На рис. 1, 2 представлены графики зависимостей $h=\sum_{i=1}^{k}\beta_i^{-2}=h(k)$ и $\rho_{[P,\Sigma]}(h)$, $h\in\mathscr{R}_+$, $k=1,2,\ldots,r$, $(r=10)$ в задаче восстановления

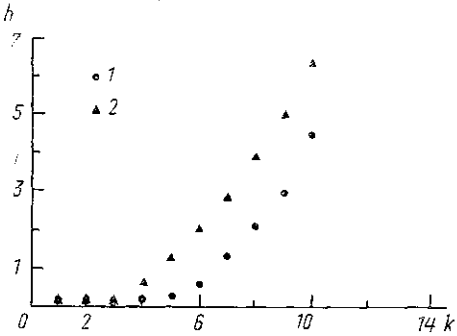

Рис. 1. Зависимость с. к. погрешности оценивания профиля вертикального распределения озона от размерности его представления для модели измерения спектра рассеянного ультрафиолетового излучения при фиксированном зенитном угле Солнца $\theta_s=70°$ (*1*) и $45°$ (*2*)

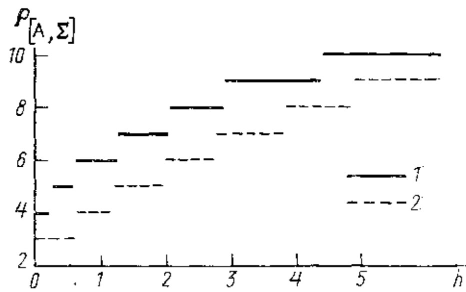

Рис. 2. График эффективного ранга модели измерения спектра рассеянного ультрафиолетового излучения при фиксированном зенитном угле Солнца $\theta_s=70°$ (*1*) и $45°$ (*2*) в задаче оценивания вертикального распределения озона

вертикального профиля озона по измерению спектра ультрафиолетовой радиации при фиксированном положении Солнца $(m=15,\ n=10)$. Из рис. 1, 2 видно, что $\rho_{[A(\theta_s=45°),\Sigma]}(h)\leqslant\rho_{[A(\theta_s=70°),\Sigma]}(h)$ и, следовательно, измерение под углом $\theta_s=70°$ позволяет более точно восстановить вертикальный профиль озона.

ЛИТЕРАТУРА

1. Пытьев Ю. П. Методы анализа и интерпретации эксперимента. М., 1990.
2. Пытьев Ю. П. Математические методы анализа эксперимента. М., 1989.

Поступила в редакцию
21.11.94

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 4

УДК 519.6

МОЖНО ЛИ РЕШИТЬ НЕКОРРЕКТНО ПОСТАВЛЕННУЮ ЗАДАЧУ БЕЗ ЗНАНИЯ ПОГРЕШНОСТЕЙ ДАННЫХ?

А. С. Леонов *, А. Г. Ягола

(кафедра математики)

Показано, что нахождение устойчивого решения операторного уравнения без знания погрешностей его данных возможно лишь для корректно поставленных задач.

Написать эту заметку нас побудило появление серии работ [1—4], где предприняты попытки решения некорректных задач без использования величин погрешностей их данных. Можно ли вообще решить не-

*) МИФИ.

корректную задачу, не зная погрешности данных? Это довольно старая проблема теории некорректных задач. Она возникла еще в начале 1960-х гг. и в дальнейшем ряд ее аспектов изучался научной школой А. Н. Тихонова. К сожалению, в литературе отсутствует целостное рассмотрение данной проблемы на теоретическом уровне. В связи с этим у нас имеется опасение, что не все результаты, касающиеся анализа этого вопроса, известны ученым-неспециалистам в области некорректных задач, которые сталкиваются с конкретной необходимостью их решения и с выбором соответствующего метода. Специальное освещение этой проблемы полезно, на наш взгляд, также и тем, что оно может предотвратить дальнейшие бесплодные попытки типа [1—4] создания «практических» методов решения некорректных задач, не использующих информацию о погрешностях данных. Поэтому мы хотели бы привести основные пункты анализа указанной проблемы.

