \sum_{l=1}^m \frac{1}{\gamma_l^2}; \quad (3.3)$$

5. эффективный ранг задачи линейного наилучшего в с. к. оценивания вектора $f \in L^2(X)$ по измерениям (2.1) равен $\rho(\delta) = \max \left\{ m : \sum_{l=1}^m \frac{1}{\gamma_l^2} \leq \delta \right\}$.

Доказательство. Так как модель измерения, проведенного по схеме (3.1), обладает всеми свойствами, требуемыми в лемме 1, то утверждения теоремы следуют из фактов, установленных в предыдущем разделе при замене $\tilde{\xi}$ на $\Sigma^{-1/2} \tilde{\xi}$, A на $\Sigma^{-1/2} A$ и при $\sigma^2 = 1$.

4. Оценка значений функции в заданных точках ее области определения

В двух предыдущих разделах настоящей статьи решена задача оценивания проекции элемента $f \in L^2(X)$ на конечномерное линейное подпространство $L^2(X)$. Полученная оценка (2.6) определяется как конечная линейная комбинация элементов из $L^2(X)$. Однако представление элементов $L^2(X)$ на числовых компьютерах является проблематичным. С практической точки

зрения важно уметь вычислять значения оценки в конечном числе точек области X . Однако так как элементом $L^2(X)$ является класс функций, совпадающих почти всюду на X , то его значение в заданной точке X не определено. В этом разделе считается, что элементы $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$ линейно независимы и заданы своими представителями $a_i(\cdot): X \rightarrow R^1$, являющимися кусочно-непрерывными функциями. Это позволяет определить значение их линейной комбинации в точке непрерывности всех функций $a_i(\cdot): X \rightarrow R^1$, $i=1, \dots, n$.

В настоящем разделе, в отличие от подходов разделов 2 и 3, предлагается оценивать вектор конечномерного евклидова пространства R^N , координаты которого суть значения проекции f на $L_m \subseteq L \subset L^2(X)$ в заданном числе точек x_1, \dots, x_N из X . Погрешность этих оценок вычисляется в метрике пространства R^N , зависит от выбора точек x_1, \dots, x_N , равна сумме дисперсий погрешности оценки в точках x_1, \dots, x_N .

Пусть так же, как и в разделе 2, P — оператор ортогонального проецирования на линейную оболочку L элементов $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$, причем a_1, \dots, a_n линейно независимы. Так как $Pf \in L$, то Pf представим в виде разложения по элементам $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$: $Pf = \sum_{j=1}^n a_j f_j$, с коэффициентами f_1, \dots, f_n , которые будем рассматривать как коэффициенты вектора $\vec{f} \in R^n$. Определим значение проекции $Pf \in L$ в точках x_1, \dots, x_N непрерывности функций $a_i(\cdot): X \rightarrow R^1$ как значение

$$(Pf)(x_i) = \sum_{j=1}^n a_j(x_i) f_j. \quad (4.1)$$

Как было показано выше, в схеме измерений $\vec{\xi} = Af + \vec{v}$ вместо f можно использовать $Pf = \sum_{j=1}^n a_j f_j$, что приведет к следующей схеме измерений:

$$\vec{\xi} = B\vec{f} + \vec{v}, \quad (4.2)$$

где матрица линейного оператора $B \in (R^n \rightarrow R^N)$ имеет матричные элементы $B_{ij} = (a_i, a_j)$, $i, j=1, \dots, n$, и обратима, так как $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$ линейно независимы. Задача теперь свелась к тому, чтобы оценить значения координат $(Pf)(x_1), \dots, (Pf)(x_N)$ вектора $\vec{u} = ((Pf)(x_1), \dots, (Pf)(x_N)) \in R^N$ по результату измерения (4.2). Согласно (4.1), вектор $\vec{u} \in R^N$ связан с $\vec{f} \in R^n$ соотношением $\vec{u} = U\vec{f} \in R^N$, где матричные элементы матрицы $U \in (R^n \rightarrow R^N)$ есть $U_{ij} = a_j(x_i)$, $i=1, \dots, N$, $j=1, \dots, n$.

