

сообщения  
объединенного  
института  
ядерных  
исследований  
дубна

P5-93-154

Б.Ф.Костенко, Ж.Ж.Мусульманбеков,  
А.А.Расторгуев

СТАНДАРТНЫЕ АЛГОРИТМЫ СГЛАЖИВАНИЯ  
И НЕКОТОРЫЕ МОДЕЛИ  
СТАТИСТИЧЕСКОЙ МЕХАНИКИ

1993

Природа дает нам классический пример процедуры сглаживания. Так, фрактальные структуры молодых гор с течением времени переходят в плавные очертания холмов. Другой пример — из городской жизни: каждый, кто хоть раз ездил в автобусе, знает, что трясет меньше всего в середине. Это соответствует следующему усреднению поверхности дороги

$$x(t) = \frac{x_1(t) + x_2(t)}{2},$$

где  $x_i$  — координаты переднего и заднего колес. Похожие алгоритмы положены в основу очень удобных библиотечных программ, позволяющих быстро и без явных априорных гипотез получить из сырых экспериментальных данных более или менее плавную кривую [1]. Численные эксперименты показали, что, выполнив достаточное число сглаживаний, можно даже получить хорошую оценку для первой производной от сглаженной экспериментальной зависимости. Некоторое беспокойство, однако, вызывают систематические отклонения от исходных данных, возникающие при большом количестве сглаживаний. Изучению и оценке этих отклонений и посвящена данная работа.

Разумеется, в какой-то мере наше исследование будет относиться и к другим естественным процессам сглаживания, которые на самом деле происходят в природе. Возможно, поэтому не вызовет особого удивления и тот факт, что эти вопросы оказались тесно связанными с некоторыми типичными задачами неравновесной статистической физики.

## 1 Представление процесса сглаживания в матричном виде

Пусть экспериментальные данные представлены  $N$  величинами

$$f_1, f_2, \dots, f_N,$$

заданными в точках  $x_1, x_2, \dots, x_N$  задается вектор  $f$ . Для простоты возьмем равномерную сетку

$$x_i = x_0 + i \cdot a,$$

где  $a$  — масштаб сетки. Операция сглаживания функции  $f$  в точке  $x_i$  представляет собой следующую процедуру ее усреднения по  $2 \cdot l + 1$  соседним точкам:

$$f_i \rightarrow f'_i = \sum_{j=-l}^l k_j \cdot f_{i+j}, \quad (1)$$

или, что то же самое, в матричной форме

$$\vec{f}' = \hat{W} \cdot \vec{f} \quad (2)$$

На коэффициенты  $k_j$ , помимо условия нормировки

$$\sum_{j=-l}^l k_j = 1, \quad (3)$$

накладывается, как правило, требование симметрии:

$$k_j = k_{-j}. \quad (4)$$

Мы несколько модифицировали стандартные алгоритмы сглаживания [1] вблизи границ таким образом, чтобы получающаяся в результате матрица  $\hat{W}$  была симметричной, поскольку в этом случае теоретический анализ задачи значительно упрощается.

Для усреднения по 3 и 5 точкам симметричные матрицы  $\hat{W}$  имеют вид

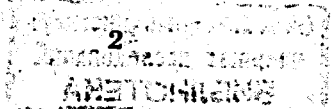
$$\hat{W}_3 = \begin{pmatrix} k_0 + k_1 & k_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ k_1 & k_0 & k_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & k_1 & k_0 & k_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_1 & k_0 & k_1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & k_1 & k_0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & k_0 & k_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & k_1 & k_0 + k_1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{W}_5 = \begin{pmatrix} k_0 + k_1 & k_1 + k_2 & k_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ k_1 + k_2 & k_0 & k_1 & k_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ k_2 & k_1 & k_0 & k_1 & k_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & k_1 & k_0 & k_1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_2 & k_1 & k_0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & k_0 & k_1 + k_2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & k_1 + k_2 & k_0 + k_1 \end{pmatrix}$$

$$\hat{W}_5 = \begin{pmatrix} k_0 + k_1 + k_2 & k_1 & k_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ k_1 & k_0 + k_2 & k_1 & k_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ k_2 & k_1 & k_0 & k_1 & k_2 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & k_2 & k_1 & k_0 & k_1 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & k_2 & k_1 & k_0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \dots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & k_0 + k_2 & k_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & k_1 & k_0 + k_1 + k_2 \end{pmatrix}$$

Для большего числа диагоналей построение аналогичное.

