arXiv:2305.02489v1 [stat.ME] 4 May 2023

小波　非平稳空间协方差函数的估计

Yangyang Chen[1], Pedro A. Morettin[1, *]，Ronaldo Dias[2], Chang Chiann[1]。

[1]统计系，数学与统计研究所，圣保罗~大学[2]坎皮纳斯大学统计系、数学、统计与科学计算研究所

摘要

本文提出一种用于估计时空变形中非平稳空间协方差函数的新方法。该方法基于单调函数方法。变形函数表示为小波基的线性组合。形变估计可确保变换为单射，因此，地理平面上任意两个不同位置都不会映射到变形平面上的同一点。模拟研究表明，该方法有效。对历史每日最高气温记录的应用展示了所提出方法在处理真实数据集时的灵活性。

关键词 时空统计学、非平稳、小波

1 引言

在地质统计学中，通常假设随机过程是平稳的，也就是说，当索引集的原点发生平移时，其分布不会改变；同时假设过程具有各向同性，即过程在绕原点旋转时保持不变。但在实际应用中，平稳性和各向同性的假设往往难以成立；例如，参见 Guttorp 等人（1994）、Schmidt 和 O'Hagan（2003），以及 Finley（2011）。

若构建一个双射变换 f，将地理域（G 平面）中的采样位置映射到变形域（D 平面）的空间表示中，则空间相关性在 D 平面上可视为各向同性。变换的单射性是最重要的要求之一，以确保 G 平面中的两个不同位置不会映射到 D 平面中的同一点。（参见 Damian 等人（2001）。）f 为单射的一个充分条件是 f 的雅可比行列式非零。

为保证映射函数的单射性，Choi 和 Lee（2000）针对均匀三次 $B\text{-}spline$形变系数提出了盒约束。Musse 等人（2001）通过一种新颖的约束

*通讯作者。电子邮箱：pam@ime.usp.br（P. A. Morettin）。

分层参数模型来确保雅可比正性。Chun 和 Fessler（2009）给出了充分条件，以约束基于 $B\text{-}splines$的变形系数，确保此类变换的雅可比矩阵为正，从而扩展了 Kim（2004）的条件。尽管这些方法确保了雅可比矩阵的正性，但它们采用的是确定性模型。Sampson 和 Guttorp（1992年）通过随机模型引入了这一主题，但无法保证基于薄板样条的变换是单射的。Damian 等人（2001）提出了一种基于贝叶斯方法的解决方案，以保证随机模型中变换的单射性。

本文提出了一种非平稳协方差函数建模方法，该方法基于单调函数方法，通过形变保证变换的单射性。值得注意的是，小波展开也用于形变。

本文结构安排如下。第 2 节简要回顾小波，并介绍本文所采用的时空模型。随后，第 3 节介绍所提出的形变。第 4 节描述一些模拟，第 5 节给出一项针对历史每日最高气温记录的应用。最后，第 6 节对全文进行总结并提出一些评论。

2 背景

2.1 小波

在小波分析中，函数 $f \in L^2(\mathbb{R})$ 可以由函数 $\phi(t)$ 的二进制膨胀 2^j 和二进制平移 $k2^{-j}$ 的线性组合来近似；该函数称为尺度函数或父小波（用于捕捉数据的平滑部分和低频成分），和/或由函数 $\psi(t)$ 的二进制膨胀 2^j 和二进制平移 $k2^{-j}$ 的线性组合来近似；该函数称为母小波（用于捕捉数据的细节和高频成分）。因此，小波基由函数 $\{\phi_{j,k}(t) \cup \psi_{j,k}(t)\ j,k \in \mathbb{Z}\} \in L^2(\mathbb{R})$ 组成，其中

$$\phi_{j,k}(t) = 2^{j/2}\phi(2^j t - k), \tag{1}$$

and

$$\psi_{j,k}(t) = 2^{j/2}\psi(2^j t - k). \tag{2}$$

获得尺度函数的一种方法是求解以下方程。

$$\phi(t) = \sqrt{2}\sum_k l_k \phi(2t - k), \tag{3}$$

且 $\psi(t)$ 由 $\phi(t)$ 得到，方法是

$$\psi(t) = \sqrt{2}\sum_k h_k \phi(2t - k), \tag{4}$$

其中

$$h_k = (-1)^k l_{1-k} \tag{5}$$

and

$$l_k = \sqrt{2}\int_{-\infty}^{\infty} \phi(t)\phi(2t - k)dt. \tag{6}$$

在多分辨率展开中，任意函数 $f \in L^2(\mathbb{R})$ 都可以表示为

$$f(t) = \sum_k c_{J_0,k}\phi_{J_0,k}(t) + \sum_{j \geq J_0}\sum_k d_{j,k}\psi_{j,k}(t), \tag{7}$$

对于某个粗尺度 J_0，通常取为零；更多详情请参见 Hardle 等人（1997 年）。

小波有许多族，例如墨西哥帽小波、香农小波、Daubechies小波和Haar小波，后者是最古老且最简单的小波。本文采用了著名的墨西哥帽小波和香农小波；它们是连续小波，并由解析表达式定义。图1和图2展示了这些小波的尺度函数（$\phi(t)$）和小波函数（$\psi(t)$）。

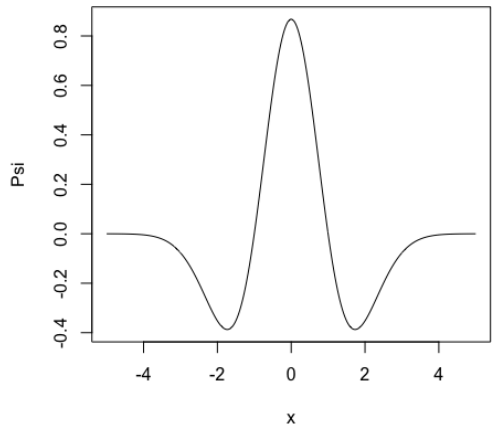


图 1：墨西哥帽小波的小波函数。

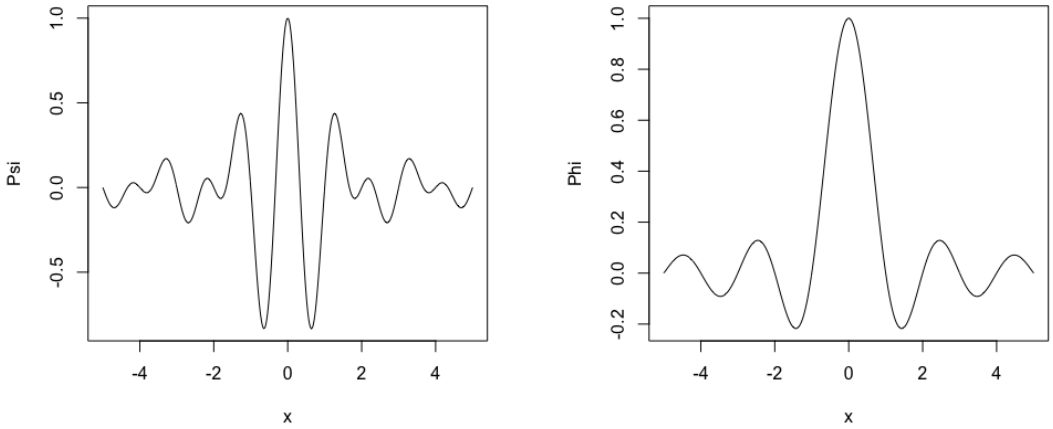


图 2：香农小波的尺度函数（左）和小波函数（右）。

2.2 时空模型

顾名思义，时空数据是在空间和时间维度上收集的。包括地球科学、气象学、神经科学和气候科学在内的许多领域，都会生成同时具有空间和时间成分的数据。关于时空数据的全面综述，请参阅 Cressie 和 Wikle（2011）。设 $Z_i(t) = Z(\mathbf{x}_i, t)$, $i = 1, \ldots\ldots n$,$t = 1, \ldots\ldots T$ 是来自某个时空过程的样本，而 Damian 等人（2001）提出的模型将用于

描述该底层过程:

$$Z(\mathbf{x}_i,t)=\mu(\mathbf{x}_i,t)+\sqrt{\nu(\mathbf{x}_i)}E_\tau(\mathbf{x}_i)+E_\epsilon(\mathbf{x}_i,t), \tag{8}$$

