
III. Методы решения задач

РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ ОЦЕНКИ ПЛОХО ОБУСЛОВЛЕННОЙ КОВАРИАЦИОННОЙ МАТРИЦЫ¹

Голубков В. В.

Институт системного анализа РАН, Москва

Аннотация

В данной работе дается решение задачи нахождения корректной оценки ковариационной матрицы с помощью указанной процедуры регуляризации.

В настоящее время для моделирования и прогнозирования дискретных случайных временных процессов и в частности демографических процессов широко используется вероятностный подход [18], в основе которого лежит методология имитационного моделирования. Одной из задач имитационного моделирования является задача генерирования случайных векторов с заданной ковариационной матрицей и с заданными маргинальными законами распределения. Как правило, ковариационная матрица не известна и в качестве таковой используется ее оценка, получаемая по известным статистическим данным. В случае, когда ковариационная матрица близка к вырожденной, может оказаться, что ее оценка из-за вычислительных ошибок не является положительно полуопределенной матрицей, чего быть не должно. В этом случае можно использовать процедуру регуляризации оценки, согласно которой в качестве корректной оценки ковариационной матрицы берется симметричная неотрицательно определенная матрица, наиболее близкая в некоторой метрике к оценке ковариационной матрицы, полученной в результате обработки статистической информации. В данной работе дается решение задачи нахождения корректной оценки ковариационной матрицы с помощью указанной процедуры регуляризации.

¹ Данная работа выполнена при поддержке РФФИ, грант № 09-001-00273а

Абстрагируясь от физического смысла указанной задачи, решение последней сводится к решению следующей математической задачи. Пусть $K = \{K_{ij}\}$ ($i, j = 1, n$) заданная вещественная квадратная симметричная n -го порядка. Требуется найти квадратную вещественную симметричную неотрицательно определенную матрицу $P = \{P_{ij}\}$ ($i, j = 1, n$), наиболее близкую к матрице K в заданной метрике, т.е. в результате решения оптимизационной задачи

$$P = \text{Arg} \min_{P \geq 0} \|K - P\|^2, \quad K = K^T, \quad P = P^T \quad (1)$$

где запись $P \geq 0$ означает, что матрица P – неотрицательно определенная, T операция транспонирования, а $\|\dots\|$ – заданная норма. В качестве нормы возьмем матричную норму, которую введем через скалярное произведение матриц (A, B) , определяемое для матриц A, B с одинаковыми размерами по формуле

$$(A, B) = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m A_{ij} B_{ij}; \quad A = \{A_{ij}\}, \quad B = \{B_{ij}\}, \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n} \quad (2)$$

Так определенное скалярное произведение матриц обладает всеми свойствами скалярного произведения и, кроме того, имеют место следующие соотношения

$$(A, B) = (A^T, B^T), \quad (ABC, D) = (B, A^T D C^T), \quad (D, ABC) = (A^T D C^T, B) \quad (3)$$

где размеры матриц такие, что все операции определены. Используя скалярное произведение матриц (2), определим квадрат матричной нормы матрицы по А формуле

$$\|A\|^2 = (A, A)$$

Тогда задача (1) через эту норму запишется в виде

$$P = \text{Arg} \min_{P \geq 0, P = P^T} \Phi(P) \quad (4)$$

$$\Phi(P) = (K - P, K - P), \quad K = K^T, \quad P = P^T$$

Поскольку любая симметричная неотрицательно определенная матрица, как известно, может быть представлена в виде произведения некоторой матрицы на ее транспонированную матрицу (это следует из спектрального представления матрицы данного типа [9, стр. 280]), а искомая матрица P является по условию симметричной неотрицательно определенной, то ее можно

представить в виде

$$P = RR^T, \tag{5}$$

где R некоторая матрица. Подстановкой выражения для P из (5) в (4), решение задачи (4) сводится к решению следующей задачи

$$R = \underset{R}{\text{Arg min}} \Phi(R), K = K^T, P = RR^T$$

$$\Phi(R) \triangleq \Phi(P) = (K - P, K - P) = (K - RR^T, K - RR^T) \tag{6}$$

Из (6), используя симметричность матрицы K и свойства (3) введенного скалярного произведения матриц, находим первую вариацию $\delta\Phi(R)$ целевой функции $\Phi(R)$

$$\delta\Phi(R) = -2 (\delta RR^T + R\delta R^T, K - RR^T) = -4 (\delta R, KR - RR^T R)$$

