

В.М. СТАРКОВ, М.С. БРОДИН, П.М. ТОМЧУК, В.Я. ГАЙВОРОНСЬКИЙ,
О.Ю. БОЯРЧУК

Інститут фізики НАН України
(Просп. Науки, 46, Київ 03680; e-mail: nikol12@voliacable.com)

МАТЕМАТИЧНА ІНТЕРПРЕТАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ЕКСПЕРИМЕНТАЛЬНИХ ДОСЛІДЖЕНЬ ВЛАСТИВОСТЕЙ НЕЛІНІЙНО-ОПТИЧНОГО МАТЕРІАЛУ

УДК 517.983.54, 519.67,
535.36

Із використанням методів обчислювальної фізики формується та розв'язується проблема математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень впливу інкорпорованих наночастинок TiO_2 на оптичні властивості нелінійно-оптичного матеріалу КДР. Математична модель представляється у вигляді інтегрального рівняння Фредгольма першого роду. Пропонується сплайн-ітераційна модифікація методу регуляризації Ландвебера розв'язання некоректно поставленої задачі. Результати проведених обчислювальних експериментів порівнюються з апостеріорі відомими даними фізичних експериментів.

Ключові слова: інкорпоровані наночастинок TiO_2 , нелінійно-оптичний матеріал КДР, рівняння Фредгольма, метод регуляризації Ландвебера.

1. Вступ

Робота присвячена розкриттю поняття математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень. Суть питання полягає в тому, що сучасні наукові дані експериментальних досліджень потребують, на нашу думку, більш ретельного дослідження з точки зору математичного аналізу. Такий підхід дозволяє поповнити об'єм експериментальної інформації і отримати більш глибокі і змістовні у фізичному визначенні результати. В цьому сенсі найкращою є ситуація, коли етапу фізичної інтерпретації передують етап математичної інтерпретації. При інтерпретації фізичних вимірів часто виникають задачі, які в математиці мають назву некоректних. До таких задач приходимо, коли потрібно за закономірностями якихось фізичних явищ визначити характеристики тих зовнішніх впливів, які зумовили ці явища. Як типовий приклад можна вказати на експериментальне вирішення більшості спектрографічних задач, коли метою вимірювань є отримання істинного розподілу енергії в спектрі досліджуваного джерела – розподілу, не спотвореного приладом. Не-

коректність задачі в фізичній ситуації, яка розглядається, зумовлена природою математичної моделі, що пов'язує істинні і спостережувані за допомогою реальних приладів величини. Така модель формується у вигляді інтегрального рівняння Фредгольма. Необхідно відзначити, що теорія інтегральних рівнянь і практика їх застосування впродовж останнього століття залишались одним із центральних об'єктів досліджень багатьох розділів математики. По-перше, інтегральні рівняння опинились на перетині багатьох областей чистої математики – функціонального аналізу, теорії функцій, математичної фізики, алгебри, обчислювальної математики, теорії ймовірностей та ін., по-друге – їх розвиток стимулювався потребами моделювання в численних задачах фізики, астрофізики, біофізики, механіки, техніки та інших дисциплін. При цьому основна увага у минулі 50 років приділялась розробці регулярних методів розв'язку некоректно поставлених задач. До таких задач відноситься, у першу чергу, розв'язання інтегральних рівнянь Фредгольму першого роду. Ці рівняння чи їх системи виникають у великій кількості прикладних завдань. До них зводяться, наприклад, задачі про вивчення спектрального складу світлового випромінювання, задачі обробки експе-

© В.М. СТАРКОВ, М.С. БРОДИН, П.М. ТОМЧУК,
В.Я. ГАЙВОРОНСЬКИЙ, О.Ю. БОЯРЧУК, 2015

риментальних даних, пов'язаних із діагностикою сферичного або осесиметричного плазмових утворень, задачі визначення функції розподілу істинних конфігурацій потрійних зірок, задачі автоматичного регулювання, дослідження відбиття хвиль від прямолінійної границі, задачі акустики, кінематики і сейсміки, задачі електродинаміки, задачі математичної обробки зображень і т.д.

Некоректні задачі мають ту особливість, що малі похибки на "вході" призводять до появи істотних похибок на "виході". Проте в математиці на сьогодні розроблені методи (так звані методи "регуляризації"), які дозволяють обійти (згладити) чутливість результату до малих похибок на "вході". Застосування таких методів до інтерпретації фізичних вимірювань часто дозволяє отримати досить точні результати навіть при використанні "недосконалого" обладнання. Детальний огляд наявних результатів і широку бібліографію можна знайти у довідкових посібниках А.Ф. Верляна і В.С. Сізікова [1], В.В. Іванова [2] та ін.

Наведемо декілька додаткових зауважень. Перш за все відзначимо, що в сучасній математичній літературі інтегральні рівняння розглядаються як підмножина операторних рівнянь. До числа операторних рівнянь можна віднести, наприклад, системи алгебраїчних рівнянь. У пропонованій роботі конструкція математичної моделі у формі рівняння Фредгольма першого роду трактується як операторне рівняння першого роду. Крім того, при вирішенні задач математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень виникають як мінімум два напрямки робіт. Перший із них пов'язаний виключно із усуненням впливу недосконалості експериментального обладнання на результати вимірювань. Іншими словами, перший напрямок включає в себе розв'язання задач редукації до ідеального обладнання. Другий напрямок математичної інтерпретації характеризується необхідністю отримання параметрів інформації, що надходить до експериментальної системи, за зареєстрованою інформацією. В такому випадку розв'язується обернена задача. Прикладом такої задачі і є досліджувана в даній роботі проблема.