Центральным моментом анализа является ответ на два вопроса: что такое некорректно поставленная задача и что такое ее «решение»? Чтобы ответить на эти вопросы, рассмотрим операторное уравнение

$$\mathscr{A}z \doteq u, \quad z \in Z \tag{1}$$

относительно неизвестного z. В такой форме могут быть записаны многие задачи, возникающие на практике. Пусть для определенности оператор $\mathscr{A}$ принадлежит множеству $\mathscr{L}(Z, U)$ линейных ограниченных операторов, действующих из гильбертова пространства Z в гильбертово U, и $u \in U$.

Согласно определению, восходящему к Ж. Адамару [5], задача (1) называется корректно поставленной на классе ее «допустимых» данных $\Sigma = \{(\mathscr{A}, u)\}$, если ее решение $\bar{z} = \bar{z}(\mathscr{A}, u) \in Z$ существует и единственно для любых данных $(\mathscr{A}, u) \in \Sigma$, а также непрерывно зависит от них (устойчива). Последнее означает, что для произвольных «возмущенных» данных задачи $(\mathscr{A}_h, u_\delta) \in \Sigma$ таких, что $\|\mathscr{A}_h - \mathscr{A}\| \leqslant h$, $\|u_\delta - u\| \leqslant \delta$, имеет место сходимость: $\bar{z}(\mathscr{A}_h, u_\delta) \xrightarrow{Z} \bar{z}(\mathscr{A}, u)$ при $h, \delta \to 0$. Фигурирующие здесь числа h и δ представляют собой оценки погрешности приближенных данных $(\mathscr{A}_h, u_\delta)$ задачи (1) с точными данными $(\mathscr{A}, u)$. При нарушении хотя бы одного из указанных трех требований задача (1) называется некорректно поставленной. Типичными примерами некорректных задач являются многие обратные задачи обработки результатов физического эксперимента, обратные задачи колебательной спектроскопии, обратные задачи астрофизики и др.

Нарушение требований существования и единственности решения задачи (1) обычно преодолевается тем, что ищется некоторое ее «обобщенное» решение. Часто в качестве такого обобщенного решения берут так называемое нормальное псевдорешение (решение в смысле метода наименьших квадратов с минимальной нормой) $\bar{z}$ [6]. Оно существует и единственно для любых допустимых точных данных задачи (1) из класса $\Sigma = \{(\mathscr{A}, u) : \mathscr{A} \in \mathscr{L}(Z, U),\ u \in U,\ u \in R(\mathscr{A}) \oplus R(\mathscr{A})^\perp\}$ и выражается через эти данные по правилу $\bar{z} = \mathscr{A}^+ u$. Здесь $R(\mathscr{A})$, $R(\mathscr{A})^\perp$ — область значений оператора $\mathscr{A}$ и ее ортогональное дополнение в U, а $\mathscr{A}^+$ — псевдообратный оператор к $\mathscr{A}$ (более подробно см. [6, 7]). Именно такой вариант задачи (1) мы и будем далее рассматривать.

Несмотря на существование и единственность нормального псевдорешения $\bar{z}$ для любых допустимых данных, задача его нахождения, как и сама задача (1), может оказаться неустойчивой по отношению к возмущениям $\mathscr{A}$ и u. В связи с этим важно ответить на вопрос, что значит «решить» такую неустойчивую задачу. Ответ был дан А. Н. Тихоновым в знаменитом определении регуляризирующего алгоритма [8]. Решить некорректную (неустойчивую) задачу означает указать такое отображение $R(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$, которое:

1) ставит в соответствие любым приближенным данным $(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$ задачи (1) некоторый элемент $z_{h\delta}=R(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)\in Z$;

2) обладает свойством сходимости:

$$z_{h\delta}\equiv R(h,\ \delta,\ \mathcal{A}_h,\ u_\delta)\to\bar{z}=\mathcal{A}^{+}u \tag{2}$$

при $h, \delta\to 0$.