Численные эксперименты показали, что качество алгоритма при такой модификации не ухудшается.



## 2. Эргодические свойства процессов сглаживания

Можно усмотреть связь рассматриваемых процессов с эргодической теорией, лежащей в основе классической статистической механики. Действительно, возьмем матрицу сглаживания  $\hat{W}$  с положительными коэффициентами, а в качестве функции  $f$ , подлежащей сглаживанию, вектор, реализующий некоторое **распределение вероятностей**

$$\vec{p} = (p_1, p_2, \dots, p_n), \quad (5)$$

где

$$p_i \geq 0, \quad \sum_i p_i = 1. \quad (6)$$

На первый взгляд, условия (6) представляются слишком ограниченными и не подходящими для рассматриваемой задачи. В действительности это не так: для изучения всех свойств процессов сглаживания достаточно ограничиться именно этим простейшим случаем. В самом деле, любой вектор  $f$ , в том числе и с отрицательными компонентами, можно представить в виде линейной комбинации нескольких векторов, удовлетворяющих условиям (6). Затем, благодаря **линейности** матричного преобразования  $\hat{W}$ , процесс сглаживания исходной функции  $f$  можно интерпретировать в виде суперпозиции процессов сглаживания **нескольких** векторов вида (5).

Теперь легко проверить, что последовательность преобразований  $\vec{p}' = \hat{W}\vec{p}, \vec{p}'' = \hat{W} \cdot \vec{p}', \dots$  образует однородную марковскую цепь и, следовательно, отвечает некоторой **классической стохастической динамике** в фазовом пространстве  $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$  системы. Тот факт, что матрица  $\hat{W}$  не имеет блочно-диагонального вида, обеспечивает **эргодичность** процесса эволюции. Другими словами, система в процессе эволюции проходит через каждую из точек  $x_i$  фазового пространства. Хорошо известно, что свойство эргодичности

является необходимым для того, чтобы равновесное состояние системы было единственным. В самом деле, если бы матрица  $\hat{W}$  имела вид

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} \hat{W}_1 & 0 \\ 0 & \hat{W}_2 \end{pmatrix},$$

то все фазовое пространство оказалось бы разбитым на две области, из которых система никогда не выходит, если она оказывается в одной из них в начальный момент времени. В таком случае можно ожидать существования двух стационарных состояний вида

$$\begin{pmatrix} \varphi_1 \\ 0 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} 0 \\ \varphi_2 \end{pmatrix},$$

являющихся собственными векторами матрицы  $\hat{W}$  с единичными собственными значениями. В рассматриваемом нами примере этого не происходит. Поэтому здесь равновесное состояние единственно<sup>1</sup>. Нетрудно также догадаться, что это равновесное состояние имеет вид

$$\vec{p} = \frac{1}{n}(1, 1, \dots, 1). \quad (7)$$

В самом деле, хорошо известно, что для марковских цепей все процессы идут в направлении возрастания энтропии (имеет место второе начало термодинамики), а состояние (7) как раз и обладает максимальной энтропией. Эту догадку подтверждают и прямые вычисления: воспользовавшись условием нормировки (3), легко убедиться, что вектор  $\vec{p}$  является собственным для матрицы  $\hat{W}$

$$\hat{W} \cdot \vec{p} = \vec{p}. \quad (8)$$

<sup>1</sup>Напомним, что в реальных физических ситуациях существование нескольких различных равновесных состояний обычно обусловлено наличием некоторой сохраняющейся величины — например, энергии. В этом случае динамическая эволюция системы и, следовательно, ее релаксация к равновесному состоянию (аттрактору), происходит на каждой из оболочек (характеризующихся определенным значением интеграла движения) в отдельности.

Запомним этот факт, именно с ним будет связана проверка справедливости "третьего начала термодинамики" для рассматриваемой системы, обсуждаемого в следующем разделе.

В заключение раздела отметим, что матрица  $\hat{W}$  связывает любые точки фазового пространства  $\{x_i\}$  системы цепочкой соответствующих марковских переходов — т.е. является неприводимой [2]. Это, в частности, гарантирует возврат системы в каждую из точек фазового пространства по прошествии достаточно большого промежутка времени (отсутствии переходных и поглощающих состояний). Похожее утверждение (теорема Пуанкаре [3]) справедливо для многих других, гораздо более сложных моделей реальных физических систем.

