В. П. Танана, В. А. Коршунов, О выборе параметра регуляризации при решении некорректных задач, *Сиб. матем. журн.*, 1980, том 21, номер 4, 161–168

https://www.mathnet.ru/smj3762

СИБИРСКИЙ МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ЖУРНАЛ

Т. XXI, № 4 ИЮЛЬ — АВГУСТ 1980

УДК 517.948+548.3 : 534.01

В. П. ТАНАНА, В. А. КОРШУНОВ

О ВЫБОРЕ ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ НЕКОРРЕКТНЫХ ЗАДАЧ

При решении некоторых классов некорректных задач, в частности обратных задач математической физики, примером которых может служить задача определения энергетического спектра бозе-системы по термодинамическим функциям, возникает необходимость выявления «тонкой структуры» решения, так как именно последняя содержит характерную информацию об индивидуальных особенностях системы. В то же время оказывается, что известные способы выбора параметра регуляризации, например определение его квазиоптимального значения, не всегда позволяют найти тонкую структуру решения ([1]). Расчеты показывают, что определить последнюю при существующей точности входных данных не удается и при выборе параметра регуляризации в методе регуляризации А. Н. Тихонова ([2, 3]) по принципу невязки ([4]). Возникает необходимость в разработке новых, более полно учитывающих специфику задачи способов выбора параметра регуляризации. В данной работе предложен и обоснован принцип минимальных невязок — способ выбора параметра регуляризации по входным данным задачи ([5]), который может рассматриваться как обобщение метода квазирешений ([6]). Эффективность предложенного способа иллюстрируется примерами решения интегрального уравнения Фредгольма первого рода (задача определения плотности состояний по теплоемкости фононов).

§ 1. Постановка задачи и принцип минимальных невязок

1. Рассмотрим операторное уравнение первого рода

$$Ax=y,\quad x\in X,\quad y\in Y, \tag{1}$$

где X и Y — линейные нормированные пространства, A — линейный взаимно-однозначный ограниченный оператор, отображающий пространство X в Y.

Предположим, что при $y=y_0$ существует точное решение x_0, но y_0 нам неизвестно, а вместо него известно лишь приближение $\bar y$ и некоторое множество $\mathfrak{M}(\bar y)$ допустимых решений: $\mathfrak{M}(\bar y)\subset X$. Требуется по $\bar y$ найти приближенное решение $\bar x$ уравнения (1) такое, что $\bar x\to x_0$ при $\bar y\to y_0$.

2. Рассмотрим семейство операторов $\{R_\alpha,\ 0<\alpha\leqslant\alpha_0,\ \alpha_0>0\}$, регуляризующих уравнение (1) на множестве $\mathfrak{M}\subset X$ ([7]). Для любого $\alpha>0$ R_α является непрерывным оператором (не обязательно линейным), отображающим пространство Y в X, и для любого $x\in\mathfrak{M}$ выполняется условие $R_\alpha Ax\to x$ при $\alpha\to 0$.

Тогда в качестве приближенного решения уравнения (1) можно взять элемент $\bar x^\alpha=R_\alpha\bar y$ с параметром $\alpha=\alpha(\bar y,\ \mathfrak{M}(\bar y))$, выбранным таким образом, чтобы имела место устойчивость приближенного решения, т. е. $\bar{x}^{\alpha(\bar{y},\mathfrak{M}(\bar{y}))} \to x_0$ при $\bar{y} \to y_0$.

Принцип минимальных невязок есть некоторый способ выбора параметра регуляризации α по известным характеристикам $\bar{y}$ и $\mathfrak{M}(\bar{y})$.

Определение. Параметр $\tilde{\alpha} = \tilde{\alpha}(\bar{y}, \mathfrak{M}(\bar{y}))$ будем называть *параметром регуляризации, выбранным по принципу минимальных невязок*, если

$$\tilde{\alpha} = \inf\{\bar{\alpha} : R_{\bar{\alpha}}\bar{y} \in \mathfrak{M}(\bar{y}),\ \varphi(\|AR_{\bar{\alpha}}\bar{y} - \bar{y}\|) = \inf\{\varphi(\|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\|) : 0 < \alpha \leqslant \alpha_0,\ R_\alpha\bar{y} \in \mathfrak{M}(\bar{y})\}\}, \tag{2}$$

где φ — некоторая функция.