Таким образом, для решения некорректной (неустойчивой) задачи недостаточно указать вычислительную процедуру $R(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$ нахождения ее «приближенного решения». Необходимо также проанализировать асимптотические свойства этой процедуры при $h, \delta\to 0$ (т. е. при $\mathcal{A}_h\to\mathcal{A}$, $u_\delta\to u$). Если не выполнить такого асимптотического исследования (как, например, поступают авторы работ [1—4]), то элемент, который считается «приближенным решением», может даже при сколь угодно малых погрешностях $h, \delta\to 0$ данных задачи оказаться сколь угодно «далеко» от искомого $\bar{z}$. В этом случае нельзя считать, что нам удалось решить некорректно поставленную задачу.

В работах А. Н. Тихонова [8, 9] не только ясно определено, что значит решить некорректную задачу (1), но и указан конкретный регуляризирующий алгоритм $R(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$ для ее решения. Он известен как метод регуляризации А. Н. Тихонова и использует параметрическое семейство элементов $z^\alpha=z^\alpha(\mathcal{A}_h, u_\delta)\in Z$, минимизирующих в Z функционал

$$M^\alpha[z]=\alpha\|z\|^2+\|\mathcal{A}_h z-u_\delta\|^2,\quad \alpha>0.$$

В случае гильбертовых Z и U можно найти, что

$$z^\alpha=(\alpha I+\mathcal{A}_h^*\mathcal{A}_h)^{-1}\mathcal{A}_h^*u_\delta\equiv T(\alpha,\ \mathcal{A}_h,\ u_\delta). \tag{3}$$

Здесь I — единичный оператор в Z, а $\mathcal{A}_h^*$ — оператор, сопряженный к $\mathcal{A}_h$. Метод регуляризации фактически состоит в выборе параметра $\alpha=\alpha(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$ таким образом, чтобы получить сходимость вида (2)

$$z^{\alpha(h,\delta,\mathcal{A}_h,u_\delta)}=T[\alpha(h,\ \delta,\ \mathcal{A}_h,\ u_\delta),\ \mathcal{A}_h,\ u_\delta]\to\bar{z}$$

при $h, \delta\to 0$. Таким образом, построение регуляризирующего алгоритма в методе А. Н. Тихонова связано со специальным выбором α в вычислительной процедуре (3) по приближенным данным задачи $(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$. Первоначально А. Н. Тихонов предложил так называемый «априорный» выбор параметра регуляризации, в котором $\alpha=\alpha(h, \delta)\to 0$, $(h+\delta)^2/\alpha(h, \delta)\to 0$ при $h, \delta\to 0$. В дальнейшем были предложены другие способы выбора α. Наиболее интересными из них оказываются «апостериорные», в которых кроме уровней погрешностей h, δ используются также и приближенные реализации данных $\mathcal{A}_h$, u_δ. Хорошо известным примером такого апостериорного способа выбора является обобщенный принцип невязки, предложенный А. В. Гончарским, А. С. Леоновым и А. Г. Яголой [10—13]. В этом методе $\alpha=\alpha(h, \delta, \mathcal{A}_h, u_\delta)$ находится как корень уравнения

$$\|\mathcal{A}_h z^\alpha-u_\delta\|=\mu_{h\delta}+\delta+h\|z^\alpha\|.$$

Здесь $\mu_{h\delta}=\inf\{\|\mathcal{A}_h z-u_\delta\|+\delta+h\|z\|:z\in Z\}$ — обобщенная мера несовместности уравнения (1) (см. [14—17]). Сходимость (2) в обобщенном принципе невязки получается при единственном предположении: $\bar{z}\in Z$. Любые другие дополнительные предположения (например, о специальных спектральных свойствах элемента $\bar{z}$ или о величине $\|\bar{z}\|$) не требуются.

В 1960—1980-е гг. разработаны эффективные численные методы решения некорректных задач, основанные на методе регуляризации с различными способами выбора α. Итог этих разработок, включая компьютерные программы, был подведен в книгах [16, 17].