Задача поиска оптимальной в среднем квадратичном линейной оценки $\hat{u} = \hat{R}\vec{\xi}$ вектора $\vec{u} = U\vec{f} \in R^N$ по результату измерения (4.2) так же, как и выше, состоит в поиске линейного оператора $\hat{R}: R^N \rightarrow R^N$ как решения задачи

$$\hat{R} = \arg \min_{R \in R^N \rightarrow R^N} \sup_{\vec{f} \in R^N} \left\{ \mathbf{E} \left\| R\vec{\xi} - U\vec{f} \right\|^2 \right\}. \quad (4.3)$$

Решением (4.3) является линейный оператор $\hat{R} = UB^{-1}$, а оценка вектора $\vec{u} = U\vec{f}$ равна $\hat{u} = UB^{-1}\vec{\xi}$ и сопровождается погрешностью $H(\hat{R}) = \text{tr}U(B\Sigma^{-1}B)^{-1}U^*$ [Пытьев, 2012].

Для снижения этой погрешности найдем вложенные семейства линейных подпространств \hat{L}_m пространства R^N , обладающих следующим свойством: для каждого $m=1, \dots, k$ проекция $\hat{P}_m \bar{u}$ вектора \bar{u} на линейное пространство \hat{L}_m размерности m оценивается с погрешностью, не большей погрешности оценки этой проекции на любое другое линейное подпространство R^N такой же размерности.

Так как $\hat{u} = \bar{u} + UB^{-1}\bar{v}$, то оценка вектора \bar{u} сопровождается погрешностью, моделируемой случайным вектором $UB^{-1}\bar{v}$ с корреляционным оператором $UB^{-1}\Sigma^{1/2}(UB^{-1}\Sigma^{1/2})^*$, а значит, искомые линейные подпространства \hat{L}_m есть линейные оболочки собственных векторов линейного самосопряженного оператора $UB^{-1}\Sigma^{1/2}(UB^{-1}\Sigma^{1/2})^*$, отвечающих его наименьшим ненулевым собственным числам.

Построим эффективный ранг задачи линейного наилучшего в с. к. оценивания вектора $\bar{u} \in R^N$ по измерениям (2.1). Для этого рассмотрим линейный оператор $UB^{-1}\Sigma^{1/2} \in R^n \rightarrow R^N$. Так как операторы Σ и B невырождены, то его ранг k равен рангу оператора U , и не может быть больше, чем $\min\{N, n\}$. Запишем его сингулярные базисы $\{\bar{s}_\mu\} \subset R^N$ и $\{\bar{q}_\lambda\} \subset R^n$ сингулярные числа $\alpha_1, \dots, \alpha_{\max\{n, N\}}$ как решения задач на собственные значения:

$$\begin{aligned} UB^{-1}\Sigma^{1/2}(UB^{-1}\Sigma^{1/2})^*\bar{s}_\mu &= \alpha_\mu^2\bar{s}_\mu, \quad \mu=1, \dots, N, \\ (UB^{-1}\Sigma^{1/2})^*UB^{-1}\Sigma^{1/2}\bar{q}_\mu &= \alpha_\mu^2\bar{q}_\mu, \quad \mu=1, \dots, N, \\ \alpha_1 &\geq \alpha_2 \geq \dots \geq \alpha_k > \alpha_{k+1} = \dots = \alpha_{\max\{n, N\}} = 0, \end{aligned} \quad (4.4)$$

где $k \leq \min\{N, n\}$. Связь между векторами сингулярных базисов, отвечающих ненулевым сингулярным числам, дается формулами

$$(UB^{-1}\Sigma^{1/2})^*\bar{s}_\lambda = \alpha_\lambda\bar{q}_\lambda, \quad (UB^{-1}\Sigma^{1/2})\bar{q}_\lambda = \alpha_\lambda\bar{s}_\lambda, \quad \lambda=1, \dots, k. \quad (4.5)$$

