УДК 518 : 517.949.12

И. Д. ГРАЧЕВ, М. Х. САЛАХОВ

(Казань)

данных определяется многочисленными приложениями в вычислительной математике, обработке эксперимента и т. п. Известно [1], что решение задачи дифференцирования экспериментальных данных, получаемое прямыми методами, является неустойчивым. Для дискретных массивов данных это проявляется в усилении случайных ошибок, всегда присутствующих в экспериментальных данных, до уровня, делающего бессмысленной попытку непосредственного применения к ним оператора дифференцирования. Получение приемлемых результатов в этом случае возможно только при явном или неявном введении априорной информации об искомой функции, например о ее дифференцируемости, ограниченности, монотонности и т. д. Остановимся коротко на известных методах численного дифференцирования одномерных экспериментальных данных, различным образом учитывающих некорректность задачи. Задача дифференцирования рассматривается либо как решение интегрального уравнения первого рода [1]

$$\int_0^t \frac{1}{(k-1)!}(t-\tau)^{k-1}\varphi(\tau)\,d\tau = f(t), \tag{1}$$

или в операторном виде

$$A\varphi = f \tag{2}$$

(φ — производная k-го порядка от функции f), либо в форме вычисления оператора в точке [2]

$$Tf = \varphi, \tag{3}$$

где $T = \dfrac{d^k}{dt^k}$.

Для (1) в работе [1] на примерах численного дифференцирования одномерных функций показана эффективность применения метода регуляризации Тихонова. Для формулировки (3) в последние годы получили широкое распространение алгоритмы численного дифференцирования, основанные на интерполяции сеточных функций сплайнами (кубическими) [2—5], в частности регуляризованными сплайнами [6, 7]. Однако алгоритмы построения многомерных сплайнов (бикубических и т. д.), обеспечивающих k-кратную дифференцируемость исходных данных, оказываются очень сложными [3]. В связи с этим до настоящего времени отсутствуют эффективные сплайн-алгоритмы дифференцирования экспериментальной функции размерностью более единицы.

В данной работе предлагается алгоритм численного дифференцирования многомерной функции на основе метода статистической регуляризации (МСР) [8, 9]. МСР представляется более естественным при обработке экспериментальных данных, так как он позволяет в адекватной эксперименту форме описать ошибки измерений и восстановления искомых функций, используя единый математический аппарат.

Обычно в рамках МСР в качестве исходной формулировки задачи рассматривается алгебраизованный вариант (1) с включением ошибок измерений ξ:

$$A\bar{\varphi} + \bar{\xi} = \bar{f}. \tag{4}$$

При статистической интерпретации искомого вектора $\bar{\varphi}$ в предположении нормального распределения вектора ошибки $\bar{\xi}$ и гладкости $\bar{\varphi}$ по известной теореме Байеса апостериорная плотность вероятности $P(\bar{\varphi}|\bar{f})$ имеет вид [8, 9]

$$P(\bar{\varphi}|\bar{f}) = \mathrm{const}\exp\{-(1/2)(\bar{\varphi}[A^*WA + \alpha\Omega]\bar{\varphi}) + (\bar{\varphi}A^*W\bar{f})\}, \tag{5}$$

где W — информационная матрица $\bar{\xi}$; Ω — положительно определенная симметричная матрица, учитывающая гладкость $\bar{\varphi}$.

Оценка вектора $\bar{\varphi}$ на основе (5) может быть осуществлена как с помощью вычисления математического ожидания $\langle\bar{\varphi}\rangle$ по $P(\bar{\varphi}|\bar{f})$, так и с использованием принципа максимума правдоподобия. Отметим, что при отсутствии дополнительных ограничений на $\bar{\varphi}$ эти оценки приводят к одинаковому регуляризованному решению
нейного уравнения (6)

$$\alpha = n[\mathrm{Sp}\{\Omega(A^*WA + \alpha\Omega)^{-1}\} + (\bar{\varphi}_\alpha, \Omega\bar{\varphi}_\alpha)]^{-1}, \quad n = \dim\bar{\varphi}. \tag{7}$$

(Относительно выбора параметра α в некоторых других вариантах метода статистической регуляризации см. также [9, 11, 12].) При решении (6), (7) достаточно быструю сходимость дает метод последовательных приближений [9].