Вместе с тем еще в начале 1960-х гг. возник вопрос, нельзя ли сконструировать регуляризирующий алгоритм, явно не зависящий от оценок погрешностей h и δ и дающий приближенное решение в виде $z_{h\delta}=R(\mathcal{A}_h, u_\delta)$. Эта заманчивая возможность была впервые продемонстрирована в численном эксперименте А. Н. Тихоновым и В. Б. Гласко [18]. Они предложили так называемый квазиоптимальный выбор α, в котором $\alpha(\mathcal{A}_h, u_\delta)$ находится как решение задачи на минимум функции

$$\psi(\alpha)=\left\|\alpha \frac{dz^\alpha}{d\alpha}(\mathcal{A}_h, u_\delta)\right\|^2, \quad \alpha \geqslant 0.$$

Однако все попытки теоретически обосновать квазиоптимальный выбор α как регуляризирующий алгоритм в общем случае бесконечномерных гильбертовых пространств Z и U без использования дополнительной детальной информации о $\bar{z}$ не дали результата. Более того, в ряде контрпримеров было показано, что метод регуляризации с квазиоптимальным выбором α не дает сходимости приближений к $\bar{z}$ при $\mathcal{A}_h \to \mathcal{A}$, $u_\delta \to u$ (см., напр., [19]). Единственный случай, для которого удалось доказать сходимость (2) квазиоптимальных приближений, — это случай точно заданного оператора $\mathcal{A}$ в конечномерных Z и U [20].

Аналогичная ситуация имеет место для выбора α по методу GCV (general cross-validation) [21], где $\alpha(\mathcal{A}_h, u_\delta)$ находится как точка глобального минимума функции

$$G(\alpha)=\|(\alpha E+\mathcal{A}_h\mathcal{A}_h^*)^{-1}u_\delta\|\cdot[\operatorname{tr}(\alpha E+\mathcal{A}_h\mathcal{A}_h^*)^{-1}]^{-1}, \quad \alpha \geqslant 0.$$

Здесь E — единичный оператор в U.

Оказывается, что это не случайно. Ключ к пониманию этого феномена дает следующая

Теорема. *Пусть $R(\mathcal{A}_h, u_\delta)$ — отображение множества $\mathcal{L}\otimes U$ в Z. Если $R(\mathcal{A}_h, u_\delta)$ является регуляризирующим алгоритмом, не зависящим явно от h и δ, то отображение $P(\mathcal{A}, u)=\mathcal{A}^+u$ непрерывно на своей области определения Σ.*

Доказательство. Условие (2) определения регуляризирующего алгоритма дает равенство $R(\mathcal{A}, u)=\mathcal{A}^+u=P(\mathcal{A}, u)$ для каждого $(\mathcal{A}, u)\in\Sigma$, а также сходимость: $P(\mathcal{A}_h, u_\delta)=R(\mathcal{A}_h, u_\delta)\to\mathcal{A}^+u=P(\mathcal{A}, u)$ для любых $(\mathcal{A}_h, u_\delta)\in\Sigma$ при $h, \delta\to 0$. Таким образом, отображение $P(\mathcal{A}, u)$ непрерывно на Σ.

Близкое по смыслу, но не эквивалентное утверждение было доказано А. Б. Бакушинским [22].

Из теоремы ясно, что регуляризирующий алгоритм, не использующий явно величины h и δ, может существовать лишь для корректно поставленных задач (1). Эта корректность (устойчивость) задачи (1) на множестве данных Σ непосредственно следует из непрерывности отображения $\mathcal{A}^+u$ на своей области определения.

Необходимость зависимости регуляризирующего алгоритма от погрешностей данных h, δ отмечалась в последних публикациях А. Н. Тихонова, посвященных решению неустойчивых систем линейных алгебраических уравнений (см. [23, 24]). Соответствующие примеры указаны также в [25].

