УДК 517.948

# О НЕКОТОРЫХ ПРОБЛЕМАХ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ ИНФОРМАЦИИ В ФИЗИКЕ ТВЕРДОГО ТЕЛА

***В.П. Танана, А.И. Сидикова***

При математическом моделировании многих процессов и явлений, происходящих в природе и обществе, приходится сталкиваться с задачами, не удовлетворяющими условиям корректности Адамара. Основной трудностью решения таких задач является то, что их математическая модель и метод должны быть увязаны друг с другом. Задачи, не удовлетворяющие условиям корректности, получили название некорректно поставленными и основы теории моделирования и решения таких задач были заложены в трудах академиков А.Н. Тихонова, М.М. Лаврентьева и член-корр. РАН В.К. Иванова.

Настоящая статья посвящена исследованию и решению обратной задачи физики твердого тела. Данная задача является некорректной. При оценке погрешности методов решения некорректно поставленных задач приходится сталкиваться с трудностью, связанной с неопределенностью точного решения, поэтому необходима разработка новых эффективных методов решения обратных задач физики твердого тела, оценки их эффективности и разработки на их основе программ для численного решения соответствующих задач. В статье рассматривается двойная регуляризация, позволяющая получить равномерное приближение фононного кристалла, а также оценку погрешности этого приближения.

*Ключевые слова: регуляризация, интегральное уравнение, оценка погрешности, некорректная задача.*

**Введение**

Как известно [1], многие физические свойства кристаллов определяет «тонкая структура» их энергетических спектров. Так как энергетические спектры кристаллов недоступны прямому измерению, то для их косвенного определения используют экспериментальные данные о теплоемкости. Связь фононного спектра кристалла с его теплоемкостью, зависящей от температуры, описывается интегральным уравнением первого рода [1]. Поскольку задача численного решения такого уравнения сильно неустойчива, то это осложняет определение «тонкой структуры» фононного спектра кристалла. Как следует из работы [2], применение известных методов регуляризации заглаживает «тонкую структуру» энергетического спектра кристалла. В настоящей работе предложена двойная регуляризация, позволяющая получить равномерное приближение фононного кристалла, а также оценку погрешности этого приближения.

**1. Постановка задачи**

Связь энергетического спектра бозе-системы с ее теплоемкостью, зависящей от температуры, описывается интегральным уравнением первого рода

$$Sn(\varepsilon)=\int_0^\infty S\left(\frac{\varepsilon}{\theta}\right)\frac{\varepsilon}{\theta}n(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}=\frac{C(\theta)}{\theta};\quad 0\le\theta<\infty, \tag{1}$$

где $S(x)=\dfrac{x^2}{2sh^2\left(\dfrac{x}{2}\right)}$; $C(\theta)$ – теплоемкость системы; $\theta=kT$; $T$ – абсолютная температура; $k$ – константа, определяемая системой, а $n(\varepsilon)$ – спектральная плотность [1].

Обозначим через $H$ действительное пространство измеримых на $[0,\infty)$ функций $f(x)$ с нормой, определяемой формулой

$$\|f(x)\|_H^2=\int_0^\infty |f(x)|^2\frac{dx}{x}. \tag{2}$$

Предложим, что при $\frac{C(\theta)}{\theta}=\frac{C_0(\theta)}{\theta}\in H$ существует точное решение $n_0(\varepsilon)\in H\bigcap C[0,\infty)$ уравнения (1), которое единственно и удовлетворяет соотношению $n_0(\varepsilon)\in G_r$, где

$$G_r=\left\{n(\varepsilon)\,:\,n(\varepsilon)\in H,\ \int\limits_0^\infty\frac{n^2(\varepsilon)}{\varepsilon}d\varepsilon+\int\limits_0^\infty[n'(\varepsilon)]^2\varepsilon d\varepsilon\le r^2\right\},\tag{3}$$

а число $r$ предполагается известным, $n'(\varepsilon)$ обобщенная производная Соболева от функции $n(\varepsilon)$, но вместо точного значения правой части $\frac{C_0(\theta)}{\theta}$ уравнения (1) известны некоторое приближение $\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}\in H$ и уровень погрешности $\delta>0$ такие, что

$$\left\|\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}-\frac{C_0(\theta)}{\theta}\right\|_H\le\delta,\tag{4}$$

где $H$ определено в (2).

Кроме того, предположим, что существует число $\varepsilon_0>0$ такое, что для любого $\varepsilon\ge\varepsilon_0$

$$n_0(\varepsilon)=0.\tag{5}$$

Требуется по исходным данным $\varepsilon_0$, $r$, $\delta$ и $\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}$, удовлетворяющим соотношениям (3)–(5), определить приближенное решение $\overline{n}_\delta(\varepsilon)\in C[0;\varepsilon_0]$ уравнения (1) и оценить его уклонение от точного решения в метрике

$$\max_{\varepsilon\in[0;\varepsilon_0]}\left|\sqrt{\varepsilon}\,\overline{n}_\delta(\varepsilon)-\sqrt{\varepsilon}n_0(\varepsilon)\right|.\tag{6}$$

## 2. Метод регуляризации А.Н. Тихонова первого порядка

Метод регуляризации А.Н. Тихонова первого порядка [3] заключается в сведении уравнения (1) к вариационной задаче

$$\inf\left\{\int\limits_0^\infty\left[\int\limits_0^\infty S\left(\frac{\varepsilon}{\theta}\right)\frac{\varepsilon}{\theta}n(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}-\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}\right]^2\frac{d\theta}{\theta}+\alpha\int\limits_0^\infty[n'(\varepsilon)]^2\varepsilon d\varepsilon+\alpha\int\limits_0^\infty n^2(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}\ :\ n(\varepsilon)\in H^1[0,\infty]\right\},\tag{7}$$

где $H^1[0,\infty]$ – гильбертово пространство, определяемое нормой

$$\|n(\varepsilon)\|^2_{H^1[0,\infty)}=\int\limits_0^\infty[n'(\varepsilon)]^2\varepsilon d\varepsilon+\int\limits_0^\infty n^2(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\varepsilon},\ \alpha>0.$$

В [3] доказано, что для любых значений $\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}\in H$ и $\alpha>0$ существует единственное решение $n_\delta^\alpha(\varepsilon)$ вариационной задачи (7).

Для определения параметра $\alpha$ в задаче (7) используем принцип невязки [4], который сводится к решению уравнения

$$\int\limits_0^\infty\left[S\left(\frac{\varepsilon}{\theta}\right)\frac{\varepsilon}{\theta}n_\delta^\alpha(\varepsilon)\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}-\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}\right]^2\frac{d\theta}{\theta}=\delta^2\tag{8}$$

относительно $\alpha$.

В работе [4] доказано, что при выполнении условия

$$\int\limits_0^\infty\left[\frac{C_\delta(\theta)}{\theta}\right]\frac{d\theta}{\theta}>\delta^2$$

уравнение (8) имеет единственное решение $\overline{\alpha}(C_\delta,\delta)$, а в [5], что при выполнении условия $4\delta<r$ справедлива оценка

$$\left[\int_0^\infty \left[n_\delta^{\bar{\alpha}(C_\delta,\delta)}(\varepsilon)-n_0(\varepsilon)\right]^2\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}\right]^{\frac{1}{2}}\le\frac{2r}{\sqrt{1+\dfrac{1}{\pi^2}\ln^2\dfrac{r}{4\delta}}}. \tag{9}$$

Из (5) и (9) следует, что

$$\int_0^{\varepsilon_0}\left[n_\delta^{\bar{\alpha}(C_\delta,\delta)}(\varepsilon)-n_0(\varepsilon)\right]^2\frac{d\varepsilon}{\varepsilon}\le\frac{4r^2}{1+\dfrac{1}{\pi^2}\ln^2\dfrac{r}{4\delta}}. \tag{10}$$

В решениях $n_0(\varepsilon)$ и $n_\delta^{\bar{\alpha}(C_\delta,\delta)}(\varepsilon)$ сделаем замену переменных, обозначив через $x$ величину $\varepsilon/\varepsilon_0$,

$$v_0(x)=n_0\left(\varepsilon/\varepsilon_0\right), \tag{11}$$

$$v_\delta(x)=n_\delta^{\bar{\alpha}(C_\delta,\delta)}\left(\varepsilon/\varepsilon_0\right). \tag{12}$$

Из (10)–(12) следует, что

$$\int_0^1\left[v_\delta(x)-v_0(x)\right]^2\frac{dx}{x}\le\frac{4r^2}{1+\dfrac{1}{\pi^2}\ln^2\dfrac{r}{4\delta}}. \tag{13}$$

Так как

$$\int_0^1\left[\sqrt{x}\,v_\delta(x)-\sqrt{x}\,v_0(x)\right]^2dx\le\int_0^1\left[v_\delta(x)-v_0(x)\right]^2\frac{dx}{x},$$

то из (13) следует, что

$$\int_0^1\left[\sqrt{x}\,v_\delta(x)-\sqrt{x}\,v_0(x)\right]^2dx\le\frac{4r^2}{1+\dfrac{1}{\pi^2}\ln^2\dfrac{r}{4\delta}}. \tag{14}$$

При этом условии (3) перейдет в следующее

$$\int_0^1\frac{v_0^2(x)}{x}dx+\int_0^1[v_0'(x)]^2xdx\le r^2. \tag{15}$$

Теперь оценим норму $\left\|\sqrt{x}v_0(x)\right\|_{W_2^1}$ в пространстве $W_2^1[0,1]$ функции $\sqrt{x}\,v_0(x)$.

$$\left\|\sqrt{x}\,v_0(x)\right\|_{W_2^1}^2=\int_0^1 xv_0^2(x)dx+\int_0^1\left[\left(\sqrt{x}\,v_0(x)\right)'\right]^2dx=$$

$$=\int_0^1 xv_0^2(x)+\frac{1}{4}\int_0^1\frac{v_0^2(x)}{x}dx+\int_0^1 v_0(x)v_0'(x)dx+\int_0^1\left[v_0'(x)\right]^2xdx. \tag{16}$$

Из неравенства Коши – Буняковского следует, что

$$\int_0^1 v_0(x)v_0'(x)dx\le\frac{1}{8}\int_0^1\frac{v_0^2(x)}{x}dx+\frac{1}{2}\int_0^1\left[v_0'(x)\right]^2xdx. \tag{17}$$

Из (16) и (17) следует, что

$$\left\|\sqrt{x}v_0(x)\right\|_{W_2^1}^2\le\int_0^1 x\,v_0^2(x)dx+\frac{3}{8}\int_0^1\frac{v_0^2(x)}{x}dx+\frac{3}{2}\int_0^1\left[v_0'(x)\right]^2xdx. \tag{18}$$

Так как

$$\int_0^1 x\,v_0^2(x)dx\le\int_0^1\frac{v_0^2(x)}{x}dx,$$

то из (18) следует, что

$$\left\| \sqrt{x}\; v_0(x) \right\|_{W_2^1}^2 \le \frac{3}{2}\int_0^1 \frac{v_0^2(x)}{x}dx + \frac{3}{2}\int_0^1 \left[ v_0'(x) \right]^2 xdx, \qquad (19)$$

а из (15) и (19), что

$$\left\| \sqrt{x}\; v_0(x) \right\|_{W_2^1}^2 \le \frac{3}{2} r^2. \qquad (20)$$

**3. Решение задачи восстановления непрерывной функции, заданной со среднеквадратичной погрешностью**

Из (14) и (20) следует, что нашу задачу свели к известной задаче восстановления непрерывной функции, заданной с погрешностью в пространстве $L_2[0,1]$.

В дальнейшем введём обозначения

$$u(x) = \sqrt{x}\, v(x); \quad x \in [0,1], \quad r_1 = \sqrt{\frac{3}{2}}\, r, \quad \mu = \frac{2r}{\sqrt{1 + \frac{1}{\pi^2}\ln\frac{r}{4\delta}}}.$$

Предположим, что неизвестная функция $u_0(x) \in C[0,1]$ и удовлетворяет условию

$$\int_0^1 u_0^2(x)dx + \int_0^1 [u_0'(x)]^2 dx \le r_1^2 \qquad (21)$$

и известна функция $g_\mu(x) \in L_2[0,1]$ и уровень погрешности $\mu$ такие, что

$$\left\| g_\mu(x) - u_0(x) \right\|_{L_2} \le \mu\ . \qquad (22)$$

Требуется по исходным данным $g_\mu, \mu$ и $r_1$, удовлетворяющим (21) и (22), определить функцию $u_\mu(x) \in C[0,1]$ и оценить величину уклонения $\left\| u_\mu(x) - u_0(x) \right\|_C$.

Для решения данной задачи используем метод усредняющих функций, описанный в [6].

Рассмотрим усредняющую функцию

$$\omega(y) = \begin{cases} \frac{1}{\gamma} e^{-\frac{1}{1-y^2}}, & |y| < 1; \\ 0, & |y| \ge 1, \end{cases} \qquad (23)$$

где $\gamma = \int_{-1}^{1} e^{-\frac{1}{1-y^2}} dy.$

По функции $\omega(y)$, определенной (23), для любого $h > 0$ зададим функцию

$$\omega_h(y) = \frac{1}{h}\omega\left(\frac{|y|}{h}\right), \qquad y \in R.$$

Теперь, используя функцию $\omega_h(y)$, определим регуляризующее семейство $\{P_h \ : \ h > 0\}$ линейных ограниченных операторов, отображающих пространство $L_2[0,1]$ в $C[0,1]$

$$P_h g(y) = \int_0^1 g(y)\ \omega_h(x-y)dy; \qquad u(y) \in L_2[0,1].$$

В одной из лемм, доказанных в [6, с. 47], следует, что для любого $h > 0$ $\|P_h\| \le \frac{1}{\sqrt{\gamma h}}$.

Обозначим через $M_{r_1}$ множество из пространства $C[0,1]$ и определяемое формулой

$$M_{r_1} = \left\{ u(x) : u(x) \in W_2^1[0,1],\ \int_0^1 u^2(x)dx + \int_0^1 [u'(x)]^2 dx \le r_1^2 \right\},$$

а через $u_0^h(x)$ – функцию, определяемую формулой

$$u_0^h(x) = P_h u_0(x).$$

В [6, с. 67] доказано, что

$$\left\| u_0(x) - u_0^h(x) \right\|_{C[0,1]} \le r_1 \sqrt{h}.$$

Окончательно, в качестве приближенного значения $u_\mu(x)$ восстанавливаемой функции $u_0(x)$ возьмем функцию

$$u_\mu(x) = P_{h(\mu)} g_\mu(x),$$

в которой $h_\mu$ определено формулой

$$h(\mu) = \frac{\mu}{r_1\sqrt{\gamma}}. \tag{24}$$

Учитывая, что

$$\left\| u_\mu(x) - u_0(x) \right\|_{C[0,1]} \le \left\| u_0(x) - u_0^{h(\mu)}(x) \right\| + \left\| P_{h(\mu)} \right\| \cdot \mu,$$

где $h(\mu)$ определено формулой (24), получим

$$\left\| u_\mu(x) - u_0(x) \right\|_{C[0,1]} \le 2\sqrt{\frac{r_1\mu}{\gamma^{1/2}}}. \tag{25}$$

Теперь, сделав замены, обратные (11) и (12), мы получим решение $\bar{n}_\delta(\varepsilon)$ уравнения (1)

$$\bar{n}_\delta(\varepsilon) = \frac{\sqrt{\varepsilon_0}\, u_\mu\left(\varepsilon/\varepsilon_0\right)}{\sqrt{\varepsilon}}. \tag{26}$$

Тогда из (6), (25) и (26) следует, что

$$\max_{\varepsilon\in[0,\varepsilon_0]} \left| \sqrt{\varepsilon}\, \bar{n}_\delta(\varepsilon) - \sqrt{\varepsilon} n_0(\varepsilon) \right| \le \frac{2}{\sqrt{\varepsilon_0 \gamma^{1/2}}} \left[ 1 + \frac{1}{\pi^2} \ln^2 \frac{r}{4\delta} \right]^{-\frac{1}{4}}.$$

### *Литература*


*1. Лифшиц, И.М. Об определении энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости / И.М. Лифшиц // ЖЭТФ. –1954. – Т. 26, № 5. – С. 551–556.*

*2. Определение фононного спектра кристалла по теплоемкости / В.И. Иверонова, А.Н. Тихонов, П.Н. Заикин, А.П. Звягина // ФТТ. –1966. – Т. 8, № 12. – С. 3459–3462.*

*3. Тихонов, А.Н. О решении некорректно поставленных задач и методе регуляризации / А.Н. Тихонов. – Докл. АН СССР. – 1963. – Т. 151, № 3. – С. 501–504.*

*4. Морозов, В.А. О регуляризации некорректно поставленных задач и выборе параметра регуляризации / В.А. Морозов // Журн. вычислит. мат. и мат. физ. – 1966. – Т. 6, № 1. – С. 170–175.*

*5. Танана, В.П. Об оценке погрешности приближенного решения одной обратной задачи физики твердого тела / В.П. Танана, А.А. Ерыгина // Вестник ЮУрГУ. Сер. «Математика. Механика. Физика». – 2013. – Т. 5, № 2. – С. 72–77.*

*6. Танана, В.П. Оптимальные методы решения некорректно поставленных задач: учеб. пособие / В.П. Танана, А.И. Сидикова. – Челябинск: ЮУрГУ, 2012. – 162 с.*



**Танана Виталий Павлович**, д-р физ.-мат. наук, профессор, заведующий кафедрой вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск); tvpa@susu.ac.ru.

**Сидикова Анна Ивановна**, канд. физ.-мат. наук, доцент кафедры вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет (г. Челябинск); 7413604@mail.ru.


***Поступила в редакцию 25 декабря 2013 г.***

**Bulletin of the South Ural State University**
**Series "Computer Technologies, Automatic Control, Radio Electronics"**
**2014, vol. 14, no. 2, pp. 12–17**

# ABOUT SOME PROBLEMS THE TRANSFORMATION OF INFORMATION IN SOLID STATE PHYSICS

***V.P. Tanana***, *South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, tvpa@susu.ac.ru,*
***A.I. Sidikova***, *South Ural State University, Chelyabinsk, Russian Federation, 7413604@mail.ru*

At the mathematical modeling there are many problems, which do not satisfy the Hadamar's conditions. The main difficulty in solving such problems is that mathematical model and method must be linked to one another. They got the name are ill-posed problems. The bases for the solution of such tasks were laid down in the works of academicians A.N. Tikhonov, M.M. Lavrentiev, corresponding member V.K. Ivanov.

This article is devoted to the study and solution of the inverse problem of solid state physics. The task is incorrect. When the error evaluation methods of the solution of ill-posed problem is necessary, we have a difficulty associated with the uncertainly of the exact solution. Therefore, to develop new effective methods of solution of inverse problems of solid state physics, assess their effectiveness and development of programs for numerical solution of this tasks are necessary. This paper describes double regularization , which allows to obtain uniform approximation of phonon crystal and estimate the error of this approximation.

*Keywords: regularization, integral equation, evaluation of inaccuracy, ill-posed problem.*

## References

1. Lifshits I.M. [About the Determination of the Energy Spectrum of the Bose System for its Thermal Capacity]. *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 1954, vol. 26, iss. 5, pp. 551–556. (in Russ.)

2. Iveronova V.I., Tikhonov A.N., Zaikin P.N., Zvyagina A.P. [Definition of the Phonon Spectrum of the Crystal Heat Capacity ]. *Journal of Solid State Physics*, 1966, vol. 8, no. 12, pp. 3459–3462. (in Russ.)

3. Tikhonov A.N. [Solving Ill-posed Problems and Regularization Method]. *Doklady of Science Academy*, 1963, vol. 151, no. 3, pp. 501–504. (in Russ.)

4. Morozov V.A. [On Regularization of Ill-posed Problems and Choosing the Regularization Parameter]. *Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 1966, vol. 6, no. 1, pp. 170–175. (in Russ.)

5. Tanana V.P., Erygina A.A. [About the Evaluation of Inaccuracy of Approximate Solution of the Inverse Problem of Solid State Physics]. *Bulletin of the South-Ural State University. Ser. Mathematics, Mechanics, Physics*, 2013, vol. 5, no. 2, pp. 72–77. (in Russ.)

6. Tanana V.P., Sidikova A.I. *Optimalnie metodi resheniya necorrectno postavlennikh zadach* [Optimal Methods for Solving Ill-posed Problems]. Chelyabinsk, South Ural St. Univ., 2012. 162 p.

***Received 25 December 2013***