Согласно (4.4), ортонормированный базис $\{\bar{s}_\mu\} \subset R^N$ является базисом Карунена–Лозва случайного вектора $UB^{-1}\bar{v}$, поэтому эффективный ранг задачи оптимального оценивания вектора \bar{u} равен $\rho(\delta) = \max\left\{\mu: \sum_{l=k-\mu+1}^k \alpha_l^2 \leq \delta\right\}$, а оптимальная оценка проекции вектора $\bar{u} \in R^N$ на \hat{L}_m имеет вид

$$\hat{u}_m = \sum_{j=k-m+1}^k (\bar{s}_j, UB^{-1}\bar{\xi})\bar{s}_j \quad (4.6)$$

и сопровождается ошибкой $H(\hat{R}_m) = \sum_{l=k-m+1}^k \alpha_l^2$, $m=1, 2, \dots, k$.

Замечание 4.1. В этом разделе суммирование в определении эффективного ранга ведется в порядке, обратном к порядку, определенному в теореме 1, так как дисперсии координат вектора погрешности здесь упорядочены в обратном порядке.

Замечание 4.2. При вычислении эффективного ранга в случае $k < N$ не учитываются нулевые собственные числа оператора $UB^{-1}\Sigma^{1/2}(UB^{-1}\Sigma^{1/2})^*$, поскольку проекция вектора $\bar{u} \in R^N$ на векторы $\bar{s}_{k+1}, \dots, \bar{s}_N$ также равна нулю, то есть в направлениях $\bar{s}_{k+1}, \dots, \bar{s}_N$ нет не только случайной (шумовой) составляющей оценки \hat{u} , но и полезного сигнала. Покажем это, записав разложение вектора оценки $\hat{u} = UB^{-1}\bar{\xi}$ по векторам ортонормированного базиса $\{\bar{q}_\lambda\} \subset R^n$ и учтем

соотношения (4.5):

$$\hat{u} = UB^{-1}\Sigma^{1/2}(\Sigma^{-1/2}\bar{\xi}) = UB^{-1}\Sigma^{1/2} \sum_{j=1}^n (\bar{q}_j, \Sigma^{-1/2}\bar{\xi}) \bar{q}_j = \sum_{j=1}^k (\bar{q}_j, \Sigma^{-1/2}\bar{\xi}) \alpha_j \bar{s}_j.$$

Значит, как оценка $\hat{u} = UB^{-1}\bar{\xi}$, так и их проекции (4.6), не имеют составляющих вдоль $\bar{s}_{k+1}, \dots, \bar{s}_N$.

Замечание 4.3. Как для вычисления оценок проекций элемента $f \in L^2(X)$ на \hat{L}_m в точках x_1, \dots, x_N , так и для вычисления эффективного ранга используется вычислительная процедура, в которой дискретизация исходной бесконечномерной задачи осуществляется выбором конечномерных базисов используемых линейных подпространств, точность дискретизации определяется точностью вычисления матричных элементов $B_{ij} = (a_i, a_j)$ линейного оператора $B \in (R^n \rightarrow R^n)$. Значения (a_i, a_j) могут быть вычислены либо аналитически, либо численно с контролируемой точностью.

5. Оценка спектра излучения по данным спектроскопии

Метод, предложенный выше, применялся для редукции измерений интенсивности излучения газоразрядной лампы на длинах волн в окрестности эмиссионного спектра D -линии натрия (дублета с положением максимумов $\lambda_1 = 588.9950$ нм и $\lambda_2 = 589.5924$ нм). Измерения проводились на двухлучевом спектрометре, ширины щелей спектрометра были выбраны так, чтобы аппаратная функция имела трапецевидную форму [Лебедева, 2005]. График аппаратной функции $a(\lambda)$ на интервале от $\lambda = -1$ нм до $\lambda = 1$ нм приведен на рисунке 1, слева (один отсчет по горизонтальной оси соответствует 0.01 нм).