Итак, согласно теореме, все «методы решения некорректных задач, не использующие h и δ», применимы в действительности исключительно для решения устойчивых (корректных) задач. К числу таких методов относятся критерий квазиоптимальности [18], метод GCV [21], вариант [1, 3] метода «truncated SVD» и некоторые другие. Как методы решения корректных задач они могут быть использованы для систем линейных алгебраических уравнений фиксированной размерности с невозмущаемой матрицей. Результат теоремы объясняет, почему все попытки теоретического обоснования указанных методов как регуляризирующих алгоритмов были неудачными в общем случае бесконечномерных гильбертовых пространств Z и U.

Приспособление этих методов для решения некорректных (неустойчивых) задач может основываться лишь на использовании какой-либо детальной дополнительной информации о точном решении $\bar{z}$, точных данных $(\mathscr{A}, u)$, о характеристиках случайных величин $\mathscr{A}_h$, u_δ. Как правило, эта информация имеет форму задания верхней оценки для $\|\bar{z}\|$ или форму специальных спектральных ограничений на $\bar{z}$. Иногда такая информация делает задачу корректно поставленной. С теоретической точки зрения она позволяет в некоторых случаях доказывать сходимость вида (2) для метода регуляризации с выбором α без использования h и δ. Это получается, однако, для достаточно «узких» подмножеств точных и приближенных данных задачи. Примеры таких попыток можно найти в [3, 4, 21, 26].

По нашему мнению, один из способов выбора параметра регуляризации, «изобретенный» недавно, требует специального рассмотрения. Это так называемый метод L-кривой [2, 3], который использует семейство (3) и в котором α выбирается как точка максимальной кривизны L-кривой $\{(\ln\|\mathscr{A}_h z^\alpha - u_\delta\|, \ln\|z^\alpha\|) : \alpha > 0\}$. Для обоснования этого метода его авторы использовали в основном модельные вычисления. Такой подход встречает существенные возражения, если он не подкреплен теоретическим доказательством сходимости (2). Более того, мы убеждены, что метод L-кривой не только не способен решать некорректные задачи (см. теорему), но и не позволяет получать решения даже простейших конечномерных корректных задач. Это легко проверить на примере уравнения (1) с $Z=U=R^1$, $\mathscr{A}=I$, $u=1$ и с приближенными данными $\mathscr{A}_h=I$, $u_\delta=1$ для любых h и δ. Оказывается, что вне зависимости от h и δ параметр регуляризации, который выбран по методу L-кривой, остается здесь постоянным: $\alpha_L(\mathscr{A}_h, u_\delta)=1$. Поэтому в соответствии с (3) «приближенным» решением служит $z^{\alpha_L}=0{,}5$, причем оно не будет сходиться к $\bar{z}=1$ при $h, \delta \to 0$. Можно сконструировать и другие более сложные и утонченные примеры, демонстрирующие несостоятельность метода L-кривой в различных его формах.

Итак, наш основной вывод заключается в том, что в общем случае невозможно решить некорректную задачу (1) без использования оценок погрешностей h и δ данных. В то же время имеются теоретически обоснованные регуляризующие алгоритмы, которые обобщают квазиоптимальный выбор α и метод truncated SVD и которые при этом явно используют h и δ (см. [19, 27, 28]).

Результаты данной заметки, включая теорему, остаются справедливыми и для нелинейных некорректных задач. В качестве алгоритмов $R(h, \delta, \mathscr{A}_h, u_\delta)$ могут фигурировать и итерационные методы [29].

Работа частично поддерживалась Российским фондом фундаментальных исследований (грант 95-01-00486), а также грантом JJ 6100 Международного научного фонда и правительства России.