其中$\mathbf{x}_i$ 表示位置， t 表示时间， $\mu(\mathbf{x}_i,t)$表示时空均值， $\nu(\mathbf{x}_i)$表示在位置$\mathbf{x}_i$观测到的过程方差。 $E_\tau(\mathbf{x}_i)$是一个高斯空间过程，而当$\mathbf{x}_i\to\mathbf{x}_j$时，$\mathrm{Cov}[E_\tau(\mathbf{x}_i),E_\tau(\mathbf{x}_j)]\to 1$表示测量误差和小尺度空间变异。

我们假设 $\mu(\mathbf{x}_i,t)\equiv\mu(\mathbf{x}_i)$不随时间变化。那么，在时间 t，位置$\mathbf{x}_i$ 和$\mathbf{x}_j$处过程的协方差为

$$\mathrm{Cov}[Z(\mathbf{x}_i,t),Z(\mathbf{x}_j,t)]=\begin{cases}\sqrt{\nu(\mathbf{x}_i)\nu(\mathbf{x}_j)}\mathrm{Corr}[E_\tau(\mathbf{x}_i)E_\tau(\mathbf{x}_j)], & \text{if}\quad \mathbf{x}_i\neq\mathbf{x}_j,\\ \nu(\mathbf{x}_i)+\sigma_\epsilon^2, & \text{if}\quad \mathbf{x}_i=\mathbf{x}_j.\end{cases} \tag{9}$$

遵循Sampson 和 Guttorp（1992年）的方法， E_τ 的非平稳空间相关可通过以下方式获得 y:

$$\mathrm{Corr}[E_\tau(\mathbf{x}_i)E_\tau(\mathbf{x}_j)]=\rho(|f(\mathbf{x}_i)-f(\mathbf{x}_j)|), \tag{10}$$

其中， ρ 是一个带有未知参数的相关函数，而 f 是一种变换，它将 G 平面上的采样位置映射为空间表示，使得 D 平面上的空间相关性可以视为各向同性。

3 基于单调函数的形变

3.1 严格单调函数

单调函数是指在整个定义域内非增或非减的函数。这类函数的一个重要性质是，若函数是严格单调函数，则它在其定义域上是单射。本文使用 Ramsay（1998年）提出的单调函数。它是在左闭区间上定义的任意二次可微严格单调函数。

严格单调函数 g 满足以下条件：$\ln(Dg)$ 可微，且 $D\{\ln(Dg)\}=D^2g/Dg$ 平方勒贝格可积，其中 D 表示求导运算，D^{-1} 表示积分算子。这些条件保证该函数的一阶导数几乎处处光滑且有界。以下定理表明， g 是一个微分方程的通解。

定理 3.1 (Ramsay（1998年）) 每个单调函数 g 都可以表示为以下形式之一。

$$g(x)=C_0+C_1D^{-1}\{\exp(D^{-1}w(x))\} \tag{11}$$

或作为齐次线性微分方程的解

$$D^2g(x)=w(x)Dg(x), \tag{12}$$

其中， $w(x)$ 是 Lebesgue平方可积函数， C_0 和 C_1 是任意常数。

注意，函数 $g(x)$ 是严格单调递增的， $Dg(x)=e^{W}(x)$，其中假设 $W(x)=D^{-1}w(x)+\log C_1$，更多细节请参见 Ramsay 和 Silverman (2006)。

3.2 基函数展开

根据定理 3.1，与其估计受约束函数 g，问题转化为计算无约束函数 w。由于 w 可以为正或负，我们将其展开为一组小波基函数的线性组合。

如前所述，我们将使用两种类型的小波：

- 墨西哥帽小波，其定义为

$$\psi^{Mex}(x) = \frac{2}{\sqrt{3}\pi^{1/4}}(1-x^2)e^{-x^2/2}. \tag{13}$$

然后，我们可以将 ω 展开为

$$\omega_{Mex}(x) = \sum_{j=0}^{J}\sum_{k=0}^{2^j-1} c_{j,k}\psi_{j,k}^{Mex}(x). \tag{14}$$

- 香农小波，其定义为

$$\psi^{Shan}(x) = \text{sinc}(\frac{x}{2})\cos(\frac{3\pi x}{2}) = 2\text{sinc}(2x) - \text{sinc}(x), \tag{15}$$

$$\phi^{Shan}(x) = \text{sinc}(x), \tag{16}$$

其中 $\text{sinc}(x) = \frac{\sin \pi x}{\pi x}$。而 ω 可表示为

$$\omega_{Shan}(x) = c_0\phi^{Shan}(x) + \sum_{j=0}^{J}\sum_{k=0}^{2^j-1} c_{j,k}\psi_{j,k}^{Shan}(x). \tag{17}$$

3.3 基于单调函数的形变

设 $\mathbf{x}_i = (x_{i1}, x_{i2})$ 为 G 平面上的位置，$\mathbf{y}_i = (y_{i1}, y_{i2})$ 为其在 D 平面上的形变后位置，$i = 1,\ldots,n$。由于 $\mathbb{R}^2$ 中没有自然的排序方式，因此很难得到二维单调函数。我们可以将 Hastie 和 Tibshirani（1990）提出的广义加性模型调整后用于估计形变：将 D 平面表示中的每个坐标视为响应变量，将 G 平面上位置的坐标视为预测变量，从而得到如下加性模型：

$$y_{il} = \beta_0 + \sum_{j=1}^{2} g_j^l(x_{ij}) + \epsilon_{il},\ l = 1, 2, \tag{18}$$

其中，β_0 表示截距，ϵ_{il} 表示随机效应。

假设 $\beta_0 = 0$ 且随机效应为零。因此，D 平面上的表示 $\mathbf{y}_i = (y_{i1}, y_{i2})$ 可写为：

$$\mathbf{y}_i = \begin{bmatrix} y_{i1} \\ y_{i2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1^1(x_{i1}) + g_2^1(x_{i2}) \\ g_1^2(x_{i1}) + g_2^2(x_{i2}) \end{bmatrix}, \tag{19}$$

其中，$g_1^l(x_{i1})$ 和 $g_2^l(x_{i2})$ 是由 (11) 给出的单调函数。由于 $g_1^l(x_{i1})$ 和 $g_2^l(x_{i2})$ 在范围 $[0, \infty)$ 上严格单调，因此 y_{il} 在该范围内也严格单调。于是，y_{il} 是一个单射函数。我们可以写为：

$$y_{il} = C_{10}^l + C_{11}^l D^{-1}\exp\{D^{-1}\omega^{l1}(x_{i1})\} + C_{20}^l + C_{21}^l D^{-1}\exp\{D^{-1}\omega^{l2}(x_{i2})\}. \tag{20}$$

根据定理 3.1，C_0 和 C_1 是任意常数，假设 $C_{10}^l = C_{20}^l = 0$ 和 $C_{11}^l = C_{21}^l = 1$。因此，(20) 可以简化为

$$y_{il} = D^{-1}\exp\{D^{-1}\omega^{l1}(x_{i1})\} + D^{-1}\exp\{D^{-1}\omega^{l2}(x_{i2})\}. \tag{21}$$

注意， $\omega^{l1}(x_{i1})$ 和 $\omega^{l2}(x_{i2})$ 可以写成式（14）或式（17）的形式。因此，使用墨西哥帽小波和香农小波估计的形变可以写成：

$$\hat{y}_{il}^{Mex} = D^{-1}\exp\{\omega_{Mex}^{l1}(x_{i1})\} + D^{-1}\exp\{\omega_{Mex}^{l2}(x_{i2})\}, \tag{22}$$

$$\hat{y}_{il}^{Shan} = D^{-1}\exp\{\omega_{Shan}^{l1}(x_{i1})\} + D^{-1}\exp\{\omega_{Shan}^{l2}(x_{i2})\}, \tag{23}$$

对于 $i = 1, ..., n,\ l = 1, 2.$

3.4 过程优化

设 $\mathbf{x}_i = (x_{i1},\ x_{i2}) \in G \subset \mathbb{R}^2$ 为 G 平面中位置 i 的坐标，并假设已获得一组 n 位置（$(x_{11},\ x_{12})$...，$(x_{n1},\ x_{n2})$）。采用优化程序来估计形变 $\mathbf{y}_i$、空间方差 $\nu = \nu(\mathbf{x})$ 以及相关函数 ρ的参数 $\boldsymbol{\theta}$，使样本的似然函数 $z_{it} = Z(\mathbf{x}_i,\ t)$、$i = 1,\ ..,\ n$、$t = 1,\ ..,\ T$最大化。

