УДК 517.988.8; 535.338.3

СИСТЕМЫ ЦЕЛОЧИСЛЕННЫХ СДВИГОВ, ПОРОЖДЕННЫЕ СВЕРТКОЙ ФУНКЦИЙ ГАУССА И ЛОРЕНЦА

Е. А. Киселев

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 21.06.2016 г.

Аннотация. Статья посвящена исследованию систем целочисленных сдвигов, построенных из функций, возникающих в атомном спектральном анализе и ядерной физике. Установлено, что наборы целочисленных сдвигов, порожденные сверткой функции Гаусса и Лоренца, являются системами Рисса. Произведена численная оценка констант Рисса A и B. Показано, что с ростом параметров ширины σ и s увеличивается отношение B/A. Построены биортогональная система и узловая функция, а также получена формула связи между их коэффициентами. Численно обнаружены некоторые другие особенности коэффициентов узловой функции и биортогональной системы, такие как нарушение в чередовании знаков и увеличение их абсолютных величин с ростом параметров σ и s.

Ключевые слова: функция Гаусса, функция Лоренца, контур Фойгта, свертка, система целочисленных сдвигов, константы Рисса, биортогональная система, интерполяция, узловая функция.

SYSTEMS OF INTEGER SHIFTS GENERATED BY CONVOLUTION OF GAUSS AND LORENTZ FUNCTIONS

E. A. Kiselev

Abstract. The article is devoted to research of systems of integer shifts constructed of functions originating in the atomic spectral analysis and the nuclear physics. It is established that sets of integer shifts generated by convolution of Gauss and Lorentz functions are Riesz systems. The numerical estimation of the Riesz constants A and B is performed. It is shown that with growing of the width parameters σ and s the ratio B/A increases. The biorthogonal system and the node function are constructed and also a formula of relation between their coefficients is obtained. Numerically revealed some other specificities of coefficients of the node function and the biorthogonal system such as irregularity in alternating of signs and increasing of its absolute values with growing of parameters σ and s.

Keywords: Gauss function, Lorentz function, Voigt profile, convolution, system of integer shifts, Riesz constants, biorthogonal system, interpolation, node function.

ВВЕДЕНИЕ

Функции Гаусса и Лоренца возникают в теории атомных спектров, а также в ядерной физике. В спектроскопии они показывают распределение интенсивности вблизи частоты ω_0 квантового перехода в атоме или молекуле. При ударном и радиационном уширениях, в случаях когда мал эффект Доплера, форма линий атомных и молекулярных спектров достаточно хорошо описывается лоренцевским контуром. Нормированное распределение интенсивности $g(\omega)$ отдельной спектральной линии, тогда имеет вид [1]

$$g_L(\omega) = \frac{\Gamma}{2\pi}\frac{1}{(\omega-\omega_0)^2+\Gamma^2/4}. \tag{1}$$

В формуле (1) Γ – параметр ширины спектральной линии.

При доплеровском уширении возникает гауссов контур:

$$g_D(\omega) = \frac{1}{\Delta\omega_D\sqrt{\pi}}\exp\left(-\left(\frac{\omega-\omega_0}{\Delta\omega_D}\right)^2\right), \tag{2}$$

где $\Delta\omega_D$ – полуширина спектральной линии [1].

При одновременном статистически независимом действии гауссова и лоренцевского типов уширения контур спектральной линии описывается сверткой функций 1 и 2 (контур Фойгта) [1]:

$$g(\omega) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} g_L(\omega-x)g_D(x)dx. \tag{3}$$

Во всех перечисленных случаях, спектральные линии описываются функциями, которые не являются ортогональными друг другу ни при каких соотношениях параметров. В настоящее время существует множество методов аппроксимации при помощи функции Гаусса (см., например, [2], [3], [4], [5]), данная система функций является достаточно хорошо изученной.