2. Постановка фізичної задачі

Змістовна частина роботи аналізується на тестовому прикладі розв'язання методами обчислю-

вальної фізики задач математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень впливу інкорпорованих наночастинок TiO_2 на оптичні властивості нелінійно-оптичного матеріалу – монокристалічних матриць дигідрофосфату калію KH_2PO_4 (KDP). Завдяки унікальній сукупності фізичних властивостей ці матеріали знаходять широке застосування у сучасній нелінійній оптиці, оптоелектроніці та фотоніці.

При проведенні експериментів вимірювався кутовий розподіл інтенсивності лазерного випромінювання, яке пройшло крізь зразок – індикатриса розсіювання. Інакше кажучи, фіксувався розподіл інтенсивності світла. Деталі індикатриси відображають інформацію про будову кристала, про вплив кластерів наночастинок кристала на параметри лазерного випромінювання та ряд інших властивостей [3].

Вимірювальний тракт лазерної установки включав у себе гоніометр Г-5 і ССD-лінійку (1024 пікселя $25 \text{ мкм} \times 200 \text{ мкм}$, цифрова роздільна здатність 12 біт) з прикріпленою до неї широкоапертурною фокусуючою лінзою (діаметр $d = 0,96 \text{ см}$). Особливості конструкції вимірювального тракту установки є такими, що спостережувані на невеликих кутах результати розподілу інтенсивності суттєво відрізняються від їх прогнозованих істинних значень. Широка апертура збираючої лінзи в приладі призводить до спотворення даних, зокрема на малих кутах вимірювання ($\theta \leq 2^\circ$). Оскільки зразки, що розглядаються, є слабorozсіюючими, то саме цей діапазон найбільше привертає увагу дослідників.

Для базового пояснення смислу математичної інтерпретації експериментальних досліджень розглянемо спочатку результати експерименту розподілу інтенсивності лазерного випромінювання, що вільно поширюється у повітрі (експеримент без зразка на вихідному обладнанні). Припускаємо, що дискретні експериментальні дані індикатриси розсіювання можуть бути апроксимовані неперервною функцією (рис. 1). Однією із кінцевих цілей експериментальних досліджень є визначення впливу інкорпорації наночастинок двоокису титану на параметри лазерного пучка, що пройшов через кристал дигідрофосфату калію. Здавалось би, що параметри лазерного пучка можна визначити напряму, використовуючи установку із оптоволоконним (діаметр $d = 410 \text{ мкм}$) спектрофото-

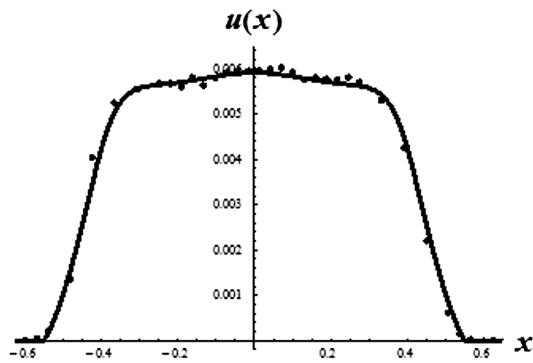


Рис. 1. Індикатриса розсіяння, отримана із використанням детектора із лінзою, $u(x)$ – безрозмірна потужність лазерного випромінювання

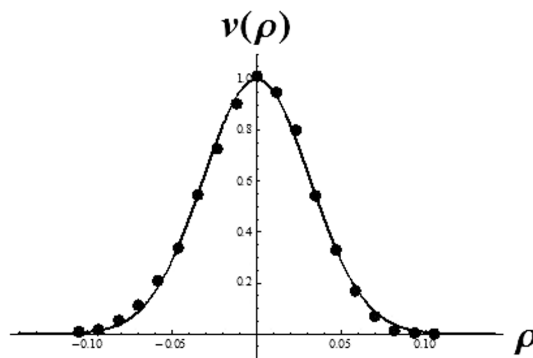


Рис. 2. Індикатриса розсіяння (профіль лазерного променя), отримана на високоточній установці із використанням оптоволоконного детектора, $v(\rho)$ – безрозмірна інтенсивність лазерного випромінювання ($v(0) = 1$)

метром, що дозволяє отримати досить точний профіль лазерного пучка (рис. 2) в діапазоні приблизно $(-1^\circ; +1^\circ)$. Однак проблема полягає в тому, що ці вимірювання є набагато більш ресурсозатратними порівняно із першою установкою. Адже отримання кожного набору даних вимагає коштовного обладнання і тривалої та кропіткої роботи.

Під час аналізу результатів вимірювань, здійснених з використанням детектора із лінзою, виникає питання про співвідношення між істинним кутовим розподілом інтенсивності всередині лазерного пучка у вигляді гаусового профілю (перед лінзою) (рис. 2) та виміряною індикатрисою розсіявання (рис. 1). Очевидно, що визначення кількісного зв'язку між представленими розподілами баз застосування методів математичного аналізу не уявляється можливим. Іншими словами, виникає на-

ступна задача: яким чином із результатів експерименту, що наведені на рис. 1, отримати параметри кривої рис. 2.