假设 $\mathbf{z}_t = (z_{1t},..., z_{nt})' \sim N_n(\boldsymbol{\mu}, \Sigma\boldsymbol{\eta})$，似然函数为

$$\begin{aligned} L(\boldsymbol{\mu}, \Sigma\boldsymbol{\eta}|\mathbf{z}) &= (2\pi)^{-nT/2} \times det(\Sigma\boldsymbol{\eta})^{-T/2} \times \exp\{-\frac{1}{2}\sum_{t=1}^{T}(\mathbf{z}_t - \boldsymbol{\mu})^T\Sigma_{\boldsymbol{\eta}}^{-1}(\mathbf{z}_t - \boldsymbol{\mu})\} \\ &= (2\pi)^{-nT/2} \times det(\Sigma\boldsymbol{\eta})^{-T/2} \times \exp\{-\frac{1}{2}tr[\Sigma_{\boldsymbol{\eta}}^{-1}(\sum_{t=1}^{T}(\mathbf{z}_t - \bar{\mathbf{z}})(\mathbf{z}_t - \bar{\mathbf{z}})^T + T(\bar{\mathbf{z}} - \boldsymbol{\mu})(\bar{\mathbf{z}} - \boldsymbol{\mu})^T)]\} \\ &= (2\pi)^{-nT/2} \times det(\Sigma\boldsymbol{\eta})^{-T/2} \times \exp\{-\frac{T}{2}tr[\Sigma_{\boldsymbol{\eta}}^{-1}S] - \frac{T}{2}(\bar{\mathbf{z}} - \boldsymbol{\mu})^T\Sigma_{\boldsymbol{\eta}}^{-1}(\bar{\mathbf{z}} - \boldsymbol{\mu})\}, \end{aligned} \tag{24}$$

其中 $\bar{}\mathbf{z}$ 是各位置的均值向量，S 是样本空间协方差矩阵，其元素为 $S_{ij} = \sum_{t=1}^{T}(z_{it} - \bar{z}_{i.})(z_{jt} - \bar{z}_{j.})$和协方差矩阵

$$\Sigma_{\boldsymbol{\eta}=(\mathbf{c},\nu,\boldsymbol{\theta})} = (\sigma_{ij}), \tag{25}$$

其中

$$\sigma_{ij} = \sqrt{v_i v_j}\rho_{\boldsymbol{\theta}}(|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j|), \tag{26}$$

其中，$\mathbf{y}_i$ 和$\mathbf{y}_j$ 是 D 平面表示中的坐标，ν_i 和 ν_j 分别是位置 i 和 j处的空间方差，$\boldsymbol{\theta}$ 是相关函数 ρ的参数。

不失一般性，令 $\boldsymbol{\mu} = \mathbf{0}$，则优化问题变为

$$\max_{\boldsymbol{\eta}} L(\Sigma\boldsymbol{\eta}|\mathbf{z}). \tag{27}$$

用于估计协方差矩阵 (25) 的优化方法包括以下步骤：

1. 令$\mathbf{c}^0$ 为$\mathbf{c}$的初始值，$\mathbf{c}$是 ω 的系数，并计算 $\boldsymbol{\gamma}^0 = (\nu^0, \boldsymbol{\theta}^0)$，使得

$$\boldsymbol{\gamma}^0 = \arg\max\ l(\Sigma_{\nu,\boldsymbol{\theta}}|\mathbf{z}, \mathbf{c}^0), \tag{28}$$

其中 $l(\Sigma_{\nu,\ }\boldsymbol{\theta}|\mathbf{z},\ \mathbf{c}^0) = \log\ L(\Sigma_{\nu,\ }\boldsymbol{\theta}|\mathbf{z},\ \mathbf{c}^0)$。

2. 根据步骤 1 中得到的 $\boldsymbol{\gamma}^0$，计算

$$\mathbf{c}^1 = \arg\max\ l(\mathbf{c}|\mathbf{z}, \Sigma_{\nu^0,\boldsymbol{\theta}^0}), \tag{29}$$

其中 $l(\mathbf{c}|\mathbf{z}^{\Sigma_{\nu^0,\ }}\boldsymbol{\theta}^0) = \log\ L(\mathbf{c}|\mathbf{z}^{\Sigma_{\nu^0,\ }}\boldsymbol{\theta}^0)$。

3. 将 $\mathbf{c}^0$ 替换为 $\mathbf{c}^1$, ，返回步骤 1。

4. 重复步骤 (2)–(3)，直至收敛。

4 模拟

本节通过一些模拟来评估所提出方法的性能。这些模拟分别在形变由线性、二次、非线性和小波函数生成的情况下进行。

变形后的坐　　标 $\mathbf{y}_i$，即位置 $i, i = 1,..,n$ 处 D 平面的表示，生成如下　　s:

- 线性情形:

$$y_{i1} = 0.75x_{i1} + x_{i2}, \tag{30}$$

$$y_{i2} = x_{i1} + 0.25x_{i2}. \tag{31}$$

- 二次情形:

$$y_{i1} = -0.5(x_{i1} - 0.5)^2 + (x_{i2} - 0.5) + 0.6, \tag{32}$$

$$y_{i2} = (x_{i1} - 0.5) - 0.5(x_{i2} - 0.5)^2 + 0.6. \tag{33}$$

- 非线性情形:

$$y_{i1} = \cos(\text{angle})(x_{i1} - 0.5) + \sin(\text{angle})(x_{i2} - 0.5) + 0.5, \tag{34}$$

$$y_{i2} = -\sin(\text{angle})(x_{i1} - 0.5) + \cos(\text{angle})(x_{i2} - 0.5) + 0.5, \tag{35}$$

其中角度为 $= 2.5\exp\{-(x_{i1} - 0.5)^2 - (x_{i2} - 0.5)^2\} + 3\pi/2$。

- 小波情形:

$$y_{i1} = D^{-1}\exp\{\sum_{j=0}^{1}\sum_{k=0}^{2^j-1} c_{j,k}^{11}\psi_{j,k}(x_{i1})\} + D^{-1}\exp\{\sum_{j=0}^{1}\sum_{k=0}^{2^j-1} c_{j,k}^{12}\psi_{j,k}(x_{i2})\}, \tag{36}$$

$$y_{i2} = D^{-1}\exp\{\sum_{j=0}^{1}\sum_{k=0}^{2^j-1} c_{j,k}^{21}\psi_{j,k}(x_{i1})\} + D^{-1}\exp\{\sum_{j=0}^{1}\sum_{k=0}^{2^j-1} c_{j,k}^{22}\psi_{j,k}(x_{i2})\}, \tag{37}$$

其中 $\psi(t)$ 为墨西哥帽小波，$c_{0,\ 0}^{11} = 0.25$, $c_{1,\ 0}^{11} = 0.01$, $c_{1,\ 1}^{11} = -0.036$, $c_{0,\ 0}^{12} = -0.37$, $c_{1,\ 0}^{12} = 0.065$,$c_{1,\ 1}^{12} = -1.2$, $c_{0,\ 0}^{21} = -0.032$, $c_{1,\ 0}^{21} = -0.043$, $c_{1,\ 1}^{21} = -1$, $c_{0,\ 0}^{22} = -0.031$, $c_{1,\ 0}^{22} = 0.11$, $c_{1,\ 1}^{22} = 0.19$。

模拟包括以下步骤:

1. 设 $n = 50$ 个样本位置生成于地理域 $\mathsf{G} = [0,1] \times [0,1]$ 中，坐标（经度和纬度）按照在 $(0,\ 1)$ 中均匀分布的方式生成。图3展示了采样位置，变形后的位置见图4。

2. 样本数据（$\mathbf{z} = (\mathbf{z}_1,\ ...,\ \mathbf{z}_T)$）由一个均值函数为 $\mu(\mathbf{z}) = \mathbf{0}$、协方差函数为

$$\mathrm{Cov}(\mathbf{z}_i, \mathbf{z}_j) = \nu\rho_{\boldsymbol{\theta}}(|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j|) + \sigma_\epsilon^2\mathbb{I}_{(\mathbf{z}_i=\mathbf{z}_j)} = \nu\exp\{-|\mathbf{y}_i - \mathbf{y}_j|/\theta\} + \sigma_\epsilon^2\mathbb{I}_{(\mathbf{z}_i=\mathbf{z}_j)} \tag{38}$$

wi参数为 $\nu = 1,\quad \theta = 0.25$ 和 $\sigma_\epsilon^2 = 0.05$ 的高斯随机场模拟得到。每个序列的长度固定为 $T = 204\quad 8.$

