◎理论研究◎

快速高斯变换的截断误差估计

蒋 鸿,朱文球,胡永祥
JIANG Hong,ZHU Wen-qiu,HU Yong-xiang

湖南工业大学 计算机与通信学院,湖南 株州 421008
Institute of Computer & Communication,Hunan University of Technology,Zhuzhou,Hunan 412008,China

JIANG Zhong,ZHU Wen-qiu,HU Yong-xiang.New truncated error estimate for fast gauss transform.Computer Engineering and Applications,2008,44(25):35-37.

Abstract: A new truncated error estimate for fast gauss transform is proved using stirling formulas.Analysis show the new error is smaller and more accurate than the error X.Wan and G.E.Karniadakis presented.
Key words: fast gauss transform;truncated error estimate;Stirling formulas

摘 要:利用Stirling公式证明了快速高斯变换的一个新的截断误差,并将新误差与X.Wan和G.E.Karniadakis提出的误差进行了比较分析。结果表明,新误差是一个具有更小下界的、更加精确的误差估计。
关键词:快速高斯变换;截断误差估计;Stirling公式
DOI:10.3778/j.issn.1002-8331.2008.25.010 **文章编号:**1002-8331(2008)25-0035-03 **文献标识码:**A **中图分类号:**TP301.6

1 引言

Greengard和Strain提出的快速高斯变换[1-3]用于快速估计如下形式的高斯函数加权和:

$$G(t_i)=\sum_{j=1}^{N}f_j e^{-\frac{(t_i-s_j)^2}{\sigma^2}},i=1,\cdots,M \tag{1}$$

其中f_j是加权系数,$\{s_j\}_{j=1,\cdots,N}$是高斯函数的d维空间中心,叫做源点,σ为高斯函数的带宽,$\{t_i\}_{i=1,\cdots,M}$为目标点,在这些点上估计N个高斯函数和的值。很容易看到,直接计算式(1)的时间复杂度为O(MN),当M和N的值较大时运算量非常大。快速算法能以$C(M+N)$的时间复杂度计算式(1),其中常数C仅与问题的维数和期望的精度有关。由于大大地加快了运算速度,快速高斯变换在计算机视觉、模式识别等领域得到了广泛地应用[4-6],并针对其不适用于高维空间的不足提出了改进算法[7]。

作为近似算法,误差估计是算法有效性的重要依据,学者们对这个问题进行了深入的研究。Greengard 和Strain[1]最先给出了快速高斯变换的一个误差。Baxter,B.J.C.和Roussos指出这个误差是错误的并提出了一个误差估计[8]。然而,这个误差仍过高地估计了误差,且由于对进行空间划分网格边长的限制使其不适用于高维空间,在数据量很大的情况下甚至在二维空间也难以应用。X.Wan和G.E.Karniadakis于2006年又给出了具有更小下界的误差估计[9]。

本文利用Stirling公式推导了一个新的误差估计。这个新的误差具有更小的下界,且表达式非常简单。

2 快速高斯变换[1]

定义Hermite函数$h_n(x)=(-1)^n\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}(e^{-x^2})$,且有以下不等式成立:

$$\frac{1}{n!}\left|h_n(x)\right|\leqslant K2^{n/2}\frac{1}{\sqrt{n!}}e^{-x^2/2} \tag{2}$$

其中K为小于1.09的常数。高斯函数的Hermite展开为:

$$e^{-(t-s)^2}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{s^n}{n!}h_n(t)$$

假设$s_0\in R$和$\sigma>0$,有:

$$e^{-(t-s)^2/\sigma}=e^{-(t-s_0-(s-s_0))^2/\sigma}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{s-s_0}{\sqrt{\sigma}}\right)^n h_n\left(\frac{t-s_0}{\sqrt{\sigma}}\right)$$

同理,对于$t_0\in R$和$\sigma>0$,有:

$$e^{-(t-s)^2/\sigma}=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}\left(\frac{t-t_0}{\sqrt{\sigma}}\right)^n h_n\left(\frac{s-t_0}{\sqrt{\sigma}}\right)$$