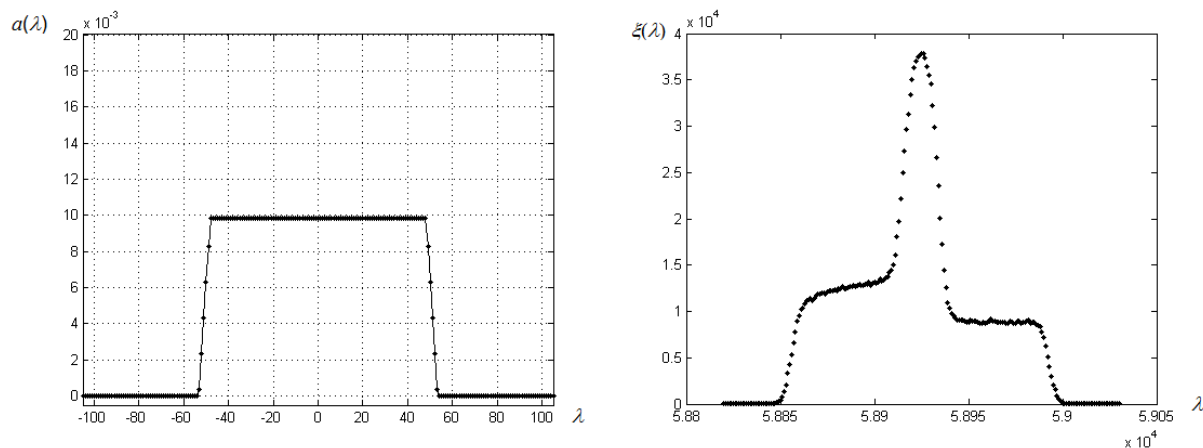


Рис. 1. Слева — график аппаратной функции $a(\lambda)$ двухщелевого спектрометра на интервале длин волн от -1 нм до 1 нм, шаг 0.01 нм, справа — результат измерения спектра излучения на длинах волн от 588.20 нм до 590.30 нм, по вертикальной оси отложено число зарегистрированных фотонов

Спектр измерялся согласно схеме измерения

$$\xi(\lambda_i) = \int_{-\infty}^{\infty} a(\lambda - \lambda_i) f(\lambda) d\lambda + v_i, \quad i = 1, \dots, n,$$

в которой длины волн $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{211}$ изменялись от 588.20 нм до 590.30 нм с шагом 0.01 нм. Результат измерения спектра — вектор с координатами $(\xi(\lambda_1), \dots, \xi(\lambda_{211}))$ — изображен на рис. 1,

справа. Здесь по горизонтальной оси отложены значения 211 длин волн, в которых измерялся спектр, по вертикальной оси отложена интенсивность измеренного спектра, равная числу зарегистрированных фотонов. Ширина аппаратной функции существенно больше ширины линий дублета, в измеренном спектре они не разрешены.

Значение длин волн, в которых оценивалось значение входного спектра, были выбраны на отрезке от 588.86 до 589.63 нм с шагом 0.01 нм, таким образом, оцениваемый вектор имеет размерность 75: $\vec{u} = (f(\lambda_1), \dots, f(\lambda_{75})) \in R^{75}$.

В математической модели спектрометрического эксперимента матричные элементы $(AA^*)_{ij} = \int_{-\infty}^{\infty} a(\lambda - \lambda_i)a(\lambda - \lambda_j)d\lambda$ матрицы линейного оператора $AA^* : R^{211} \rightarrow R^{211}$ вычислялись точно, а ковариационный оператор погрешности был выбран в виде $\Sigma = \text{diag}(\xi(\lambda_1), \dots, \xi(\lambda_{211}))$, что соответствует некоррелированной погрешности с дисперсией, соответствующей пуассоновскому шуму.

