Алгоритмы быстрой многомерной интерполяции.

Franklin G. Horowithz Peter Hornby Don Bone
Maurice Craig

Резюме.

Нами разработана выскопроизводительная и универсальная схема интерполяции многомерных данных. С помощью предлагаемой техники интерполирования можно в точности воспроизводить результаты, получаемые методом *обычного крайгинга* (и его модификаций для 3D-интерполяции), сплайн-интерполяции (thin-plate splines) (метод минимальной кривизны Бриггса) для 2-х мерного случая. Более того, в сравнении с традиционной реализацией этих методов, предлагаемая нами схема требует меньших вычислительных затрат.

Результатом использования предлагаемой схемы является интерполирующая функция, удовлетворяющая соответствующему дифференциальному уравнению в частных производных (ДУЧП). ДУЧП может формироваться исходя из физической постановки задачи и его вид может принимать различные формы. Также ДУЧП может определяться неявно (через модель вариограммы) или быть нелинейным (несмотря на неизбежное уменьшение производительности численного метода).

В работе исследована эквивалентность крайгинга и сплайн-интерполяции [3] с позиций методов интерполяции радиальными базисными функциями (РБФ). Так, например, мы можем построить ДУЧП, которые лежат в основе моделей вариограмм, наиболее часто используемых в геостатистике. Помимо практической ценности, работа имеет и теоретический интерес.

Цель этой работы заключается в исследовании тесной взаимосвязи различных теорий: крайгинга; интерполяции РБФ; сплайн-

интерполяции; и решения ДУЧП. Мы покажем, что из этих теорий можно получать идентичные методы интерполирования.

Введем некоторые обозначения. Ниже мы будем обозначать вектора прописными, а матрицы - заглавными жирными буквами. Пусть $x_i \in R^n$ - координаты контрольных точек, в которых известны значения u_i. Через $u(x)$ обозначим интерполирующую функцию, проходящую через N контрольных точек:

$$u(x_i) = u_i, \quad 1 \leq i \leq N$$

Крайгинг.

Простой крайгинг.

В традиционной формулировке простого крайгинга (и его модификаций) [2] значение $u(x_0)$ в т. x_0 ищется в виде линейной комбинации u_i, где каждое u_i входит со своим весовым коэффициентом:

$$u(x_0) \approx (w_0, u), \tag{1}$$

где u - вектор с элементами u_i, а (a, b) обозначает скалярное произведение двух векторов. Вектор весовых коэффициентов w_0 находится из решения системы линейных уравнений (СЛУ)

$$Cw_0 = b_0, \tag{2}$$

где $C_{ij} = \phi(x_i - x_j)$ - ковариация двух контрольных точек в рассматриваемой модели, а $b_0 = \phi(x_0 - x_j)$ - ковариация контрольной точки и точки x_0.

Мы выбрали для рассмотрения простой крайгинг за его математическую простоту и потому что большинство (если не все) других разновидностей крайгинга могут быть получены из простого крайгинга путем наложения дополнительных ограничений и/или путем интегрирования результатов интерполирования (т.е. обычный крайгинг, универсальный крайгинг или крайгинг с трендом, блочный крайгинг).

Дуальный крайгинг.

В дуальной формулировке крайгинга ([4] или [7] - английский вариант) $u(x_0)$ ищется из набора коэффициетов f:

$$u(x) \approx (b_0, f). \tag{3}$$

Неизвестный вектор f находится из решения СЛУ:

$$C^T f = u \tag{4}$$

Более подробное описание метода приводится в приложении 1, где также рассматривается аналог метода крайгинга с учетом тренда.

Эффективность.

С точки зрения числа операций, необходимых для решения задачи интерполяции, прямая реализация уравнений (3)-(4) дает небольшое улучшение по сравнению с уравнениями (1)-(2). Напомним, что матрица C размерности $N \times N$.

