В. П. Танана, В. А. Коршунов, Принцип минимальных невязок,
Докл. АН СССР, 1978, том 239, номер 4, 800–803

https://www.mathnet.ru/dan41632

Доклады Академии наук СССР
1978. Том 239, № 4

УДК 517.948+548.3:534.01 МАТЕМАТИКА

В. П. ТАНАНА, В. А. КОРШУНОВ

ПРИНЦИП МИНИМАЛЬНЫХ НЕВЯЗОК

(Представлено академиком А. Н. Тихоновым 21 XII 1977)

При решении некоторого класса некорректных задач (например, задач определения фононных спектров по термодинамическим функциям кристалла ([1])) известные способы выбора параметра регуляризации α не всегда позволяют выявить «тонкую структуру» решения ([2]), а определение последней в этих задачах имеет важное прикладное значение. Поэтому необходима разработка новых способов выбора параметра регуляризации, более полно учитывающих специфику задачи. В настоящей заметке предлагается такой способ.

1. Пусть X, Y — линейные нормированные пространства, A — линейный взаимно однозначный ограниченный оператор, отображающий пространство X в Y. Рассмотрим операторное уравнение первого рода

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

Предположим, что при $y=y_0$ существует точное решение x_0, но y_0 нам не известно, а вместо него известно лишь приближение $\bar{y}$ и некоторое множество $M(\bar{y})$ допустимых решений, $M(\bar{y})\subset X$. 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 $\{R_\alpha,\ 0\leqslant\alpha\leqslant\alpha_0,\ \alpha_0>0\}$, регуляризующих уравнение (1) на множестве $M\subset X$ (см. ([3])). Для любого $\alpha>0$ R_α является непрерывным оператором (не обязательно линейным), отображающим пространство Y в X, и для любого $x\in M$ 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 $\alpha=\alpha(\bar{y}, M(\bar{y}))$, выбранным таким образом, чтобы имела место устойчивость приближенного решения, т.е. $\bar{x}^{\alpha(\bar{y}, M(\bar{y}))}\to x_0$ при $\bar{y}\to y_0$.

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

Определение. Параметр $\alpha_0=\alpha_0(\bar{y}, M(\bar{y}))$, будем называть *параметром регуляризации, выбранным по принципу минимальных невязок*, если

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

где φ — некоторая функция.

Предположим, что $M(\bar{y})=M_1\cap M_2$, где M_1 слабо компактно в X, а $M_2=\{x\in K\colon f(x)=M\}$, где K — некоторый замкнутый конус в пространстве X, f — непрерывный функционал на X, удовлетворяющий условию: из $x_n\xrightarrow{\text{сл}}x$, $f(x_n)\to f(x)$ следует $x_n\to x$. Точное решение x_0 уравнения (1) принадлежит множеству M. Относительно регуляризующего семейства операторов $\{\tilde{R}_\alpha\colon 0\leqslant\alpha\leqslant\alpha_0\}$ предположим, что при $\alpha\neq 0$

$$\tilde{R}_\alpha=PR_\alpha,$$

где $\{R_\alpha\colon 0<\alpha\leqslant\alpha_0\}$ — семейство линейных ограниченных операторов, регуляризующих уравнение (1) на множестве $M_1\cap M_2$, сильно непрерывных по α, и для любого $y\in Y$ $\|AR_\alpha y-y\|\to 0$ при $\alpha\to 0$. P — непрерывный оператор, отображающий множество $X\setminus\{0\}$ в M_2 и для любого $x_0\in M_2$ $Px_0=x_0$. На практике оператор P может быть выбран из физических соображений с целью обработки полученных регуляризованных решений $R_\alpha\bar{y}$.

Функцию φ определим следующим образом:

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

При сделанных предположениях справедливы следующие утверждения.

Теорема 1. *Существует единственное значение параметра α_0, удовлетворяющее принципу минимальных невязок.*

Теорема 2. *Имеет место устойчивость приближенных решений $x^{\alpha_0(\bar{y},M)}=\tilde{R}_{\alpha_0(\bar{y},M)}\bar{y}$ с параметром регуляризации $\alpha_0=\alpha_0(\bar{y}, M)$, выбранным по методу минимальных невязок* (2).

Заметим, что если $X=Y=Z=H$, где H — сепарабельное гильбертово пространство, а $\{R_\alpha\}$ есть регуляризующее семейство операторов А. Н. Тихонова, 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 $\bar{y}$ правой части уравнения (1) и уровень ее погрешности δ, $\|y_0-\bar{y}\|\leqslant\delta$, то в качестве множества $M(\bar{y})$ допустимых решений можно взять множество

$$M=\{x\colon x=Bz,\ \|z\|=\inf_{\|Cz-\bar{y}\|\leqslant\delta}\|z\|\}.$$

В этом случае принцип минимальных невязок будет совпадать с принципом невязки [4, 5].

Если $M(\bar{y})=BS(0, r)$, 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 $M(\bar{y})$, то принцип минимальных невязок совпадает с методом квазирешений [6].

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

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

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 $x_0(s)$ известно, что $x_0(s)\in M(\bar{y})$, а $M(\bar{y})$ имеет следующий вид:

$$M(\bar{y})=M_1(\bar{y})\cap M_2(\bar{y}),$$

где

$$M_1(\bar{y})=\{x\colon x\in Bz,\ \|x\|_{L_1}\leqslant r_1\},$$
$$M_2(\bar{y})=\{x\colon x\in Bz,\ x\geqslant 0,\ \|x\|_{L_1}=r_2\},\qquad r_1, r_2>0.$$

Так как в данном случае $M(\bar{y})$ от $\bar{y}$ не зависит, обозначим его просто M.

В качестве регуляризующего семейства выберем семейство операторов $\{\tilde{R}_\alpha\}$ следующего вида:

$$\tilde{R}_\alpha=P_1P_2R_\alpha,$$

где $R_\alpha=B(C_1+\alpha E)^{-1}C'$, $C_1=C'C$, $C=AB$, а P_1, P_2 — нелинейные операторы, отображающие L_1 в L_1 следующим образом:

$$P_1x=\frac{x}{\|x\|_{L_1}},\qquad P_2x=\begin{cases}x, & x\geqslant 0,\\ 0, & x<0.\end{cases}$$

Оператор $P=P_1P_2$ отображает множество $X\setminus\{0\}$ в M и для любого $x_0\in M$ $Px_0=x_0$, кроме того, он является непрерывным на $X\setminus\{0\}$.

4. Интегральные уравнения, связывающие фононную плотность состояний $x(s)$ с термодинамическими функциями фононов, имеют наиболее простой вид, если пренебречь фонон-фононным взаимодействием. Пусть $y(t)$ — теплоемкость системы невзаимодействующих фононов, тогда

$$\int_a^b K(t,s)x(s)ds=y(t),\quad K(t,s)=\left(q\frac{s}{t}\right)^2\operatorname{cosech}^2\left(q\frac{s}{t}\right),\quad c\leqslant t\leqslant d, \tag{3}$$

Был построен алгоритм и составлена программа численного решения уравнения (3) методом регуляризации с выбором параметра регуляризации α по принципу минимальных невязок. С целью проверки вычисли-