§ 2. Обоснование принципа минимальных невязок

1. Для обоснования принципа минимальных невязок в одном практически важном случае предположим, что $\mathfrak{M}(\bar{y}) = \mathfrak{M}_1 \cap \mathfrak{M}_2$, где $\mathfrak{M}_1$ — слабо компактно в X, а $\mathfrak{M}_2 = \{x \in K : f(x) = M\}$, где K — выпуклое замкнутое множество в пространстве X, f — непрерывный функционал на X, удовлетворяющий условию:

$$x_n \rightharpoonup x,\ f(x_n) \to f(x) \Rightarrow x_n \to x. \tag{3}$$

Точное решение x_0 уравнения (1) принадлежит множеству $\mathfrak{M}$.

Относительно регуляризующего семейства операторов $\{R_\alpha : 0 < \alpha \leqslant \alpha_0\}$ предположим, что при $\alpha \neq 0$ $R_\alpha = SP_\alpha$, где $\{P_\alpha : 0 < \alpha \leqslant \alpha_0\}$ — семейство линейных ограниченных операторов, регуляризующих уравнение (1) на множестве $\mathfrak{M}_1 \cap \mathfrak{M}_2$, сильно непрерывных по α, и для любого $\bar{y} \in Y$ $\|AP_\alpha\bar{y} - \bar{y}\| \to 0$ при $\alpha \to 0$. S — непрерывный оператор, отображающий множество $X \backslash \{0\}$ в $\mathfrak{M}_2$, и для любого

$$x_0 \in \mathfrak{M}_2\quad Sx_0 = x_0. \tag{4}$$

При решении практических задач оператор S может быть выбран из физических соображений с целью обработки полученных регуляризованных решений $P_\alpha\bar{y}$.

Функцию φ определим следующим образом:

$$\varphi(\|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\|) = \begin{cases} \|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\| + \|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\|, & \alpha \neq 0; \\ \|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\|, & \alpha = 0. \end{cases}$$

2. При сделанных предположениях справедливы следующие теоремы:

Теорема 1. *Существует единственное значение параметра $\tilde{\alpha}$, удовлетворяющее принципу минимальных невязок* (2).

Доказательство. Рассмотрим минимизирующую последовательность $\{\alpha_n\}$ такую, что $R_{\alpha_n}\bar{y} \in \mathfrak{M}_1$ и $\|AR_{\alpha_n}\bar{y} - \bar{y}\| + \|AR_{\alpha_n}\bar{y} - \bar{y}\| \to \inf\{\|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\| + \|AP_\alpha\bar{y} - \bar{y}\| : 0 < \alpha \leqslant \alpha_0,\ R_\alpha\bar{y} \in \mathfrak{M}_1\}$. Без ограничения общности можно считать, что $\alpha_n \to \tilde{\alpha}$, но тогда ввиду сильной непрерывности по α семейств операторов $\{P_\alpha\}$ и $\{R_\alpha\}$ будем иметь

$$R_{\alpha_n}\bar{y} \to R_{\tilde{\alpha}}\bar{y}. \tag{5}$$

Если $\alpha \neq 0$, то

$$P_{\alpha_n}\bar{y} \to P_{\tilde{\alpha}}\bar{y}, \tag{6}$$

в противном случае $\|AP_{\alpha_n}\bar{y} - \bar{y}\| \to 0$. Из (5) и (6) следует, что $R_{\tilde{\alpha}}\bar{y} \in \mathfrak{M}_1$ и

$$\varphi(\|AR_{\tilde{\alpha}}\bar{y} - \bar{y}\|) = \inf\{\varphi(\|AR_\alpha\bar{y} - \bar{y}\|) : 0 < \alpha \leqslant \alpha_0,\ R_\alpha\bar{y} \in \mathfrak{M}_1\}. \tag{7}$$