Дуальная формулировка метода крайгинга требует решения СЛУ (4) только один раз, количество операций при этом оценивается как $O(N^3)$. Для вычисления значения интерполирующей функции в M узлах сетки необходимо еще $O(MN)$ операций (выражение (3) вычисляется M раз и каждое такое вычисление требует $O(N)$ операций для вычисления скалярного произведения f и $\phi(x_0 - x_i)$). Итак, прямая реализация дуального крайгинга требует

$$O(N^3) + O(NM) \tag{5}$$

операций.

Метод простого крайгинга требует решения СЛУ (2) в каждом из M узлов сетки, что требует $O(MN^3)$ операций. Вычисление (1) для всех узлов сетки требует $O(MN)$ операций. Общее число операций для простого крайгинга можно оценить как

$$O(MN^3) + O(MN) \tag{6}$$

Если сперва обратить матрицу C ($O(N^3)$ операций), то можно избежать многократного решения СЛУ (2). Тогда для каждого узла сетки необходимо вычислять $C^{-1}b_0$. Каждое такое вычисление требует $O(N^2)$ операций, что для всей сетки составит $O(MN^2)$ операций. Итоговое количество операций составляет

$$O(N^3) + O(MN^2). \tag{7}$$

Предложенный алгоритм может оказаться более эффективным, чем прямая реализация метода простого крайгинга (в зависимости от того, как соотносятся M и N). Напомним, что контрольные точки обычно

располагаются либо пятнами, либо на линиях (траверс, линии полета) и поэтому число M должно быть также велико, как $O(N^2)$, или даже $O(N^3)$, однако обычно M берут как $O(N)$.

Очевидно, дуальный крайгинг оказывается эффективнее, чем любой другой алгоритм, реализующий простой крайгинг. Также очевидно, что при $N \sim 10,000$ (что является обычным для реальных задач) ни один из рассмотренных алгоритмов не применим на общедоступных в настоящее время компьютерах. Это наблюдение приводит к необходимости разработки алгоритмов локальной интерполяции, основной идеей которых является уменьшение числа N до более пригодного для вычислений (например 40 или 50). Такие алгоритмы обязательно должны содержать в себе такие трудоемкие процедуры, как нахождение ближайшей соседней точки и др. В этой статье подобные методы не рассматриваются.

Интерполяция РБФ.

Теоретические основы интерполяции РБФ описаны в [5] и в списке литературы, прилагаемом к этой статье. Хотя метод и не формулируется на языке статитстики, интерполяция производится почти идентично дуальному крайгингу:

$$u(x_0) = \sum_i f_i \phi(x_0 - x_i) + P_h(x). \tag{8}$$

Здесь ϕ используется в том же смысле, как описано выше, а $P_h(x)$ - некоторый полином. f_i и коэффициенты полинома $P_h(x)$ удовлетворяют расширенной СЛУ:

$$\widehat{C}^T \widehat{f} = \widehat{u} \tag{9}$$

Разница между уравнениями (3)-(4) и (8)-(9) заключается в добавлении "полиномной" части $P_h(x)$, что увеличивает размерность СЛУ простого крайгинга (см. приложение 1). Когда $P_h(x) = 0$, то мы получим (3), а когда $P_h(x) \neq 0$, мы получим дуальный аналог универсального крайгинга (также известного как крайгинг с трендом).

В терминах РБФ, модель ковариационной функции $\phi(x_0 - x_i)$, используемой в крайгинге, есть радиальная базисная функция. Также, как и в крайгинге, при интерполяции РБФ, вычислители выбирают форму ϕ из небольшого набора допустимых функций (в основном от функций требуется, чтобы матрица $\widehat{C}^T$ была обратима). Эффективность интерполяции РБФ такая же, как и у дуального крайгинга (т.е. описывается уравнением (5)).

Дифференциальные уравнения в частных производных.

Связь с РБФ и крайгингом.