Вопрос о разложении по функциям Лоренца исследовался в работах [6], [7], [8]. Коротко перечислим основные результаты, полученные в этом направлении. Решена задача интерполяции по системе равномерных сдвигов функции Лоренца и проведен анализ устойчивости при различных значениях параметра ширины [6]. Построено несколько параметрических семейств биортогональных систем [7]. Изучено поведение коэффициентов узловой функции для системы равномерных сдвигов: установлена их немонотонность с возрастанием порядкового номера и нарушение чередования знаков, что отличается от случая функции Гаусса [8].

В настоящей статье проводится изучение базисных свойств функций, представляющих собой контур Фойгта (3). Будет рассмотрена задача об интерполяции по системам равномерных сдвигов этих функций, вопрос о возможности и способах построения биортогональных систем, а также проведена оценка устойчивости при помощи констант Рисса.

1. ПОСТАНОВКА ЗАДАЧИ

Рассматривается пространство комплекснозначных функций $L_2(\mathbb{R})$. Скалярное произведение и норма задаются обычным образом

$$(f,g) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)g^*(x)dx, ||f|| = \left(\int\limits_{-\infty}^{\infty} |f(x)|^2dx\right)^{1/2}.$$

Для удобства математических преобразований в формулах (1)–(3) введем следующие обозначения: $\Gamma = 2s, \Delta\omega_D = \sigma\sqrt{2}$. Отвлекаясь от реальной природы получаемого спектра, обозначим исследуемую зависимость $f(x)$. Требуется построить линейную комбинацию функций $\varphi_k(x), k \in \mathbb{Z}$, тем или иным образом приближающую $f(x)$. Система $\varphi_k(x), k \in \mathbb{Z}$ в нашем случае будет представлять собой равномерные сдвиги функции вида (3). С помощью соответствующего выбора единиц измерения задача всегда может быть сведена к рассмотрению целочисленных сдвигов, поэтому введем обозначения

$$\varphi_k(x,\sigma,s) = \varphi(x-k,\sigma,s),$$

где

$$\varphi(x,\sigma,s) = \frac{s}{\sigma\pi\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-t)^2}{2\sigma^2}\right)\frac{1}{s^2+t^2}dt. \qquad (4)$$

Прямое и обратное преобразование Фурье задается стандартным образом

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ix\xi}dx, f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi)e^{ix\xi}d\xi.$$

Для функции $\varphi(x,\sigma,s)$ тогда будет справедливо соотношение:

$$\widehat{\varphi}(\xi,\sigma,s) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{\sigma^2\xi^2}{2}\right)e^{-s|\xi|}. \qquad (5)$$

Важными характеристиками неортогональных систем функций являются константы Рисса.

Определение 1.([9], [10], [11]) Функции $\varphi_k(x), k \in \mathbb{Z}$ образуют систему Рисса с положительными константами A и B, если для любой последовательности $\{c_k\} \in l_2$, выполнена двусторонняя оценка

$$A||c||^2_{l_2} \leqslant \left|\left|\sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k\varphi_k(x)\right|\right|^2 \leqslant B||c||^2_{l_2}, \qquad (6)$$

где

$$||c||^2_{l_2} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k|^2.$$

Наибольшая из величин A в левом неравенстве называется нижней константой Рисса, наименьшая величина B в правом неравенстве – верхней константой Рисса. Отношение B/A в случае конечных наборов функций представляет собой число обусловленности матрицы Грама [12]. Чем ближе B/A к 1, тем выше устойчивость вычислений [11]. Для ортонормированных систем функций обе константы A и B равны 1. Кроме того, как показано в статье [9], для систем Рисса возможно построение биортогональной системы, которая дает один из способов разложения по $\varphi_k(x)$.

Определение 2. Функции $\varphi_k(x), \psi_n(x), k, n \in \mathbb{Z}$ образуют биортогональную систему, если

$$(\varphi_k, \psi_n) = \delta_{k,n}, k, n \in \mathbb{Z}.$$

На практике, когда имеется некоторый дискретный сигнал, широко используется также интерполяционный подход. Основным инструментом данного метода является узловая функция. Применительно к системам целочисленных сдвигов ей можно дать следующее определение.

Определение 3. Функция $\widetilde{\varphi}(x)$, являющаяся линейной комбинацией сдвигов $\varphi(x-k)$

$$\widetilde{\varphi}(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_k\varphi(x-k) \qquad (7)$$

называется узловой функцией, если она удовлетворяет соотношениям

$$\widetilde{\varphi}(m) = \delta_{0,m}, m \in \mathbb{Z}. \qquad (8)$$

Перейдем теперь непосредственно к рассмотрению системы целочисленных сдвигов контура Фойгта (4).

2. КОНСТАНТЫ РИССА

Нахождение констант Рисса в случае систем сдвигов обычно проводится следующим образом. Пусть $\varphi(x) \in L_2(\mathbb{R})$, тогда для того, чтобы функции $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образовывали систему Рисса с постоянными A и B, необходимо и достаточно, чтобы для почти всех $\xi \in \mathbb{R}$ выполнялись неравенства [10]

$$A \leqslant 2\pi \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\widehat{\varphi}(\xi + 2\pi k)|^2 \leqslant B. \tag{9}$$

Сумма в формуле (9) представляет собой периодическую функцию от ξ с периодом 2π. Поэтому, если обозначить

$$P(\xi) = 2\pi \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\widehat{\varphi}(\xi + 2\pi k)|^2,$$

то константы Рисса можно найти с помощью соотношений

$$A = \inf_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi), B = \sup_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi).$$

Для интересующего нас контура Фойгта (4) с учетом (5) имеем

$$P(\xi, \sigma, s) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\sigma^2(\xi + 2\pi k)^2\right) e^{-2s|\xi + 2\pi k|}. \tag{10}$$

Перейдем к результатам расчетов. При $\sigma = s = 0.5$ отношение констант $B/A \sim 136.4$. При увеличении σ оно стремительно возрастает: $s = 0.5, \sigma = 1$, $B/A \sim 2.2 \cdot 10^5$; $s = 0.5, \sigma = 2$, $B/A \sim 1.6 \cdot 10^{18}$. Несколько медленнее отношение констант увеличивается с ростом s: $s = 2, \sigma = 0.5$, $B/A \sim 1.7 \cdot 10^6$; $s = 5, \sigma = 0.5$, $B/A \sim 2.6 \cdot 10^{14}$. Таким образом, при больших значениях σ или s матрица Грама исследуемой системы сдвигов становится плохо обусловленной, причем более чувствительна система к изменениям именно параметра σ.

3. БИОРТОГОНАЛЬНАЯ СИСТЕМА

Для наборов целочисленных сдвигов $\varphi_k(x) = \varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$, являющихся системами Рисса, известен следующий результат [11]: если функция $\psi(x)$ удовлетворяет соотношению

$$\widehat{\psi}(\xi) = \frac{\widehat{\varphi}(\xi)}{P(\xi)}, \tag{11}$$

то $\psi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ вместе с набором $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образуют биортогональную систему.

Предварительно отметим несколько особенностей $P(\xi, \sigma, s)$ для сдвигов контура Фойгта. Во-первых, по теореме Вейерштрасса ряд (10) сходится равномерно на отрезке $\xi \in [0, 2\pi]$, так как справедлива оценка

$$\exp\left(-\sigma^2(\xi + 2\pi k)^2\right) e^{-2s|\xi + 2\pi k|} \leqslant e^{-2s|\xi + 2\pi k|} \leqslant e^{-4s\pi(|k|-1)}$$

и при этом

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} e^{-4s\pi(|k|-1)} < +\infty$$

Отсюда следует, что $P(\xi, \sigma, s)$ является непрерывной по ξ функцией. Аналогично можно показать, что $P(\xi, \sigma, s)$ имеет непрерывную производную, за исключением точек $\xi = 0$ и $\xi = 2\pi$.

Во-вторых, поскольку все слагаемые ряда для $P(\xi,\sigma,s)$ строго положительны и $P(\xi,\sigma,s)$ – непрерывна, то $\exists\varepsilon > 0 : P(\xi,\sigma,s) > \varepsilon$. Тогда при всех $\xi \in \mathbb{R}$ определена функция $1/P(\xi,\sigma,s)$, которая также будет непрерывной и имеет кусочно-непрерывную производную. Следовательно, $1/P(\xi,\sigma,s)$ можно разложить в ряд Фурье, который равномерно сходится к ней. Обозначим коэффициенты этого ряда через $\psi_k(\sigma,s)$, т. е.

$$\frac{1}{P(\xi,\sigma,s)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \psi_k(\sigma,s)e^{-ik\xi}. \tag{12}$$

Запишем теперь соотношение (11) для нашего случая

$$\widehat{\psi}(\xi,\sigma,s) = \frac{\widehat{\varphi}(\xi,\sigma,s)}{P(\xi,\sigma,s)} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \psi_k(\sigma,s)\widehat{\varphi}(\xi,\sigma,s)e^{-ik\xi}.$$

Равномерно сходящийся ряд справа можно почленно интегрировать, поэтому применяя к последней формуле обратное преобразование Фурье, получим

$$\psi(x,\sigma,s) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \psi_k(\sigma,s)\varphi(x-k,\sigma,s). \tag{13}$$

Таким образом, $\psi(x,\sigma,s)$ представляется в виде линейной комбинации сдвигов $\varphi(x-k,\sigma,s)$ с коэффициентами $\psi_k(\sigma,s)$, которые можно найти, разложив функцию $1/P(\xi,\sigma,s)$ в ряд Фурье на отрезке $\xi \in [0,2\pi]$.

Рассмотрим значения коэффициентов при конкретных σ и s. Во-первых, при некоторых параметрах наблюдается нарушение чередования знаков у коэффициентов. Например, при $s = 0.1$ и $\sigma = 0.5$: $\psi_{15}(0.1,0.5) = -0.00029$, $\psi_{16}(0.1,0.5) = -0.00024$ (все значащие цифры верные с точностью до округления). Выяснение того, когда именно следует ожидать подобный эффект, требует отдельного теоретического исследования. Заметим лишь, что нарушения чередования знаков особенно явно выражено при больших значениях параметра s по сравнению с σ, когда преобладающую роль в свертке играет именно функция Лоренца. Во-вторых, коэффициенты $\psi_k(\sigma,s)$ с увеличением σ и s возрастают по абсолютной величине. Например, $\psi_0(1,1) \approx 3.2 \cdot 10^4$, но $\psi_0(1,2) \approx 7.0 \cdot 10^{17}$, $\psi_0(2,1) \approx 1.4 \cdot 10^8$. Следовательно, ряды с участием $\psi_k(\sigma,s)$ будут сходится медленнее, при вычислениях потребуется учитывать все больше слагаемых. Это одно из проявлений потери устойчивости с ростом параметров σ и s.

4. ПОСТРОЕНИЕ УЗЛОВОЙ ФУНКЦИИ

Задача построения узловой функции (7) сводится к решению системы уравнений (8) относительно коэффициентов d_k. Для этого обычно применяется следующий прием. Введем вспомогательные ряды Фурье (символы или маски)

$$D(\xi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} d_k e^{-ik\xi}, \Phi(\xi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \varphi(k)e^{-ik\xi}.$$

Согласно [4] для того, чтобы выполнялись соотношения (8) достаточно найти такие d_k, чтобы для почти всех $\xi \in [0,2\pi]$ выполнялось равенство

$$D(\xi)\Phi(\xi) = 1.$$

Таким образом, необходимо разложить функцию $1/\Phi(\xi)$ в ряд Фурье.

Теорема. Если $\psi_k(\sigma,s)$ – коэффициенты для биортогональной системы в формуле (13), а $d_k(\sigma,s)$ – коэффициенты узловой функции для системы целочисленных сдвигов контура Фойгта (4), то имеет место соотношение

$$d_k(\sigma,s) = \psi_k(\sigma/\sqrt{2},s/2).$$

Доказательство. Применим формулу суммирования Пуассона

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \varphi(k)e^{-ik\xi} = \sqrt{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{\infty} \widehat{\varphi}(\xi + 2\pi k), \tag{14}$$

которая справедлива для всех $\xi \in \mathbb{R}$, если ряд слева сходится всюду, а ряд в правой части (14) сходится к некоторой непрерывной функции [11]. Подставим вместо $\varphi(x)$ функцию (4):

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \varphi(k,\sigma,s)e^{-ik\xi} = \sum_{k=-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{\sigma^2(\xi+2\pi k)^2}{2}\right)e^{-s|\xi+2\pi k|}. \tag{15}$$

Ряд в правой части представляет собой функцию $P(\xi, \sigma/\sqrt{2}, s/2)$. Поэтому оба требования, необходимые для применимости (15), как это следует из проведенного выше анализа $P(\xi, \sigma, s)$, выполняются и формула (15) является справедливой при всех $\xi \in \mathbb{R}$.

Для функции $1/P(\xi, \sigma/\sqrt{2}, s/2)$ существует равномерно сходящийся к ней ряд Фурье, а его коэффициентами будут $\psi_k(\sigma/\sqrt{2},s/2)$. Теорема доказана.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Грим, Г. Уширение спектральных линий в плазме / Г. Грим. — М. : Мир, 1978. — 491 с.

2. Журавлев, М. В. О вычислительных особенностях интерполяции с помощью целочисленных сдвигов гауссовых функций / М. В. Журавлев, Л. А. Минин, С. М. Ситник // Научные ведомости Белгородского государственного университета. — 2009. — № 13(68), вып. 17/2. — С. 89–99.

3. Журавлев, М. В. О константах Рисса для систем целочисленных сдвигов функции Гаусса / М. В. Журавлев // Научные ведомости Белгородского государственного университета. — 2011. — № 5(100), вып. 22. — С. 39–46.

4. Maz'ya, V. Approximate approximations / V. Maz'ya, G. Schmidt. — Providence, R.I. : American Mathematical Society. Mathematical Surveys and Monographs, 2007. — V. 141. — 350 p.

5. Schlumprecht, Th. On the sampling and recovery of bandlimited functions via scattered translates of the Gaussian / Th. Schlumprecht, N. Sivakumar // Journal of Approximation Theory. — 2009. — V. 151, № 1. — P. 128–153.

6. О константах Рисса для некоторых систем целочисленных сдвигов / Е. А. Киселев [и др.] // Математические заметки. — 2014. — Т. 96, вып. 2. — С. 239–250.

7. Киселев, Е. А. О построении биортогональных систем подпространств, порожденных целочисленными сдвигами одной функции / Е. А. Киселев, Л. А. Минин, И. Я. Новиков // Математические заметки. — 2014. — Т. 96, вып. 3. — С. 468–470.

8. Минин, Л. А. Поведение коэффициентов узловых функций, построенных из равномерных сдвигов функций Лоренца и функций Гаусса / Л. А. Минин, С. М. Ситник, С. Н. Ушаков // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Физика. Математика. — 2014. — № 12(183), вып. 35. — С. 214–217.

9. Бари, Н. К. Биортогональные системы и базисы в гильбертовом пространстве / Н. К. Бари // Ученые записки МГУ. — 1951. — Т. 4, № 148. — С. 69–107.

10. Новиков, И. Я. Теория всплесков / И. Я. Новиков, В. Ю. Протасов, М. А. Скопина. — М. : Физматлит, 2005. — 616 с.

11. Чуи, Ч. Введение в вейвлеты / Ч. Чуи. — М. : Мир, 2001. — 412 с.

12. Кострикин, А. И. Линейная алгебра и геометрия / А. И. Кострикин, Ю. И. Манин. — М. : Наука, 1986. — 304 с.

REFERENCES

1. Grim G. Broadening spectral lines in plasmas. [Грим Г. Уширение спектральных линий в плазме]. Moscow: Mir, 1978, 491 p.

2. Zhuravlev M.V., Minin L.A., Sitnik S.M. On numerical aspects of interpolating by shifts of Gaussian functions. [Журавлев М.В., Минин Л.А., Ситник С.М. О вычислительных особенностях интерполяции с помощью целочисленных сдвигов гауссовых функций]. *Научные ведомости Белгородского государственного университета — Belgorod State University Scientific bulletin*, 2009, no. 13(68), iss. 17/2, pp. 89–99.

3. Zhuravlev M.V. On Riesz constants for systems of integer shifts of Gauss functions. [Журавлев М.В. О константах Рисса для систем целочисленных сдвигов функции Гаусса]. *Научные ведомости Белгородского государственного университета — Belgorod State University Scientific bulletin*, 2011, no. 5(100), iss. 22, pp. 39–46.

4. Maz'ya V., Schmidt G. Approximate approximations. Providence, R.I.: American Mathematical Society. Mathematical Surveys and Monographs, 2007, vol. 141, 350 p.

5. Schlumprecht Th., Sivakumar N. On the sampling and recovery of bandlimited functions via scattered translates of the Gaussian. Journal of Approximation Theory, 2009, vol. 151, no. 1, pp. 128–153.

6. Kiselev E.A. et. al. On the Riesz constants for systems of integer translates. [Киселев Е.А. и др. О константах Рисса для некоторых систем целочисленных сдвигов]. *Matematicheskie zametki — Mathematical Notes*, 2014, vol. 96, iss. 2, pp. 239–250.

7. Kiselev E.A., Minin L.A., Novikov I.Ya. On the construction of biorthogonal systems for subspaces generated by integral shifts of a single function. [Киселев Е.А., Минин Л.А., Новиков И.Я. О построении биортогональных систем подпространств, порожденных целочисленными сдвигами одной функции]. *Matematicheskie zametki — Mathematical Notes*, 2014, vol. 96, iss. 3, pp. 468–470.

8. Minin L.A., Sitnik S.M., Ushakov S.N. Properties of coefficients of node functions of uniform expansions with integer shifts of Gauss and Lorentz functions. [Минин Л.А., Ситник С.М., Ушаков С.Н. Поведение коэффициентов узловых функций, построенных из равномерных сдвигов функций Лоренца и функций Гаусса]. *Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия: Физика. Математика — Belgorod State University Scientific bulletin*, 2014, no. 12(183), iss. 35, pp. 214–217.

9. Bari N.K. Biorthogonal systems and bases in Hilbert space. [Бари Н.К. Биортогональные системы и базисы в гильбертовом пространстве]. *Ученые записки МГУ — Uch. Zap. Mosk. Gos. Univ*, 1951,vol. 4, no. 148, pp. 69–107.

10. Novikov I.Ya., Protasov V.Yu., Scopina M.A. Wavelet Theory. [Новиков И.Я., Протасов В.Ю., Скопина М.А. Теория всплесков]. Moscow, 2005, 616 p.

11. Chui C. An Introduction to Wavelets. [Чуи Ч. Введение в вейвлеты]. Moscow: Mir, 2001, 412 p.

12. Kostrikin A.I., Manin Yu.I. Linear algebra and geometry. [Кострикин А.И., Манин Ю.И. Линейная алгебра и геометрия]. Moscow: Nauka, 1986, 304 p.

Киселев Евгений Александрович, ассистент, факультет компьютерных наук, Воронежский государственный университет, г. Воронеж, Российская Федерация
E-mail: evg-kisel2006@yandex.ru

Kiselev Evgeniy Alexandrovich, Department assistant, Faculty of Computer Sciences, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: evg-kisel2006@yandex.ru