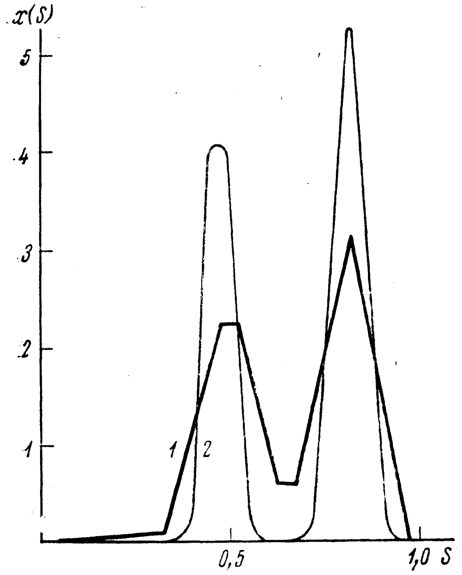

Рис. 1. Точное (*1*) и регуляризованное (*2*) решения интегрального уравнения

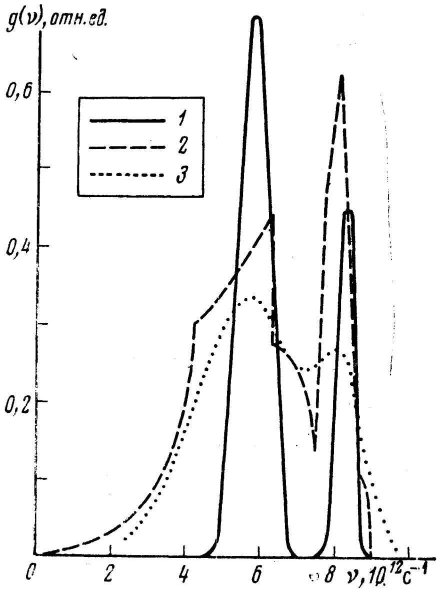

Рис. 2. Фононная плотность состояний никеля: *1* – решение уравнения (3), *2* – результат работы [9], *3* – результат работы [10]

тельной эффективности решались модельные примеры, когда задавалась функция $x_0(s)$, вычислялась правая часть уравнений (3), а затем решалась обратная задача при различных уравнениях 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 (3) 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.

В качестве примера определения фононной плотности состояний по теплоемкости кристалла приведем результаты для переходного металла никеля. Для получения достаточно точных значений теплоемкости невзаимодействующих фононов $y(t_i)$ из измеренной теплоемкости кристалла ([7, 8]) исключались ангармоническая, электронная и магнонная составляющие теплоемкости.

Результаты численного решения уравнения (3) для кристалла никеля приведены на рис. 2. Там же приведены фононные плотности состояний $g(\nu)$ никеля, найденные методом неупругого рассеяния медленных нейтронов: кривая *2* рассчитана по модели Борна — Кармана на основе результатов измерений дисперсионных соотношений для основных направлений симметрии при 296 К ([9]), кривая *3* получена на основе измеренного дифференциального сечения однофононного рассеяния на поликристаллическом образце естественного изотопного состава ([10]) *. Совпадение результатов можно считать хорошим.

Таким образом, при выборе параметра регуляризации по принципу минимальных невязок удается выявить тонкую структуру решения даже при больших уровнях погрешности исходных данных.

Авторы признательны В. К. Иванову и П. В. Гельду за внимание к работе.

Уральский государственный университет
им. А. М. Горького
Свердловск

Поступило
14 XI 1977

ЛИТЕРАТУРА

[1] *В. К. Иванов, В. А. Коршунов и др.*, ДАН, т. 228, 19 (1976). [2] *В. И. Иверонова, А. Н. Тихонов и др.*, ФТТ, т. 8, 3489 (1966). [3] *А. Н. Тихонов, В. Я. Арсенин*, Методы решения некорректных задач, М., «Наука», 1974. [4] *В. К. Иванов*, Журн. вычислит. матем. и матем. физ., т. 6, 1983 (1966). [5] *В. А. Морозов*, ДАН, т. 175, 1225 (1967). [6] *В. К. Иванов*, ДАН, т. 145, 270 (1962). [7] *R. H. Busey, W. F. Giauque*, J. Am. Chem. Soc., v. 74, 3157 (1962). [8] *M. Dixon, F. E. Hoare et al.*, Proc. Roy. Soc., v. A285, 561 (1965). [9] *R. J. Birgeneau, J. Cordes et al.*, Phys. Rev., v. 136, A1359 (1964). [10] *Б. И. Горбачев, П. Г. Иваницкий и др.*, Укр. физ. журн., т. 18, 558 (1973).

* Определяемая в эксперименте функция $g(\nu)$ представляет собой свертку фононной плотности состояний кристалла с функцией разрешения спектрометра. Восстановление фононной плотности состояний является некорректной задачей и ее целесообразно решать методом регуляризации А. Н. Тихонова [3].