Рассмотрим, как между собой соотносятся дуальный крайгинг, интерполяция РБФ и решение ДУЧП. Для этого рассмотрим взаимосвязь РБФ и ДУЧП. Предположим, что для заданной функции ϕ существует оператор L такой, что

$$L\phi(x - x_i) = \delta(x - x_i), \tag{10}$$

где δ - дельта-функция Дирака и

$$LP_h(x) = 0. \tag{11}$$

Так, например, если L - дифференциальный оператор, то ϕ - функция Грина оператора L, а $P_h(x)$ - решение однородного дифференциального уравнения. Нашей целью является показать идею и мы не хотим скрывать ее простоту за сложными математическими выкладками.

Применяя L к (8), получим:

$$Lu = \sum_i f_i \delta(x - x_i) \tag{12}$$

Эта запись соответствует операторному уравнению, где u - отклик системы (описываемой оператором L) на множество точечных сил f_i, действующих в т. x_i. Коэффициенты $P_h(x)$ определяют (или определяются) из граничных условий - это зависит от ситуации. Уравнение (12) вместе с граничными условиями делают задачу положительно определенной. Если не рассматривать вопрос о граничных условиях, то задача эквивалентна задаче крайгинга (или задаче РБФ-интерполяции). Этот путь является наиболее эффективными и интересным для получения доказательства существования единственного и устойчивого решения для интересующего нас класса задач (т.е. когда известны ϕ и $P_h(x)$). Это выглядит правдоподобным, что функцию Грина для обратимой (имеющей решение?) задачи в ДУЧП можно рассматривать как РБФ, Мы не показали, что оператор L существует для произвольной функции ϕ - в действительности это утверждение и не должно выполняться всегда. Однако, свобода в выборе граничных условий совместно с существованием методов преобразования Фурье могут дать много подвижек в этом направлении.

Предположим теперь, что L - это дифференциальный оператор. Рассмотрим уравнение (12), дискретизированное путем аппроксимации оператора L конечно-разностным выражением (вообще говоря, оно должно включать в себя квадратуры для интегро-дифференциального оператора L).

При такой дискретизации нам известны $u(x_i)$, а f_i - неизвестны и наоборот. Таким образом, для дискретизации (12) необходимо преобразовать уравнение таким образом, чтобы все неизвестные оказались в левой части уравнения, а все известные - в правой.

После этого накладываются граничные условия, которые неявно определяют $P_h(x)$. Например, при оценке запасов рудных месторождений обычно накладывают ограничение $u(x) = 0$ на значительном удалении от области исследования.

Численные данные.

Мы показали, что простой крайгинг, дуальный крайгинг и интерполяция РБФ эквивалентны решению ДУЧП с соответствующими граничными условиями. Теперь мы можем использовать один из быстрых алгоритмов численного решения ДУЧП для расчета задачи интерполяции.

Мы решаем дискретизированное уравнение (12), используя метод конечных разностей. В [6] показано, что такой метод решения для сетки, состоящей из M узлов, требует

$$O(M) \tag{13}$$

операций.

Эта оценка не зависит от количества контрольных точек и метод сходится тем быстрее, чем выше их плотность. Сравните количество операций (13) с тем количеством операций, которые необходимо проделать, решая задачу в формулировке метода крайгинга или итерполяции РБФ: выражениями (5), (6) и (7).

На практике обычно известна либо функция ϕ, либо оператор L. Недостающий элемент этой пары можно получить, применяя методы преобразования Фурье для уравнения (10) (однако, оператор, получившийся после свертки может оказаться неустойчивым). Наша реализация метода не достигла теоретически возможной скорости $O(M)$ из-за трудностей представления контрольных точек на сетках различных размерностей. Однако, скорость нашей реализации несомненно выше, чем

$O(M^2)$ и, вероятно, выше чем $O(M \log M)$. Мы рассматриваем эту трудность скорее как алгоритмическую, чем как фундаментальную проблему, связанную с сеточным подходом к задаче интерполяции.