Отсюда, приравнявая первую вариацию $\delta\Phi(R)$ нулю (необходимое условие минимума функции $\Phi(R)$), получаем матричное уравнение, которому должна удовлетворять оптимальное значение матрицы R

$$KR - RR^T R = 0 \tag{7}$$

Умножая уравнение (7) справа на матрицу R^T и учитывая (5), находим

$$KR - P^2 = 0$$

В силу симметричности матриц K и P отсюда следует

$$KP = PK$$

что означает, что матрицы K и P являются перестановочными (коммутирующими) матрицами. Но тогда для симметричных перестановочных матриц K и P согласно [9, стр. 207, 265] существует такая ортонормированная матрица H , с помощью которой одновременно матрицы K и P приводятся к диагональному виду, т.е.

$$K = H\Lambda^{(k)}H^T; P = H\Lambda^{(p)}H^T; HH^T = H^TH = E,$$

где E единичная, а $\Lambda^{(k)}$ и $\Lambda^{(p)}$ – диагональные матрицы с диагональными элементами, равными собственным числам соответствующих матриц. Другими словами, оптимальная матрица P с необходимостью должна иметь следующую структуру:

$$\begin{aligned} P &= H\Lambda^{(p)}H^T; H \in G_H = \{H : K = H\Lambda^{(k)}H^T, HH^T = H^TH = E\}, \\ \Lambda^{(k)} &= \text{diag}(\lambda_1^{(k)}, \lambda_2^{(k)}, \dots, \lambda_n^{(k)}), \\ \Lambda^{(p)} &= \text{diag}(\lambda_1^{(p)}, \lambda_2^{(p)}, \dots, \lambda_n^{(p)}); \lambda_i^{(p)} \geq 0, i = 1, n. \end{aligned} \quad (8)$$

Не нарушая общности, будем считать, что собственные числа $\lambda_i^{(k)}$ ($i = \overline{1, n}$) матрицы K пронумерованы таким образом, что имеет место представление матрицы $\Lambda^{(k)}$ в следующем блочном виде:

$$\Lambda^{(k)} = \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} & 0 \\ 0 & \Lambda_2^{(k)} \end{pmatrix}, \quad \Lambda_1^{(k)} = \text{diag}(\lambda_1^{(k)}, \lambda_2^{(k)}, \dots, \lambda_m^{(k)}); \quad \lambda_i^{(k)} \geq 0, i = \overline{1, m} \\ \Lambda_2^{(k)} = \text{diag}(\lambda_{m+1}^{(k)}, \lambda_{m+2}^{(k)}, \dots, \lambda_n^{(k)}); \quad \lambda_i^{(k)} < 0, i = \overline{m+1, n} \quad (9)$$

Используя (8) и свойства скалярного произведения матриц (3), из (6) получаем

$$\begin{aligned} \Phi(P) &= (K-P, K-P) = (H\Lambda^{(k)}H^T - H\Lambda^{(p)}H^T, H\Lambda^{(k)}H^T - H\Lambda^{(p)}H^T) = \\ &= (\Lambda^{(k)} - \Lambda^{(p)}, \Lambda^{(k)} - \Lambda^{(p)}) = \sum_{i=1}^n (\lambda_i^{(p)} - \lambda_i^{(k)})^2 = \sum_{i=1}^m (\lambda_i^{(p)} - \lambda_i^{(k)})^2 + \sum_{i=m+1}^n (\lambda_i^{(p)} - \lambda_i^{(k)})^2 \end{aligned}$$

или

$$\Phi(P) = (K - P, K - P) = \sum_{i=1}^m (\lambda_i^{(p)} - \lambda_i^{(k)})^2 + \sum_{i=m+1}^n (\lambda_i^{(p)} - \lambda_i^{(k)})^2.$$

Отсюда с учетом (8) и (9) следует, что минимальное значение целевой функции $\Phi(P)$ достигается на такой матрице P , у которой собственные числа $\lambda_i^{(p)}$ ($i = 1, n$) имеют следующие значения:

$$\lambda_i^{(p)} = \lambda_i^{(k)}, i = \overline{1, m}; \lambda_i^{(p)} = 0, i = \overline{m+1, n}. \quad (10)$$

причем минимальное значение целевой функции в этом случае равно

$$\Phi(P) = \sum_{i=m+1}^n (\lambda_i^{(k)})^2$$

Из (8), (9) и (10) получаем следующее выражение для $\Lambda^{(p)}$:

$$\Lambda^{(p)} = \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \Lambda_1^{(k)} = \text{diag}(\lambda_1^{(k)}, \lambda_2^{(k)}, \dots, \lambda_m^{(k)})$$