ЛИТЕРАТУРА

1. Hansen P. C.//BIT. 1987. **27**. P. 534.
2. Hansen P. C.//Inverse Problems. 1992. **8**. P. 849.
3. Hansen P. C., O'Leary D. P.//Report UMIACS-TR-91-142, Dept. of Comput. Science, Univ. of Maryland, 1991.
4. Kitagawa T.//Japan J. Appl. Math. 1987. **4**. P. 371.
5. Hadamard J. Lectures on Cauchy's Problem in Linear Partial Differential Equations, Yale Univ. Press. New Haven, 1923.
6. Generalized Inverses and Applications/Ed. M. Z. Nashed. N. Y.: Acad. Press. 1976.
7. Воеводин В. В., Кузнецов Ю. А. Матрицы и вычисления. М., 1984.
8. Тихонов А. Н.//ДАН СССР. 1963. **153**, № 1. С. 49.
9. Тихонов А. Н.//ДАН СССР. 1963. **151**, № 3. С. 501.
10. Гончарский А. В., Леонов А. С., Ягола А. Г.//ЖВМ и МФ. 1973. **13**, № 2. С. 294.
11. Ягола А. Г.//ДАН СССР. 1979. **245**, № 1. С. 37.
12. Леонов А. С.//ДАН СССР. 1979. **245**, № 2. С. 300.
13. Leonov A. S., Yagola A. G.//Ill-posed Problems in the Natural Sciences: Proc. of the Intern. Conf./Eds. A. N. Tikhonov et al. Utrecht: VSP; Moscow: TVP, 1992. P. 71.
14. Леонов А. С.//ДАН СССР. 1982. **262**, № 6. С. 1306.
15. Кочиков И. В., Матвиенко А. Н., Ягола А. Г.//ЖВМ и МФ. 1984. **24**, № 7. С. 1087.
16. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. М., 1983.
17. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. Численные методы решения некорректных задач. М., 1990.
18. Тихонов А. Н., Гласко В. Б.//ЖВМ и МФ. 1965. **5**, № 3. С. 463.
19. Леонов А. С.//Матем. сб. 1983. **122(164)**, № 3(11). С. 405.
20. Леонов А. С.//ЖВМ и МФ. 1978. **18**, № 6. С. 1363.
21. Wahba G.//SIAM J. Numer. Anal. 1977. **14**, N 4. P. 651.
22. Бакушинский А. Б.//ЖВМ и МФ. 1984. **24**, № 8. С. 1258.
23. Тихонов А. Н.//ДАН СССР. 1985. **280**, № 3. С. 559.
24. Тихонов А. Н.//Некорректные задачи естествознания/Под ред. А. Н. Тихонова, А. В. Гончарского. М., 1987. С. 8.
25. Kochikov I. V., Kuramshina G. M., Pentin Yu. A., Yagola A. G.//J. Mol. Struct. 1992. **272**. P. 13.
26. Тихонов А. Н., Гласко В. Б., Криксин Ю. А.//ДАН СССР. 1979. **248**, № 3. С. 531.
27. Леонов А. С.//ДАН СССР. 1991. **321**, № 3. С. 460.
28. Леонов А. С.//ЖВМ и МФ. 1991. **31**, № 10. С. 1427.
29. Бакушинский А. Б., Гончарский А. В. Итеративные методы решения некорректных задач. М., 1988.

Поступила в редакцию
27.01.95

ВЕСТН. МОСК. УН-ТА. СЕР. 3, ФИЗИКА. АСТРОНОМИЯ. 1995. Т. 36, № 4

УДК 539.19+539.2

СВЯЗАННЫЕ СОСТОЯНИЯ ПОЛОЖИТЕЛЬНЫХ ИОНОВ ВОДОРОДА В ПОЛЕ ПОВЕРХНОСТИ МЕТАЛЛА

О. С. Еркович, В. В. Комаров, А. М. Попова

(НИИЯФ)

Рассматривается взаимодействие положительных ионов водорода с поверхностью металла путем анализа структуры электронного газа в системе «металл+протон». Расчеты проводились в рамках метода многочастичных функционалов плотности. Получены результаты для энергий связи атомов и ионов водорода с поверхностью, положений равновесия и вибрационных энергий протона в поле поверхности. Используемый метод, являясь обобщением метода функционалов плотности, обладает существенно большими возможностями при описании неоднородных ферми-систем за счет более точного описания обменно-корреляционных эффектов.