Теперь рассмотрим последовательность значений параметра $\{\overline{\alpha}_n\}$ такую, что $\overline{\alpha}_n \to \tilde{\alpha}$ и для любого n $\overline{\alpha}_n$ удовлетворяет (7). Тогда, учитывая сильную непрерывность по α семейств операторов $\{P_\alpha\}$ и $\{R_\alpha\}$, получим, что и значение $\tilde{\alpha}$ удовлетворяет (7). Тем самым доказано существование $\tilde{\alpha}$. Единственность значения параметра $\tilde{\alpha}$ очевидна. Теорема доказана.

Теорема 2. *Имеет место устойчивость приближенных решений* $x^{\tilde{\alpha}(\overline{y},\mathfrak{M}(\overline{y}))} = R_{\tilde{\alpha}(\overline{y},\mathfrak{M}(\overline{y}))}\overline{y}$ *с параметром регуляризации* $\tilde{\alpha} = \tilde{\alpha}(\overline{y}, \mathfrak{M}(\overline{y}))$, *выбранным по принципу минимальных невязок* (2).

Доказательство. Предположим, что устойчивость приближенных решений $x^{\tilde{\alpha}(\overline{y},\mathfrak{M}(\overline{y}))} = R_{\tilde{\alpha}(\overline{y},\mathfrak{M}(\overline{y}))}\overline{y}$ не имеет места, т. е. найдется последовательность приближенных решений $\overline{x}_n = x^{\tilde{\alpha}(\overline{y}_n,\mathfrak{M}(\overline{y}_n))}$ таких, что $\overline{y}_n \to y_0$, и тем не менее

$$\|\overline{x}_n - x_0\| \geqslant d > 0. \tag{8}$$

Последовательность $\{\overline{x}_n\}$ принадлежит множеству $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 \cap \mathfrak{M}_2$, следовательно, $\{\overline{x}_n\}$ слабо компактна. Можно считать, что последовательность $\{\overline{x}_n\}$ слабо сходится:

$$\overline{x}_n \rightharpoonup \overline{x} \text{ при } n \to \infty,\ \overline{x} \in X \text{ и } \|\overline{x}_n\| \leqslant \|x_0\|. \tag{9}$$

Покажем, что $\overline{x} = x_0$. Семейство операторов $\{P_\alpha\}$ регуляризует уравнение (1) на $\mathfrak{M} = \mathfrak{M}_1 \cap \mathfrak{M}_2$ и $x_0 \in \mathfrak{M}$, следовательно,

$$P_\alpha y_0 \to x_0 \text{ при } \alpha \to 0. \tag{10}$$

Выберем последовательность α_n так, что

$$\|P_{\alpha_n}\|\|\overline{y}_n - y_0\| \to 0 \text{ при } n \to \infty. \tag{11}$$

Построим последовательность $\hat{x}_n = P_{\alpha_n}\overline{y}_n$. Тогда из (10) и (11) следует:

$$\hat{x}_n \to x_0 \text{ при } n \to \infty. \tag{12}$$

Следовательно, $\|AP_{\alpha_n}\overline{y}_n - \overline{y}_n\| \to 0$ при $n \to \infty$. Оператор S непрерывный и удовлетворяет условию (4), тогда из (12) следует $S\hat{x}_n \to x_0$ при $n \to \infty$, а следовательно, $\|AR_{\alpha_n}\overline{y}_n - \overline{y}_n\| \to 0$ при $n \to \infty$.

Если параметр $\tilde{\alpha}$ выбран по принципу минимальных невязок (см. определение), то справедливо следующее неравенство:

$$\begin{aligned} \|AR_{\tilde{\alpha}}\overline{y}_n - \overline{y}_n\| &\leqslant \|AR_{\tilde{\alpha}}\overline{y}_n - \overline{y}_n\| + \|AP_{\tilde{\alpha}}\overline{y}_n - \overline{y}_n\| \leqslant \\ &\leqslant \|AR_{\tilde{\alpha}_n}\overline{y}_n - \overline{y}_n\| + \|AP_{\tilde{\alpha}_n}\overline{y}_n - \overline{y}_n\|, \quad \tilde{\alpha}_n \to \tilde{\alpha}. \end{aligned} \tag{13}$$

Переходя в (13) к пределу при $n \to \infty$, получим

$$A\overline{x} = y_0 = Ax_0. \tag{14}$$

так как A — непрерывный оператор и, следовательно, оператор A слабо непрерывен, из (14) следует $\overline{x} = x_0$.