Таким образом, установлено, что минимум целевой функции $\Phi(P)$ достигается на матрице P , вычисляемой по формуле:

$$P = H\Lambda^{(p)}H^T, H \in G_H = \{H: K = H\Lambda^{(k)}H^T, HH^T = H^TH = E\}$$

$$\Lambda^{(k)} = \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} & 0 \\ 0 & \Lambda_2^{(k)} \end{pmatrix}, \Lambda^{(p)} = \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (11)$$

$$\Lambda_1^{(k)} = \text{diag}(\lambda_1^{(k)}, \lambda_2^{(k)}, \dots, \lambda_m^{(k)}); \lambda_i^{(k)} \geq 0, i = \overline{1, m}$$

$$\Lambda_2^{(k)} = \text{diag}(\lambda_{m+1}^{(k)}, \lambda_{m+2}^{(k)}, \dots, \lambda_n^{(k)}); \lambda_i^{(k)} < 0, i = \overline{m+1, n}$$

Поскольку, вообще говоря, матрица $H \in G_H$ не является единственной, то возникает вопрос о зависимости оптимальной матрицы P от H , т.е. вопрос о единственности матрицы P . Покажем, что оптимальная матрица P , вычисляемая по формулам (11), является единственной, т.е. для всех матриц $H \in G_H$ значение оптимальной матрицы P будет одно и тоже. Действительно, возьмем две произвольные матрицы $H_1 \in G_H$ и $H_2 \in G_H$ и вычислим по формулам (11) соответствующие матрицы P_1 и P_2

$$P_1 = H_1\Lambda^{(p)}H_1^T, P_2 = H_2\Lambda^{(p)}H_2^T; H_1, H_2 \in G_H. \quad (12)$$

Так как $H_1, H_2 \in G_H$, то согласно (11) имеем

$$H_1\Lambda^{(k)}H_1^T = K, H_2\Lambda^{(k)}H_2^T = K \Rightarrow H_1\Lambda^{(k)}H_1^T = H_2\Lambda^{(k)}H_2^T,$$

откуда следует, что $\Lambda^{(k)}H_1^TH_2 = H_1^TH_2\Lambda^{(k)}$

или

$$\Lambda^{(k)}\hat{H} - \hat{H}\Lambda^{(k)} = 0, \hat{H} = H_1^TH_2 \quad (13)$$

Запишем матрицу \hat{H} в следующем блочном виде

$$\widehat{\mathbf{H}} = \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{H}}_{11} & \widehat{\mathbf{H}}_{12} \\ \widehat{\mathbf{H}}_{21} & \widehat{\mathbf{H}}_{22} \end{pmatrix}.$$

где блоки $\widehat{\mathbf{H}}_{ij}$ ($i, j = 1, 2$) имеют размеры одноименных блоков матрицы $\Lambda^{(k)}$ в (11). Отсюда и из (11) находим

$$\begin{aligned} \Lambda^{(k)} \widehat{\mathbf{H}} - \widehat{\mathbf{H}} \Lambda^{(k)} &= \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Lambda_2^{(k)} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{H}}_{11} & \widehat{\mathbf{H}}_{12} \\ \widehat{\mathbf{H}}_{21} & \widehat{\mathbf{H}}_{22} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \widehat{\mathbf{H}}_{11} & \widehat{\mathbf{H}}_{12} \\ \widehat{\mathbf{H}}_{21} & \widehat{\mathbf{H}}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \Lambda_2^{(k)} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{11} - \widehat{\mathbf{H}}_{11} \Lambda_1^{(k)} & \Lambda_1^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{12} - \widehat{\mathbf{H}}_{12} \Lambda_2^{(k)} \\ \Lambda_2^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{21} - \widehat{\mathbf{H}}_{21} \Lambda_1^{(k)} & \Lambda_2^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{22} - \widehat{\mathbf{H}}_{22} \Lambda_2^{(k)} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (14)$$

что совместно с (13) в частности дает

$$\Lambda_1^{(\kappa)} \widehat{\mathbf{H}}_{11} - \widehat{\mathbf{H}}_{11} \Lambda_1^{(\kappa)} = 0, \quad \Lambda_1^{(\kappa)} \widehat{\mathbf{H}}_{12} - \widehat{\mathbf{H}}_{12} \Lambda_2^{(\kappa)} = 0, \quad \Lambda_2^{(\kappa)} \widehat{\mathbf{H}}_{21} - \widehat{\mathbf{H}}_{21} \Lambda_1^{(\kappa)} = 0. \quad (15)$$

Из двух последних соотношений и свойств элементов диагональных матриц $\Lambda_1^{(k)}$ и $\Lambda_2^{(k)}$ в (11) следует, что

$$\widehat{\mathbf{H}}_{12} = \mathbf{0}, \quad \widehat{\mathbf{H}}_{21} = \mathbf{0}. \quad (16)$$

Действительно, второе соотношение в (15) в скалярной форме можно записать в виде

$$\begin{aligned} (\Lambda_1^{(k)} \widehat{H}_{12})_{ij} - (\widehat{H}_{12} \Lambda_2^{(k)})_{ij} &= \sum_{r=1}^m (\Lambda_1^{(k)})_{ir} (\widehat{H}_{12})_{rj} - \sum_{r=1}^{n-m} (\widehat{H}_{12})_{ir} (\Lambda_2^{(k)})_{rj} = 0, \\ i &= \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n-m}. \end{aligned} \quad (17)$$

Здесь и в дальнейшем запись $(A)_{ij}$ означает элемент матрицы A , стоящий на пересечении i -й строки и j -го столбца. Поскольку согласно (11)

$$\begin{aligned} (\Lambda_1^{(k)})_{ij} &= \lambda_i^{(k)} \delta_{ij}, \quad \lambda_i^{(k)} \geq 0; \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, m} \\ (\Lambda_2^{(k)})_{ij} &= \lambda_{m+i}^{(k)} \delta_{ij}, \quad \lambda_{m+i}^{(k)} < 0; \quad i = \overline{1, n-m}, \quad j = \overline{1, n-m} \end{aligned} \quad \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & i = j \\ 0, & i \neq j \end{cases} \quad (18)$$

то отсюда и из (17) получаем

$$\begin{aligned} \sum_{r=1}^m \lambda_i^{(k)} \delta_{ir} (\widehat{H}_{12})_{rj} - \sum_{r=1}^{n-m} (\widehat{H}_{12})_{ir} \lambda_{m+r}^{(k)} \delta_{rj} &= (\lambda_i^{(k)} - \lambda_{m+j}^{(k)}) (\widehat{H}_{12})_{ij} = 0, \\ i &= \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n-m}. \end{aligned}$$

Учитывая, что в силу (18) значения

$$(\lambda_i^{(k)} - \lambda_{m+j}^{(k)}) > 0 \quad (i = \overline{1, m}; j = \overline{1, n - m})$$

отсюда непосредственно следует

$$(\widehat{\mathbf{H}}_{12})_{ij} = 0; \quad i = \overline{1, m}, \quad j = \overline{1, n - m}$$

что доказывает справедливость первого соотношения в (16). Транспонируя третье соотношение в (15) и умножая полученное соотношение на -1, находим

$$\Lambda_1^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{21}^T - \widehat{\mathbf{H}}_{21}^T \Lambda_2^{(k)} = 0$$

Далее, дословно повторяя выкладки, использованные при доказательстве первого соотношения в (16), с заменой в них $\widehat{\mathbf{H}}_{12}$ на $\widehat{\mathbf{H}}_{21}^T$, получаем, $\widehat{\mathbf{H}}_{21}^T = 0$ а, значит и $\widehat{\mathbf{H}}_{21}^T = 0$.

Таким образом, справедливость соотношений (16) доказана.

Из (12) имеем

$$\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2 = \mathbf{H}_1 \Lambda^{(p)} \mathbf{H}_1^T - \mathbf{H}_2 \Lambda^{(p)} \mathbf{H}_2^T = \mathbf{H}_1 (\Lambda^{(p)} \mathbf{H}_1^T \mathbf{H}_2 - \mathbf{H}_1^T \mathbf{H}_2 \Lambda^{(p)}) \mathbf{H}_2^T$$

или с учетом (13)

$$\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2 = \mathbf{H}_1 (\Lambda^{(p)} \widehat{\mathbf{H}} - \widehat{\mathbf{H}} \Lambda^{(p)}) \mathbf{H}_2^T \quad (19)$$

Используя структуру матрицы $\Lambda^{(p)}$ в (11) и повторяя выкладки при выводе формулы (14), в которых надо положить $\Lambda_2^{(k)} = 0$, получаем

$$\Lambda^{(p)} \widehat{\mathbf{H}} - \widehat{\mathbf{H}} \Lambda^{(p)} = \begin{pmatrix} \Lambda_1^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{11} - \widehat{\mathbf{H}}_{11} \Lambda_1^{(k)} & \Lambda_1^{(k)} \widehat{\mathbf{H}}_{12} \\ -\widehat{\mathbf{H}}_{21} \Lambda_1^{(k)} & 0 \end{pmatrix}.$$

Отсюда, принимая во внимание первое соотношение в (15) и соотношения (16), следует, что

$$\Lambda^{(p)} \widehat{\mathbf{H}} - \widehat{\mathbf{H}} \Lambda^{(p)} = 0.$$

Последнее вместе с (19) дает

$$\mathbf{P}_1 - \mathbf{P}_2 = 0 \Rightarrow \mathbf{P}_1 = \mathbf{P}_2$$

что и доказывает единственность оптимальной матрицы P . Из этого следует вывод: для вычисления матрицы P по формулам (11) можно использовать любую матрицу $H \in G_n$.

В случае, когда матрица K является неотрицательно определенной ($K \geq 0$), то тогда $m = n$ и, стало быть, согласно (11) в этом случае матрица P совпадает с матрицей K , т.е. $P = K$. Для вычисления матрицы P по формулам (11) необходимо знать спектральное представление матрицы K , а именно надо знать матрицы $\Lambda^{(k)}$ и H , которые формируются соответственно по собственным числам и собственным векторам матрицы K . Для нахождения матриц $\Lambda^{(k)}$ и H можно использовать численный итерационный метод вращений [10, стр. 598]. Этот метод является достаточно эффективным, как по вычислительным затратам, так и по скорости сходимости.

В заключение следует отметить, что в задачах по вероятностному прогнозированию имитационным методом дискретных случайных временных процессов используется не сама ковариационная матрица P , а матрица R , через которую по формуле (5) выражается матрица P . Если скоро матрицы $\Lambda^{(k)}$ и H вычислены, то в качестве матрицы R можно взять арифметический квадратный корень $P^{1/2}$ из матрицы P

$$R = P^{1/2} = H(\Lambda^{(p)})^{1/2}H^T, \quad (\Lambda^{(p)})^{1/2} = \text{diag}\left(\sqrt{\lambda_1^{(p)}}, \sqrt{\lambda_2^{(p)}}, \dots, \sqrt{\lambda_n^{(p)}}\right)$$

или матрицу вида

$$R = H(\Lambda^{(p)})^{1/2}, \quad (\Lambda^{(p)})^{1/2} = \text{diag}\left(\sqrt{\lambda_1^{(p)}}, \sqrt{\lambda_2^{(p)}}, \dots, \sqrt{\lambda_n^{(p)}}\right).$$

Второй вариант более предпочтителен, поскольку при его реализации требуется меньше вычислений, что важно для ковариационных матриц большой размерности.

Литература

1. *Pfaumer P.* Confidence intervals for population projections based on Monte Carlo methods. *International Journal of Forecasting*, volume 4, issue 1, 1988, 135-142.
2. *Alho J.V.* Stochastic methods in population forecasting, *International Journal of Forecasting* 6: 521-530, 1990.
3. *Keilman N., Pham D.Q.*, Predictive Intervals for Age-Specific Fertility, *European Journal of Population* 16: 41-66, 2000.

4. *Keilman N., Pham D.Q., Hetland A.*, Why population forecasts should be probabilistic – illustrated by the case of Norway, *Demographic Research*, v.6, 2002.
5. *Lutz W., Sanderson W., Scherbov S.* Probabilistic population projections based on expert opinion, pp 397-428 in Lutz W. (ed). *The future population of the world: What can we assume today?* London: Earthscan (rev.ed.), 1996.
6. *Lutz W., Sanderson W., Scherbov S.* The end of world population growth, *Nature* 412: 543545, 2001.
7. *Oeppen J., Vaupel J.W.* Broken limits to life expectancy. *Science* 296: 1029-1031, 2002.
8. *Голубков В.В., Кругляков С.В.*, Прогнозирование случайных процессов с использованием параметрических моделей автокорреляционных функций. *Динамика неоднородных систем*, Москва, Изд. URSS, 2006, № 10.
9. *Гантмахер Ф.Р.*, Теория матриц, «Наука», М.: 1966.
10. *Березин И.С., Н.П. Жидков*, Методы вычислений т. 1, «Наука», М.: 1966.