3. 使用第3.4节所述的优化程序，结合墨西哥帽小波和香农小波，计算 $i = 1,...,n = 50$ 的 $\mathbf{y}_i$、$\hat{}\mathbf{y}_i = (\hat{y}_{i1},\hat{y}_{i2})$ 估计值以及协方差函数的参数。

4. 计算相关矩阵估计值的均方误差（MSE），

$$\mathrm{MSE} = \frac{1}{n^2}\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}(\mathrm{corr}_{ij} - \exp\{-|\hat{\mathbf{y}}_i - \hat{\mathbf{y}}_j|/\hat{\theta}\})^2, \tag{39}$$

其中，corr_{ij} 是 $\mathbf{z}$ 的相关矩阵中第 i 行第 j 列的元素，即$\mathbf{z}_i$ 与$\mathbf{z}_j$之间的相关性。

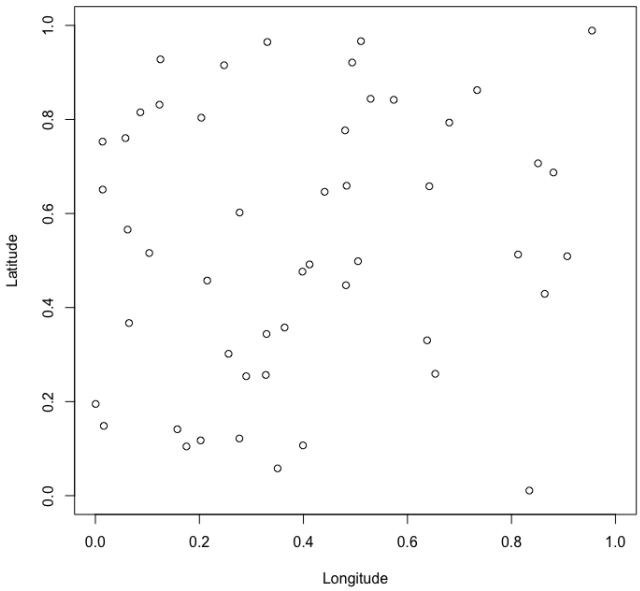
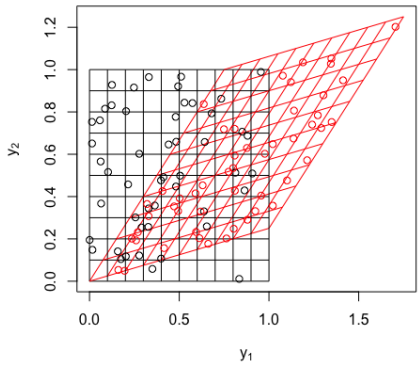


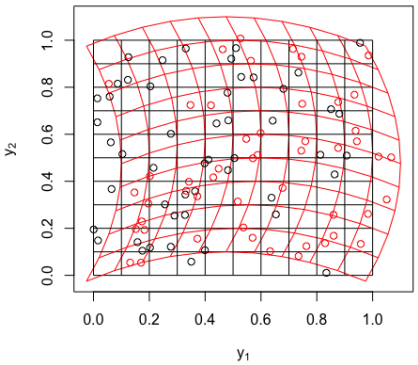
图3：模拟位置。

表1展示了协方差函数的估计参数，以及几种拟合中相关矩阵估计值的均方误差（MSE）。可以观察到，在线性、非线性和小波情形下，使用 $J = 3$ 和香农小波得到的估计值更接近参数的真实值；而在二次情形下，使用墨西哥帽小波得到的估计值更接近真实值。值得注意的是，在三种情形下，使用墨西哥帽小波均获得了最低的均方误差，但在线性情形下对应的是 $J = 2$ ，而在非线性和小波情形下对应的是 $J = 3$ 。只有在二次情形下，使用香农小波和 $J = 4$才获得了最小的均方误差。

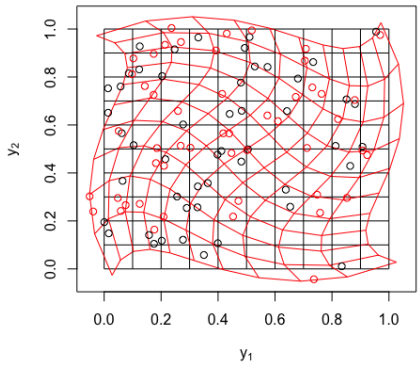
图5–12展示了样本数据的估计变形，以及估计相关矩阵上三角部分元素与真实相关矩阵之间的散点图。比较估计相关矩阵对于评估估计结果非常方便。根据表1中的均方误差（MSE），均方误差越小，散点图的准确性越高。值得注意的是，在线性情形和小波情形下，估计变形与真实变形非常接近。



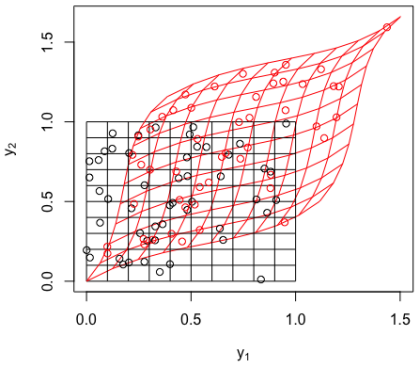
(a) 线性变形



(b) 二次变形



(c) 非线性变形



(d) 小波变形

图4：G 平面中的采样位置（及规则网格），以黑色表示；D平面中的变形后的位置（及变形后的网格），以红色表示。

表1：估计值】【。协方差函数的估计参数以及不同拟合结果的相关矩阵均方误差 .

参数的真实值: $\nu = 1 \quad \theta = 0.25 \quad \sigma_\epsilon^2 = 0.05$

	墨西哥帽小波			香农		
	线性变形					
	J = 2	J = 3	J = 4	J = 2	J = 3	J = 4
ν	1.03540	1.04229	1.03757	1.03493	1.02579	1.03192
θ	0.19197	0.18178	0.20000	0.20204	0.23975	0.21140
σ_ϵ^2	0.04117	0.03905	0.03771	0.04380	0.06739	0.04512
MSE	0.00173	0.00505	0.00290	0.00196	0.00409	0.00708
	二次变形					
	J = 3	J = 4	J = 5	J = 3	J = 4	J = 5
ν	1.01631	1.03535	1.01537	1.04410	1.04491	1.00799
θ	0.25529	0.26601	0.25003	0.26182	0.25878	0.25973
σ_ϵ^2	0.04272	0.04371	0.04082	0.04140	0.04032	0.04690
MSE	0.00309	0.00165	0.00195	0.00220	0.00124	0.00205
	非线性变形					
	J = 3	J = 4	J = 5	J = 3	J = 4	J = 5
ν	1.04400	1.04378	1.02342	1.02903	0.99906	1.04291
θ	0.22920	0.21801	0.23132	0.25214	0.24048	0.23826
σ_ϵ^2	0.04117	0.03905	0.03771	0.04183	0.03259	0.03297
MSE	0.00387	0.00539	0.00485	0.00409	0.00436	0.00451
	小波变形					
	J = 3	J = 4	J = 5	J = 3	J = 4	J = 5
ν	1.00827	1.02275	1.01732	1.02485	1.00019	1.00496
θ	0.19449	0.19605	0.20986	0.22260	0.20877	0.21827
σ_ϵ^2	0.05629	0.04681	0.05375	0.06022	0.06107	0.06728
MSE	0.00179	0.00279	0.00218	0.00296	0.00222	0.00226

