УДК 517.948

ОЦЕНКА ПОГРЕШНОСТИ МЕТОДА, ОСНОВАННОГО НА ОБОБЩЕННОМ ПРИНЦИПЕ НЕВЯЗКИ, ДЛЯ ЗАДАЧИ ВОССТАНОВЛЕНИЯ СПЕКТРАЛЬНОЙ ПЛОТНОСТИ КРИСТАЛЛОВ

А.А. Ершова[1], *А.И. Сидикова*[2]

Изучена задача определения фононного спектра кристалла по его теплоемкости. Получена оценка точности метода регуляризации А.Н. Тихонова с параметром регуляризации, выбранным из обобщенного принципа невязки.

Ключевые слова: регуляризация; модуль непрерывности; оценка погрешности; некорректная задача; обобщенный принцип невязки.

Введение

Задача определения фононного спектра по его теплоемкости, зависящей от температуры, следуя [1], сводится к интегральному уравнению первого рода. Дополнительная трудность данной задачи заключается в том, что фононный спектр имеет несколько локальных максимумов, которые определяют многие физические свойства кристаллов. Поэтому они должны быть восстановлены.

В работе [2] была получена оценка погрешности приближенного решения. Но в ней не была учтена погрешность дискретизации. В данной работе для выбора параметра регуляризации использовался обобщенный принцип невязки и получена оценка погрешности приближенного решения, учитывающая дискретизацию задачи. Для этого пользовалась техника работы [3].

1. Постановка задачи

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

$$Sn(s)=\int_a^b K(s,t)n(s)ds=\frac{f(t)}{t};0<t\le\infty, \tag{1}$$

где $K(s,t)=\dfrac{s^2}{2t^3\operatorname{sh}^2\left(\dfrac{s}{2t}\right)}$, $n(s)\in L_2[a,b],\dfrac{f(t)}{t}\in L_2(0,\infty)$, $n(s)$ – спектральная плотность кристалла, а $f(t)$ – его теплоемкость, зависящая от температуры.

Предположим, что при $f(t)=f_0(t)$ существует точное решение $n_0(s)$ уравнения (1), которое принадлежит множеству M, где

$$M=\left\{n(s):n(s),n'(s)\in L_2[a,b],n(a)=0\right\}, \tag{2}$$

а $n'(s)$ – производная по s.

Пусть точное значение $f_0(t)$ нам неизвестно, а вместо него даны $f_\delta(t)\in L_2(0,\infty),\delta>0$ такие, что

$$\left\|\frac{f_\delta(t)}{t}-\frac{f_0(t)}{t}\right\|_{L_2}<\delta.$$

Требуется по $f_\delta(t),\delta$ и M определить приближенное решение $n_\delta(t)$ и оценить его уклонение от точного решения $n_0(t)$ в метрике пространства $L_2[a,b]$.

Заметим, что единственность решения уравнения (1) доказана в [4].

[1] Ершова Анна Александровна – аспирант, кафедра теории управления и оптимизации, Челябинский государственный университет.
E-mail: anya.erygina@ya.ru
[2] Сидикова Анна Ивановна – кандидат физико-математических наук, доцент, кафедра вычислительной математики, Южно-Уральский государственный университет.
E-mail: 7413604@mail.ru

Введем оператор *B*, отображающий пространство $L_2[a,b]$ в $L_2[a,b]$, формулой

$$n(s)=Bu(s)=\int_a^s u(\xi)d\xi;\ \ u(s)\in L_2[a,b],Bu(s)\in L_2[a,b], \tag{3}$$

и оператор С

$$Cu(s)=ABu(s);u(s)\in L_2[a,b],Cu(s)\in L_2(0,\infty). \tag{4}$$

Из (3) и (4) следует, что

$$Cu(s)=\int_a^b P(s,t)u(s)ds, \tag{5}$$

где

$$P(s,t)=\int_b^s K(\xi,t)d\xi. \tag{6}$$

Предположим, что для численного решения уравнения (1) оператор *C* неудобен и требует замены его конечномерным оператором C_n, для которого известна величина h_n, определяемая соотношением

$$\|C_n-C\|\le h_n.$$

Для определения величины h_n рассмотрим ядро интегрального оператора (1)

$$K(s,t)=\frac{s^2}{2t^3\operatorname{sh}^2\left(\frac{s}{2t}\right)},a\le s\le b,0<t<\infty$$