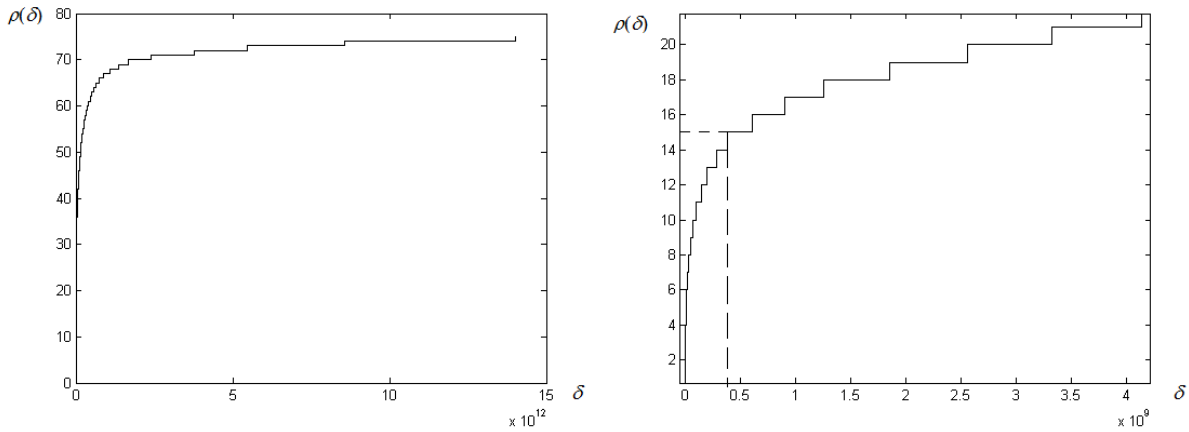


Рис. 2. Слева — график эффективного ранга задачи (4.3) для $\rho(\delta) \in [0, 75]$, справа в более крупном масштабе показана часть этого графика для $\rho(\delta) \in [0, 22]$

На рисунке 2, слева, приведен график эффективного ранга задачи оптимального оценивания спектра излучения $\vec{u} \in R^{75}$. Видно, что при оценке всех 75 составляющих вектора \vec{u} значенный спектра величина погрешности $H(\hat{R})$ равна $1,4 \cdot 10^{13}$ кв. фотонов. Эта погрешность настолько велика, что спектр не виден на фоне шумовой погрешности, см. рисунок 3, слева, на котором приведен график оценки $\hat{R}\vec{\xi} = UB^{-1}\vec{\xi}$ спектра на основе всех 75 составляющих оцениваемого сигнала.

На рисунке 2, справа, в более крупном масштабе приведен участок графика, изображенного на рисунке 2, слева. Значение эффективного ранга, равное 15, достигается при погрешности $3,8 \cdot 10^8$ кв. фотонов. График оценки $\hat{R}_{15}\vec{\xi}$ проекции вектора \vec{u} на 15-мерное линейное подпространство $\hat{L}_{15} \subset R^{75}$ приведен на рисунке 3, справа.

6. Заключение

В работе предложен метод, позволяющий указать предельные возможности оценивания функции $f(\cdot) \in L^2(X)$ по измерениям значений конечного числа ее линейных функционалов (a_i, f) , $i = 1, \dots, n$, выполненных с погрешностью. Показано, что оценить с конечной погрешностью можно лишь значения ортогональной проекции элемента $f(\cdot)$ на линейную оболочку