### 3 Квантовая модель процессов сглаживания и третье начало термодинамики

Нетрудно найти дифференциальное уравнение, аппроксимирующее многократное применение процедуры сглаживания (2). Обозначим изменение вектора  $\vec{f}$  за один шаг через  $d\vec{f}$ :

$$d\vec{f} = -\hat{H} \cdot \vec{f}, \quad (9)$$

где  $\hat{H} = -(\hat{I} - \hat{W})$ . Если это изменение мало:

$$df_i \ll f_i, \quad (10)$$

то, приняв "длительность" одного акта сглаживания равной единице времени, переходим от уравнения (9) к его непрерывному аналогу:

$$d\vec{f}/dt = -\hat{H} \cdot \vec{f}. \quad (11)$$

Уравнение (11) имеет вид кинетического уравнения [4], или, что более точно, представляет собой уравнение Шредингера

в мнимом времени (см., например, [5]), поскольку компоненты вектора  $\vec{f}$  могут принимать и отрицательные значения. Его формальное решение:

$$\vec{f}(t) = \exp(-\hat{H} \cdot t) \cdot \vec{f}(0). \quad (12)$$

Исходную несглаженную функцию  $\vec{f}(0)$  можно разложить по собственным векторам  $\vec{\Phi}_\lambda$  гамильтониана  $\hat{H}$ , которые, в силу его симметричности, образуют полный ортогональный базис:

$$\vec{f}(0) = \sum_\lambda c_\lambda \cdot \vec{\Phi}_\lambda. \quad (13)$$

Соотношение (12) можно теперь представить в виде

$$\vec{f}(t) = \sum_\lambda c_\lambda \cdot \exp(-\lambda \cdot t) \cdot \vec{\Phi}_\lambda, \quad (14)$$

являющемся решением уравнения Шредингера в мнимом времени.

Из физических соображений ясно, что спектр оператора  $\hat{H}$  ограничен снизу нулем, иначе с течением времени наблюдался бы неудержимый рост вклада состояний с  $\lambda < 0$ . Поскольку  $\hat{H} = -(\hat{I} - \hat{W})$ , то в предыдущем разделе мы фактически установили, что пограничное собственное значение  $\lambda = 0$  в действительности тоже реализуется (см. соотношение (8)). Теперь мы уже в состоянии понять причину систематических искажений при многократном повторении процедуры сглаживания: разные собственные векторы имеют в соотношении (14) разные "времена жизни". В перспективе очень большого числа итераций видна лишь безжизненная пустыня: состояние (7), отвечающее единичному собственному значению оператора  $\hat{W}$ .

Довольно легко установить ряд более детальных свойств собственных значений и векторов операторов  $\hat{W}$  и  $\hat{H}$  — уже достаточных для полного качественного анализа процесса эволюции системы, по крайней мере для случая, когда матрица  $\hat{W}$  имеет трехдиагональный вид (первая из матриц, указанная в

первом разделе). В этом случае  $\hat{W}$  является, с одной стороны, стохастической [2], а с другой — якобиевой [2]. Поэтому для нее верны следующие утверждения [2]:

1. Спектральный радиус матрицы  $\hat{W}$  (максимальный из модулей ее собственных значений) равняется единице.
2. Все собственные значения  $\hat{W}$  вещественны.
3. Все собственные значения  $\hat{W}$  различны, т.е.  $\mu_1 < \mu_2 < \dots < \mu_n$ , и для  $k \geq 1$  число перемен знака в ряду координат собственного вектора  $\hat{\Phi}_{\mu_k}$  матрицы, соответствующего собственному числу  $\mu_k$  (нулевые значения координат собственного вектора не учитываются), в точности равно  $n - k$ .