实际使用中一般取无穷级数的前p项。在一维情况下,高斯函数的Hermite展开为:

$$e^{-\frac{\|y-x_i\|^2}{h^2}}=\sum_{n=0}^{p-1}\frac{1}{n!}\left(\frac{x_i-x_*}{h}\right)^n h_n\left(\frac{y-x_*}{h}\right)+\varepsilon(p) \tag{3}$$

作者简介:蒋鸿(1976-),女(汉族),讲师,主要研究方向:智能信息处理,计算机视觉;朱文球(1969-),男(汉族),副教授,主要研究方向:图像处理,模式识别;胡永祥(1973-),男(汉族),副教授,主要研究方向:医学图像处理,模式识别。
收稿日期:2008-02-26 **修回日期:**2008-05-21

$$e^{-\frac{\|y-x_i\|^2}{h^2}}=\sum_{n=0}^{p-1}\frac{1}{n!}h_n(\frac{x_i-y_*}{h})(\frac{y-y_*}{h})^n+\varepsilon(p) \tag{4}$$

其中 $\varepsilon(p)$ 为截断误差。根据式(1)和式(4)有(式(1)和(3)有类似的结果):

$$G(t_i)=\sum_{j=1}^{N}f_j\left[\sum_{n=0}^{p-1}\frac{1}{n!}h_n(\frac{s_j-t_*}{\sigma})(\frac{t_i-t_*}{\sigma})^n\right]=$$

$$\sum_{n=0}^{p-1}\left[\sum_{j=1}^{N}f_jh_n(\frac{s_j-t_*}{\sigma})\right]\frac{1}{n!}(\frac{t_i-t_*}{\sigma})^n=$$

$$\sum_{n=0}^{p-1}C_n\frac{1}{n!}(\frac{t_i-t_*}{\sigma})^n$$

计算复杂度为 $O(Np+Mp)$。由于级数快速衰减,通常 $p<<\min(N,M)$,所以运算量大大地减少了。

将多变量的高斯函数看作多个单变量的高斯函数的乘积可以将一维情况推广至高维,即设 $s,t\in R^d$,则:

$$e^{-|t-s|^2}=e^{-|t_1-s_1|^2-\cdots-|t_d-s_d|^2}$$

令 $\alpha=(\alpha_1,\cdots,\alpha_d)$ 为 d 维非负整数。对于任意 $\alpha\in N^d$ 和任意 $x\in R^d$,定义:

$$x^\alpha=x_1^{\alpha_1}x_2^{\alpha_2}\cdots x_d^{\alpha_d}$$

$$|\alpha|=\alpha_1+\alpha_2+\cdots+\alpha_d$$

$$\alpha!=\alpha_1!\ \alpha_2!\ \cdots\alpha_d!$$

$$h_\alpha(x)=h_{\alpha_1}(x)+h_{\alpha_2}(x)+\cdots+h_{\alpha_d}(x)$$

如果 $\alpha>p$,则对任意 $\alpha_j>p$,$j=1,\cdots,d$。将式(2)扩展到 d 维空间得:

$$\frac{1}{\alpha!}|h_\alpha(t)|\leqslant Ke^{-|t|^2/2}2^{|\alpha|/2}\frac{1}{\sqrt{\alpha!}} \tag{5}$$

其中 K 小于 $(1.09)^d$,$|t|^2=|t_1|^2+\cdots+|t_2|^2$。另外,$h_\alpha(x)$ 的泰勒扩展为:

$$h_\alpha(x)=\sum_{\beta\geqslant0}\frac{(t-t_0)^\beta}{\beta!}(-1)^\beta h_{\alpha+\beta}(t_0) \tag{6}$$

d 维高斯函数的 Hermite 展开为:

$$e^{-|t-s|^2}=\sum_{\alpha\geqslant0}\frac{(t-s_0)^\alpha}{\alpha!}h_\alpha(s-s_0) \tag{7}$$