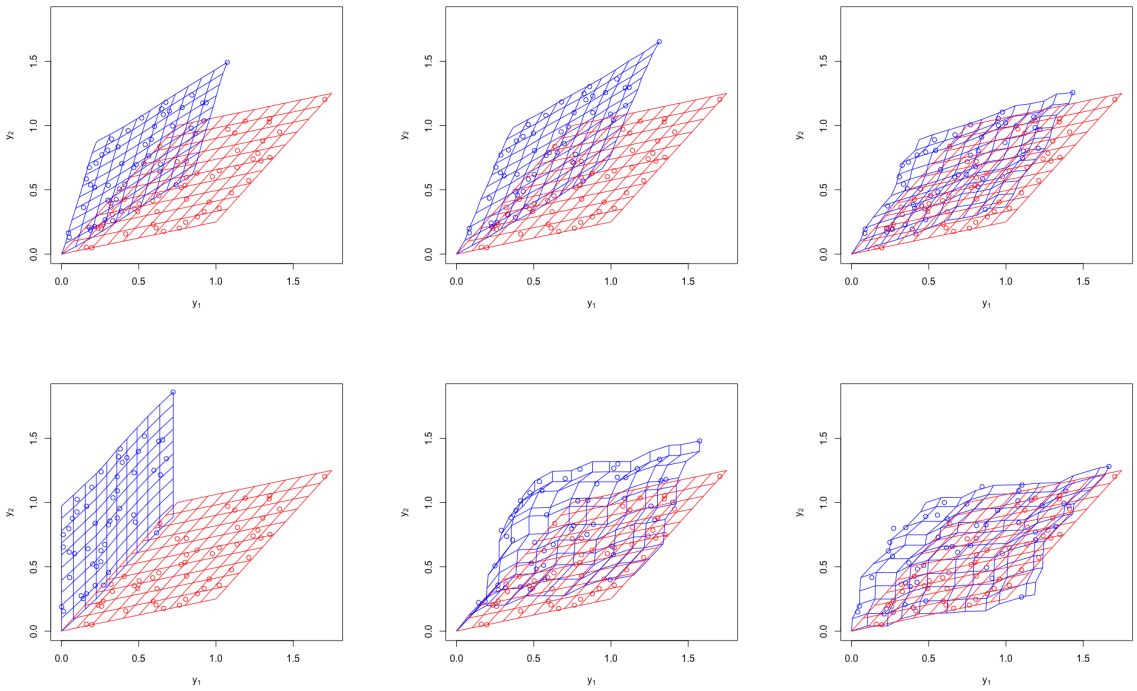


图 5：线性形变情形下，使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时， $J = 2$，3，4（从左到右）对应的估计变形（蓝色）。

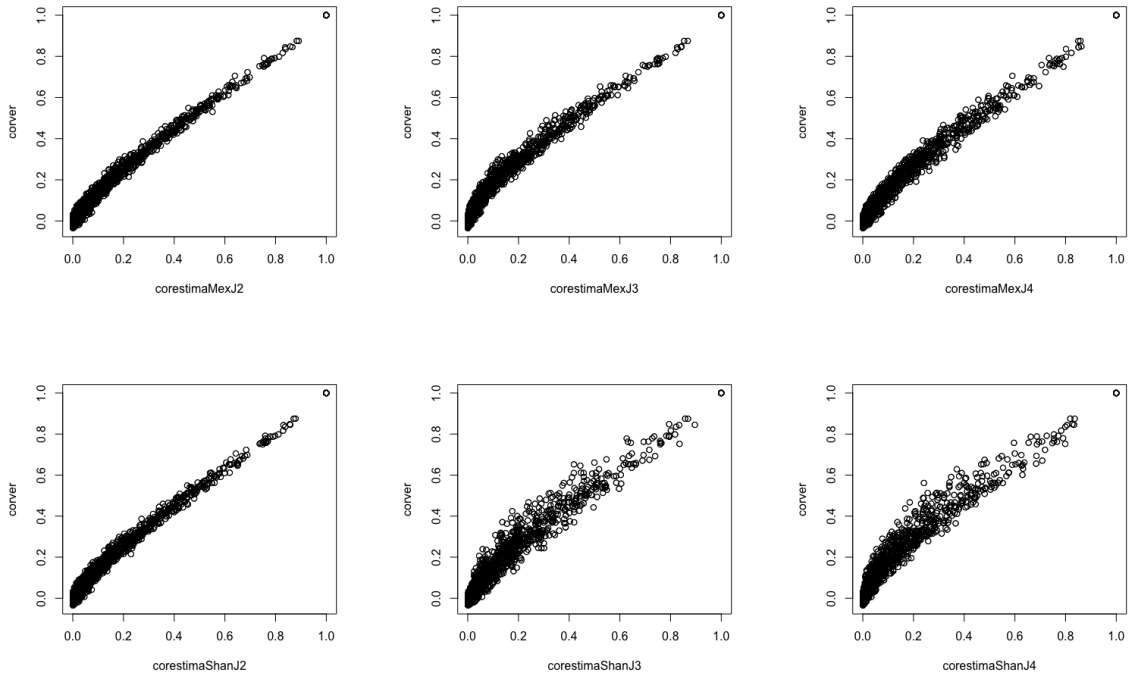


图 6：线性形变情形下，使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时， $J = 2$，3，4（从左到右）对应的估计相关矩阵与真实相关矩阵的比较。

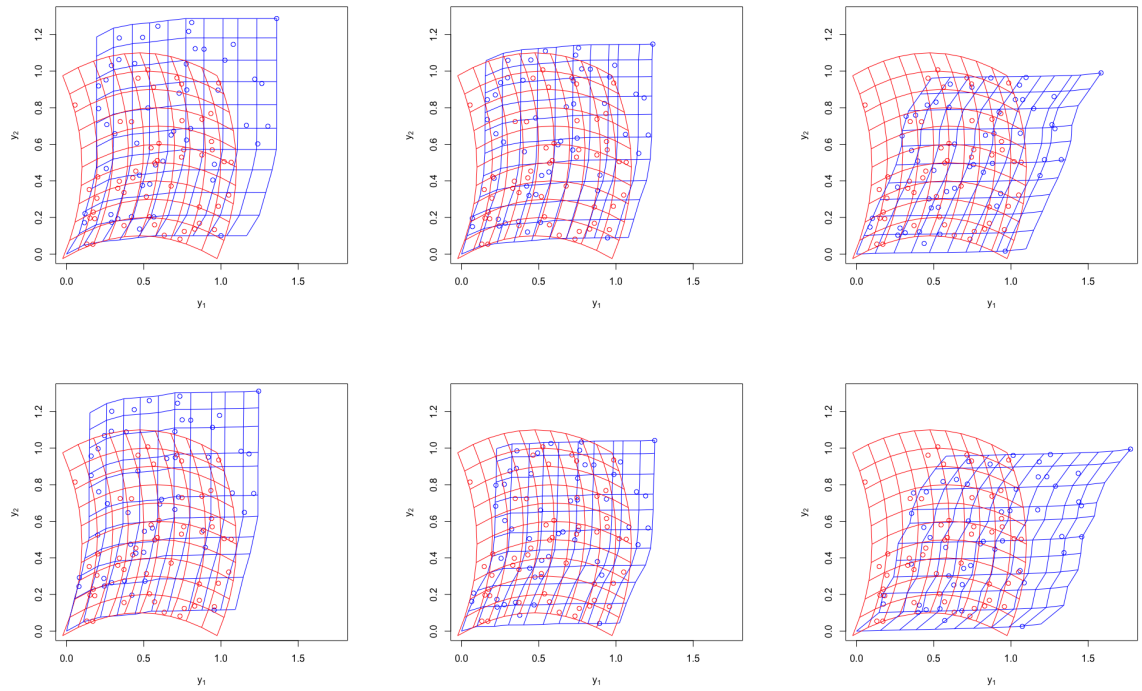


图 7：二次变形情形下使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时，当 $J = 3, 4, 5$（从左到右）得到的估计变形（蓝色）。