Из последнего утверждения вытекает, что соотношение (13) очень напоминает разложение функции  $f$  в ряд Фурье, поскольку различные собственные векторы, входящие в него, испытывают все возрастающее число осцилляций по мере увеличения номера собственного значения оператора. Поскольку собственные значения операторов  $\hat{H}$  и  $\hat{W}$  связаны соотношением

$$\lambda_i = (1 - \mu_i),$$

то из (3) следует, что в процессе эволюции, описываемом формулой (14), будут сильнее подавляться вклады тех собственных векторов, которые содержат большее число осцилляций. Интересно отметить аналогию обсуждаемой процедуры сглаживания с методом выделения сигнала из шума, применяемым в радиотехнике. Подобно тому как в рассматриваемом случае, выполнив разумное число итераций, можно подавить вклад собственных векторов с относительно большими значениями  $\lambda$ , так и с помощью специальных фильтров удаляют высокочастотные фурье-гармоники, приводящие к быстрым нерегулярным изменениям сигнала.

Не составляет труда записать и точное выражение для функции  $f$  после  $m$  итераций, если матрица  $\hat{W}$  симметрична

$$f = \sum_{\mu} C_{\mu} \mu^m \Phi_{\mu}, \quad (15)$$

где  $\Phi_{\mu}$  — собственные функции операторов  $W$  и  $H$ . Связь с предыдущим приближенным описанием (14) видна из следующего простого соотношения

$$\mu^m \simeq \exp(-(1 - \mu) \cdot m). \quad (16)$$

Тем не менее приближенное описание вполне удовлетворительно описывает подавление "высокочастотных" компонент (с  $\lambda \sim 1$ ) — т.е. саму суть процесса сглаживания. Возможно, подобное представление задачи окажется полезным для реализации этого алгоритма с помощью нейронной сети, где, как известно, часто возникает необходимость переформулировки рассматриваемой проблемы в форме некоторой задачи статистической физики. В этой связи заметим, что оператор эволюции системы  $\exp(-\hat{H} \cdot t)$ , с формальной точки зрения, идентичен оператору плотности

$$\rho = \exp(-\hat{H}/T) = \sum_{\epsilon} \exp(-\epsilon/T) |\epsilon\rangle \langle \epsilon|,$$

рассматриваемому в статистической механике, если в качестве температуры  $T$  взять величину, обратную параметру времени  $t$ . Эта аналогия усиливается еще и тем, что, как показано в предыдущем разделе, основное состояние гамильтониана  $H$  не вырождено. Поэтому при  $t \rightarrow \infty$  энтропия квантового ансамбля Гиббса  $\exp(-\hat{H} \cdot t)$  стремится к нулю, как и должно быть согласно третьему началу термодинамики.

Для завершения построения динамики процесса эволюции нам осталось, фактически, лишь найти явные выражения для собственных векторов и собственных значений оператора Гамильтона  $\hat{H}$  системы. Особенно просто это сделать в случае сглаживания по трем точкам:



## 4 Собственные векторы и значения матрицы сглаживания по трем точкам

Если сглаживание осуществляется с помощью усреднения по трем точкам, матрица  $\hat{W}$  имеет 3-диагональный вид, описанный в первом разделе. Поскольку, однако, произвольная 3-диагональная стохастическая матрица с помощью преобразования  $\hat{W} \rightarrow C \cdot (\hat{W} - \hat{I})$  (где  $C$  — некоторое число) может быть приведена к следующему конкретному виду

$$\hat{S} = \frac{1}{4} \cdot \begin{pmatrix} 3 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 2 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 2 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 2 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad (17)$$

и рассматриваемое преобразование не изменяет собственные векторы матрицы, ограничимся здесь именно этим частным случаем. Если считать, что отдельные компоненты  $f_i$  собственных векторов  $\vec{f}$  могут быть описаны некоторой функциональной зависимостью:

$$f_i = f(x_i),$$

то уравнение для собственных значений и собственных векторов матрицы  $\hat{W}$

$$\hat{W} \cdot \vec{f}_\lambda = \lambda \cdot \vec{f}$$

приобретает вид (для точек, не лежащих на границах)

$$f(x-a) - 2 \cdot f(x) + f(x+a) = 4 \cdot (\lambda - 1) \cdot f(x).$$

Решениями этого функционального уравнения являются суперпозиции функций вида  $const \cdot x$  (отвечающие  $\lambda = 1$ ) и

$\Lambda^x$  (т.е. обычные и гиперболические синусы и косинусы, а также экспонента)[6]. Для нахождения конкретного вида искомой функциональной зависимости  $f(x)$  нам осталось отобрать решения, удовлетворяющие уравнению на собственные значения вблизи границ

$$\begin{aligned} 3 \cdot f(x) + f(x+a) &= 4 \cdot \lambda \cdot f(x), \\ f(x+(N-1) \cdot a) + 3 \cdot f(x+N \cdot a) &= 4 \cdot \lambda \cdot f(x+N \cdot a). \end{aligned}$$