Имеем
$$\overline{x}_n \rightharpoonup x_0. \tag{15}$$

Из свойств слабого предела получим, учитывая (9):

$$\|x_0\| \leqslant \varliminf_{n\to\infty}\|\overline{x}_n\| \leqslant \varlimsup_{n\to\infty}\|\overline{x}_n\| \leqslant \|x_0\|. \tag{16}$$

Из (16) следует

$$\|\overline{x}_n\| \to \|x_0\|. \tag{17}$$

Последовательность $\{\bar{x}_n\} \in \mathfrak{M}$; из (15) и (17) следует $\bar{x}_n \to x_0$, что противоречит (8). Тем самым теорема доказана.

3. Заметим, что если $X = Y = Z = H$, где H — сепарабельное гильбертово пространство, $\{R_\alpha\}$ есть регуляризующее семейство операторов А. Н. Тихонова ([2,3]), т. е. $R_\alpha = B(C^*C + \alpha E)^{-1}C^*$, где $C = AB$, B — линейный вполне непрерывный оператор, отображающий H в H (оператор вложения), C^* — оператор, сопряженный C, а в качестве исходной информации известно приближенное значение правой части уравнения (1) и уровень ее погрешности δ, $\|\bar{y} - y_0\| \leqslant \delta$, то в качестве множества $\mathfrak{M}(\bar{y})$ допустимых решений можно взять множество

$$\mathfrak{M}\{x : x = Bz,\ \|z\| = \inf\{\|z\| : \|Cz - \bar{y}\| \leqslant \delta\}\}.$$

В этом случае принцип минимальных невязок будет совпадать с принципом невязки ([4]).

Если $\mathfrak{M}(\bar{y}) = BS(0, r)$, где $S(0, r)$ — шар радиуса r с центром в точке 0, и в качестве априорной информации известно, что точное решение x_0 уравнения (1), $Ax_0 = y_0$, принадлежит $\mathfrak{M}(\bar{y})$, то принцип минимальных невязок совпадает с методом квазирешений ([6]).

§ 3. Пример

1. Пусть $Z = Y = L_2[0, 1]$, $X = L_1[0, 1]$.

$$Ax = \int_0^1 K(t, s)\, x(s)\, ds, \quad Bz = \int_0^1 Q(s, \tau)\, z(\tau)\, d\tau,$$

где $K(t, s)$ и $Q(s, t)$ — функции, непрерывные на квадрате $[0 \leqslant t \leqslant 1,\ 0 \leqslant s \leqslant 1]$.

Предположим, что о точном решении $x_0(s)$ нам известно, что $x_0(s) \in \mathfrak{M}(\bar{y})$, а $\mathfrak{M}(\bar{y})$ имеет следующий вид:

$$\mathfrak{M}(\bar{y}) = \mathfrak{M}_1(\bar{y}) \cap \mathfrak{M}_2(\bar{y}),$$

где $\mathfrak{M}_1(\bar{y}) = \{x : x \in BZ,\ \|x\|_{L_1} \leqslant r_1\}$, $\mathfrak{M}_2(\bar{y}) = \{x : x \in BZ,\ x \geqslant 0,\ \|x\|_{L_1} = r_2\}$, $r_1, r_2 > 0$. Так как в данном случае $\mathfrak{M}(\bar{y})$ от $\bar{y}$ не зависит, обозначим его просто $\mathfrak{M}$.

В качестве регуляризующего семейства выберем семейство операторов $\{R_\alpha\}$ следующего вида: $R_\alpha = S_1S_2P_\alpha$, где $P_\alpha = B(C^*C + \alpha E)^{-1}C^*$, $C = AB$, S_1 и S_2 — нелинейные операторы, отображающие L_1 в L_1 следующим образом:

$$S_1x = \frac{x}{\|x\|_{L_1}},$$

$$S_2x = \begin{cases} x, & x \geqslant 0; \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

Оператор $S = S_1S_2$ отображает множество $X \setminus \{0\}$ в $\mathfrak{M}$, и для любого $x_0 \in \mathfrak{M}$ $Sx_0 = x_0$, кроме того, он является непрерывным на $X \setminus \{0\}$.

2. В качестве приложения описанного метода рассмотрим задачу определения энергетического спектра бозе-системы (например, системы фононов) по термодинамическим функциям. Интегральное уравнение,

связывающее плотность состояний $g(\nu)$ и теплоемкость $y(t)$ системы невзаимодействующих фононов, имеет вид:

$$\int_a^b K(t, \nu) g(\nu) d\nu = y(t), \quad c \leqslant t \leqslant d, \tag{18}$$

$$K(t, \nu) = \left(q \frac{\nu}{t}\right)^2 \operatorname{cosech}^2\left(q \frac{\nu}{t}\right), \quad q \text{ — константа.}$$

Известно, что плотность состояний $g(\nu)$ имеет конечное число особых точек, в которых первая производная терпит разрывы [8], т. е. искомая функция принадлежит пространству С. Л. Соболева W_2^1. Поэтому при решении рассматриваемой задачи использовались регуляризаторы А. Н. Тихонова нулевого и первого порядка [2, 3].

3. Был построен алгоритм и составлена программа численного решения уравнения (18) методом регуляризации с выбором параметра регуляризации α по принципу минимальных невязок. С целью проверки вычислительной эффективности решались модельные примеры, когда задавалась функция $x_0(s)$, вычислялась правая часть уравнения (18), а затем решалась обратная задача при различных уровнях погрешности правой части.

Результаты решения модельных примеров показывают устойчивость получаемых с помощью рассматриваемого метода приближенных решений даже при значительных погрешностях правой части. На рис. 1 приведены функция $x_0(s)$ и регуляризованное решение $x^\alpha(s)$ уравнения (18) с правой частью, округленной до трех знаков. Следует отметить, что при такой погрешности δ исходных данных невязка на порядок превышает δ для всех возможных значений параметра регуляризации α, т. е. принцип невязки выбора параметра α в данной ситуации оказывается неприменимым.

§ 4. Определение фононных спектров кристаллов

1. При решении некорректной задачи (18) определяющее значение имеет точность задания правой части, т. е. теплоемкости системы невзаимодействующих фононов. Для получения возможно более точных значений последней из экспериментальных величин теплоемкости кристалла следует исключить составляющие, обусловленные существованием и взаимодействием различных элементарных возбуждений в кристалле.

В случае никеля учитывались электронный и магнонный вклады в теплоемкость и так называемые ангармонические составляющие теплоемкости, связанные с фонон-фононным взаимодействием и тепловым расширением кристалла. Для магния определялись электронная (с учетом электрон-фононного взаимодействия) и ангармонические составляющие теплоемкости. Для кремния достаточно было учесть лишь ангармонические составляющие теплоемкости.

2. На рис. 2, 3, 4 приведены решения уравнения (18) для никеля, цинка и кремния, а также фононные плотности состояний, найденные на основе результатов нейтронографических исследований.

Для никеля приведены данные измерений фононной плотности состояний прямым методом (по дифференциальному сечению однофононного рассеяния на поликристаллическом образце естественного изотопного состава) [9] и расчета по модели Борна — Кармана с четырьмя соседями, основанном на результатах измерений дисперсионных соотношений для основных направлений симметрии при 296 К [10].

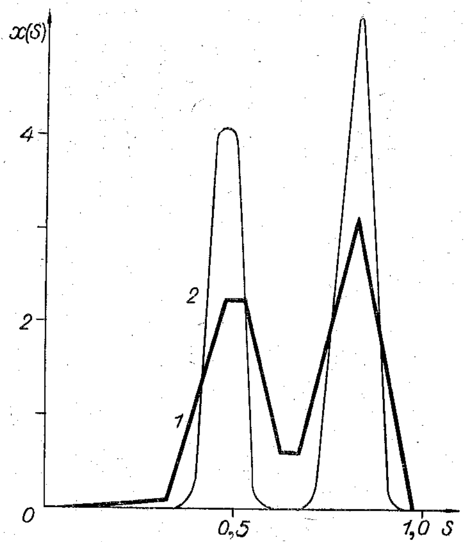

Рис. 1. Точное (1) и регуляризованное (2) решения уравнения (18).

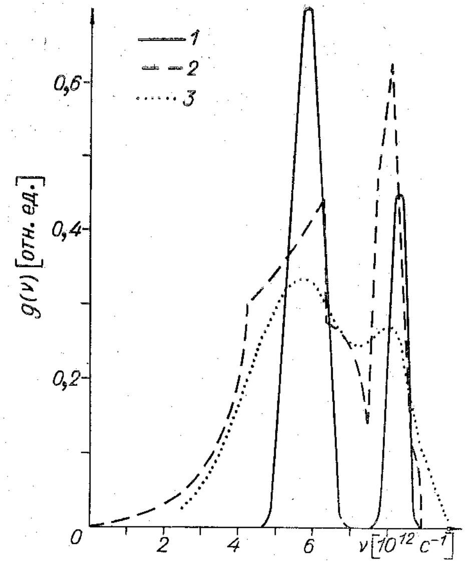

Рис. 2. Фононная плотность состояний никеля: 1 — решение уравнения (18), 2 — [10], 3 — [9].

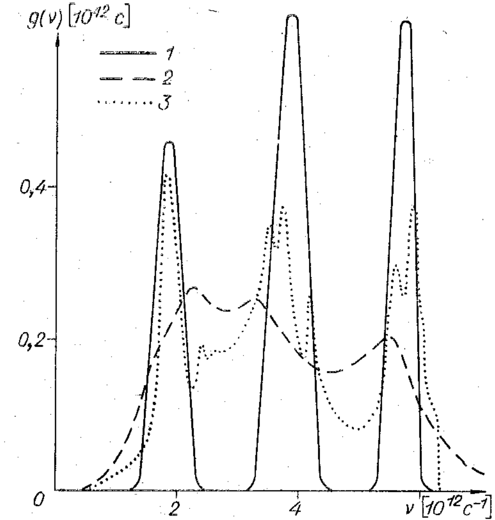

Рис. 3. Фононная плотность состояний цинка: 1 — решение уравнения (18), 2 — [11], 3 — [12].

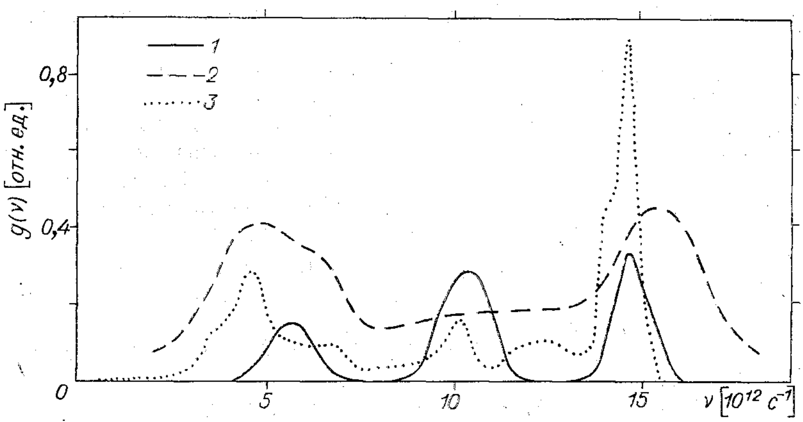

Рис. 4. Фононная плотность состояний кремния: 1 — решение уравнения (18), 2 — [13], 3 — [14].