3. Математична модель вимірювального тракту лазерної установки

Розв'язання задачі математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень пропонується здійснити методом обчислювальної фізики [4].

Цей метод включає в себе декілька етапів:

1. Побудова математичної моделі вимірювального тракту лазерної установки.
2. Перевірка адекватності математичної моделі.
3. Визначення основних властивостей рівнянь, що формують математичну модель.
4. Вибір та/або модифікація методів розв'язання оберненої задачі.
5. Проведення серії обчислювальних експериментів.
6. Зіставлення результатів обчислювальних та фізичних експериментів.
7. Здійснення фізичної інтерпретації експериментальних досліджень.

Перші два етапи реалізації методу були виконані в роботі [3]. Нагадаємо, що в найбільш загальному вигляді математичне моделювання можна звести до побудови оператора A (або відображення чи трансформації), який трактується як формалізація процесу вимірювання, коли елемент v (крива на рис. 2) трансформується в елемент u (крива на рис. 1), тобто $Av = u$.

Необхідно підкреслити, що фізичним втіленням оператора A є вимірювальний тракт лазерної установки, а саме гоніометр Г-5, ССD-лінійка і широкоапертурна фокусуєча лінза. Основа формалізації в даному конкретному випадку полягає в тому, що нескінченно мале значення зареєстрованої потужності випромінювання задається наближено за допомогою виразу:

$$\Delta u = v(P)G(O; P)\Delta S,$$

де $v(P)$ – істинна інтенсивність випромінювання, що розсіяне зразком, $G(O; P)$ – функція проходження випромінювання в точці падіння пучка на лінзу (визначається відношенням потужності випромінювання, зафіксованого ССD-лінійкою, до поту-

жності падаючого на лінзу випромінювання), ΔS – елемент площі апертури лінзи.

Вимірне детектором значення потужності випромінювання в такому випадку природно визначити виразом

$$u(O) = \iint_S v(P)G(O; P)dS, \quad (1)$$

де O – точка в центрі лінзи.

Якщо позначити через L відстань від зразка до лінзи, а через θ_0 – кут повороту плеча гоніометра від початкового напрямку пучка, коли центр Θ пучка збігається з центром O лінзи, то в ролі координати центра лінзи можна брати $x = L \sin \theta_0 \approx L\theta_0$ і з похибкою, що не перевищує 0,1% ($L = 20$ см, $|x| \leq 0,7$ см), записати співвідношення:

$$r^2 = \rho^2 + x^2 - 2\rho x \cos \alpha,$$

де r – полярний радіус довільної точки апертури лінзи з початком координат в центрі лінзи O ($r = |OP|$), ρ – полярний радіус цієї точки відносно центра Θ лазерного пучка ($\rho = |\Theta P|$), α – відповідний полярний кут.

У такому випадку вираз (1) перетворюється до вигляду

$$u(x) = \iint_S v(s, t)\tilde{G}(x; s, t) ds dt, \quad (2)$$

$$x \in [-a, a] \quad (a \leq 0,7 \text{ см}),$$

де початок координат суміщений із центром пучка Θ , x – координата центра лінзи, s, t – координати довільної точки апертури лінзи: $s = \rho \cos \alpha$, $t = \rho \sin \alpha$.

Завдяки ізотропності досліджуваних зразків розподіл інтенсивності є аксіально-симетричним. Тому лінії рівня інтенсивності являють собою кола з радіусом $\rho = L \sin \theta \approx L\theta$, і співвідношення (2) доцільно записати в полярній системі координат

$$u(x) = \int_{\rho_1(x)}^{\rho_2(x)} \rho v(\rho) \int_{\alpha_1(x, \rho)}^{\alpha_2(x, \rho)} G(x; \rho, \alpha) d\rho d\alpha, \quad (3)$$

$$x \in [-a, a],$$

де $\alpha_1(x, \rho), \rho_1(x)$ і $\alpha_2(x, \rho), \rho_2(x)$ відповідні граничні значення $\alpha(x, \rho), \rho(x)$ (рис. 3).

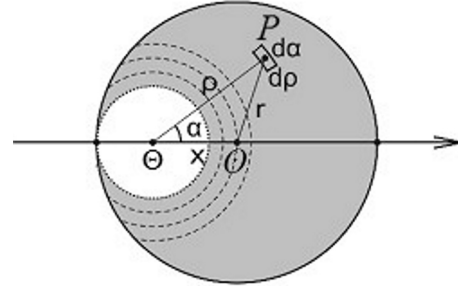


Рис. 3. Лінії рівня інтенсивності на лінзі

При цьому вважається, що функція проходження випромінювання $\tilde{G}(x; s, t)$ в точці P падіння лазерного пучка на лінзу є характеристикою процесу вимірювання і визначається відношенням зареєстрованої потужності випромінювання до потужності падаючого на лінзу випромінювання і залежить від відстані до центра лінзи r :

$$\tilde{G}(x; s, t) = \hat{G}(r) = \hat{G}((\rho^2 + x^2 - 2\rho x \cos \alpha)^{1/2}) = G(x; \rho, \alpha). \quad (4)$$

Функцію $\hat{G}(r)$ можна визначити безпосередньо, оскільки діаметр пучка ($\delta \approx 0,9$ мм) значно менший від розміру лінзи. В розглянутому прикладі при визначенні функції $\hat{G}(r)$ використовувались експериментальні дані (рис. 1) для профілю лазерного пучка, що вільно поширюється у повітрі. Вони можуть бути апроксимовані неперервною функцією, форма якої близька до реальної функції проходження, оскільки $\delta \ll d$. Необхідно відзначити, що форма кривої для функції $\hat{G}(r)$ в силу визначення повністю подібна індикатрисі розсіювання (рис. 1).