Можно убедиться, что гиперболические синус и косинус, а также экспонента и линейная зависимость не удовлетворяют граничным условиям ни при каком выборе входящих в них параметров. Для косинуса, с учетом этих граничных условий, получаем

$$\begin{aligned} \lambda_i &= (\cos(k_i \cdot \Delta x) + 1)/2, \\ \cos(\phi_i) &= \cos(\phi_i - k_i \cdot \Delta x), \\ \cos(\phi_i + k_i \cdot (n-1) \cdot \Delta x) &= \cos(\phi_i + k_i \cdot n \cdot \Delta x). \end{aligned}$$

Из первого уравнения находим собственное значение, а из второго и третьего — фазу  $\phi$  и частоту  $k$  (амплитуда сократилась). Таким образом:

$$\lambda_i = \frac{2 \cdot (\cos(\frac{\pi \cdot i \cdot \Delta x}{n}))}{4}$$

$$\vec{\phi} = \begin{pmatrix} \cos(\frac{\pi \cdot i}{2 \cdot n}) \\ \cos(\frac{3 \cdot \pi \cdot i}{2 \cdot n}) \\ \cos(\frac{2 \cdot (n-1) \cdot \pi \cdot i}{2 \cdot n}) \\ \vdots \end{pmatrix}$$

Очевидно, что рассмотрение *sin* новых решений не принесет, поскольку они сводятся к *cos* при соответствующем выборе фаз.

По поводу пяти- и семидиагональных симметричных матриц. Все зависит от выбора коэффициентов. Возьмем, например, снова трехдиагональную матрицу (17) и возведем ее в квадрат — получим в результате пятидиагональную матрицу

$$\hat{S} = \frac{1}{16} \cdot \begin{pmatrix} 10 & 5 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 5 & 6 & 4 & 1 & 0 & \dots \\ 1 & 4 & 6 & 4 & 1 & \dots \\ 0 & 1 & 4 & 6 & 4 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 6 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

с собственными значениями  $\lambda_1^2, \lambda_2^2, \dots, \lambda_N^2$  на тех же собственных векторах.

Вопрос, на какой степени остановиться, решался чисто практически. Очевидно, что при степени  $N/2$  все элементы матрицы будут ненулевыми. Такой вариант матрицы оказался наиболее приемлемым при сглаживании производных.

## 5 Промежуточные асимптотики

Как уже говорилось выше, сглаживание на конечном отрезке с помощью симметричных матриц с положительными элементами, удовлетворяющих условию (3), после достаточно большого числа шагов приводит к одному и тому же результату — постоянной величине<sup>2</sup>.

<sup>2</sup>О важности всех этих ограничений можно судить, например, по тому, что для несимметричных неположительных матриц даже на ограниченном отрезке могут существовать нетривиальные инварианты, отличные от константы.

Это заставляет обратиться к так называемым **промежуточным асимптотикам**, то есть квазиустойчивым состояниям, которые возникают и держатся после достаточно большого числа сглаживаний в срединной части отрезка, пока туда не дойдут искажающие волны от границ и не испортят картину (ниже будет приведен случай, когда середина долгое время остается устойчивой и после того, как до нее добегут волны).

Для общности обсуждения здесь имеет смысл отказаться от требования неотрицательности матричных элементов, которое до этого имелось в виду. Подобные обобщенные алгоритмы сглаживания описаны в [1], где они названы (по причинам, которые станут понятными ниже) **нелинейными**. Физическая интерпретация этих процессов — с нашей точки зрения, очень интересная — будет рассмотрена в следующем разделе. Здесь лишь отметим, что осуществить обсуждавшееся ранее представление процедур сглаживания в виде линейной комбинации нескольких марковских цепей в этом случае, разумеется, невозможно.

С математической точки зрения изучение промежуточных асимптотик сводится к рассмотрению процесса сглаживания с помощью бесконечномерной матрицы, определенной на некоторой равномерной сетке, заданной на **всей вещественной оси**. Свойства таких матриц отличаются от их конечномерных аналогов, в частности, тем, что они имеют собственные векторы с  $\lambda = 1$ , отличные от состояния

$$\vec{p} = \frac{1}{n}(1, 1, \dots, 1),$$

обладающего максимальной энтропией.