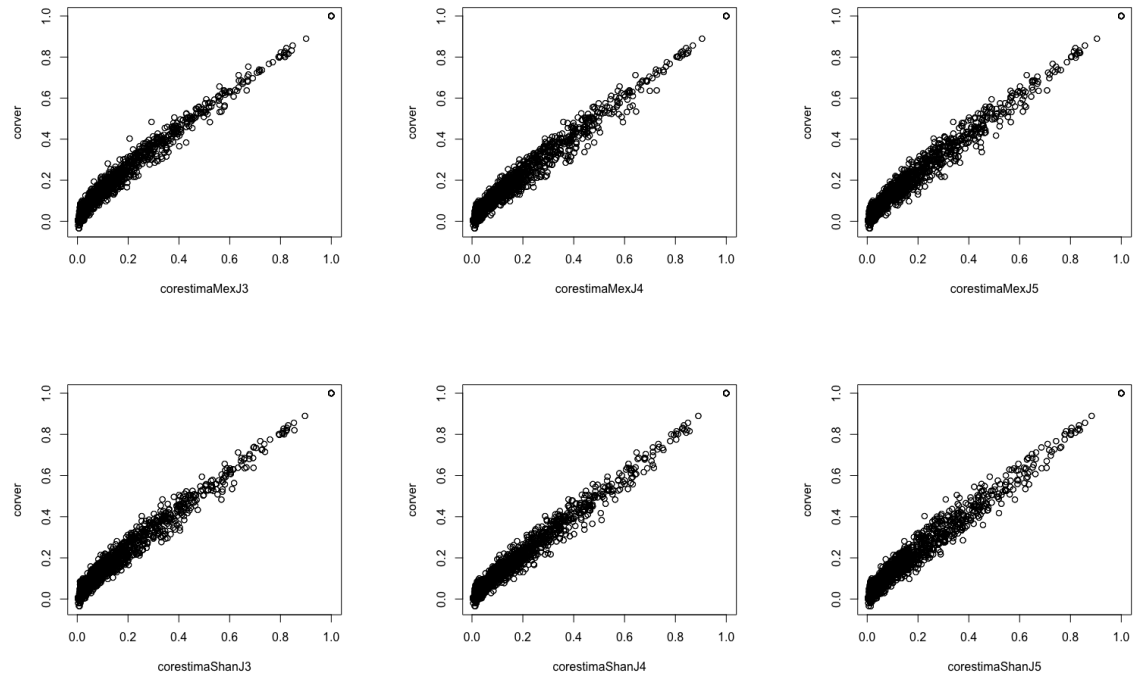


图 8：二次变形情形下使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时，当 $J = 3, 4, 5$（从左到右）得到的估计相关矩阵与真实相关矩阵的比较。

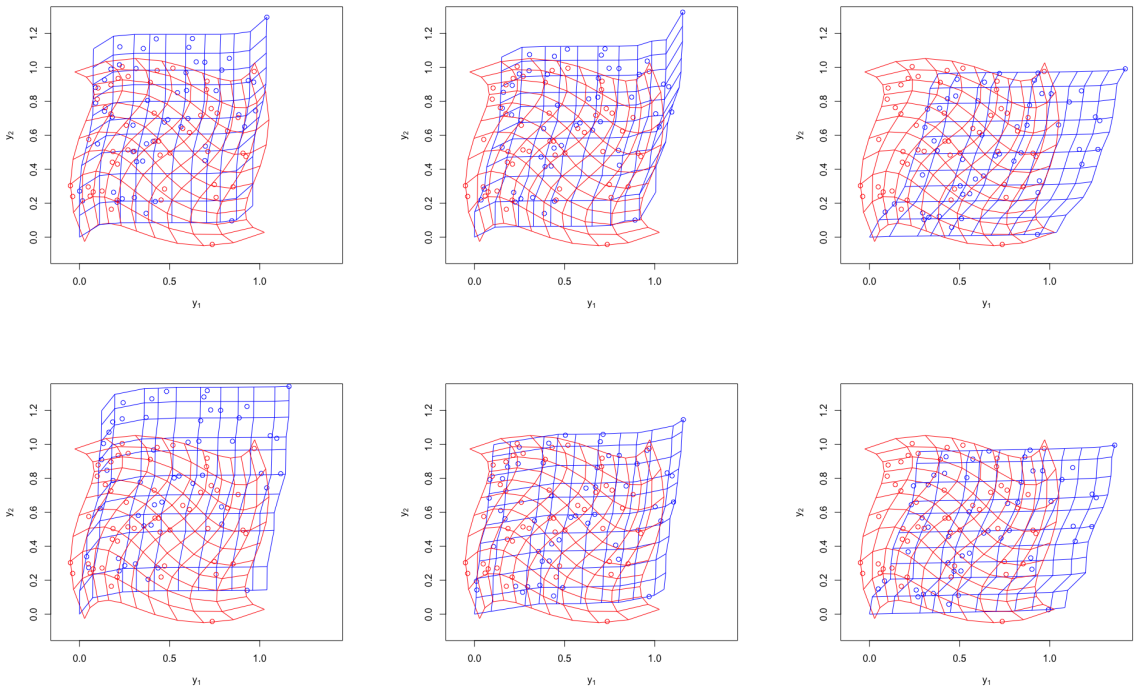


图 9：在非线性形变情况下，使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时，$J = 3$，4，5（从左到右）对应的估计变形（蓝色）。

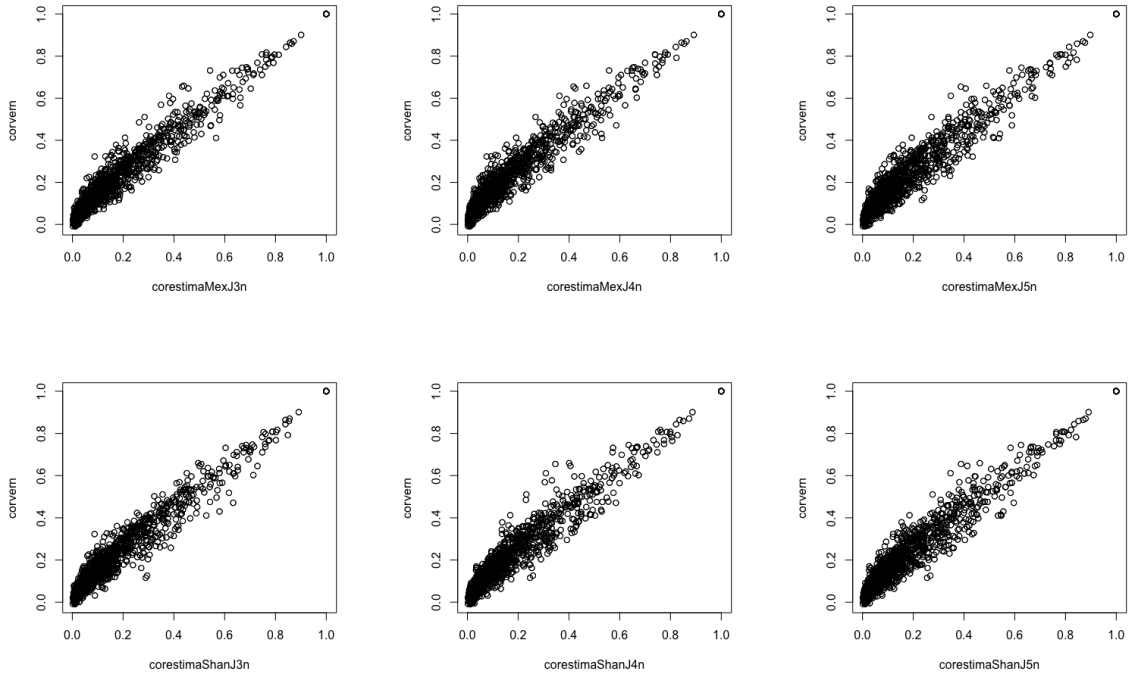


图 10：在非线性形变情况下，使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时，$J = 3$，4，5（从左到右）对应的估计相关矩阵与真实相关矩阵的比较。

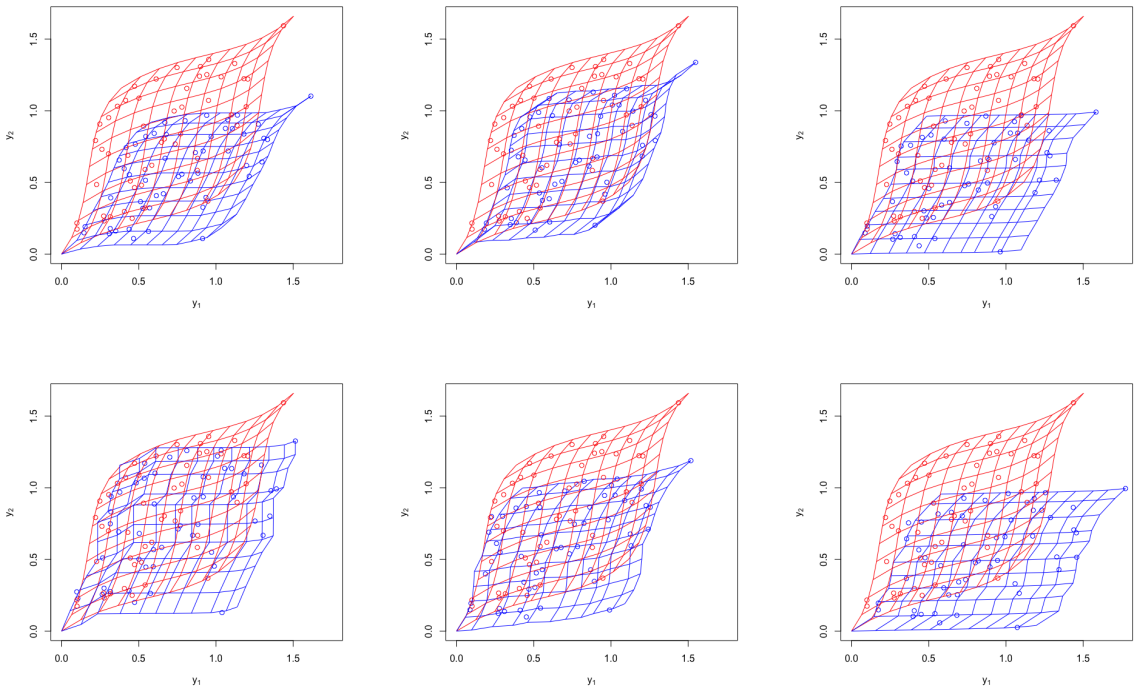


图 11：当 $J = 3$、4、5（从左至右）时，使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）的小波变形情形下的估计变形（蓝色）。

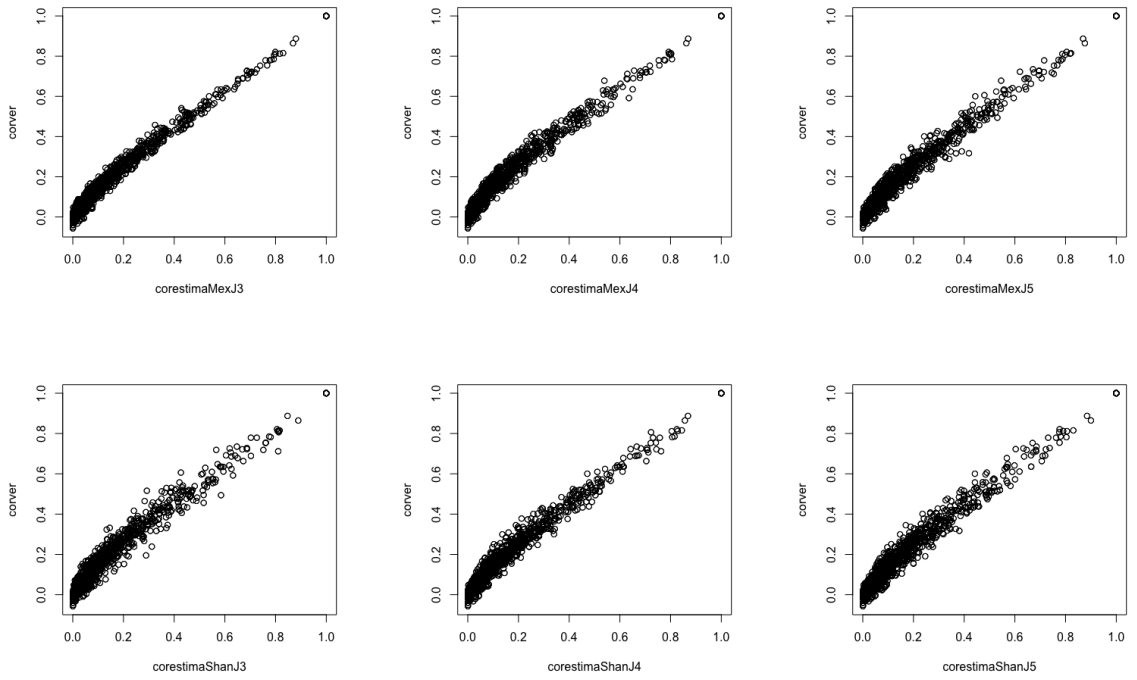


图 12：当 $J = 3$、4、 5（从左到右）时，使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）的小波变形情形中估计相关矩阵与真实相关矩阵的比较。

5 应用

用于说明第3.4节所述优化程序的数据集提供了历史每日最高气温记录。通过 R 包 **rnoaa**，可以直接从 GHCN（全球历史气候学网络）每日数据库获取这些数据。该数据库是美国国家海洋和大气管理局（NOAA）的综合性公共数据库。该数据集涵盖美国中西部各州的每日最高气温记录（以十分之一摄氏度为单位）。该地区由12个州组成：北达科他州、南达科他州、伊利诺伊州、印第安纳州、艾奥瓦州、堪萨斯州、密歇根州、明尼苏达州、密苏里州、内布拉斯加州、俄亥俄州和威斯康星州。我们仅使用1980年至1999年（含首尾年份）期间没有缺失数据的气候监测站。最终选取的51个站点如图13所示。图14展示了4个采样站点记录的最高气温。

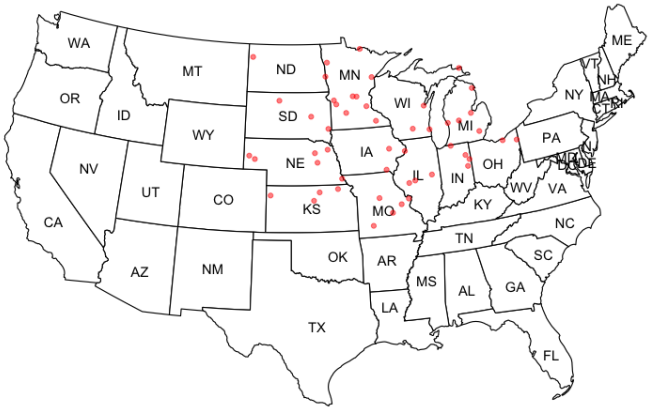


图 13：从美国中西部各州选取的站点位置。

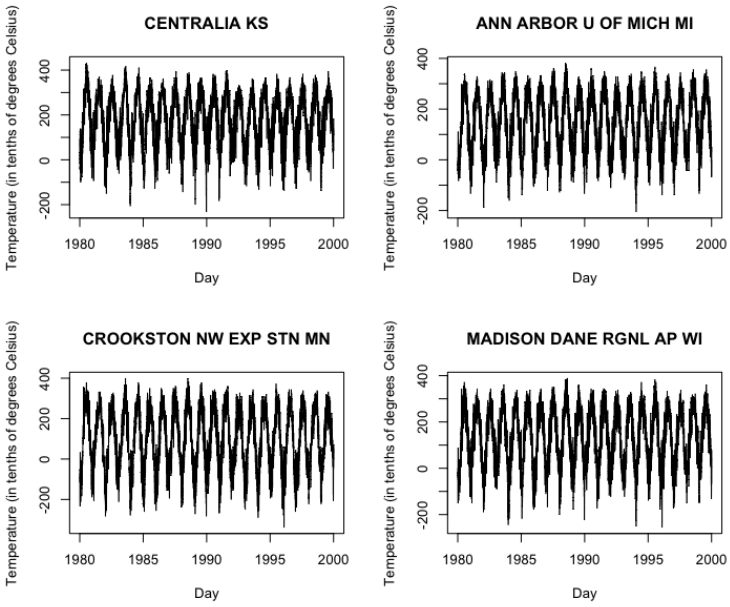


图 14：4 个采样站点记录的最高气温。

结果是通过第3.4节中描述的优化方法以及使用墨西哥帽小波和香农小波的形变（22）、（23）获得的，其中 $J = 2, 3, 4$。所使用的协方差函数采用公式（38）。图15展示了估计变形，表2给出了几种拟合的相关矩阵的均方误差。我们可以看到，当 $J = 3$ 时，墨西哥帽小波和香农小波的均方误差均有所改善。在散点图（图16）中也可以观察到相同的结论。值得注意的是，相关性较强，这可能是因为这些站点来自同一区域。

表2：不同拟合的相关矩阵估计参数和均方误差。

	墨西哥帽小波			香农		
	$J = 2$	$J = 3$	$J = 4$	$J = 2$	$J = 3$	$J = 4$
ν	0,06438	0,06299	0,07400	0,06826	0,06871	0,06746
θ	5,11259	4,24264	5,86402	4,04539	4,11567	4,98565
σ_ϵ^2	0,00024	0,00016	0,00022	0,00015	0,00011	0,00019
MSE	0,00106	0,00103	0,00174	0,00146	0,00109	0,00122