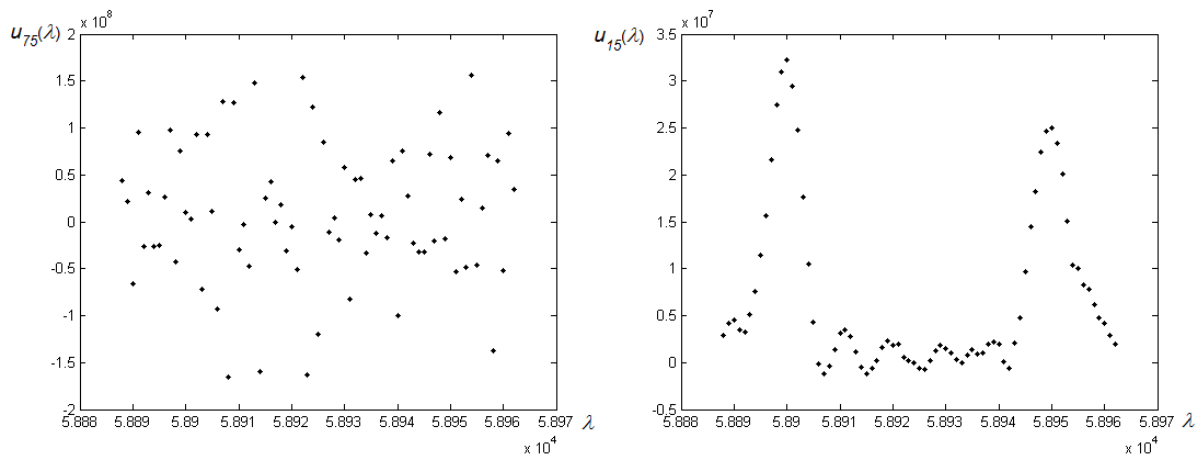


Рис. 3. Слева — график оценки $\hat{u} = UB^{-1}\bar{\zeta}$, в которой учтены все 75 составляющих оцениваемого сигнала, справа — оценка спектра \hat{u}_{15} , см. (4.5)

$L \subset L^2(X)$ элементов $a_1, \dots, a_n \in L^2(X)$, получена оценка этой погрешности. Для уменьшения погрешности оценивания предложено оценивать проекцию на линейное подпространство $L_m \subset L$ размерности m , меньшей, чем размерность L , обладающее экстремальным свойством: погрешность оценки проекции $f \in L^2(X)$ на L_m не больше, чем погрешность оценки проекции $f \in L^2(X)$ на любое линейное подпространство $L^2(X)$ той же размерности m . Даны метод вычисления оценки указанной проекции и способ выбора размерности m на основе эффективного ранга задачи оценивания, определенного как функция $\rho(\cdot): R_+ \rightarrow \{1, 2, \dots, n\}$, для каждого $\delta > 0$ определяющая максимальную размерность $\rho(\delta)$ проекции элемента $f \in L^2(X)$, которую можно оценить с погрешностью, не большей δ . Приведен пример интерпретации данных спектрометрического эксперимента.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, проекты № 12-01-96501 и 14-07-00409.

Список литературы

- Батова С. С., Пирогов Ю. А., Чуличков А. И. Сверхразрешение в системах пассивного радиовидения // В кн. «Сборник тезисов докладов научно-технической конференции «Гиперспектральные приборы и технологии». — Красногорск, 17–18 января 2013 г. — С. 140–141.
- Болтс Г. П. Обратные задачи в оптике. — М.: Машиностроение, 1984. — 200 с.
- Деммель Дж. Вычислительная линейная алгебра. Теория и приложения. — М.: УРСС, 2001. — 430 с.
- Лебедева В. В. Экспериментальная оптика. 4-е изд. — М.: Физический факультет МГУ имени М. В. Ломоносова, 2005. — 282 с.
- Митин И. В., Пытьев Ю. П., Шодмонкулов Т. Д. Метод максимальной надежности в задаче синтеза и интерпретации спектрометрических измерений // Матем. моделирование. — 1991. — Т. 3, № 12. — С. 31–37.
- Пытьев Ю. П. Математические методы интерпретации эксперимента. — М.: Высш. школа, 1989. — 351 с.
- Пытьев Ю. П. Методы математического моделирования измерительно-вычислительных систем. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2012. — 428 с.

Чуличков А. И. Основы теории измерительно-вычислительных систем. — Тамбов, Изд-во Тамбовского тех. ун-та, 2000. — 144 с.

Чуличков А. И., Юань Б., Каримов К. М., Кливаденко Д. В. Оценка функции по конечному набору линейных функционалов, измеренных с погрешностью // В кн.: 19-я Междунар. конф. «Математика. Компьютер. Образование». Тезисы докладов. Дубна, 2012. — С. 233.

Pyt'ev Yu. P., Chulichkov A. I., Sobolev S. S., Antonjuk V. A. On the Problem of Superresolution of Blurred Images // Pattern Recognition and Image Analysis. — 2004. — Vol. 14, No. 1. — P. 50–59.