Матрица Ω для одномерных функций реализует конечно-разностное приближение к стабилизирующему функционалу

$$\int\left[\frac{d^p\varphi}{dx^p}\right]^2 dx = (\bar{\varphi}, \Omega_p\bar{\varphi}), \quad \Omega = \sum_{p=0}^{2} a_p\Omega_p. \tag{8}$$

Вводя вектор производных $\bar{\psi} = D_p\bar{\varphi}$, где D_p — алгебраизация дифференцирования порядка p, и используя определение скалярного произведения, получим на основе (8) явный вид матрицы Ω:

$$\Omega = D_p^T D_p. \tag{9}$$

Формулы (6) и (7) с учетом (9) дают МСР-решение задачи численного дифференцирования в постановке (2), выраженное через алгебраизацию операторов дифференцирования D и интегрирования A.

Как будет показано ниже, более эффективным оказывается поиск регуляризованного решения непосредственно для постановки (3) без ограничений на невырожденность оператора D.

Отметим [2], что если T^{-1} существует, то задачи в постановках (2) и (3) эквивалентны при $A = T^{-1}$. В [2] излагается теоретическая возможность исследования задач (2) и (3) в одной схеме. Объединение обеих задач достигается путем обобщения понятия обратного оператора, что приводит к необходимости рассматривать многозначные операторы.

Формально, подставляя в (6) соотношение $A^{-1} = D$, имеем следующее выражение для $\bar{\varphi}_\alpha$:

$$\bar{\varphi}_\alpha = D(W + \alpha D^T\Omega D)^{-1}W\bar{f}, \tag{10}$$

что при статистическом подходе дает оценку максимального правдоподобия с учетом априорной информации о гладкости $\bar{\varphi}$ задачи дифференцирования в виде

$$D\bar{f} = \bar{\varphi}. \tag{11}$$

Аналогично [2] и в случае вырожденности D можно показать, что оценка (10) справедлива для уравнения (11).

К оценке (10) для произвольных D можно прийти и несколько иным путем. Выделим в (11) задачу сглаживания экспериментальных данных $\bar{f}$ (оценки $\bar{f}_c$) в форме

$$\bar{f}=\bar{f}_c+\bar{\xi}. \tag{12}$$

К (12) может быть применен МСР, и для $A=E$ будем иметь

$$\bar{f}_c=(W+\alpha\Omega^f)^{-1}W\bar{f}. \tag{13}$$

В данном случае стабилизатор определялся для функции $\bar{f}_c$.

Учитывая связь между $\bar{\varphi}$ и $\bar{f}_c$ (11) и метод построения конечно-разностных стабилизаторов (8), (9), приходим к соотношению

$$\Omega^f=D^T\Omega D. \tag{14}$$

Тогда выражение (10) можно рассматривать как регуляризованную оценку $\bar{f}_c$ с последующим определением на основе формулы (11) наилучшей линейной [13] оценки $\bar{\varphi}$, справедливой для любых D. Этот путь позволяет обосновать и формальное преобразование (7) к виду, пригодному для решения задачи дифференцирования (11) для произвольных D. В результате

$$\alpha=n[\mathrm{Sp}\{D^T\Omega D(W+\alpha D^T\Omega D)^{-1}\}+(\bar{\varphi}_\alpha,\Omega\bar{\varphi}_\alpha)]^{-1}. \tag{15}$$

Концепция наилучших линейных оценок дает возможность построить также ковариационную матрицу полученного решения:

$$W_\varphi^{-1}=D\left(W+\alpha D^T\Omega D\right)^{-1}D^T. \tag{16}$$

Такой подход к задаче дифференцирования в форме (11) допускает обобщение на случай двумерных массивов. Полагая, что двумерный массив F_1 экспериментальных данных соответствует дискретизации двумерной функции $F_1(x, y)$ на регулярной декартовой сетке [14], запишем двумерное численное дифференцирование следующим образом:

$$\Phi=D_lF_1D_m^T. \tag{17}$$

Здесь D_l, D_m — алгебраизация операторов дифференцирования порядков l и m по координатам x и y соответственно, F_1 — матрица экспериментальных данных, Φ — искомая матрица производных от экспериментального массива, ξ — матрица ошибок измерений. Непосредственная замена в (17) D_l и D_m их регуляризирующими эквивалентами по (10) не имеет убедительного обоснования, а в практическом плане может приводить к потере гладкости по первому направлению при дифференцировании с регуляризацией по второму. Обобщение МСР на задачу дифференцирования в форме (17) связано с введением формализма четырехмерных матриц. Целесообразнее осуществить переход к векторному представлению (19), «разворачивая» матрицы F_1 и Φ по строкам или столбцам в векторы. При развертке по столбцам (17) преобразуется к виду

$$\bar{\varphi}=(D_l\otimes D_m)\bar{f}, \tag{18}$$

где $\otimes$ — символ прямого произведения матриц; $\bar{f}$ и $\bar{\varphi}$ — векторы, соответствующие развертке матриц F_1 и Φ по столбцам.

Стабилизирующую матрицу вектора $\bar{\varphi}$ для двумерной задачи определим построением конечно-разностного приближения к функционалу гладкости

$$\iint\left[\frac{d^{l'+m'}\Phi(x, y)}{dx^{l'}\,dy^{m'}}\right]^2dxdy=(\bar{\varphi},\ \Omega_{l'm'}\bar{\varphi}). \tag{19}$$

Алгебраизация (19) на основе представления дифференцирования в виде (17) и использование свойств прямого произведения дают метод построения конечно-разностных стабилизаторов, учитывающих априорную двумерную гладкость l', m'-порядка [15]:

$$\Omega_{l'm'} = \Omega_{l'} \otimes \Omega_{m'}, \tag{20}$$

где $\Omega_{l'} = D_{l'}^T D_{l'}$, $\Omega_{m'} = D_{m'}^T D_{m'}$. Используя (18) и (20), удается полностью сохранить методы, развитые выше для одномерного случая, и записать регуляризованное решение в виде

$$\bar{\varphi}_\alpha = D_{lm}\left[W + \alpha D_{lm}^T \Omega_{l'm'} D_{lm}\right]^{-1} W\bar{f} \tag{21}$$

($D_{lm} = D_l \otimes D_m$, W — информационная матрица векторного представления ошибок измерений ξ).

Аналогичным образом записываются уравнения для оценки α и ковариационной матрицы решения $\bar{\varphi}_\alpha$.

В рамках развитого подхода обобщение МСР на случай произвольных массивов данных осуществляется автоматически и при соответствующей их развертке сводится к введению в (21) многократных прямых произведений. Кроме того, предложенный подход позволяет построить экономичные алгоритмы многомерного дифференцирования с привлечением алгебры блочных циркуляционных матриц. Циркуляционной матрицей называется квадратная матрица $N \times N$ вида

$$A = \begin{bmatrix} a_0 & a_{N-1} & \ldots & a_1 \\ a_1 & a_0 & \ldots & \\ \vdots & & & \\ a_{N-1} & \ldots & & a_0 \end{bmatrix}. \tag{22}$$

Ее элементы могут быть образованы из элементов первого столбца по правилу

$$A_{jk} = \begin{cases} a_{j-k}, & j-k \geqslant 0; \\ a_{N+(j-k)}, & j-k < 0, \end{cases} \tag{23}$$

где j, $k = 0, \ldots, N-1$. Первоначальный вектор-столбец называется порождающим вектором. Циркуляционные матрицы являются частным случаем теплицевых матриц [16]. Подробное изложение свойств циркуляционных матриц содержится в [17]. Упоминание о некоторых проблемах, связанных с циркуляционными матрицами, имеется в работах [18, 19].