и определим функцию $N(t)$ формулой

$$\max_{a\le s\le b}\left|\frac{s^2}{2t^3\operatorname{sh}^2\left(\frac{s}{2t}\right)}\right|\le\frac{b^2}{2t^3\operatorname{sh}^2\left(\frac{a}{2t}\right)}=N(t). \tag{7}$$

Покажем, что $N(t)\in L_2(0,\infty)$.

Из непрерывности $K(s,t)$ следует непрерывность $N(t)$. Кроме того,

$$\|N(t)\|^2_{L_2(0,\infty)}=\frac{b^4}{4}\int_0^\infty\frac{1}{t^6\operatorname{sh}^4\left(\frac{a}{2t}\right)}dt.$$

При $t\to\infty$, $N^2(t)\sim\left(\frac{\sqrt{2}b}{a}\right)^4\frac{1}{t^2}$, а при $t\to 0, N(t)\to 0$. Таким образом, $N(t)\in L_2(0,\infty)$.

Для определения оператора C_n разобьем отрезок $[a,b]$ на *n* равных частей и введем функции $\overline{P}_i(t),P_n(s,t)$ формулами

$$\overline{P}_i(t)=P(\bar{s}_i,t), \tag{8}$$

где $\bar{s}_i=\frac{s_i+s_{i+1}}{2},s_{i+1}=a+\frac{(i+1)(b-a)}{n},s_i=a+\frac{i(b-a)}{n},i=0,1...n-1,$

а

$$P_n(s,t)=\overline{P}_i(t);\ \ s_i\le s<s_{i+1},\ \ t\in(0,\infty);\ \ i=0,1...n-1. \tag{9}$$

Используя (9), определим оператор C_n формулой

$$C_nu(s)=\int_a^b P_n(s,t)u(s)ds;t\in(0,\infty), \tag{10}$$

где $C_n:L_2[a,b]\to L_2(0,\infty)$.

Из (5)–(10) следует, что

$$\|C_n - C\| \le \|N(t)\|_{L_2} \frac{(b-a)^{\frac{3}{2}}}{n} = h_n. \tag{11}$$

2. Обобщенный принцип невязки

Для решения уравнения (1) воспользуемся методом регуляризации А.Н. Тихонова первого порядка

$$\inf\left\{\left[\left\|C_n u(s) - \frac{f_\delta(t)}{t}\right\|^2 + \alpha\int_a^b |u(s)|^2\,ds\right] : u(s)\in L_2[a,b]\right\}, \alpha>0. \tag{12}$$

Из [5] следует существование и единственность решения $u_{\delta h_n}^{\alpha}(s)$ вариационной задачи (12).

Обозначим через $\overline{f}_{\delta,n}(t)$ функцию, принадлежащую пространству $L_2(0,\infty)$, и определяемую формулой

$$\overline{f}_{\delta,n}(t) = pr\left[\frac{f_\delta(t)}{t}; R(C_n)\right], \tag{13}$$

то есть являющуюся метрической проекцией в пространстве $L_2(0,\infty)$ функции $\frac{f_\delta(t)}{t}$ на множество значений оператора C_n.

Значение параметра регуляризации $\overline{\alpha} = \overline{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ в задаче (12) выберем из обобщенного принципа невязки [4]

$$\left\|C_n u_{\delta h_n}^{\alpha}(s) - \overline{f}_{\delta,n}(t)\right\| = \left\|u_{\delta h_n}^{\alpha}(t)\right\| h_n + \delta. \tag{14}$$

Известно, что при условии $\left\|\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\| > \delta + \left\|n'_0(s)\right\| h_n$ существует единственное решение $\overline{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ уравнения (14).

Если решение $u_{\delta h_n}^{\overline{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)}(s)$ задачи (12), (14) обозначить через $u_{\delta h_n}(s)$, то приближенное решение $n_{\delta h_n}(s)$ уравнения (1) будет иметь вид

$$n_{\delta h_n}(s) = Bu_{\delta h_n}(s). \tag{15}$$

Из (8)–(10) следует, что

$$C_n u(s) = \sum_{i=0}^{n-1} \overline{P}_i(t) \int_{s_i}^{s_{i+1}} u(s)ds. \tag{16}$$

Так как

$$\int_{s_i}^{s_{i+1}} u(s)ds = \sqrt{\frac{b-a}{n}} u_i, \tag{17}$$

где

$$u_i = \sqrt{\frac{n}{(b-a)}} \int_{s_i}^{s_{i+1}} u(s)ds, \tag{18}$$

то из (16) и (17) следует, что

$$C_n u(s) = \sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n-1} \overline{P}_i(t) u_i. \tag{19}$$

Пусть $X_n \subset L_2[a,b]$ и является подпространством кусочно-постоянных функций $\varphi(s)$

$$\varphi(s) = \{c_i : s_i \le s < s_{i+1}, i = 0,1...n-1\}. \tag{20}$$

В качестве базиса, определяющего пространство X_n, рассмотрим систему функций $\{e_i\}$, $i = 0,1...n-1$

$$e_i(s) = \begin{cases} 1; s_i \le s < s_{i+1} \\ 0; \quad s \notin [s_i, s_{i+1}), \quad i = 0,1...n-1. \end{cases} \tag{21}$$

После нормировки система (21) примет вид

$$\varphi_i(s) = \begin{cases} \sqrt{\dfrac{n}{(b-a)}}; s_i \le s < s_{i+1} \\ 0; s \notin [s_i, s_{i+1}). \end{cases} \tag{22}$$

Теперь наряду с задачей (12) рассмотрим задачу

$$\inf \left\{ \left\| C_n \hat{u}(s) - \frac{f_\delta(t)}{t} \right\|^2 + \alpha \left\| \hat{u}(s) \right\|^2 ; \hat{u}(s) \in X_n \right\}. \tag{23}$$

Теорема 1. Вариационный задачи (12) и (23) эквивалентны. Доказательство приведено в [3].

Рассмотрим задачу

$$\inf \left\{ \int_0^\infty \left[\sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n-1} \overline{P}_i(t) u_i - \frac{C_\delta(t)}{t} \right]^2 dt + \alpha \sum_{j=0}^{n-1} u_j^2 : u_j \in R_n \right\}. \tag{24}$$

Из [5] следует, что для любого $\alpha > 0$ существует единственное решение $(\overline{u}_i^\alpha) \in R^n$.
Кроме того, задача (24) эквивалентна системе линейных алгебраических уравнений

$$\sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n} b_{ij} u_i + \alpha u_j = g_j; \; j = 0,1...n-1, \tag{25}$$

где $b_{ij} = \int_0^\infty \overline{P}_i(t) \overline{P}_j(t) dt, g_j = \sqrt{\dfrac{b-a}{n}} \int_0^\infty \overline{P}_j \dfrac{C_\delta(t)}{t} dt$.

Теорема 2. Пусть $\overline{u}_{\delta,n}^\alpha$ и $\overline{u}_i^\alpha$ – решение задачи (23) и (24), соответственно. Тогда эти решения связаны соотношением

$$\overline{u}_{\delta,n}^\alpha = \sum_{i=0}^{n-1} \overline{u}_i^\alpha \varphi_i(s).$$

Так как из теорем 1 и 2 будет следовать, что вариационная задача (12) сведена к системе линейных алгебраических уравнений (25), то, решив последнюю, получим $(\overline{u_i}^\alpha) \in R^n$. Тогда для определения параметра регуляризации $\overline{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ в этом решении воспользуемся уравнением (14), которое в R^n примет вид

$$\left\{ \int_0^\infty \left[\sqrt{\frac{b-a}{n}} \sum_{i=0}^{n-1} \overline{P}_i(t) \overline{u}_i^\alpha - \frac{C_{\delta,n}(t)}{t} \right]^2 dt \right\}^{\frac{1}{2}} = \left[\sum_{i=0}^{n-1} \left(\overline{u}_i^\alpha \right)^2 \right]^{\frac{1}{2}} h_n + \delta. \tag{26}$$

При условии

$$\left\| \frac{\overline{f}_{\delta,n}(t)}{t} \right\| > \delta + \left\| n_0'(s) \right\| h_n$$

существует единственное решение $\overline{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$ уравнения (26).

Окончательно приближенное решение $n_{\delta h_n}(s)$ уравнения (1) будет иметь вид

$$n_{\delta h_n}(s) = \sum_{i=0}^{n-1} \overline{u}_i^{\overline{\alpha}} \varphi_i(s), \tag{27}$$

где $\overline{\alpha} = \overline{\alpha}(C_n, f_\delta(t), h_n, \delta)$.

3. Оценка погрешности приближенного решения уравнения (1)

Рассмотрим две вариационных задачи, приведенных в [6] и [7]

$$\inf\left\{\|u(s)\|^2 : u(s)\in L_2[a,b], \left\|C_n u(s)-\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|\le \delta+\|u(s)\|h_n\right\} \tag{28}$$

и

$$\inf\left\{\|u(s)\|^2 : u(s)\in L_2[a,b], \left\|C_n u(s)-\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|\le \delta+\tau h_n\right\}, \tag{29}$$

где $0\le\tau\le\dfrac{\left\|\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|-\delta}{h_n}$.

Из теоремы, доказанной в [7], следует, что выполнение условия $\left\|\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|>\delta+\tau h_n$ влечет существование и единственность решения $u^{\tau}_{\delta h_n}(s)$ вариационной задачи (29).

Теперь запишем уравнение

$$\left\|u^{\tau}_{\delta h_n}(s)\right\|=\tau. \tag{31}$$

Теорема 3. Пусть $\left\|\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|>\delta+\left\|n_0'(s)\right\|h_n$, тогда вариационная задача (28) эквивалентна задачам (30) и (31). Доказательство приведено в [8].

Теорема 4. Пусть $\left\|\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|>\delta+\left\|n_0'(s)\right\|h_n$, тогда вариационная задача (28) эквивалентна задаче (12) с параметром α, выбранным из уравнения (14). Доказательство приведено в [8].

Перейдем к оценке погрешности приближенного решения в метрике пространства $L_2[a,b]$.

Введем функцию $\omega(\sigma,r),\quad \sigma,\quad r>0$ формулой

$$\omega(\sigma,r)=\sup_n\left\{\|n(s)\|_{L_2} : n(s)\in M_r, \|Sn(s)\|\le\sigma\right\},$$

где $M_r=B\overline{S}_r$, а S определен (1).

Теорема 5. Пусть $n_0(s)\in M$, а $n_{\delta h_n}(s)$ определена формулой (15) и $\left\|\overline{f}_{\delta,n}(t)\right\|>\delta+\left\|n_0'(s)\right\|h_n$. Тогда существует число $r>0$, такое, что

$$\left\|n_{\delta h_n}(s)-n_0(s)\right\|_{L_2[a,b]}\le 2\omega(\delta+2rh_n,r).$$

Доказательство приведено в [3].

В работе [2] было получено, что

$$\omega(\sigma,r)\le r\left(1+\frac{1}{\pi}\ln^2\left(\frac{r}{4\delta}\right)\right)^{-\frac{1}{2}}. \tag{32}$$

Для приближенного решения $u_{\delta h_n}(t)$, определенного (15), имеет место оценка

$$\left\|n_{\delta h_n}(s)-n_0(s)\right\|_{L_2[a,b]}\le 2r\left(1+\frac{1}{\pi}\ln^2\left(\frac{r}{4\left(\delta+2rh_n\right)}\right)\right)^{-\frac{1}{2}},$$

где $n_{\delta h_n}(s)$ – приближенное решение уравнения (1), определенное (26).

Литература

1. Лифшиц, И.М. Об определении энергетического спектра бозе-системы по ее теплоемкости / И.М. Лифшиц // Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 1954. – Т. 26, № 5. – С. 551–556.

2. Танана, В.П. Оценка погрешности метода регуляризации Тихонова при решении одной обратной задачи физики твердого тела / В.П. Танана, А.А. Ерыгина // Сибирский журнал индустриальной математики. – 2014. – Т. 17, № 2(58). – С. 125–136.

3. Танана, В.П. Об оценке погрешности регуляризующего алгоритма, основанного на обобщенном методе невязки, при решении интегральных уравнений / В.П. Танана, А.И. Сидикова, Е.Ю. Вишняков // Вестник ЮУрГУ. Серия: Компьютерные технологии, управление, радиоэлектроника. – 2014. – Т. 14, № 4. – С. 59–64.

4. Танана, В.П. О единственности решения обратной задачи определения фононных спектров кристаллов / В.П. Танана, В.В. Бояршинов // Деп. в ВИНИТИ. – 1987. – 892 – В87.

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

6. Гончарский, А.В. Обобщенный принцип невязки / А.В. Гончарский, А.С. Леонов, А.Г. Ягола // Журнал вычислительной математики и математической физики. – 1973. – Т. 13, № 2. – С. 294–302.

7. Танана, В.П. Об одном проекционно-интерактивном алгоритме для операторных уравнений I рода / В.П. Танана // Докл. АН СССР. – 1975. – Т. 224, № 15. – С. 1025–1029.

8. Танана, В.П. Методы решения операторных уравнений / В.П. Танана. – М.: Наука, 1981. – 156 с.

Поступила в редакцию 11 декабря 2014 г.

Bulletin of the South Ural State University
Series "Mathematics. Mechanics. Physics"
2015, vol. 7, no. 2, pp. 25–30

UNCERTAINTY ESTIMATION OF THE METHOD BASED ON GENERALIZED RESIDUAL PRINCIPLE FOR THE RESTORE TASK OF THE SPECTRAL DENSITY OF CRYSTALS

A.A. Ershova[1], A.I. Sidikova[2]

The article studies the task of identification of phonon spectrum of a crystal according to its hit capacity. The authors reveal the evaluation of accuracy of Tikhonov regularization method with regularization parameter which was chosen form generalized residual principle.

Keywords: regularization; module of continuity; uncertainty estimation; ill-conditioned task; generalized residual principle.

References

1. Lifshits I.M. *Zhurnal eksperimental'noy i teoreticheskoy fiziki.* 1954. Vol. 26, Issue 5. pp. 551–556. (in Russ.).

2. Tanana V.P., Erygina A.A. *Sibirskiy zhurnal industrial'noy matematiki*. 2014. Vol. 17, no. 2(58). pp. 125–136. (in Russ.).

3. Tanana V.P., Sidikova A.I., Vishnyakov E.Yu. Ob otsenke pogreshnosti regulyarizuyushchego algoritma, osnovannogo na obobshchennom metode nevyazki, pri reshenii integral'nykh uravneniy (On Error Estimates for Regularizing Algorithm Based on Generalized Residual Method when Solving Integral Equations). *Bulletin of South Ural State University. Series of "Computer Technologies, Automatic Control & Radioelectronics"*. 2014. Vol. 14, no. 4. pp. 59–64. (in Russ.).

4. Tanana V.P., Boyarshinov V.V. *Dep. v VINITI.* 1987. 892.V87. (in Russ.).

5. Tikhonov A.N. *Dokl. AN SSSR*. 1963. Vol. 151, no. 3. pp. 501–504. (in Russ.).

6. Goncharskiy A.V., Leonov A.S., Yagola A.G. *Zhurnal vychislitel'noy matematiki i matematicheskoy fiziki*. 1973. Vol. 13, no. 2. pp. 294–302. (in Russ.).

7. Tanana V.P. *Dokl. AN SSSR.* 1975. Vol. 224, no. 15. pp. 1025–1029. (in Russ.).

8. Tanana V.P. *Metody reshenija operatornyh uravnenij* (Methods of solution of operator equations). Moscow, Nauka Publ., 1981. 156 p. (in Russ.).

Received 11 December 2014

[1] Ershova Anna Aleksandrovna is Post-graduate Student, Department of Theory of Management and Optimization, Chelyabinsk State University.
E-mail: anya.erygina@ya.ru

[2] Sidikova Anna Ivanovna is Cand. Sc. (Physics and Mathematics), Associate Professor, Calculating Mathematics Department, South Ural State University.
E-mail: 7413604@mail.ru