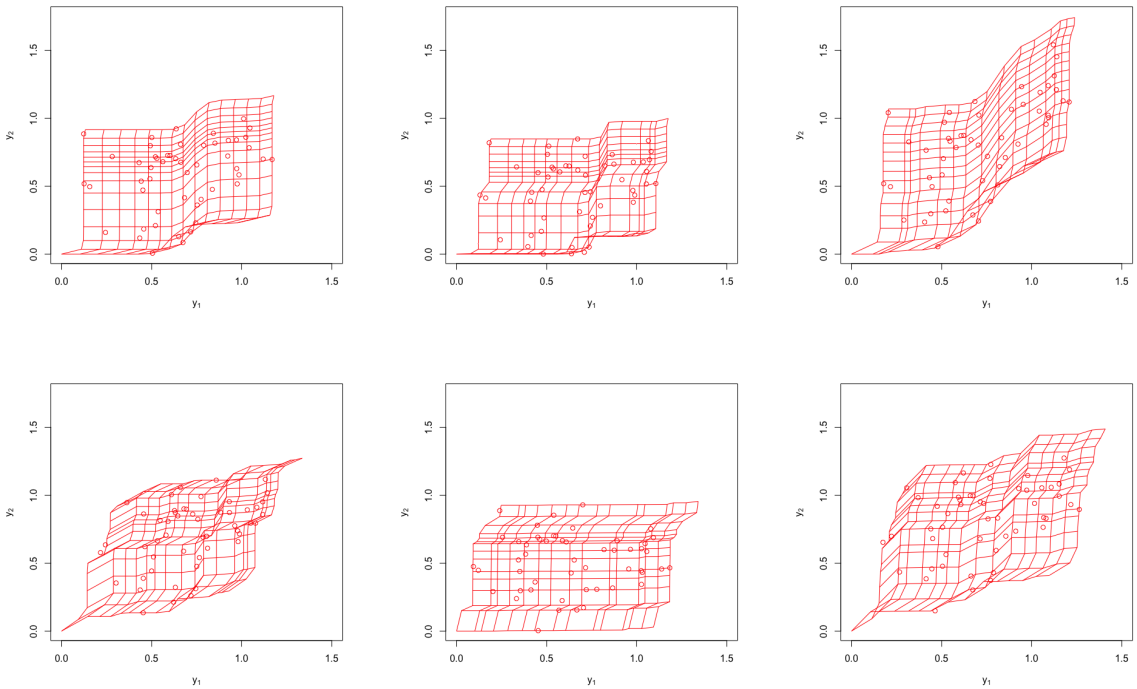


图15：使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时，当 $J = 2$，3，4（从左到右）得到的估计变形（红色）。

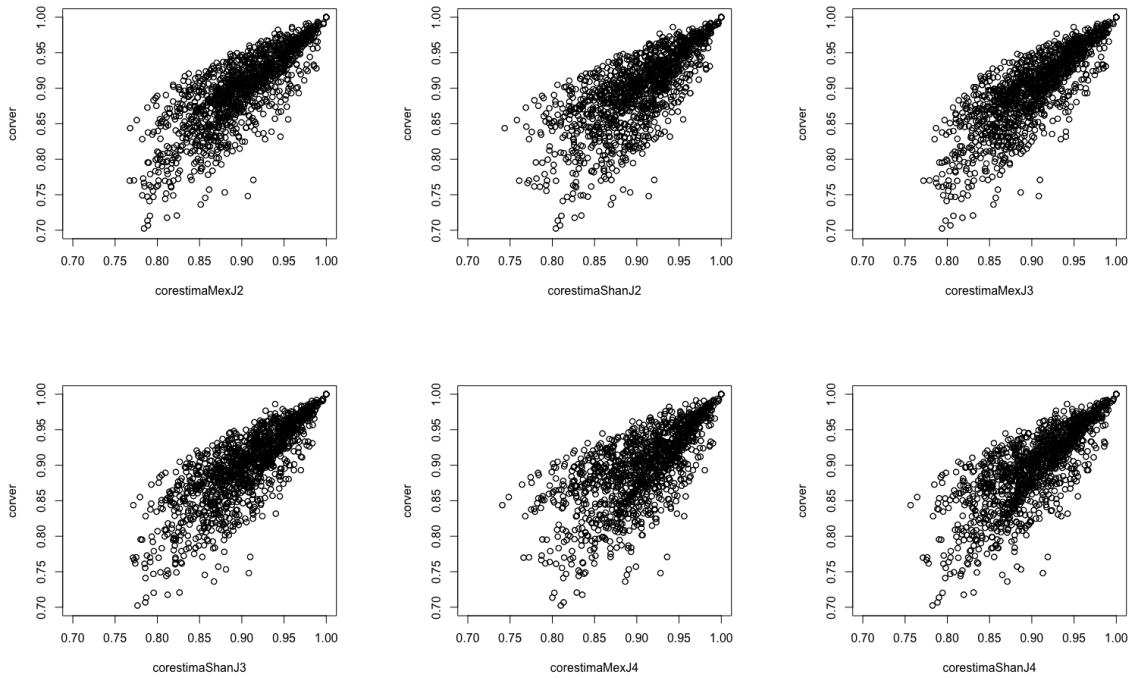


图 16：使用墨西哥帽小波（上）和香农小波（下）时，$J = 2$，3、4（从左到右）下估计相关矩阵与真实相关矩阵的比较。

6 进一步评论

本文提出了一种基于单调函数和小波基展开的变形方法，可保证变换的单射性。我们采用所提出的优化方法进行了若干模拟，并开展了一项应用研究。

根据反函数定理，如果 f 的雅可比行列式（记为 $det(J(f))$）非零，则 f 是单射函数。本文提出的形变满足雅可比行列式可逆这一条件。当 $det(J(f)) > 0$ 时，f 被视为双射函数，也就是说，可保证函数 f 的保向性。今后的研究可以进一步探索在所考虑的随机模型下保证变换为双射的方法。

致谢

Yangyang Chen 感谢 FAPESP 通过资助项目 2019/05917-6 提供支持。Pedro Alberto Morettin、Ronaldo Dias 和 Chang Chiann 感谢 FAPESP 资助项目 2018/04654-9 提供的部分支持。

参考文献

Choi, Y. 和 Lee, S. (2000) 二维和三维均匀三次B样条函数的单射条件， *Graphical Models*，第62卷，第6期，411–427。Chun, S. Y. 和 Fessler, J. A. (2009) 一种用于B样条非刚性图像配准的简单正则化器，可增强局部可逆性，*IEEE journal of selected topics in signal processing* **3**(1): 159-169。Cressie, N. 和 Wikle, C. K. (2011) *Statistic for Spatio-Temporal Data*，纽约：Wiley。Damian, D., Sampson, P. 和 Guttorp, P. (2001) 半参数非平稳空间协方差结构的贝叶斯估计， *Environmentrics* **12**(2):161-178。Guttorp, P., Meiring, W. 和 Sampson, P. D. (1994) 地面臭氧数据的时空分析， *Environmetrics***5**(3):241-254。Hardle, W., Kerkyacharian, G., Picard, D., Tsybakov, A. (1997) *Wavelets Approximations and Statistical Applica-tions*，纽约：Springer。Hastie, T.J. 和 Tibshirani, R.J. (1990) *Generalized Additive Models*，Chapman and Hall，纽约。Kim, J. (2004) 基于强度的图像配准：采用稳健相似性度量和约束优化的方法及其在放射治疗中的应用，博士学位论文，密歇根大学，密歇根州安娜堡。Musse, O. Heitz, F. 和 Armspach, J. (2001) 使用约束分层参数模型进行保持拓扑的可变形图像匹配， *IEEE Trans. Image Process.*，第10卷，第7期，1081–1093。Ramsay, J. O. (1998) 光滑单调函数的估计。 *Journal of Royal Statistical Society*，B辑，**60**(2), 365-375。Ramsay, J. O. 和 Silverman, B. W. (2006) *Functional Data Analysis*，第2版，纽约：Springer。Sampson, P. 和 Guttorp, P. (1992) 非平稳空间协方差结构的非参数估计， *Jounalof the American Statistical Association* **87**(417): 108-119。Schmidt, A. M. 和 O'Hagan, A. (2003) 通过空间变形对非平稳空间协方差结构进行贝叶斯推断。*Journal of the Royal Statistical Society*，B辑，**65**(3), 743-758。