Замечательное свойство циркуляционных матриц (как с комплексными, так и с вещественными элементами) — возможность построения для них единой полной системы собственных векторов

$$x_l = \begin{bmatrix} 1 \\ \exp\left(2\pi i \frac{l}{N}\right) \\ \vdots \\ \exp\left(2\pi i \frac{N-1}{N} l\right) \end{bmatrix}, \tag{24}$$

где $l = (0, \ldots, N-1)$. Это позволяет проводить одновременную диагонализацию любых циркуляционных матриц A с помощью конечномерного фурье-преобразования:

$$FAF^* = \lambda. \tag{25}$$

Здесь λ — диагональная матрица собственных значений, F — матрица порядка N с элементами

$$F_{kl} = \exp(-2\pi i(kl)/N). \tag{26}$$

Нетрудно показать, что

$$F^{-1} = (1/N)F^* \tag{27}$$

и собственные значения λ представляют собой конечномерное F-преобразование порождающего вектора:

$$\lambda_l = \sum_{j=0}^{N-1} a_j \exp(-2\pi i (lj)/N). \tag{28}$$

Свойства (24)—(28) дают возможность кардинальным образом уменьшить объем вычислений и памяти ЭВМ при работе с циркуляционными матрицами. Кроме того, очень важно, что большинство свойств интегральных преобразований Фурье строго выполняется в алгебре циркуляционных матриц, что существенно упрощает анализ погрешностей применения фурье-преобразований к дискретным массивам данных.

Применение алгебры циркуляционных матриц в задаче численного дифференцирования основано на «почти циркуляционном» виде одной из стандартных алгебраизаций оператора дифференцирования

$$D_1 = -(\Delta x)^{-1}(E - H), \tag{29}$$

где H — наддиагональная единичная матрица [19], Δx — шаг сетки. Матрица D_1 приводится к циркуляционному виду добавлением единицы

$$\tilde{D}_1 = -(\Delta x)^{-1}(E - H - \Pi^{n-1}). \tag{30}$$

Здесь Π^{n-1} — единичная поддиагональная матрица в степени $n-1$ [19]. В явном виде $\tilde{D}_1$ имеет вид

$$\tilde{D}_1 = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 \dots 0 \\ 0 & -1 & 1 \dots 0 \\ \vdots & & \\ 1 & 0 & 0 \dots -1 \end{bmatrix} (\Delta x)^{-1}. \tag{31}$$

«Краевые эффекты», связанные с добавлением единицы, практически неизбежны при любой алгебраизации дифференцирования, а в случае (30) они могут быть существенно меньше при симметричном продолжении функций. Однако циркуляционная алгебраизация дифференцирования оказывается вырожденной. Учитывая, что при развитом подходе регуляризованное решение (10) полностью определяется алгебраизацией дифференцирования (30), и используя свойства циркуляционных матриц, запишем решение

$$\bar{\varphi}_\alpha = F^* \lambda_D \left[\lambda_W + \alpha (\lambda_D^*)^{p+1} (\lambda_D)^{p+1}\right]^{-1} \lambda_W F \bar{f}, \tag{32}$$

где λ_D — диагональная матрица собственных значений матрицы $\tilde{D}_1$, вычисляемая с точностью до множителя $1/n$ в соответствии с (28); λ_W — диагональная матрица собственных значений матрицы W, которая при $W = (1/S^2)E$ сохраняет свой вид; p — порядок гладкости искомой функции. Аналогичным образом преобразуются оценки α и W_φ.

Поскольку на практике F-преобразование может быть с учетом (28) реализовано в виде быстрого преобразования Фурье (БПФ), формула (32) позволяет значительно сократить требуемую память ЭВМ и объем вычислений. Экономичная реализация алгоритмов многомерного МСР-дифференцирования типа (21) осуществляется алгебраизацией дифференцирования по всем направлениям в виде (30) и полной диагонализацией всех матриц с помощью блочного $F \otimes F \otimes F \otimes \dots$ преобразования, которое вновь согласуется с техникой многомерных БПФ. Здесь достигается сокращение объема вычислений приблизительно в n^l раз, где l — размерность задачи.

С целью проверки эффективности конкретных вычислительных алгоритмов, согласующих технику МСР и БПФ с алгеброй блочных циркуляционных матриц, были проведены математические эксперименты по численному дифференцированию одномерных и двумерных массивов, характерные результаты которых представлены на рис. 1—3.