Задача нахождения собственных векторов бесконечномерной матрицы в какой-то степени даже проще конечномерного случая и сводится к решению конечно-разностного уравнения (для собственного значения  $\lambda = 1$ ):

$$\sum_{j=-l}^l k_j \cdot f(x+j) = f(x). \quad (18)$$



Делая подстановку  $f(x) = \Lambda^x$  [6], получаем характеристическое уравнение:

$$\sum_{j=-l}^l k_j \cdot \Lambda^j = 1.$$

Умножая на  $\Lambda^l$  и учитывая, что  $\sum_{j=-l}^l k_j = 1, k_j = k_{-j}$ , получаем:

$$\sum_{j=0}^{l-1} k_{l-j} \cdot \Lambda^j + \sum_{j=l+1}^{2l} k_{j-l} \cdot \Lambda^j = 2 \cdot \sum_{j=1}^l k_j \cdot \Lambda^l,$$

или, более компактно:

$$\sum_{j=1}^l k_j \cdot (\Lambda^j - 1)^2 \cdot \Lambda^{l-j} = 0. \quad (19)$$

Очевидно, что это уравнение, для любого  $l$  и при любых значениях коэффициентов  $k_j$ , имеет кратный корень  $\Lambda = 1$ , что соответствует двум решениям исходного конечно-разностного уравнения — полиномам нулевой и первой степени [6]. Для трехдиагональных матриц других инвариантных функций преобразования (то есть собственных векторов с собственным значением  $\lambda = 1$ ) не существует. Для пяти-, семи- (и выше) -диагональных матриц выбором коэффициентов можно повысить кратность корня  $\Lambda = 1$  до 4, 6 и более, что соответствует наличию инвариантных полиномов третьего, пятого и более высоких порядков (см. предыдущую ссылку). Так, нетрудно убедиться, что для 5-диагональной матрицы с  $k_1 + 4 \cdot k_2 = 0$  инвариантом является произвольный полином третьей степени; то же — для 7-диагональной матрицы с  $k_1 + 4 \cdot k_2 + 9 \cdot k_3 = 0$ , а при дополнительном условии  $k_1 + 3 \cdot k_2 + 7 \cdot k_3 = 0$  (то есть  $k_2 = -2 \cdot k_3, k_1 = -k_3$ ) матрица сглаживания оставляет неизменным полином пятого порядка.

Другие инварианты преобразования сглаживания с помощью бесконечномерной матрицы представляют собой показательные и тригонометрические функции. Например, для 5-диагональной матрицы характеристическое уравнение после сокращения множителя  $(\Lambda - 1)^2$  сводится к квадратному:

$$k_2 \cdot \Lambda^2 + (2 \cdot k_2 + k_1) \cdot \Lambda + k_2 = 0.$$

При  $k_1/k_2 < -4$   $\Lambda > 0$ , что порождает показательные функции.

Случай  $k_1/k_2 = -4$  был рассмотрен выше.

При  $-4 < k_1/k_2 < 0$   $\Lambda$  — комплексное число, что порождает тригонометрические функции  $\sin$  и  $\cos$ .

В случае  $k_1/k_2 > 0$   $\Lambda < 0$ ; для функции непрерывного аргумента показательная функция с отрицательным основанием, очевидно, бессмысленна, а для дискретного  $x$  совпадает с константой.

Приближение к промежуточным асимптотикам в общих чертах можно описать следующим образом. Допустим, что эти асимптотики реализуются, например, на состояниях  $1, x, \cos x$ . Тогда:

1. Производим, если нужно, ортогонализацию асимптотических состояний (в данном случае нет необходимости — сумма произведений асимптотических функций в дискретном наборе точек, расположенных в интервале  $[0, 2\pi]$ , равна нулю).
2. Раскладываем произвольную функцию  $f(x)$  в ряд Тейлора — выделяем проекции  $f$  на  $1$  и  $x$ .
3. Раскладываем в ряд Фурье "хвост" разложения функции  $f(x)$  в ряд Тейлора, начиная с члена  $\sim x^2$  — определяем проекцию на  $\cos$ .