Пример

Для примера, если $L \equiv \nabla^4, \quad u = u(x)$ есть смещения и $f = f(x)$ силы ($x \in R^2$), то уравнение (12) будет ДУЧП для двухмерных тонких (упругих) пластин (thin-plate spline) (интерполяция методом наименьшей кривизны [1], часто применяемый в геофизике). Аналогичные задачи, более высоких размерностей дадут $x \in R^n$ и соответствующим образом определят ∇^4. Интерполяционные функции для случая более жестких пластин могут быть найдены из рассмотрения более высоких степеней ∇ (например, для сферической модели вариограммы).

Обсуждение.

Предложенный подход обладает возможностью дать задачам интерполяции их физическое толкование. Если результат интерполяции должен удовлетворять (12), где L известен из физической постановки задачи, то прямое применение предложенной методики даст физически обоснованное решение. Кроме того, предложенный подход позволяет более быстро рассчитывать задачи интерполяции методом крайгинга, используюя быстрые методы решения ДУЧП.

Методы крайгинга являются основой для методов моделирования изменчивости прогнозируемой величины с учетом дополнительных ограничений. Особый интерес представляет собой взаимосвязь такого моделирования и соответствующей постановкой краевой задачи. Если существует такая краевая задача, то как она должна выглядеть?

Т.к. мы используем оператор L, заданный в виде конечной формулы (и ее конечно-разностном преставлении), мы думаем, что нет смысла ограничиваться рассмотрением только линейных операторов. Для некоторых классов нелинейных краевых задач препятствием в использовании нелинейных операторов будут служить лишь алгоритмические сложности.

Здесь остался еще один абзац

Приложение 1.

Эквивлентность интерполяции РБФ и обычного крайгинга.

СЛУ простого крайгинга возникает из задачи минимизации. Условие, что дисперсия оценки минимизируется путем варьирования весовых коэффициентов w_i записывается как (2). Для обычного крайгинга, для получения несмещенной оценки, уравнение (2) должно решаться с дополнительным условием:

$$\sum w_i = 1, \tag{14}$$

что также дает точную интерполяцию функции, являющейся константой. Уравнения (2) и (14) решаются совместно методом неопределенных множителей Лагранжа, что приводит к новой, расширенной СЛУ:

$$\begin{bmatrix} C & 1 \\ 1^T & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_0 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_0 \\ 1 \end{bmatrix} \tag{15}$$

Перепишем уравнение (15) следующим образом:

$$\widehat{C}\widehat{w}_0 = \widehat{b}_0 \tag{16}$$

Теперь, согласно методу крайгинга, значение интерполяционной функции в т. x_0 выражается

$$u(x_0) = (w_0, u)_N = (\widehat{w}_0, \widehat{u})_{N+1}. \tag{17}$$

Здесь скалярное произведение между N-мерными векторами α и β обозначается $(\alpha, \beta)_N$. Расширенные вектор $\widehat{u}$ должен быть построен таким образом, чтобы сохранялось первое равенство в (17). Единственное расширение u, которое сохраняет (17)

$$\widehat{u} = \begin{bmatrix} u \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{18}$$

Используя это равенство, мы получим эквивалент обыкновенного крайгинга, выраженного в термирнах РБФ. Начнем с рассмотрения выражения для получения значения в точке по методу обыкновенного крайгинга:

$$u(x_0) = (\widehat{w}_0, u)_{N+1} \tag{19}$$

Т.к. мы предположили, что $\widehat{C}$ обратимая матрица, то существует $\widehat{f}$ (с учетом симметричности $\widehat{C}$):

$$\widehat{C}^T \widehat{f} = \widehat{u}. \tag{20}$$

Это есть уравнение РБФ интерполяции, расширенное дополнительным условием. Это уравнение соответствует (8), где $P_h(x) = const$. Значение в т. x_0 может быть вычислено по формуле

$$u(x_0) = (\widehat{b}_0, \widehat{f})_{N+1} \tag{21}$$

Но из (16) мы знаем, что это может быть записано, как

$$u(x_0) = (\widehat{C}\widehat{w}_0, \widehat{f})_{N+1} \tag{22}$$

Произведя над (22) матричные преобразование (транспонирование, группировка), получим