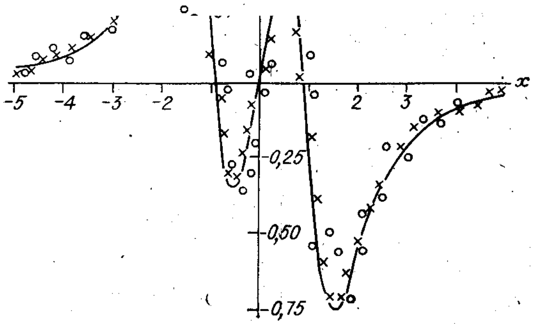

Рис. 1. Дифференцирование одномерной функции по формуле (34) $-f(x) = [1/(1 + (x-1)^2)] + [1/(1 + (x+1)^2)]$:

1 — «истинное» распределение производной, 2 — восстановление производной при $\alpha = 0$ и уровне ошибок 3%, 3 — восстановление по формулам (32), (15) при уровне ошибок 3%.

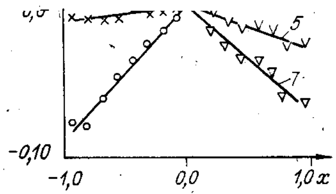

Рис. 3. Дифференцирование двумерной функции по обеим координатам $D = (D_x \otimes D_y)$, $z = 1 - x^2y^2$:

1 — «истинное» (сплошные линии) и 2 — восстановление по формуле (21) значение производной в сечении $y = -9/16$; 3, 4 — в сечении $y = -1/16$; 5, 6 — в сечении $y = 3/16$; 7, 8 — в сечении $y = 7/16$.

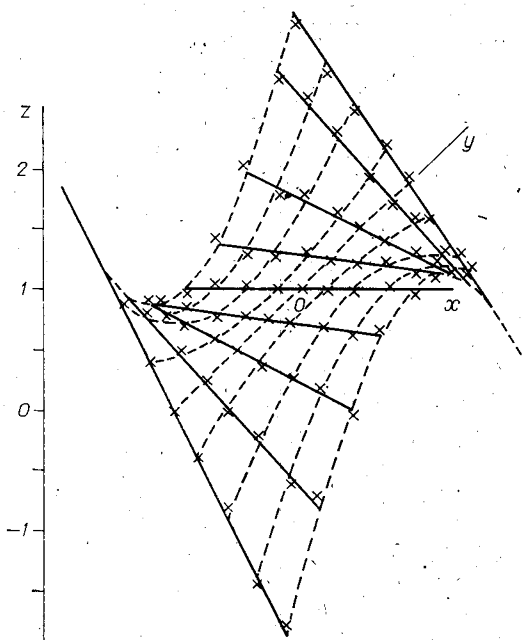

Рис. 2. Дифференцирование двумерной функции по координате x: $D = (D_x \otimes E)$.

Сплошные и штриховые линии соответствуют сечениям $x = \text{const}$, $y = \text{const}$ «истинного» распределения производной; крестиками обозначены результаты восстановления по формуле (21) при уровне ошибок 2%.

Рис. 1 иллюстрирует результаты одномерного дифференцирования без регуляризации ($\alpha = 0$) и с использованием (32) при уровне ошибок 3% от максимума f. С учетом достаточно сложного вида искомой функции φ следует отметить хорошее качество восстановления по (32) и оценки погрешности восстановления по диагональным элементам ковариационной матрицы.

На рис. 2 представлен результат одновременного дифференцирования по x и сглаживания по y ($D_y = E$) функции $z = 1 - x^2y^2$ в области $(-1 \leqslant x \leqslant 1,\ -1 \leqslant y \leqslant 1)$. Для циркуляционного алгоритма это функция «критического типа», так как значения ее производной растут по модулю к краям интервала, что должно приводить к наибольшим «краевым эффектам». Однако МСР-оценки по многомерному аналогу (32) с использованием двумерного БПФ дают и в этом случае хорошее качество восстановления.

На рис. 3 показан результат одновременного дифференцирования по x, y функции $z = 1 - x^2y^2$. И в этом случае в целом наблюдается хорошее качество восстановления.

Авторы выражают благодарность Р. З. Латипову за проведенные расчеты на ЭВМ.