(Кроме того, возможна необычная ситуация, когда, например, на отдельных участках реализуются различные инвариантные функции, удачно "сшивающиеся" друг с другом.)

Заметим, что если все элементы матрицы сглаживания  $k_j > 0$  положительны — случай, с обсуждения которого мы начали, — то никаких промежуточных асимптотик, кроме линейных, не возникает. Однако в реальных задачах обработки нетривиальные промежуточные асимптотики не имеют большой ценности (если только речь не идет о задачах фитирования). Во-первых, заранее обычно неизвестно, функцией какого

вида лучше всего аппроксимируются экспериментальные данные. А когда это известно, можно учесть эту информацию более эффективным способом (например, применением метода штрафных функций [3]).

## 6 Физическая интерпретация нелинейных алгоритмов сглаживания

Упомянувшийся выше процесс разрушения гор полностью укладывается в рамки линейных алгоритмов сглаживания. Действительно, в этом случае мы имеем постепенное размывание локальных возвышенностей и заполнение освобожденным веществом локальных впадин. Алгоритмы сглаживания с неотрицательными коэффициентами, порождающие только линейные промежуточные асимптотики, как раз и описывают этот процесс<sup>3</sup>. В итоге мы получаем горизонтальную поверхность — состояние с наибольшей энтропией.

До недавнего времени считалось, что лишь такие равновесные состояния (точнее, близкие к ним) и реализуются в природе. В последнее время стало ясно, что большие отклонения от состояний с максимальной энтропией, перемежаемость, — явление также очень распространенное. Укажем лишь два примера из работы [9]. Первый известен, видимо, лишь узкому кругу специалистов и до сих пор не получил полного научного объяснения — это ячеистая структура Вселенной [9].

<sup>3</sup>Было бы интересно рассмотреть и более реалистичные модели. Например, с целью учета влияния силы тяжести использовать несимметричные матрицы сглаживания. На качественном уровне это уже обсуждалось в разделе 3. Было бы естественно также ввести элемент стохастичности. Возникающие при этом случайные матрицы, по существу, идентичны тем, что возникают при изучении структуры уровней высоковозбужденных состояний ядра [7], или, при более широкой постановке вопроса, — матрицам, которые в настоящее время интенсивно изучаются в связи с проблемой описания квантового хаоса (см., например, [8]).

Второй пример часто встречается в повседневной жизни, но так же плохо объяснен: ячеистая структура облаков.

Покажем, что нелинейное сглаживание дает качественное описание физических процессов такого типа (а найденные в предыдущем разделе периодические инвариантные функции моделируют наблюдаемые ячеистые структуры). Возьмем для простоты симметричную трехдиагональную матрицу  $W$ , на элементы которой не налагается условие неотрицательности. Представим ее в форме:

$$W = W_p + \delta W,$$

где  $W_p$  — матрица сглаживания с положительными элементами, а  $\delta W$  — некоторая добавка вида (мы полагаем, как и прежде, что сумма элементов строки матрицы  $W$  равна единице):

$$\delta W = \begin{pmatrix} \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \dots & -c/2 & c & -c/2 & 0 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & -c/2 & c & -c/2 & 0 & \dots \\ \dots & 0 & 0 & -c/2 & c & -c/2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.$$

Убедимся, что добавка  $\delta W$ , в отличие от члена  $W_p$ , играет конструктивную, организующую роль. Для этого рассмотрим, например, действие  $\delta W$  на равновесное состояние, претерпевшее небольшое локальное изменение плотности

$$\delta W \cdot (\dots, p, p + \delta, p, \dots)^T = (\dots, -\frac{c}{2}\delta, c\delta, -\frac{c}{2}\delta, \dots)^T.$$

Отсюда видно, что возникшая флуктуация имеет тенденцию развиваться: небольшое локальное уплотнение притягивает к себе все большее и большее количество вещества. Как раз такие явления следует принимать во внимание как при моделировании процессов эволюции вещества во Вселенной (учет влияния гравитационного притяжения), так и при описании процессов формирования облаков (развитие процесса

конденсации на образовавшихся центрах). Поскольку действие операторов  $W_p$  и  $\delta W$  направлено в противоположные стороны, естественно ожидать появления новых равновесных состояний, отличных от тривиального. Найденные в предыдущем разделе промежуточные асимптотики как раз и являются такими равновесными состояниями<sup>4</sup>. Разумеется, для того, чтобы воспроизвести форму ячеек, возникающих в явлениях перемежаемости, приведенные модели слишком просты, но суть явлений они описывают правильно.

## 7 Линейное сглаживание по многим точкам

Опыт показывает, что при многократном применении процедуры линейное сглаживание меньше искажает экспериментальные данные у границы, чем нелинейное. Для матриц с отрицательными элементами возможны даже случаи неустойчивости процесса — катастрофический рост возмущений у границ.

Поскольку многократное сглаживание эквивалентно однократному применению матрицы, полученной от возведения исходной матрицы в соответствующую степень, особый интерес представляет рассмотрение матриц именно такого вида. Элементы этих матриц можно вычислить заранее, не производя многократных перемножений при реализации алгоритма на ЭВМ. Особенно просто это сделать для матрицы, выполняющей усреднение:

$$y_i' = \frac{y_{i-1} + 2 \cdot y_i + y_{i+1}}{4}$$

<sup>4</sup>Правда, нужно выбирать матрицы с большим числом диагоналей — для трехдиагональных матриц никаких промежуточных асимптотик, кроме линейных, не существует: чтобы сформировать какую-то структуру, притяжение должно быть достаточно "дальнодействующим".

Действительно, исходную трехдиагональную матрицу можно записать в виде:

$$\hat{W}_3 = \frac{(\hat{D}_{+a/2} + \hat{D}_{-a/2})^2}{4}$$

где  $\hat{D}_a$  — оператор сдвига:

$$\hat{D}_a \cdot f(x) = f(x+a),$$

а величина  $a$  — масштаб сетки. Тогда  $2 \cdot l + 1$ -диагональная матрица, эквивалентная  $l$ -сглаживанию, имеет следующий вид:

$$\hat{W}_{2l+1} = \frac{(\hat{D}_{+a/2} + \hat{D}_{-a/2})^{2 \cdot l}}{4^l}$$

Элементы этой матрицы:

$$w_{i,j} = \begin{cases} 0, & \text{при } |i-j| > l \\ C_{2l}^{i-j+l} + C_{2l}^{i-j+l-1}, & \text{при } i+j \leq l+1, i+j \geq N-l \\ C_{2l}^{i+j-l}, & \text{в остальных случаях} \end{cases}$$

где  $C_n^m$  — коэффициенты бинома Ньютона.

Эта матрица использовалась для сглаживания элементарных функций и их производных и при  $l \sim N/2$  дала удовлетворительные результаты ( $N$  — число точек на отрезке). Во-первых, как и всякое линейное сглаживание, оно существенно меньше искажало объект (функцию и ее производные) у границ отрезка. Во-вторых, оно быстро подавляло паразитные осцилляции, особенно неприятные для второй производной, — при нелинейном сглаживании они практически не поддаются уничтожению.

Линейные сглаживания, не уступая нелинейным по скорости устранения шумов, обладают тем преимуществом, что не вносят больших искажений у границ отрезка.

Нам приятно поблагодарить В.М. Северьянова и Р.М. Ямалева за стимулирующие обсуждения. Авторы также благодарны И.В. Пузынину за поддержку настоящей работы.

# Литература

1. *Дьяконов В.П.* Справочник по алгоритмам и программам на языке бейсик для персональных ЭВМ. М.: Наука, 1989.
2. *Воеводин В.В., Кузнецов Ю.А.* Матрицы и вычисления. М.: Наука, 1984.
3. Математическая энциклопедия. М.: Советская энциклопедия, 1984.
4. *Гардинер Н.В.* Стохастические методы в естественных науках. М.: Мир, 1986.
5. *Васильев А.Н.* Функциональные методы в квантовой теории поля и статистике. Л.: ЛГУ, 1976.
6. *Гельфонд А.О.* Исчисление конечных разностей. М.: Наука, 1967.
7. *Бор О., Моттelson Б.* Структура атомного ядра. М.: Мир, 1971.
8. *Зелевинский В.Г., Соколов В.В.* Материалы XXIV Зимней школы ЛИЯФ, Ленинград, 1989.
9. *Зельдович Я.Б. и др.* УФН, 1987, т.152, вып.1, с.3.

Рукопись поступила в издательский отдел  
29 апреля 1993 года.