Алгебра спектральных преобразований

Тетуев Р. К.
radja@impb.ru
Пущино, Институт математических проблем биологии РАН

Известно, что для произвольной функции $f(x)$, заданной в N точках $f(x_0), \dots, f(x_{N-1})$, при правильном выборе коэффициентов $C_0, \dots, C_{N-1}$ можно получить точное представление в виде конечного ряда:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} C_n \varphi_n(x),$$

где $\{\varphi_n(x)\}$ — некоторая система из N функций, заданных и линейно независимых на том же интервале, $x_0, \dots, x_{N-1} \in (a, b)$. Так, получим взаимно однозначное соответствие вектора дискретных значений функции и вектора дискретных значений коэффициентов:

$$(f_0, \dots, f_{N-1}) \Longleftrightarrow (C_0, \dots, C_{N-1}).$$

Несмотря на явную взаимозаменяемость данных представлений дискретных функций, последнее из них на практике зачастую оказывается более приемлемым, нежели первое. Так, можно получить представление функций приближенно, в виде «укороченых рядов» при $N_{min} < N$:

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{N_{\min}-1} C_n \varphi_n(x).$$

При подборе наиболее подходящей системы $\{\varphi_n(x)\}$ и правильном выборе минимального количества коэффициентов $N_{\min}$ можно добиться не только удовлетворительного приближения самой функции, но и различных ее преобразований. Например, для оператора $A = d/dx$ можно добиться следующего приближения:

$$f'(x) \approx \sum_{n=0}^{N_{\min}-1} C_n \varphi_n'(x).$$

Вообще, можно утверждать, что выше записано представление функции $f'(x)$ через систему функций $\{\varphi'(x)\}$. При этом, как видно, сам вектор коэффициентов остался без изменений.

На практике часто требуется выполнить совместные расчеты над множеством функций, проводя сравнительную оценку, и было бы намного удобнее, если бы все они представлялись через единную систему, но сами вектора коэффициентов преобразовывались (пересчитывались) по некоторым правилам к новым значениям. То есть в нашем случае — к виду

$$f'(x) \approx \sum_{n=0}^{K-1} C_n^* \varphi_n(x).$$

Пусть, к примеру, известно, что некоторая экспоненциальная функция $f(x) = e^{\alpha x}$ приближено описана степенным рядом:

$$f(x) \approx \sum_{n=0}^{4} C_n x^n = 1 + 2x + 2x^2 + \frac{4}{3}x^3 + \frac{2}{3}x^4.$$

Легко предложить правило для перерасчета вектора коэффициентов:

$$C_n^* := (n+1)C_{n+1},$$

соответствующее действию оператора дифференцирования:

$$f'(x) \approx \sum_{n=0}^{3} C_n^* x^n = 2 + 4x + 4x^2 + \frac{8}{3}x^3.$$

Представленные выше описания функций определены через единую систему функций (степенной ряд). Тогда, исходя из высокой степени корреляции значений векторов

$$\mathbf{C} = \left\{1, 2, 2, \frac{4}{3}, \frac{2}{3}\right\} \text{ и } \mathbf{C}^* = \left\{2, 4, 4, \frac{8}{3}, 0\right\}$$

приходим к выводу, что $f'(x) \approx 2f(x)$, следовательно, $\alpha \approx 2$ и $f(x) \approx e^{2x}$.

Рассмотренный пример со степенными рядами весьма прост при реализации на ЭВМ, однако обладает рядом существенных недостатков, как показано в работе [1], в сравнении с использованием ортогональных базисов, построенных на классических ортогональных полиномах.

Определим здесь алгебру спектральных преобразований (АСП) как набор правил преобразования векторов коэффициентов $\{F^{A,\Phi}\}$, если вектора являются спектральными разложениями функций по базису $\Phi = \{\varphi_n(x)\}$, при этом каждое правило $F^{A,\Phi}$ соответствует определенному оператору $A()$ из некоторой группы преобразований функций: $A \in \Gamma$.

Как доказано в работе [1], для построения правил быстрого перерасчета векторов коэффициентов достаточно знать рекуррентные соотношения особого вида, если таковые существуют и определены через линейные формы $F_n^A()$ для каждой из функций базиса $\varphi_{n+1}(x) \in \Phi$:

$$A(\varphi_{n+1}) = F_n^A\big[A(\varphi_n), \ldots, A(\varphi_{n-d}), \varphi_{n+q}, \ldots, \varphi_{n-p}\big]. \tag{1}$$

В работе [1] показано, что если рекуррентные соотношения этого вида известны для группы некоторых линейных операторов, например,

$$A(),\ B(),\ C() \in \Gamma,$$

то легко получить соотношения вида (1) как для обратных операторов:

$$A^{-1}(),\ B^{-1}(),\ C^{-1}() \in \Gamma,$$

так и для различных суперпозиций данных операторов:

$$A(B()),\ B(A()),\ C(B^{-1}()),\ A(A(C()))\ldots \in \Gamma.$$

Перечислим основные успехи и направления развития АСП на сегодня:

1. Привлечение часто используемых базисов. В работе [1] рассмотрены все классические ортогональные полиномы непрерывного аргумента: Якоби, Гэгенбауера, Эрмита, Чебышева, Лежандра, Лагерра и т. д.
2. Поиск аналитических соотношений вида (1) для требуемых линейных операторов: дифференцирования, интегрирования, свертки и т.д. [1], а также нелинейных, таких как перемножение функций [2].
3. Развитие алгоритмов быстрой обработки данных при использовании систем с паралельной архитектурой вычислений: OpenMP, MPI [1, 2].
4. Развитие элементной базы в сторону использования нейронных сетей и других вычислительных автоматов со взвешенным суммированием.

Работа выполнена при поддержке РФФИ, проекты №06-01-08039, №06-07-89303, №07-01-00564.

Литература

[1] *Тетуев Р. К., Дедус Ф. Ф.* Классические ортогональные полиномы. Применение в задачах обработки данных. — Пущино: препринт 2007. — 60 с.

[2] *Новикова Д. А., Поволоцкий А. В.* Формулы для преобразования функций в пространстве коэффициентов разложения по базису полиномов Чебышева второго рода // Сборник статей молодых ученых факультета ВМиК МГУ. — 2007. — №4. — С. 1–8.