Для апроксимації експериментальних значень використовувався такий набір функцій: гаусова функція, парабола і функція “шапочка” [5]. Тому шукану функцію $\hat{G}(r)$ наближено можна записати таким чином:

$$\hat{G}(r) = \chi_1(R_1^2 - r^2) \left(A \exp((r/r_A)^2) - (r/r_B)^2 - C \exp\left(-\frac{(r/r_C)^2}{1 - (r/r_H)^2}\right) \chi_0(r_H^2 - r^2) \right), \quad (5)$$

де $R_1 = 0,55089$ см, $A = 2,223$, $C = 1,277$, $r_A = 0,5808$ см, $r_B = 0,2357$ см, $r_C = 0,3574$ см, $r_H = 0,4711$ см, $\chi(s)$ – функція Хевісайда:

$$\chi_1(s) = \begin{cases} 1, & s \geq 0, \\ 0, & s < 0, \end{cases} \quad \chi_0(s) = \begin{cases} 1, & s > 0, \\ 0, & s \leq 0. \end{cases}$$

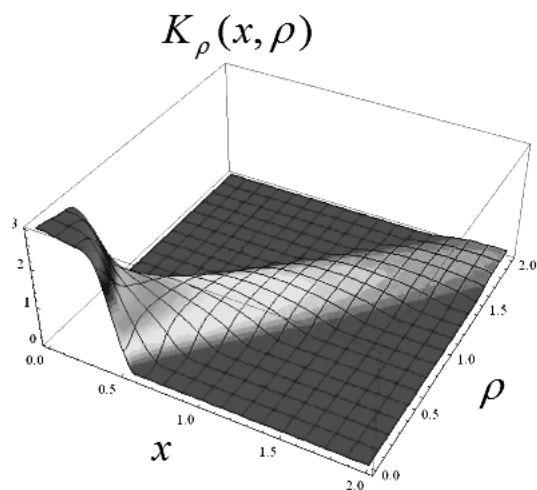


Рис. 4. Апаратна функція $K_\rho(x, \rho)$

При цьому відносна середньоквадратична похибка апроксимації дорівнює 3,6%. Оскільки діаметр лазерного пучка не є нульовим, то при обчисленнях використовується значення $R_1 = 0,5509$ см, $R_1 > R$. Функція $G(x, \rho, \alpha)$ симетрична (4), тому значення внутрішнього інтеграла в (3) можна обчислити так:

$$K_\rho(x, \rho) = \int_0^{\alpha_2(x, \rho)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha = \frac{1}{2} \int_{\alpha_1(x, \rho)}^{\alpha_2(x, \rho)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha.$$

З тієї самої причини ясно, що $\alpha_1(x, \rho) = -\alpha_2(x, \rho)$. Використовуючи вираз для співвідношення сторін трикутника, можна знайти верхню границю інтегрування $\alpha_2(x, \rho)$:

$$\alpha_2(x, \rho) = \begin{cases} \arccos\left(\frac{\rho^2 + x^2 - R_1^2}{2\rho x}\right), & \rho + x > R_1, \\ \pi, & \rho + x \leq R_1. \end{cases}$$

Це дозволить обчислити внутрішній інтеграл в (4):

$$K(x, \rho) = \int_0^{\alpha_2(x, \rho)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha = \frac{1}{2} \int_{\alpha_1(x, \rho)}^{\alpha_2(x, \rho)} G(x, \rho, \alpha) d\alpha.$$

Враховуючи це представлення (рис. 4), інтегральне співвідношення (3) можна записати у ви-

гляді

$$u(x) = 2 \int_{\rho_1(x)}^{\rho_2(x)} \rho v(\rho) K_\rho(x, \rho) d\rho, \quad x \in [-a, a].$$

При визначенні границь інтегрування $\rho_1(x)$ і $\rho_2(x)$ слід розглянути два можливих варіанти розміщення лінзи відносно центра лазерного пучка. В першому із них центр пучка знаходиться всередині кола з радіусом R_1 : $x \leq R_1$ (рис. 3). У другому – центр пучка знаходиться поза меж кола, тобто $x > R_1$.

У роботі [3] показано, що в кінцевому рахунку математична модель вимірювального тракту лазерної установки зводиться до інтегрального рівняння Фредгольма першого роду:

$$u(x) = \int_0^b K(x, \rho) v(\rho) d\rho, \quad x \in [-a, a], \quad (6)$$

де $K(x, \rho) = 2\rho K_\rho(x, \rho)$, $b = 2R_1$.

Рахуємо вільний член $u(x)$ рівняння (6) заданою функцією із дійсного гільбертового простору $L_2[-a, a]$, а шукану функцію $v(\rho)$ – елементом дійсного гільбертового простору $L_2[0, b]$.

4. Перевірка адекватності математичної моделі

На етапі перевірки достовірності математичної моделі вимірювального тракту лазерної установки для оптичної діагностики використовувались інтегральне рівняння Фредгольма першого роду (6) з ядром $K(x, \rho) = 2\rho K_\rho(x, \rho)$, дані про істинний розподіл інтенсивності $v(\rho)$ в розсіяному лазерному пучку. Для отримання функції розподілу інтенсивності $v(\rho)$ в ролі вимірювального тракту використовувалось оптоволокно із малою апертурою (діаметр $d = 410$ мкм). Розрахункові значення функції $\bar{u}(x)$, отримані шляхом прямого обчислення інтеграла (6), порівнювались із експериментально зареєстрованими і апроксимованими індикатрисами розсіяння $u(x)$. Проведена серія експериментів, в яких зокрема досліджувались:

- розсіяння лазерного пучка, що поширювався у повітрі (без зразка);
- розсіяння лазерного пучка після проходження крізь пластинку кристала KDP із домішками TiO_2 .

У всіх серіях вимірювань лазерні пучки мали гаусовий розподіл інтенсивності вигляду

$$v(\rho) = a_k \exp\left(-(\rho/\rho_k)^2\right), \quad k = 1, 2;$$

$$\rho_1 = 0,0447214 \text{ см}; \quad \rho_2 = 0,0421182 \text{ см}.$$

На рис. 5 неперервною лінією показаний графік функції $\bar{u}(x)$, що отримана із використанням формули (6) і з відповідного для даного експерименту ядром $K(x, \rho) = 2\rho K_\rho(x, \rho)$, і функції $v(\rho)$ при $k = 2$. Точкам на графіку відповідають експериментальні значення потужності випромінювання, що пройшло крізь лінзу. Похибка апроксимації результатів не перевищує 5%.

На рис. 6 наведено криві теоретичних залежностей інтенсивності лазерного випромінювання $\bar{u}(x)$ та їх апроксимовані аналоги індикатрис розсіяння $u(x)$. Верхні криві відповідають інтенсивності випромінювання без зразка, нижні – інтенсивності випромінювання після проходження лазерного пучка крізь пластинку кристала KDP із домішками TiO_2 .

На основі представлених даних можна зробити висновок про достовірність математичної моделі (6) вимірювального тракту лазерної установки для оптичної діагностики слабозосіюючих зразків на базі гоніометру Г-5, із використанням детектора у вигляді ССД – лінійки та фокусуєчої лінзи.

5. Проблема некоректності задачі

Математичне формулювання проблеми математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень впливу інкорпорованих наночастинок TiO_2 на оптичні властивості нелінійно-оптичного матеріалу KDP представлено таким чином: виміряне детектором значення потужності випромінювання $u(x)$ пов'язане із істинною інтенсивністю $v(\rho)$ випромінювання, що розсіяне зразком, операторним рівнянням

$$u = Av, \quad u \in L_2[-a, a], \quad v \in L_2[0, b], \quad (7)$$

де оператор A – оператор Гільберта–Шмідта [6] у припущенні, що ядро $K(x, \rho)$ рівняння (6) належить простору $L_2([-a, a] \times [0, b])$:

$$\int_0^b \int_{-a}^a (K(x, \rho))^2 dx d\rho < \infty. \quad (8)$$

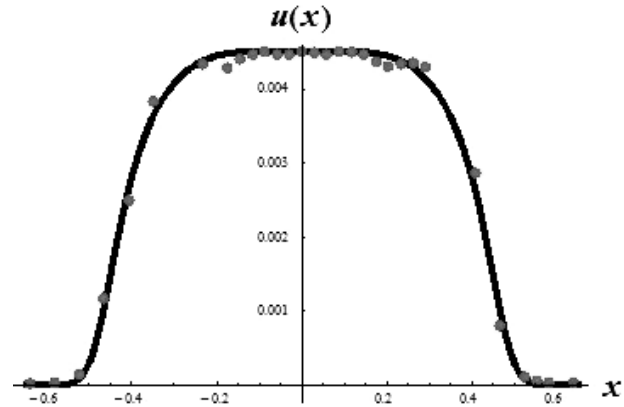


Рис. 5. Теоретична крива (формула (6)) розподілу інтенсивності випромінювання під час дослідження кристала KDP із домішками TiO_2 (точки – експериментальні дані, що отримані із використанням детектора і лінзи)

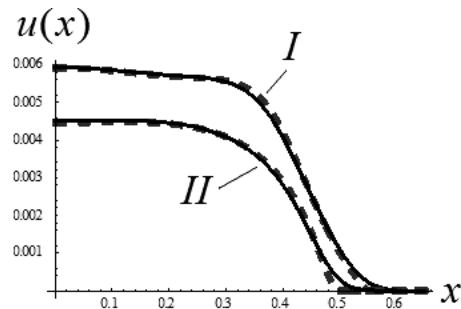


Рис. 6. Теоретичні криві розподілу інтенсивності лазерного випромінювання і індикатрис розсіяння (штрихові лінії) (варіант a – крива I і варіант b – крива II)

Дослідження властивостей рівняння (6) зводиться до вивчення властивостей оператора A .

Теорема 1[6]. *Оператор Гільберта–Шмідта A з ядром $K(x, \rho)$, з інтегрованим квадратом, являє собою в гільбертовому просторі $L_2[-a, a]$ компактний лінійний оператор, норма якого задовольняє нерівність*

$$\|A\| \leq \left(\int_0^b \int_{-a}^a (K(x, \rho))^2 dx d\rho \right)^{1/2}. \quad (9)$$

В ході виконання роботи замість точних даних задачі $K(x, \rho)$ і $u(x)$ реально відомі лише їх наближення $\tilde{K}(x, \rho)$ і $u_\delta(x)$ такі, що

$$\int_0^b \int_{-a}^a (\tilde{K}(x, \rho))^2 dx d\rho < \infty, \quad \|u - u_\delta\| \leq \delta. \quad (10)$$

Тому, при проведенні обчислювальних експериментів, вихідне математичне формулювання (7) проблеми математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень з повним правом можна записати у вигляді наближеного операторного рівняння з рівнем похибки δ, h :

$$A_h v = u_\delta, \quad u_\delta \in L_2[-a, a], \quad v \in L_2[0, b], \quad (11)$$

при цьому $\|u - u_\delta\| \leq \delta, \|A - A_h\| \leq h$.

Норма оператора A_h задовольняє в такому випадку нерівність

$$\|A_h\| \leq \left(\int_0^b \int_{-a}^a (\tilde{K}(x, \rho))^2 dx d\rho \right)^{1/2}. \quad (12)$$

Таким чином, можна стверджувати, що рівняння (11) – це операторне рівняння першого роду, де $A_h \in \Lambda(V, U)$ – лінійний компактний оператор, що діє із гільбертового простору $V = L_2[0, b]$ в гільбертовий простір $U = L_2[-a, a]$, $u_\delta \in U$ – заданий елемент, $v \in V$ – шуканий елемент, $\Lambda(V, U)$ – простір усіх обмежених лінійних операторів, визначених на V .

Компактність оператора A_h має принципове значення з точки зору вибору методу і побудови алгоритму розв'язання операторного рівняння першого роду (11), оскільки в нескінченновимірному просторі V компактний оператор A_h не може мати обмеженого зворотного A_h^{-1} в просторі U [6].

А це означає, в свою чергу, що формальне обернення (11) або спроба пошуку розв'язку задачі (11) у вигляді $v = A_h^{-1}u_\delta$ не приводить до задовільних результатів в умовах реального експерименту, оскільки нескінченно малі варіації реєстрованих результатів, пов'язаних із експериментальною процедурою, приводять до як завгодно великого відхилення у реконструйованій функції $v(\rho)$. Таким чином, розв'язок задачі (11) є нестійким, а сама задача є некоректно поставленою за Адамаром [7–10].

Задача

$$u = Av, \quad u \in U, \quad v \in V, \quad A \in \Lambda(V, U),$$

називається коректно поставленою за Адамаром, якщо виконуються три умови:

1) область значень $\text{Range}(A)$ оператора A збігається з U , $\text{Range}(A) = U$, (умова розв'язності) або для $\forall u \in U \quad \exists v \in V$;

2) із рівності $Av_1 = Av_2$ для деяких $v_1, v_2 \in V$ випливає, що $v_1 = v_2$, (умова єдиності) або для $\forall v_1, v_2 \in V : Av_1 = Av_2 \Rightarrow v_1 = v_2$;

3) зворотний оператор A^{-1} неперервний на U (умова стійкості) або

$$\lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \sup_{A_h : \|A - A_h\|_{V \rightarrow U} \leq h} \inf_{v \in A^{-1}u} \|v - A_h^{-1}u_\delta\|_V = 0.$$

У випадку, коли не виконується одна із цих умов, задача називається некоректно поставленою, або просто некоректною. У практиці експериментальних досліджень найчастіше йде мова про невиконання третьої умови. При математичному моделюванні її можна сформулювати в такому вигляді: Незначним змінам вхідних даних (A, u) можуть відповідати як завгодно великі зміни даних на виході (v) .

З метою подолання проблеми некоректності задачі до розгляду вводиться регуляризуючий оператор (регуляризатор) $R_\alpha(\delta, h, A_h)$ [5], такий, що:

$$\lim_{\substack{\delta \rightarrow 0 \\ h \rightarrow 0}} \sup_{A_h : \|A - A_h\|_{V \rightarrow U} \leq h} \inf_{v \in A^{-1}u} \|v - R_\alpha(\delta, h, A_h)u_\delta\|_V = 0,$$

де $A^{-1}u$ – повний прообраз елемента u , α – параметр регуляризації.

Після отримання математичної моделі, а також після того, як зроблено висновок про достовірність математичної моделі (6) вимірювального тракту лазерної установки для оптичної діагностики слабоборозсіюючих зразків на базі гоніометра Г-5, із використанням детектора у вигляді ССD-лінійки та фокусувальної лінзи, переходимо до етапу розв'язання оберненої задачі, а саме: визначення функції $v(\rho)$ за відомими $u(x)$ та $K(x, \rho)$. Ця задача в операторному представленні має вигляд (7) і є некоректною.

Для наближеного розв'язку рівняння (11) в конкретній задачі, що розглядається був вибраний ітераційний метод Ландвебера (II.8):

$$v_k = (E - \mu A_h^* A_h)v_{k-1} + \mu A_h^* u_\delta, \\ k = 1, 2, \dots; \quad (0 < \mu < 2 / \|A_h\|^2), \quad v_0 = 0.$$

Вагомими аргументами на користь такого вибору стали простота програмної реалізації метода, високий рівень комп'ютерної сумісності і достатній рівень ефективності, як по числу ітерацій, так і

по точності наближеного розв'язку. Реалізація методу Ландвебера ініціює необхідність визначення параметра регуляризації α – моменту зупинки ітераційного процесу.

Фізичною особливістю задачі є наявність умови

$$v(\rho) \geq 0, \quad \forall \rho \in (-\infty, \infty). \quad (13)$$

У роботі запропоновано підхід до апостеріорного визначення числа ітерацій k_* , що базується на використанні згладжуючого функціонала (параметричного функціонала Тихонова) (I.3):

$$\Phi_\alpha[v, u_\delta] = \|Av - u_\delta\|_U^2 + \alpha \Omega[v],$$

де $\Omega[v]$ – стабілізуючий функціонал (стабілізатор), α – параметр регуляризації, у поєднанні з принципом нев'язки (II.10):

$$\|Av_{k_*} - u_\delta\| \in [a_1\delta, a_2\delta].$$

Стосовно точного розв'язку $v(\rho)$ рівняння (6) апріорі справедливо твердження, що цей розв'язок є неперервним на $[0, b]$, має неперервну похідну і інтегрований на $[0, b]$ із квадратом. В такому випадку можна допустити, що простір V є гільбертовим простором Соболева $V = W_2^1[0, b] = H^1[0, b]$. В такому формулюванні стабілізуючий функціонал $\Omega[v]$ і параметричний функціонал Тихонова $\Phi_\alpha[v, u_\delta]$ можна відповідно до (I.8) представити у вигляді

$$\begin{aligned} \Omega[v] &= \|v\|_{W_2^1}^2, \\ \Phi_\alpha[v, u_\delta] &= \|A_h v - u_\delta\|_{L_2}^2 + \alpha \|v\|_{W_2^1}^2 = \\ &= \int_{-a}^a \left[\int_0^b \tilde{K}(x, \rho) v(\rho) d\rho - u_\delta \right]^2 dx + \\ &+ \alpha \int_0^b [v^2(\rho) + [v'(\rho)]^2] d\rho. \end{aligned} \quad (14)$$

Визначається число k_* таке, що, наприклад, функціонал $S_S(v_k, u_\delta) = |\Omega_S[v_k] - 1,0|$ має на v_{k_*} екстремальне значення

$$\begin{aligned} v_{k_*} &= \arg [\inf_k S_S[v_k, u_\delta]], \\ \Omega_S[v_k] &= \frac{\|v_k\|_{W_2^1}^2}{\|\exp(-500,0\rho^2)\|_{W_2^1}^2}. \end{aligned} \quad (15)$$

6. Обчислювальні експерименти

На етапі обчислювальних експериментів була введена нова шукана функція $w(s) = v(\sqrt{s})$ шляхом заміни $s = \rho^2$. Тоді

$$u(x) = \int_0^{b^2} w(s) K_1(x, s) ds, \quad (16)$$

$$K_1(x, s) = K_\rho(x, \sqrt{s}).$$

У випадку відсутності зразка графік функції $K_1(x, s)$ набуває вигляду, наведеному на рис. 7.

Необхідно підкреслити, що при побудові регуляризуючого алгоритму використовувалась лише така додаткова інформація:

$$w(s) \geq 0, \quad \forall s \in (-\infty, \infty).$$

Алгоритм методу Ландвебера формулюється таким чином:

$$\begin{aligned} w_0(s) &= \tilde{w}_0(s), \\ w_m(s) &= w_{m-1}^+(s) + \eta [F(s) - \\ &- \int_0^{\alpha_s} \Re(s, t) w_{m-1}^+(t) dt], \quad m = 1, 2, \dots, \\ w_m^+(s) &= (w_m(s) + |w_m(s)|)/2, \\ 0 < \eta < 2 / \|A_1^* A_1\|, \\ F(s) &= \int_0^{\alpha_s} K_1(x, s) u_\delta(x) dx, \quad \alpha_s = a + R_1, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} \Re(t, s) &= \Re(s, t) = \int_0^{b^2} K_1(x, t) K_1(x, s) dx, \\ \|A_1^* A_1\|^2 &= \|\Re(t, s)\|^2 \leq \int_0^{\alpha_s} \int_0^{\alpha_s} \Re^2(t, s) dt ds. \end{aligned}$$

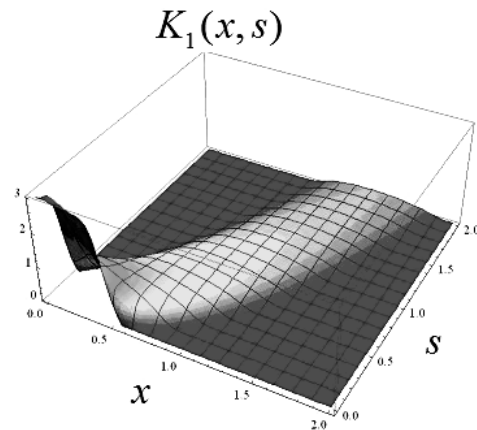


Рис. 7. Ядро інтегрального рівняння (16)

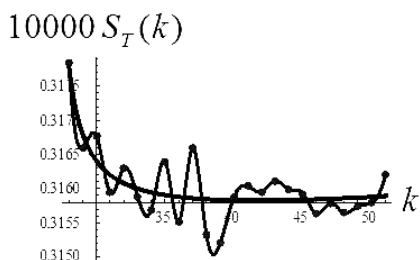


Рис. 8. Графік функції $S_T(k) = |\Omega_T[w_k] - 1,0|$

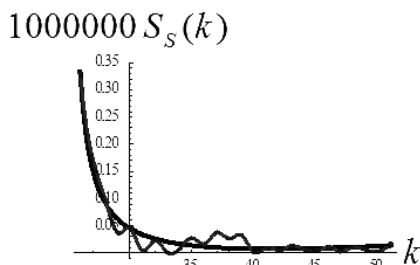


Рис. 9. Графік функції $S_S(k) = |\Omega_S[w_k] - 1,0|$

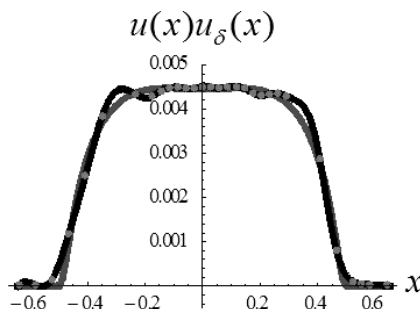


Рис. 10. Точна $u(x)$ і наближена $u_\delta(x)$ функції індикатриси розсіяння

Проведена серія обчислювальних експериментів, в яких визначались величини показників експонент гаусових функцій

$$v_n(\rho) = a_n \exp\left(-(\rho/\rho_n)^2\right) = a_n \exp\left(-\beta_n \rho^2\right);$$

$$a_n = 1; \quad n = 1, 2;$$

що моделюють розподіл інтенсивності:

- а) лазерного пучка, що поширюється без зразка;
- б) пучка після проходження крізь пластинку кристала KDP із домішками TiO_2 .

Для контролю точності розв'язку задачі за допомогою регуляризуючого алгоритму Ландвебера (17) використовувались:

1. Функціонал нев'язки $\|A_h w_k - w_\delta\|_{L_2}$.

2. Стабілізуючий функціонал Тихонова $\Omega[w_k] = \|w_k\|_{L_2}^2$.

3. Стабілізуючий функціонал Соболева $\Omega[w_k] = \|w_k\|_{W_2^1}^2$.

Точні значення показників експонент апостеріорі відомі:

$$\bar{\beta}_1 = 500,0; \quad \bar{\beta}_2 = 563,717200778126.$$

У вказаних варіантах розрахунків в ролі нульового наближення була прийнята функція:

$$\tilde{w}_0(s) = \exp(-20,0s).$$

Для ілюстрації застосування стабілізатора Тихонова

$$\Omega_T[w_k] = \|w_k\|_{L_2}^2 / \|\exp(-500,0s)\|_{L_2}^2,$$

наведемо графік функції $S_T(k) = |\Omega_T[w_k] - 1,0|$; ($k = \overline{26,51}$) (рис. 8).

Аналогічним чином використовувався і стабілізатор Соболева:

$$\Omega_S[w_k] = \|w_k\|_{W_2^1}^2 / \|\exp(-500,0s)\|_{W_2^1}^2,$$

$S_S(k) = |\Omega_S[w_k] - 1,0|$; ($k = \overline{26,51}$) (рис. 9).

Підсумки обчислювального експерименту відповідно до алгоритму (17) є такими:

$$\tilde{\beta}_1(k = 40) = 499,9999988285064,$$

$$\tilde{\beta}_2(k = 61) = 563,7172007781256.$$

Порівняння отриманих значень показників експонент із точними значеннями говорить саме за себе. Фактично отримані асимптотично точні розв'язки рівняння (7) або, інакше кажучи, нормальні розв'язки (I.7) цього рівняння:

$$v_n^\dagger(\rho) = \exp(-\bar{\beta}_n \rho^2); \quad n = 1, 2.$$

Похибки $\Delta_n = |\bar{\beta}_n - \tilde{\beta}_n|$ можна трактувати як результати округлення чисел у комп'ютерному представленні. Безсумнівний інтерес викликає відповідь на питання про величину похибки розв'язку рівняння (11) із неточно заданою правою частиною:

$$Av = u_\delta. \tag{18}$$

Під час дослідження впливу похибки правої частини рівняння (18) на розв'язок $v(\rho)$ за вихідну приймалась функція, що інтерполює експериментальні значення індикатриси розсіяння пучка після проходження кристала KDP із домішками TiO_2 (рис. 10). Середньоквадратична похибка наближення до точної функції $\delta = 0,051127$.

Результатом проведених обчислень виявилось таке значення показника експоненти $\tilde{\beta}_2(k = 31) = 556,412$. Відносна середньоквадратична похибка наближення шуканої функції $\tilde{v}_2(\rho)$ рівна $0,00925329$, що в п'ять з половиною раз менше похибки наближення функції u_δ .

7. Висновки

1. Побудована математична модель у вигляді інтегрального рівняння Фредгольма першого роду вимірального тракту експериментальної лазерної установки для математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень впливу наночастинок TiO_2 на оптичні властивості нелінійно-оптичного матеріалу; перевірка адекватності математичної моделі підтвердила її достовірність із точністю до дев'яти значущих цифр.

2. Розвинута теорія сплайн-ітераційних методів обчислювальної фізики розв'язку проблеми математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень; розроблена сплайн-ітераційна модифікація методу регуляризації Ландвебера.

3. Параметри лазерного пучка, отримані експериментально із використанням установки із оптоволоконним спектрофотометром, підтверджені обчислювальними експериментами.

4. Результатом математичної інтерпретації є виявлення факту самофокусування лазерного пучка через наявність домішок TiO_2 .

5. Розв'язання проблеми математичної інтерпретації результатів експериментальних досліджень можна представити як створення деякого віртуального прецизійного експериментального обладнання. