УДК 517.518.32+517.988.8

СИСТЕМЫ ЦЕЛОЧИСЛЕННЫХ СДВИГОВ, ПОРОЖДЕННЫЕ ПРОИЗВЕДЕНИЕМ ГАУССОВОЙ И СТЕПЕННОЙ ФУНКЦИЙ

М. А. Галыгина, Е. А. Киселев, Л. А. Минин, С. Н. Ушаков

Воронежский государственный университет

Поступила в редакцию 04.10.2020 г.

Аннотация. Системы целочисленных сдвигов являются удобным математическим аппаратом в различных приложениях. В данной работе рассмотрены семейства сдвигов, порожденные произведением функции Гаусса и степенной функции. Для них получены формулы, которые дают возможность рассчитать константы Рисса. Также представлены и некоторые количественные оценки. Опираясь на результаты расчетов, установлено, что с увеличением параметра ширины функции Гаусса отношение констант Рисса возрастает. Построены несколько вариантов биортогональных систем, которые позволяют создать алгоритмы разложения в ряд по исследуемому набору функций.

Ключевые слова: функция Гаусса, система целочисленных сдвигов, система Рисса, константы Рисса, биортогональная система.

SYSTEMS OF INTEGER TRANSLATES GENERATED BY PRODUCT OF THE GAUSSIAN AND THE POWER FUNCTIONS

M. A. Galygina, E. A. Kiselev, L. A. Minin, S. N. Ushakov

Abstract. Systems of integer translates are a convenient mathematical tool in various applications. In this paper we consider families of translates generated by product of the Gaussian function and the power function. Formulae that make it possible to calculate the Riesz bounds for them are obtained. Some quantitative estimates are also presented. Based on the calculation results, it was found that with increasing the width parameter of the Gaussian function the ratio of the Riesz bounds increases. Several variants of biorthogonal systems those allow to create series expansion algorithms for the set of functions under investigation have been constructed.

Keywords: Gaussian function, system of integer translates, Riesz system, Riesz bounds, biorthogonal system.

ВВЕДЕНИЕ

Системы равномерных сдвигов представляют собой достаточно удобный математический аппарат с точки зрения различных приложений. Это связано с тем, что на практике измерения часто проводят с постоянным шагом. Так, например, большой популярностью на данный момент пользуются система целочисленных сдвигов функции Гаусса и B-сплайны [1], [2].

Недостатком многих применяемых в настоящее время семейств сдвигов является их неортогональность. В этой связи возникают две ключевые задачи. Во-первых, поиск алгоритмов представления в виде сходящегося ряда по исследуемой системе функций. Во-вторых, оценка устойчивости процедуры разложения.

В данной работе рассматривается пространство $L_2(\mathbb{R})$. Объектом изучения являются системы целочисленных сдвигов, порождаемые функциями вида

$$\varphi_n(x) = x^n \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right), \sigma > 0, n = 0, 1, 2, \dots, \tag{1}$$

которые нашли применение в квантовой химии [3]. Для этого семейства функций мы построим биортогональную систему. Чтобы избежать громоздких обозначений, необходимые определения мы будем формулировать сразу для частного случая систем целочисленных сдвигов.

Определение 1. [4], [5] Два набора функций $\varphi(x-k)$ и $\psi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образуют биортогональную систему в пространстве $L_2(\mathbb{R})$, если выполняется соотношение

$$(\varphi(\cdot - k),\psi(\cdot - \ell)) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \varphi(x-k)\overline{\psi(x-\ell)}dx = \delta_{k,\ell}, k, \ell \in \mathbb{Z}. \tag{2}$$

Широко используется также термин двойственная система. Подобная конструкция является одним из инструментов разложения по неортогональным семействам функций. Известно, что биортогональная система существует, если исследуемый набор функций $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образует систему Рисса [6].

Определение 2. [5], [7] Функции $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$, $\varphi(x) \in L_2(\mathbb{R})$ образуют систему Рисса с положительными константами A и B, если для любого набора коэффициентов $\{c_k\} \in \ell_2$ выполнена двусторонняя оценка

$$A\left\|c\right\|_{\ell_2}^2 \leqslant \left\|\sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \varphi(\cdot - k)\right\|_{L_2}^2 \leqslant B\left\|c\right\|_{\ell_2}^2, \tag{3}$$

где нормы задаются обычным образом:

$$\left\|c\right\|_{\ell_2}^2 = \sum_{k=-\infty}^{\infty} |c_k|^2, \left\|f\right\|_{L_2}^2 = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left|f(x)\right|^2 dx. \tag{4}$$

Под A и B обычно понимаются их наилучшие оценки. Тогда наибольшее значение A называют нижней константой Рисса, наименьшую величину B — верхней константой Рисса. Для ортонормированных систем функций A и B равны 1.

В конечномерном случае отношение констант Рисса B/A равно числу обусловленности матрицы Грама [4]. Когда оно слишком велико, матрица называется плохо обусловленной и в этом случае приходится прибегать к специальным приемам для обеспечения устойчивости вычислений [8]. По этой причине отношение констант Рисса B/A рассматривается в качестве важного параметра, характеризующего устойчивость процедуры разложения по исследуемой системе функций.

Если задать прямое и обратное преобразование Фурье в виде

$$\widehat{f}(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-ix\xi}dx, f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(\xi)e^{ix\xi}d\xi, \tag{5}$$

то имеют место следующие факты, которые справедливы в частном случае систем целочисленных сдвигов.

Утверждение 1. [5], [7] Пусть $\varphi(x) \in L_2(\mathbb{R})$. Для того чтобы семейство функций $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ являлось системой Рисса с положительными постоянными A и B, необходимо и достаточно, чтобы для почти всех $\xi \in [0, 2\pi]$ выполнялось соотношение

$$A \leqslant 2\pi \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\widehat{\varphi}(\xi + 2\pi k)|^2 \leqslant B. \tag{6}$$

Под A и B в формуле (6) также понимаются их наилучшие оценки.

Утверждение 2. [5], [7] Пусть набор функций $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ является системой Рисса. Тогда, если функцию $\psi^{in}(x)$ задать в образах Фурье формулой

$$\widehat{\psi}^{in}(\xi) = \frac{\widehat{\varphi}(\xi)}{2\pi \sum\limits_{k=-\infty}^{\infty} |\widehat{\varphi}(\xi + 2\pi k)|^2}, \tag{7}$$

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

Знаком "in" у функции $\psi^{in}(x)$ мы отмечаем тот факт, что она принадлежит линейной оболочке $\varphi(x-k), k \in \mathbb{Z}$ [5], [7]. Если использовать подход, аналогичный тому, который описан в статье [9], можно построить и другие варианты биортогональных систем. В этом случае мы будем использовать обозначение "out" вверху.

1. КОНСТАНТЫ РИССА

Рассмотрим функцию (1) при некотором фиксированном значении n. Для краткой записи соотношений нам потребуется понятие третьей тета-функции Якоби [10]

$$\theta_3(x,q) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} q^{k^2} e^{2ikx}, |q| < 1. \tag{8}$$

Условимся в дальнейшем производную m-го порядка некоторой функции $f(x)$ обозначать $f^{(m)}(x)$, причем под $\theta_3^{(m)}(x,q)$ мы будем подразумевать производную тета-функции по первому аргументу.

Теорема 1. Семейство целочисленных сдвигов $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$ является системой Рисса, с константами, которые определяются следующими соотношениями:

$$A = \min_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi), B = \max_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi), \tag{9}$$

где

$$P(\xi) = \sum_{m=0}^{n} b_m(n) \theta_3^{(2m)} \left(\frac{\xi}{2}, q \right), \tag{10}$$

$$b_m(n) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{4n+1}} (n-m)! C_n^m C_{2(n-m)}^{n-m} (2\sigma)^{2(n-m)+1}, q = \exp\left(-\frac{1}{4\sigma^2}\right). \tag{11}$$

Доказательство. Прежде всего отметим, что в силу наличия в суммах функции Гаусса, все рассматриваемые ниже функциональные ряды будут сходиться равномерно.

Согласно формуле (6), для расчета констант Рисса необходимо найти сумму

$$P(\xi) = 2\pi \sum_{k=-\infty}^{\infty} |\widehat{\varphi}_n(\xi + 2\pi k)|^2. \tag{12}$$

С помощью формулы суммирования Пуассона [7] выражение для $P(\xi)$ можно записать в виде тригонометрического ряда

$$P(\xi) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} a_k e^{ik\xi}, \tag{13}$$

где

$$a_k = \int_{-\infty}^{\infty} \left|\widehat{\varphi}_n(\xi)\right|^2 e^{-ik\xi} d\xi. \tag{14}$$

Для нахождения интеграла воспользуемся свойствами преобразования Фурье, связанными с унитарностью и сдвигом аргумента:

$$a_k = \int_{-\infty}^{\infty} \widehat{\varphi}_n(\xi)\overline{(\widehat{\varphi}_n(\xi)e^{ik\xi})}d\xi = \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_n(x)\overline{\varphi_n(x+k)}dx. \tag{15}$$

Затем подставим явный вид функции $\varphi_n(x)$:

$$a_k = \int_{-\infty}^{\infty} x^n (x+k)^n \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{(x+k)^2}{2\sigma^2}\right)dx. \tag{16}$$

После несложных преобразований получим

$$a_k = \exp\left(-\frac{k^2}{4\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} x^n (x+k)^n \exp\left(-\frac{(x+k/2)^2}{\sigma^2}\right)dx. \tag{17}$$

Выполним замену переменной $\sigma y = x + k/2$:

$$\begin{gathered} a_k = \sigma \exp\left(-\tfrac{k^2}{4\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sigma y - \tfrac{k}{2}\right)^n \left(\sigma y + \tfrac{k}{2}\right)^n \exp\left(-y^2\right)dy = \\ = \sigma \exp\left(-\tfrac{k^2}{4\sigma^2}\right) \int_{-\infty}^{\infty} \left(\sigma^2 y^2 - \tfrac{k^2}{4}\right)^n \exp\left(-y^2\right)dy. \end{gathered} \tag{18}$$

Подынтегральная функция является четной, поэтому можно сделать пределы интегрирования полубесконечными. После этих действий, выполнив дополнительно замену переменной $z = y^2$, получим:

$$a_k = \sigma \exp\left(-\frac{k^2}{4\sigma^2}\right) \int_0^{\infty} \left(\sigma^2 z - \frac{k^2}{4}\right)^n \exp(-z)\frac{dz}{\sqrt{z}}. \tag{19}$$

Выразим интеграл через Г-функцию. Для этого раскроем скобки по формуле бинома Ньютона:

$$\begin{gathered} a_k = \sigma \exp\left(-\tfrac{k^2}{4\sigma^2}\right) \sum_{m=0}^{n} C_n^m \left(-\tfrac{k^2}{4}\right)^m \sigma^{2(n-m)} \int_0^{\infty} z^{n-m-1/2} \exp(-z)dz = \\ = \exp\left(-\tfrac{k^2}{4\sigma^2}\right) \sum_{m=0}^{n} (-1)^m C_n^m \tfrac{k^{2m}}{2^{2m}} \sigma^{2(n-m)+1} \Gamma\left(n - m + \tfrac{1}{2}\right). \end{gathered} \tag{20}$$

Поскольку

$$\begin{gathered} \Gamma\left(n-m+\tfrac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}\tfrac{1}{2}\left(\tfrac{1}{2}+1\right)\cdot\ldots\cdot\left(\tfrac{1}{2}+n-m-1\right) = \\ = \tfrac{\sqrt{\pi}(2(n-m)-1)!!}{2^{n-m}} = \tfrac{\sqrt{\pi}(2(n-m))!}{2^{2(n-m)}(n-m)!} = \tfrac{\sqrt{\pi}}{2^{2(n-m)}}(n-m)!C_{2(n-m)}^{n-m}, \end{gathered} \tag{21}$$

можем записать

$$a_k = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{2n}} \exp\left(-\frac{k^2}{4\sigma^2}\right) \sum_{m=0}^{n} (-1)^m (n-m)! C_n^m C_{2(n-m)}^{n-m} \sigma^{2(n-m)+1} k^{2m}. \tag{22}$$

Соотношение (22) с использованием обозначений $b_m(n)$, q в условии теоремы 1 приводится к следующему виду:

$$a_k = q^{k^2} \sum_{m=0}^{n} (-1)^m 2^{2m} b_m(n) k^{2m}. \tag{23}$$

Подставим полученное выражение (23) в формулу (13) для $P(\xi)$, сделав при этом сумму по m внешней:

$$\begin{gathered} P(\xi) = \sum_{m=0}^{n} (-1)^m 2^{2m} b_m(n) \sum_{k=-\infty}^{\infty} q^{k^2} k^{2m} e^{ik\xi} = \\ = \sum_{m=0}^{n} 2^{2m} b_m(n) \tfrac{d^{2m}}{d\xi^{2m}} \left(\sum_{k=-\infty}^{\infty} q^{k^2} e^{ik\xi} \right) = \\ = \sum_{m=0}^{n} 2^{2m} b_m(n) \tfrac{d^{2m}}{d\xi^{2m}} \left(\theta_3 \left(\tfrac{\xi}{2}, q \right) \right) = \sum_{m=0}^{n} b_m(n) \theta_3^{(2m)} \left(\tfrac{\xi}{2}, q \right). \end{gathered} \tag{24}$$

Покажем теперь, что в случае, когда $\varphi_n(x)$ определяется формулой (1), функция $P(\xi)$ будет строго положительной. Действительно, ряд для $P(\xi)$ состоит из неотрицательных слагаемых $|\widehat{\varphi}_n(\xi + 2\pi k)|^2$, каждое из которых, если подставить явный вид $\varphi_n(x)$, по структуре представляет собой сдвиг одного и того же полинома степени $2n$, умноженного на функцию Гаусса. Данный полином может иметь лишь конечное число корней, поэтому все слагаемые не могут обратиться в нуль одновременно и $P(\xi) > 0, \xi \in \mathbb{R}$.

Поскольку $\theta_3(x, q)$ и все ее производные непрерывны, то непрерывной будет и функция $P(\xi)$. Следовательно, $P(\xi)$ на отрезке $[0, 2\pi]$ ограничена и достигает своего минимального и максимального значения. Отсюда получаем следующую оценку: $0 < \min\limits_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi) \leqslant P(\xi) \leqslant \max\limits_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi) < \infty$. В этом случае, согласно утверждению 1, функции $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образуют систему Рисса с константами $A = \min\limits_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi)$, $B = \max\limits_{\xi \in [0,2\pi]} P(\xi)$. При этом, как следует из сказанного выше, полученные оценки для A и B будут наилучшими. Теорема доказана.

2. БИОРТОГОНАЛЬНЫЕ СИСТЕМЫ

С помощью теоремы 1 для семейства сдвигов $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$ можно легко построить биортогональную систему.

Следствие из теоремы 1. Пусть функция $\psi_n^{in}(x)$, $n = 0, 1, 2, \ldots$ в образах Фурье задается формулой

$$\widehat{\psi}_n^{in}(\xi) = \frac{\widehat{\varphi}_n(\xi)}{\sum\limits_{m=0}^{n} b_m(n) \theta_3^{(2m)} \left(\frac{\xi}{2}, q \right)}, \tag{25}$$

где коэффициенты $b_m(n)$ определяются соотношением (11). Тогда ее сдвиги $\psi_n^{in}(x-k), k \in \mathbb{Z}$ вместе с $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образуют биортогональную систему.

Данное утверждение напрямую вытекает из формулы (7), если подставить в нее выражение (10).

Будем теперь рассматривать сдвиги функции (1) с различными значениями $n = 0, 1, 2, \ldots$ совокупно. Для краткой записи соотношений, нам потребуются центрированные B-сплайны.

С помощью свертки они рекуррентно определяются следующим образом [2], [7]:

$$B_1(x) = \chi_{\left[-\frac{1}{2},\frac{1}{2}\right]}(x), B_{n+1}(x) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} B_n(x-t)B_1(t)dt,\ n \geqslant 1, \tag{26}$$

где $\chi_{[a,b]}(x)$ — характеристическая функция отрезка $[a,b]$.

Теорема 2. Пусть функция $\psi_n^{out}(x), n = 0,1,2,\dots$ в образах Фурье задается выражением

$$\widehat{\psi}_n^{out}(\xi) = \frac{i^n}{(2\pi)^{n+1}\sigma^{2n+1}n!}\exp\left(\frac{\sigma^2\xi^2}{2}\right)B_{n+1}^{(n)}\left(\frac{\xi}{2\pi}\right). \tag{27}$$

Тогда имеет место следующее соотношение:

$$\begin{gathered}(\varphi_m(\cdot-k),\psi_n^{out}(\cdot-\ell)) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\varphi_m(x-k)\overline{\psi_n^{out}(x-\ell)}dx = \\ = \delta_{k,\ell}\delta_{m,n}, k,\ell\in\mathbb{Z}, m\leqslant n.\end{gathered} \tag{28}$$

Доказательство. Прежде всего отметим, что функция $\widehat{\psi}_n^{out}(\xi)$ имеет компактный носитель, поскольку B-сплайны являются финитными. Следовательно, $\widehat{\psi}_n^{out}(\xi) \in L_2(\mathbb{R})$, и обратное преобразование Фурье существует.

Равенство (28) эквивалентно соотношению

$$(\varphi_m(\cdot-k),\psi_n^{out}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\varphi_m(x-k)\overline{\psi_n^{out}(x)}dx = \delta_{k,0}\delta_{m,n}, k\in\mathbb{Z}, m\leqslant n. \tag{29}$$

В этом легко убедиться, если в формуле (29) выполнить замену переменной интегрирования $x = y-\ell$ и переобозначить величину $k+\ell$.

Для нахождения скалярного произведения $(\varphi_m(\cdot-k),\psi_n^{out})$ рассмотрим сначала следующий интеграл, зависящий от параметра y:

$$\lambda_n(y) = (\varphi_0(\cdot-y),\psi_n^{out}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\exp\left(-\frac{(x-y)^2}{2\sigma^2}\right)\overline{\psi_n^{out}(x)}dx. \tag{30}$$

Воспользуемся свойствами преобразования Фурье, связанными с унитарностью и сдвигом аргумента:

$$\lambda_n(y) = \int\limits_{-\infty}^{\infty}\sigma\exp\left(-\frac{\sigma^2\xi^2}{2}\right)e^{-iy\xi}\overline{\widehat{\psi}_n^{out}(\xi)}d\xi. \tag{31}$$

Затем подставим выражение (27) в (31):

$$\begin{gathered}\lambda_n(y) = \frac{(-i)^n}{(2\pi)^{n+1}\sigma^{2n}n!}\int\limits_{-\infty}^{\infty}B_{n+1}^{(n)}\left(\frac{\xi}{2\pi}\right)e^{-iy\xi}d\xi = \\ = \frac{(-i)^n}{2\pi\sigma^{2n}n!}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\frac{d^n}{d\xi^n}\left(B_{n+1}\left(\frac{\xi}{2\pi}\right)\right)e^{-iy\xi}d\xi.\end{gathered} \tag{32}$$

Далее применим свойства преобразования Фурье, связанные с производной и масштабированием:

$$\lambda_n(y) = \frac{y^n}{2\pi\sigma^{2n}n!}\int\limits_{-\infty}^{\infty}B_{n+1}\left(\frac{\xi}{2\pi}\right)e^{-iy\xi}d\xi = \frac{\sqrt{2\pi}y^n}{\sigma^{2n}n!}\widehat{B}_{n+1}(2\pi y). \tag{33}$$

Образ Фурье B-сплайнов определяется выражением

$$\widehat{B}_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{sinc}^n \left(\frac{\xi}{2}\right), \tag{34}$$

где $\mathrm{sinc} = \frac{\sin(x)}{x}$ – функция отсчетов. Подставляя формулу (34) в (33), придем к соотношению

$$\lambda_n(y) = \frac{1}{\sigma^{2n} n!} y^n \mathrm{sinc}^{n+1}(\pi y). \tag{35}$$

В результате получим следующее равенство:

$$\lambda_n(y) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-y)^2}{2\sigma^2}\right) \overline{\psi_n^{out}(x)} dx = \frac{1}{\sigma^{2n} n!} y^n \mathrm{sinc}^{n+1}(\pi y). \tag{36}$$

Вычислим производную по y порядка $m \leqslant n$ левой и правой части соотношения (36) в целочисленных точках $y = k, k \in \mathbb{Z}$. Интеграл благодаря наличию функции Гаусса сходится равномерно, поэтому дифференцирование и интегрирование можно поменять местами:

$$\lambda_n^{(m)}(k) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{d^m}{dy^m} \left(\exp\left(-\frac{(x-y)^2}{2\sigma^2}\right)\right)\Bigg|_{y=k} \overline{\psi_n^{out}(x)} dx. \tag{37}$$

С другой стороны, пользуясь формулой (35), напрямую легко убедиться в справедливости следующего соотношения:

$$\lambda_n^{(m)}(k) = \frac{1}{\sigma^{2n}} \delta_{k,0} \delta_{m,n}, k \in \mathbb{Z}, m \leqslant n. \tag{38}$$

Равенство (29) теперь можно доказать по индукции. При $m = 0$ с помощью формул (37) и (38) сразу получаем требуемое:

$$\begin{gathered} \lambda_n(k) = (\varphi_0(\cdot - k), \psi_n^{out}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\tfrac{(x-k)^2}{2\sigma^2}\right) \overline{\psi_n^{out}(x)} dx = \\ = \tfrac{1}{\sigma^{2n}} \delta_{k,0} \delta_{0,n} = \delta_{k,0} \delta_{0,n}, k \in \mathbb{Z}. \end{gathered} \tag{39}$$

Предположим далее, что при всех m, меньших некоторого натурального $m_1 \leqslant n$, соотношение (29) уже доказано, т. е.

$$\begin{gathered} (\varphi_m(\cdot - k), \psi_n^{out}) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} (x-k)^m \exp\left(-\tfrac{(x-k)^2}{2\sigma^2}\right) \overline{\psi_n^{out}(x)} dx = \\ = \delta_{k,0} \delta_{m,n} = 0, k \in \mathbb{Z}, m < m_1. \end{gathered} \tag{40}$$

Производная под интегралом в формуле (37) представляет собой функцию Гаусса, умноженную на полином степени m, имеющий своим аргументом $x - k$. Из равенства (40) следует, что не равный нулю вклад в интеграл при $m = m_1$ может давать только старшая степень $x - k$, т. е. $(x - k)^{m_1}$:

$$\begin{gathered} \lambda_n^{(m_1)}(k) = \int\limits_{-\infty}^{\infty} \tfrac{1}{\sigma^{2m_1}} (x-k)^{m_1} \exp\left(-\tfrac{(x-k)^2}{2\sigma^2}\right) \overline{\psi_n^{out}(x)} dx = \\ = \tfrac{1}{\sigma^{2m_1}} (\varphi_{m_1}(\cdot - k), \psi_n^{out}). \end{gathered} \tag{41}$$

С другой стороны, согласно формуле (38), имеем:

$$\lambda_n^{(m_1)}(k) = \frac{1}{\sigma^{2m_1}} (\varphi_{m_1}(\cdot - k), \psi_n^{out}) = \frac{1}{\sigma^{2n}} \delta_{k,0} \delta_{m_1,n} = \frac{1}{\sigma^{2m_1}} \delta_{k,0} \delta_{m_1,n}. \tag{42}$$

Отсюда, как видим, вытекает соотношение (29) при $m = m_1$. Теорема доказана.

Следствие из теоремы 2. Система функций $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$, $n = 0, 1, \ldots, n_1$ не полна в $L_2(\mathbb{R})$ ни при каком натуральном значении n_1.

Чтобы убедиться в справедливости данного утверждения, достаточно взять функцию $\psi_{n_2}^{out}(x)$ при $n_2 > n_1$. Согласно формуле (29), $\psi_{n_2}^{out}(x)$ будет ортогональна всем функциям $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$, $n = 0, 1, \ldots, n_1$.

3. ОБСУЖДЕНИЕ РЕЗУЛЬТАТОВ

Сначала рассмотрим некоторые количественные оценки, связанные с константами Рисса. При $n = 0$ получаем достаточно хорошо изученное семейство целочисленных сдвигов функции Гаусса [1], [9], [11], поэтому мы сразу перейдем к случаю $n = 1$. Запишем соотношение (10) в развернутом виде:

$$P(\xi) = \frac{\sigma\sqrt{\pi}}{16}\left(8\sigma^2\theta_3\left(\frac{\xi}{2},q\right) + \theta_3''\left(\frac{\xi}{2},q\right)\right), q = \exp\left(-\frac{1}{4\sigma^2}\right). \qquad (43)$$

График функции $P_1(\xi) = P(\xi)/||\varphi_1||^2_{L_2}$ при различных значениях σ показан на рис. 1. Деление на $||\varphi_1||^2_{L_2}$ эквивалентно приведению функций $\varphi_1(x-k), k \in \mathbb{Z}$ к единичной норме.

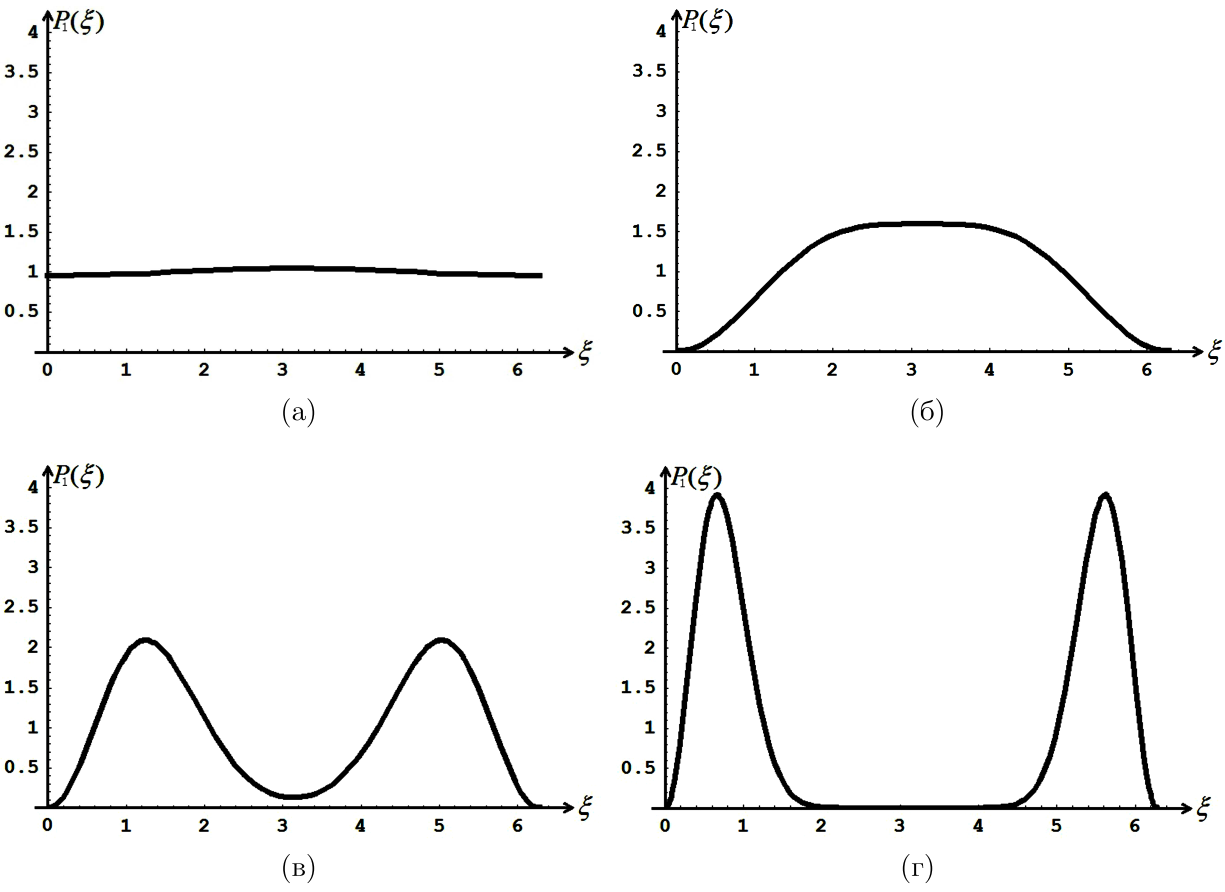

Рис. 1. *График функции* $P_1(\xi)$ *при* $\sigma = 0.2$ *(а),* $\sigma = 0.48$ *(б),* $\sigma = 0.8$ *(в),* $\sigma = 1.5$ *(г)*

Проведенные расчеты свидетельствуют о том, что функция $P_1(\xi)$ принимает минимальное значение в точках $\xi = 0$ и $\xi = 2\pi$. При этом, если $\sigma \leqslant \sigma_0 \sim 0.48$, наибольшего значения $P_1(\xi)$ достигает в точке $\xi = \pi$, а при $\sigma > \sigma_0$ имеется два симметрично расположенных максимума, которые с ростом σ постепенно удаляются от $\xi = \pi$ (см. рис. 1в и 1г). При достаточно больших значениях σ (свыше ~ 2) к данным уверждениям следует отнестись с определенной осторожностью: величины $P_1(0)$ и $P_1(\pi)$ крайне малы ($< 10^{-14}$), поэтому их трудно численно сравнивать друг с другом, а вопрос о строгом теоретическом обосновании приведенных эмпирических фактов на данный момент, к сожалению, остается открытым.

В табл. 1 приведено приближенно найденное отношение констант Рисса B/A для систем сдвигов $\varphi_0(x-k)$ [11] и $\varphi_1(x-k), k \in \mathbb{Z}$ при различных значениях σ. При малых σ величина B/A близка к 1, а семейство функций $\varphi_1(x-k), k \in \mathbb{Z}$ является практически ортогональным. С увеличением σ отношение B/A растет, причем существенно быстрее, чем для системы целочисленных сдвигов функции Гаусса, соответствующей $n = 0$. На практике это означает, что если использовать функции $\varphi_1(x-k), k \in \mathbb{Z}$ для аппроксимации, то уже при $\sigma \sim 0.8$ вычисления необходимо проводить с точность до восьми значащих цифр. Можно дать некоторые количественные оценки для констант Рисса и при $n > 1$, но в силу достаточно сложного поведения $P(\xi)$, мы ограничимся случаем $n = 1$.

Таблица 1. *Отношение констант Рисса B/A*

	$\sigma = 0.2$	$\sigma = 0.4$	$\sigma = 0.6$	$\sigma = 0.8$
$n = 0$	1.01	2.43	17.5	$2.77 \cdot 10^2$
$n = 1$	1.09	28.5	$1.94 \cdot 10^4$	$6.84 \cdot 10^8$

Перейдем к теореме 2. Согласно ей, функции $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$ и $\psi_n^{out}(x-k), k \in \mathbb{Z}$ образуют биортогональную систему. Тогда, если исследуемая функция $f(x)$ принадлежит линейной оболочке $\varphi_n(x-k)$

$$f(x) = \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_k \varphi_n(x-k), \tag{44}$$

коэффициенты разложения c_k могут быть рассчитаны по формуле

$$c_k = (f, \psi_n^{out}(\cdot - k)) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) \overline{\psi_n^{out}(x-k)} dx. \tag{45}$$

Построенный математический аппарата позволяет проводить разложение и в более общем случае — если $f(x)$ является суммой функций $\varphi_n(x-k)$ с разными значениями $n = 0, 1, \ldots, N-1$:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{N-1} \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{k,n} \varphi_n(x-k). \tag{46}$$

Коэффициенты разложения $c_{k,n}$ в данной ситуации можно найти следующим образом. Рекуррентно строится последовательность функций

$$f_0(x) = f(x), f_p(x) = f_{p-1}(x) - \sum_{k=-\infty}^{\infty} c_{k,N-p} \varphi_{N-p}(x-k), p = 1,2, \ldots, N-1. \tag{47}$$

В силу соотношения (28), имеем:

$$c_{k,n} = (f_{N-1-n}, \psi_n^{out}(\cdot - k)) = \int_{-\infty}^{\infty} f_{N-1-n}(x) \overline{\psi_n^{out}(x-k)} dx. \tag{48}$$

На начальном этапе, зная исходную функцию $f_0(x) = f(x)$, можно вычислить коэффициенты $c_{k,N-1}$. Затем с помощью соотношения (47) строится функция $f_1(x)$, которая по формуле (48) позволяет рассчитать $c_{k,N-2}$ и т. д.

К сожалению, найти аналитически обратное преобразование Фурье функции (27) не удается, поэтому на практике необходимо будет либо строить $\psi_n^{out}(x)$ численно, либо производить расчет скалярных произведений в образах Фурье. Это же относится и к функции $\psi_n^{in}(x)$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В данной работе рассмотрены системы целочисленных сдвигов функции (1). При фиксированном n получены формулы (9)–(11), которые необходимы для расчета констант Рисса. При $n = 1$ численно показано, что с увеличением σ отношение B/A достаточно быстро растет, что приводит на практике к определенным трудностям при выполнении расчетов. В образах Фурье построена биортогональная система (25).

Также построены биортогональные системы (27) для набора функций, включающего сдвиги $\varphi_n(x-k), k \in \mathbb{Z}$ одновременно с несколькими значениями n. На основе разработанного математического аппарата предложен алгоритм разложения в ряд по данному семейству функций.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Maz'ya, V. Approximate approximations / V. Maz'ya, G. Schmidt. — New York : AMS, Mathematical Surveys and Monographs, 2007. — V. 141. — 350 p.

2. Prautzsch, H. Bézier and B-Spline Techniques / H. Prautzsch, W. Boehm, M. Paluszny. — Berlin, Heidelberg: Springer, Mathematics and Visualization, 2002. — 304 p.

3. Матулис, В. Э. Прикладная квантовая химия / В. Э. Матулис, В. Э. Матулис, О. А. Ивашкевич. — Минск : Изд-во БГУ, 2007. — 143 с.

4. Кашин, Б. С. Ортогональные ряды / Б. С. Кашин, А. А. Саакян. — М. : Изд-во АФЦ, 1999. — 550 с.

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

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

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

8. Бахвалов, Н. С. Численные методы / Н. С. Бахвалов, Н. П. Жидков, Г. М. Кобельков. — М. : Наука, 1987. — 598 с.

9. 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.

10. Уиттекер, Э. Т. Курс современного Анализа: Ч. 2. Трансцендентные функции / Э. Т. Уиттекер, Дж. Н. Ватсон. — М. : Физматлит, 1963. — 515 с.

11. 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.

REFERENCES

1. Maz'ya V., Schmidt G. Approximate approximations. New York: AMS, Mathematical Surveys and Monographs, 2007, vol. 141, 350 p.

2. Prautzsch H., Boehm W., Paluszny M. Bézier and B-Spline Techniques. Berlin, Heidelberg: Springer, Mathematics and Visualization, 2002, 304 p.

3. Matulis V.Eh., Matulis V.Eh., Ivashkevich O.A. Applied Quantum Chemistry. [Matulis V.Eh., Matulis V.Eh., Ivashkevich O.A. Prikladnaya kvantovaya himiya]. Minsk: BSU, 2007, 143 p.

4. Kashin B.S., Saakyan A.A. Orthogonal Series. [Kashin B.S., Saakyan A.A. Ortogonal'nye ryady]. Moscow, 1999, 550 p.

5. Novikov I.Ya., Protasov V.Yu., Skopina M.A. Wavelet Theory. [Novikov I.Ya., Protasov V.Yu., Skopina M.A. Teoriya vspleskov]. Moscow, 2005, 616 p.

6. Bari N.K. Biorthogonal systems and bases in Hilbert space. [Bari N.K. Biortogonal'nye sistemy i bazisy v gil'bertovom prostranstve]. Uchenye Zapiski MGU.

7. Chui C.K. An Introduction to Wavelets. [CHui CH. Vvedenie v vejvlety]. Moscow, 2001, 412 p.

8. Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. Numerical Methods. [Bakhvalov N.S., Zhidkov N.P., Kobel'kov G.M. CHislennye metody]. Moscow: Nauka, 1987, 598 p.

9. Kiselev E.A., Minin L.A., Novikov I.Ya. On the construction of biorthogonal systems for suspaces generated by integral shifts of a single function. [Kiselev E.A., Minin L.A., Novikov I.Ya. O postroenii biortogonal'nyh sistem podprostranstv, porozhdennyh celochislennymi sdvigami odnoj funkcii]. *Matematicheskie zametki — Mathematical Notes*, 2014, vol. 96, iss. 3, pp. 468–470.

10. Whittaker E.T., Watson G.N. A Course of Modern Analysis. Part 2: The Transcendental Functions. [Whittaker E.T., Watson G.N. Kurs sovremennogo Analiza: CH. 2. Transcendentnye funkcii]. Moscow, 1963, 515 p.

11. Zhuravlev M.V. On the Riesz constants for systems of integer translates of the Gaussian function. [Zhuravlev M.V. O konstantah Rissa dlya sistem celochislennyh sdvigov funkcii Gaussa]. *Nauchnye vedomosti Belgorodskogo gosudarstvennogo universiteta — Belgorod State University Scientific Bulletin*, 2011, no. 5 (100), iss. 22, pp. 39–46.

Галыгина Маргарита Александровна, студент магистратуры факультета компьютерных наук, Воронежский государственный университет, Воронеж, Российская Федерация
E-mail: rioletta@mail.ru

Galygina Margarita Aleksandrovna, Master's Student, Faculty of Computer Sciences, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: rioletta@mail.ru

Киселев Евгений Александрович, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры цифровых технологий, Воронежский государственный университет, Воронеж, Российская Федерация
E-mail: evg-kisel2006@yandex.ru

Kiselev Evgenii Aleksandrovich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Digital Technologies, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: evg-kisel2006@yandex.ru

Минин Леонид Аркадьевич, кандидат физико-математических наук, доцент кафедры математической физики и информационных технологий, Воронежский государственный университет, Воронеж, Российская Федерация
E-mail: mininla@mail.ru

Minin Leonid Arcadievich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate Professor, Department of Mathematical Physics and Information Technologies, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: mininla@mail.ru

Ушаков Сергей Николаевич, кандидат физико-математических наук, преподаватель кафедры функционального анализа и операторных уравнений, Воронежский государственный университет, Воронеж, Российская Федерация
E-mail: ushakowww@yandex.ru

Ushakov Sergei Nikolaevich, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, University Lecturer, Department of Operational Equation Studies and Functional Analysis, Voronezh State University, Voronezh, Russian Federation
E-mail: ushakowww@yandex.ru