$$u(x_0) = (\widehat{w}_0, \widehat{C}^T \widehat{f})_{N+1} \tag{23}$$

Подставив сюда (20), получим:

$$u(x_0) = (\widehat{w}_0, \widehat{u})_{N+1} \tag{24}$$

Но это и есть в точности решение задачи обыкновенного крайгинга в т. x_0. Следовательно, если существует решение расширенной задачи интерполяции РБФ (20), то тогда существует эквивалентное решение задачи обыкновенного крайгинга и наоборот.

Дуальный аналог метода крайгинга с треном.

Рассмотрим задачу интерполяции функции, заданной точечными значениями в R^2. С помощью расширенной системы линейных уравнений, включающей в себя строки и столбцы для определения коэффициентов полинома $P_h(x)$ можно точно интерполировать любую линейную функцию. Система линейных уравнений для определения коэффициентов f_i и трех коэффициентов $P_h(x)$ записывается

$$\begin{bmatrix} C & c_1 & c_2 & 1 \\ c_1^T & 0 & 0 & 0 \\ c_2^T & 0 & 0 & 0 \\ 1^T & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} f \\ \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \mu \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} u \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{25}$$

где c_j - вектор j-ых координат контрольных точек $\{x_i^{(j)}\}_{i=1...N}$ (Здесь $x_i^{(j)}$ обозначает j-ю координату в i-й контрольной точке). Уравнение (25) содержит дополнительные ограничения на первые моменты "сил" f_i, которые записываются как $\sum_{i=1}^{n} f_i x_i^{(1)} = 0$ и $\sum_{i=1}^{n} f_i x_i^{(2)} = 0$. Эта запись эквивалентна использованию линейного тренда в крайгинге.

Результат интерполяции рассчитывается по формуле

$$u(x_0) = (\widehat{b}_0, \widehat{f})_{N+1}, \tag{26}$$

где $b_0 = \begin{bmatrix} b_0 & x_0^{(1)} & x_0^{(2)} & 1 \end{bmatrix}^T$. Действительно, условия на моменты более высокого порядка могут быть получены аналогичным образом и, таким образом, мы получаем дуальный аналог универсального крайгинга (или крайгинга с трендом).

Список литературы

[1] Briggs, I.C., 1974 "Machine Contouring Using Minimum Curvature", Geophysics, v.39, n0. 1, pp. 39-48.

[2] Isaaks, E.H. and Srivastava, R.M., 1989 "An Introduction to Applined Geostatistics", Oxford University Press, New York.

[3] Matheron, G., 1980 "Splines and Kriging - Their Formal Equivalence", in Down-to-Earth Statistics - Solutions looking for geological problems, ed. D.F. Merriam, pp. 77-95, Syracuse University Geology Contributions.

[4] Matheron, G., 1982 "Pour une analyse krigeante des donnees regionalisees"Note interne, n 732, CGMM, Fontainebleau, 20 p.

[5] Powell, M.J.D., 1992 "The theory of Radial Basis Function Approximation in 1990", in Advances in Numerical Analysis, Vol. 2: Wavelets, Subdivision Algorithms, and Radial Basis Functions, ed. W.A. Light, pp. 105-210, Oxford University Press, New York.

[6] Press, W.H., Teukolsky, S.A., Vetterling, W.T. and Flanery B.P., 1982 "Numerical Recipes in C; The Art of Scientific Computing", Cambridge University Press, Cambridge.

[7] Royer J.J., and Vieira, P.C., 1984 "Dual Formalism of Kriging", in Geostatistics for Natural Resources Characterization, Part 2, ed. G.

Verly, M. David, A.G. Journel, and A. Marechal, NATO ASI Series C: Mathematical and Physical Sciences, Vol. 122, pp 691-702, D. Reidel Pub. Co., Dordrecht.