Для цинка даны результаты измерений фононной плотности состояний прямым методом ([11]) и расчета по модифицированной аксиально-симметричной модели с шестью соседями на основе измеренных дисперсионных соотношений для направлений Λ, Σ и T ([12]).

Для кремния приведены результаты измерений $g(\nu)$ прямым методом ([13]) и расчета ([14]) на основе потенциала валентных сил с шестью параметрами, подогнанными по результатам измерений дисперсионных соотношений для основных направлений симметрии ([15]).

Из рисунков видно, что полученные решения обратной задачи имеют характерную «тонкую структуру», хорошо согласующуюся с обнаруживаемой при экспериментальном исследовании фононных спектров, причем данная структура выявляется более четко, чем при измерениях фононной плотности состояний прямыми методами.

Таким образом, при выборе в методе А. Н. Тихонова параметра регуляризации по принципу минимальных невязок удается определить тонкую структуру решения даже при значительных уровнях погрешности входных данных некорректной задачи.

Авторы благодарят В. К. Иванова за внимание к работе.

Свердловск,
Уральский государственный университет им. А. М. Горького

Статья поступила 2 августа 1978 г.

ЛИТЕРАТУРА

[1] *Иверонова В. И., Тихонов А. Н., Заикин П. Н., Звягина А. П.* Определение фононного спектра кристаллов по теплоемкости.— Физ. твердого тела, 1966, т. 8, № 12, с. 3459—3462.

[2] *Тихонов А. Н.* О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации.— Докл. АН СССР, 1963, т. 151, № 3, с. 501—504.

[3] *Тихонов А. Н.* О регуляризации некорректно поставленных задач.— Докл. АН СССР, 1963, т. 153, № 1, с. 49—52.

[4] *Иванов В. К.* О приближенном решении операторных уравнений первого рода.— Журн. вычислит. математики и мат. физики, 1966, т. 6, № 6, с. 1089—1095.

[5] *Танана В. П., Коршунов В. А.* Принцип минимальных невязок.— Докл. АН СССР, 1978, т. 239, № 4, с. 800—803.

[6] *Иванов В. К.* О линейных некорректных задачах.— Докл. АН СССР, 1962, т. 145, № 2, с. 270—272.

[7] *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. М., «Наука», 1974.

[8] *Phillips J. C.* Critical points and lattice vibration spectra.— Phys. Rev., 1956, v. 104, № 5, p. 1263—1277.

[9] *Горбачев Б. И., Иваницкий П. Г., Кротенко В. Т., Пасечник М. В.* Исследование неупругого рассеяния медленных нейтронов на образцах никеля с различным изотопным составом.— Укр. физич. журн., 1973, т. 18, № 4, с. 558—563.

[10] *Birgeneau R. J., Cordes J., Dolling G., Woods A. D. B.* Normal modes of vibration in nickel.— Phys. Rev., 1964, v. 136, № SA, p. 1359—A1365.

[11] *Еремеев И. П., Садиков И. П., Чернышов А. А.* Плотность состояний фононов в гексагональных металлах II группы.— Физика твердого тела, 1976, т. 18, № 6, с. 1652—1660.

[12] *Chesser N. J., Axe J. D.* Lattice dynamics of zinc: phonon structure factors.— Phys. Rev. B, 1974, v. 9, № 10, p. 4060—4067.

[13] *Нестеренко Б. А., Горбачев Б. И., Зражевский В. А., Иваницкий П. Г., Кротенко В. Т., Пасечник М. В., Снитко О. В.* Фононный спектр решетки кремния.— Физ. твердого тела, 1974, т. 16, № 11, с. 3513—3515.

[14] *Tubino R., Piseri L., Zerbi G.* Lattice dynamics and spectroscopic properties by a valence vorce potential of diamondlike crystals: C, Si, Ge and Sn.— J. Chemical Physics, 1972, v. 56, № 3, p. 1022—1039.

[15] *Dolling G.* Lattice vibrations in crystals with the diamond structure.— In: "Inelastic scattering neutrons in solids and liquids, vol. 2", Vienna, IAEA, 1963, p. 37—47.