设 $y_j,x_i,x_*\in R^d$,结合式(1)(5)得:

$$G(y_j)=\sum_{\alpha>0}C_\alpha h_\alpha(\frac{y_j-x_*}{\sigma}) \tag{8}$$

其中:

$$C_\alpha=\frac{1}{\alpha!}\sum_{i=1}^{N}q_i\left(\frac{x_i-x_*}{\sigma}\right)^\alpha \tag{9}$$

高维空间的高斯变换 Hermite 展开是多个一维高斯函数 Hermite 展开的乘积。如果每个一维 Hermite 展开都取 p 项,则需要求出 p^d 个系数 C_α。因此,总的时间复杂度为 $O((M+N)p^d)$。

3 截断误差估计

3.1 Stirling 公式

该公式用来求解 $n!$,表达式为:

$$n!=\sqrt{2n\pi}(\frac{n}{e})^ne^{-\frac{\theta}{12n}}\quad 0<\theta<1 \tag{10}$$

3.2 截断误差

我们完全按照文献[1]的形式描述定理(差别仅仅是误差估计不同),并给出完整的证明。由于文献[1]中定理 3 可完全由定理 1 和定理 2 推导所得,在这里仅给出定理 1 和定理 2 的证明。

定理 1(文献[1],Lemma 2.1)在一个以 s_B 为中心、边长为 $r\sqrt{2\sigma}$($r<\sqrt{p/e}$,p 为截取 Hermite 展开式的前 p 项)围成的子空间 B 中有 N_B 个源点 s_j,$j=1,\cdots,N_B$,则与子空间 B 中源点相关的高斯域:

$$G(t)=\sum_{j=1}^{N_B}q_je^{-\frac{|t-s_j|^2}{\delta}} \tag{11}$$

的 Hermite 展开为:

$$G(t)=\sum_{\alpha\geqslant0}A_\alpha h_\alpha(\frac{t-s_B}{\sqrt{\sigma}}) \tag{12}$$

其中:

$$A_\alpha=\frac{1}{\alpha!}\sum_{j=1}^{N_B}q_j(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\sigma}})^\alpha \tag{13}$$

截取前 p^d 项后的误差为:

$$|E(p)|=\left|\sum_{\alpha\geqslant p}A_\alpha h_\alpha(\frac{t-s_B}{\sqrt{\sigma}})\right|\leqslant Q_BK^d(2\pi p)^{-d/4}\frac{r_p^p}{1-r_p} \tag{14}$$

其中 $Q_B=\sum|q_j|$,$K=1.09$,$r_p=r\sqrt{e/p}$。

证明

$$|E(p)|=\left|\sum_{\alpha\geqslant p}A_\alpha h_\alpha(\frac{t-s_B}{\sqrt{\sigma}})\right|\leqslant\sum_{\alpha\geqslant p}|A_\alpha|\left|h_\alpha(\frac{t-s_B}{\sqrt{\sigma}})\right|=$$

$$\sum_{\alpha\geqslant p}\left|\frac{1}{\alpha!}\sum_{i=1}^{N_B}q_i(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\sigma}})^\alpha\right|\left|\prod_{j=1}^{d}\left|h_{\alpha_j}(\frac{(t)_j-(s_B)_j}{\sqrt{\sigma}})\right|\right|\leqslant$$

($(t)_j$ 表示 t 的第 j 部分)

$$\sum_{\alpha\geqslant p}\left|\sum_{i=1}^{N_B}q_i(\frac{r}{\sqrt{2}})^\alpha\right|\left|\prod_{j=1}^{d}\left|\frac{1}{\alpha_j!}h_{\alpha_j}(\frac{(t)_j-(s_B)_j}{\sqrt{\sigma}})\right|\right|\leqslant$$

(子空间边长为 $r\sqrt{2\sigma}$)

$$\sum_{\alpha\geqslant p}(\frac{r}{\sqrt{2}})^\alpha\sum_{i=1}^{N_B}|q_i|\prod_{j=1}^{d}K\frac{1}{\sqrt{\alpha_j!}}2^{\alpha_j/2}=$$

(注:利用式(2))

$$Q_BK^d\sum_{\alpha\geqslant p}\prod_{j=1}^{d}r^{\alpha_j}\frac{1}{\sqrt{\alpha_j!}}=$$

$$Q_BK^d\sum_{\alpha\geqslant p}\prod_{j=1}^{d}(r\sqrt{e/\alpha_j})^{\alpha_j}(2\pi\alpha_j)^{-1/4}e^{-\frac{\theta}{24\alpha_j}}\leqslant$$

(Stirling 公式)

$$Q_BK^d\sum_{\alpha\geqslant p}\prod_{j=1}^{d}(r\sqrt{e/p})^{\alpha_j}(2\pi p)^{-1/4}=$$

$$Q_BK^d(2\pi p)^{-d/4}\sum_{\alpha\geqslant p}(r\sqrt{e/p})^\alpha=$$

(注:$\alpha=\alpha_1+\alpha_2+\cdots+\alpha_d$)

$$Q_B K^d (2\pi p)^{-d/4} \frac{r_p^p}{1-r_p} \qquad (\text{注：要求 } r<\sqrt{p/e})$$

式(14)得证。

定理 2(文献[1]，Lemma 2.2) 高斯函数的 Hermite 展开：

$$G(t)=\sum_{\alpha\geqslant 0} A_\alpha h_\alpha\left(\frac{t-s_B}{\sqrt{\sigma}}\right) \tag{15}$$

关于任意点 t_C 有以下泰勒展开式：

$$G(t)=\sum_{\beta\geqslant 0} B_\beta \left(\frac{t-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)^\beta \tag{16}$$

其中：

$$B_\beta=\frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!}\sum_{\alpha\geqslant 0} A_\alpha h_{\alpha+\beta}\left(\frac{t_B-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right) \tag{17}$$

其中 A_α 的值由式(13)给出。将泰勒展开式(16)截取前 p^d 项后，在一个以 t_C 为中心，边长为 $r\sqrt{2\sigma}$ 的子空间 C 中，截断误差为：

$$|E_T(p)|=\left|\sum_{\beta\geqslant p} B_\beta\left(\frac{t-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)^\beta\right| \leqslant Q_B K^d (2\pi p)^{-d/4}\frac{r_p^p}{1-r_p} \tag{18}$$

其中 $Q_B=\sum|q_j|$，$K=1.09$，$r_p=r\sqrt{e/p}$。

证明

$$|E_T(p)|=\left|\sum_{\beta\geqslant p} B_\beta\left(\frac{t-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)^\alpha\right| \leqslant$$

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left|\frac{(-1)^{|\beta|}}{\beta!}\sum_{\alpha\geqslant 0}A_\alpha h_{\alpha+\beta}\left(\frac{s_B-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)\right|\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta=$$

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left[\left|\frac{(-1)^\beta}{\beta!}\sum_{\alpha\geqslant p}\frac{1}{\alpha!}\sum_{i=1}^{N_B}q_j\left(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\sigma}}\right)^\alpha h_{\alpha+\beta}\left(\frac{s_B-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)\right|\right]\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta=$$

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left[\left|\frac{(-1)^\beta}{\beta!}\sum_{j=1}^{N_B}q_j\sum_{\alpha\geqslant 0}\frac{1}{\alpha!}\left(\frac{s_j-s_B}{\sqrt{\sigma}}\right)^\alpha h_{\alpha+\beta}\left(\frac{s_B-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)\right|\right]\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta=$$

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left[\left|\frac{(-1)^\beta}{\beta!}\sum_{j=1}^{N_B}q_j h_\beta\left(\frac{s_j-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)\right|\right]\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta\leqslant$$

(Hermite 函数的泰勒展开，见式(6))

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left[\sum_{j=1}^{N_B}|q_j|\left|\frac{1}{\beta!}h_\beta\left(\frac{s_j-t_C}{\sqrt{\sigma}}\right)\right|\right]\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta=$$

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left[\sum_{j=1}^{N_B}|q_j|\left|\prod_{i=1}^{d}\frac{1}{\beta_i!}h_{\beta_i}\left(\frac{(s_j)_i-(t_C)_i}{\sqrt{\sigma}}\right)\right|\right]\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta\leqslant$$

$$\sum_{\beta\geqslant p}\left[\sum_{j=1}^{N_B}|q_j|\left|\prod_{i=1}^{d}K\frac{1}{\sqrt{\beta_i!}}2^{\beta_i/2}\right|\right]\left|\frac{r}{\sqrt{2}}\right|^\beta=$$

$$Q_B K^d\sum_{\beta\geqslant p}\prod_{i=1}^{d}\frac{1}{\sqrt{\beta_i!}}r^{\beta_i}\leqslant Q_B K^d(2\pi p)^{-d/4}\frac{r_p^p}{1-r_p}$$

(注：要求 $r<\sqrt{p/e}$)

式(18)得证。

4 比较分析

为简单起见，选用在定理 2 中的误差估计来进行比较分析。

X.Wan 和 G.E.Karniadakis[9]证明了定理 2 的误差为(参数同定理 2)：

$$|E_T(p)|\leqslant Q_B\sum_{i=1}^{d}\binom{d}{i}\left(K(2\pi)^{-1/4}p^{-1/4}\frac{r_p^p}{1-r_p}\right)^i \tag{19}$$

忽略其高阶项为：

$$|E_T(p)|\leqslant Q_B dK(2\pi p)^{-1/4}\frac{r_p^p}{1-r_p} \tag{20}$$

得到的定理 2 的新误差为：

$$|E_T^{new}(p)|\leqslant Q_B K^d(2\pi p)^{-d/4}\frac{r_p^p}{1-r_p} \tag{21}$$

为了比较这两个误差，令：

$$\varphi(p)=\frac{|E_T(p)|}{|E_T^{new}(p)|}=d(2\pi p)^{(d-1)/4}K^{1-d}>1 \tag{22}$$

可以看出，新的误差具有更小的下界。

5 结论

利用 Stirling 公式为快速高斯变换估计了一个新的误差。重新证明了文献[1]的定理 1 和定理 2 并给出了完整的证明过程。相对来说，新的证明方法简洁易懂，新的误差表达式非常简单。与文献[9]所得的误差进行了比较分析表明新误差具有更小的下界。

参考文献：

[1] Greengard L，Strain J.The fast Gauss transform[J].SIAM J Sci Stat Comput，1991，12(1)：79-94.

[2] Strain J.The fast Gauss transform with variable scales[J].SIAM J Sci Stat Comput，1991，12(5)：1131-1139.

[3] Greengard L，Sun X.A new version of the fast Gauss transform[C]//Proceedings of the International Congress of Mathematicians，III (Extra Vol.III)，1998：575-584.

[4] Elgammal A，Duraiswami R，Davis L.Efficient nonparametric adaptive color modeling using fast Gauss transform[C]//Proc IEEE Conf on Computer Vision and Pattern Recognition，Kauai，Hawaii，2001：563-570.

[5] Broadie M，Yamamoto Y.Application of the fast Gauss transform to option pricing[J].Management Science，2003，49(8)：1071-1088.

[6] Elgammal A，Duraiswami R，Davis L S.Efficient kernel density estimation using the fast gauss transform with applications to color modeling and tracking[J].IEEE Trans PAMI，2003，25(11)：1499-1504.

[7] Yang C，Duraiswami R，Gumerov N，et al.Improved fast Gauss transform and efficient kernel density estimation[C]//Proc ICCV 2003，Nice，France，2003：464-471.

[8] Baxter B J C，Roussos G.A new error estimate of the fast Gauss transform[J].SIAM J Sci Comput，2002，24(1)：257-259.

[9] Wan X，Karniadakis G E.A sharp error estimate for the Fast Gauss Transform[J].Journal of Computational Physics，2006，219：7-12.