ЛИТЕРАТУРА

1. Тихонов А. Н., Арсенин В. Я. Методы решения некорректных задач.— 2-е изд.— М.: Наука, 1979.
2. Иванов В. К., Васин В. В., Танана В. П. Теория линейных некорректных задач и ее приложения.— М.: Наука, 1978.
3. Марчук Г. И. Методы вычислительной математики.— М.: Наука, 1980.
4. Стечкин С. Б., Субботин Ю. Н. Сплайны в вычислительной математике.— М.: Наука, 1976.
5. Алберг Дж., Нильсон Э., Уолш Дж. Теория сплайнов и ее приложения.— М.: Мир, 1972.
6. Морозов В. А. О задаче дифференцирования и некоторых алгоритмах приближения экспериментальной информации.— В кн.: Вычислительные методы и программирование. М.: МГУ, 1970, вып. 14, с. 46—62.
7. Воскобойников Ю. В. Критерий и алгоритмы выбора параметра при сглаживании сплайн-функциями.— В кн.: Алгоритмы обработки и средства автоматизации теплофизического эксперимента. Новосибирск: ИТФ СО АН СССР, 1978, с. 30—45.
8. Турчин В. Ф., Козлов В. П., Малкевич М. С. Использование методов математической статистики для решения некорректных задач.— УФН, 1970, т. 102, вып. 3, с. 345—386.
9. Преображенский Н. Г., Пикалов В. В. Неустойчивые задачи диагностики плазмы.— Новосибирск: Наука, 1982.
10. Туровцева Л. С. Решение обратных некорректных задач методом статистической регуляризации. (Программа ОБР).— М., 1975. (Препринт/АН СССР, ИПМ, 23).
11. Баглай Р. Д. О критерии выбора параметра регуляризации, основанном на вычислении функции чувствительности.— ЖВМиМФ, 1975, т. 15, № 2, с. 305—320.
12. Воскобойников Ю. Е., Томсонс Я. Я. Выбор параметра регуляризации и ошибки восстановления входного сигнала в методе статистической регуляризации.— Автометрия, 1975, № 4, с. 10—18.
13. Федоров В. В. Теория оптимального эксперимента.— М.: Наука, 1971.
14. Пененко В. П. Методы численного моделирования атмосферных процессов.— Л.: Наука, 1981.
15. Грачев И. Д., Салахов М. Х., Фишман И. С. Обработка двумерных экспериментальных данных методом статистической регуляризации.— Опт. и спектр., 1983, т. 54, вып. 5, с. 923—925.
16. Иохвидов И. С. Ганкелевы и теплицевы матрицы и формы.— М.: Мир, 1974.
17. Таммет Х. Ф. Введение в линейную конечномерную теорию спектрометрии.— Таллин: Валгус, 1975.
18. Беллман Р. Введение в теорию матриц.— М.: Наука, 1969.
19. Гантмахер Ф. Р. Теория матриц.— М.: Наука, 1967.

Поступила в редакцию 14 июня 1983 г.

УДК 548.734

В. В. ИЛЮХИН, Б. С. КОГАН, Э. А. КУЗЬМИН,
Е. А. СОЛДАТОВ, В. Р. ФИДЕЛЬМАН
(Севастополь)

О РАЗДЕЛЕНИИ НЕКОТОРЫХ СЛОЖНЫХ ФУНКЦИЙ НА СОСТАВЛЯЮЩИЕ

1. Сложные функции (сигналы), представляющие сумму отдельных базовых составляющих одинаковой формы, разнесенные друг относительно друга на некоторые (не обязательно кратные) сдвиги, имеют место в самых различных отраслях науки и техники [1—4].

Необходимость разработки количественного метода по разложению общего сигнала на отдельные составляющие возникает в случае считывания информации при обработке изображений в радио- и гидролокации, океанографии, радиоастрономии, биомедицине, оптике, пеленгации и других областях. Во многих приложениях важное значение имеет разделение функции на сумму экспонент [5, 6] и особенно (в случае, если все показатели экспонент чисто мнимые величины) разделение функций на гармонические составляющие [7—12]. Такая задача может быть све-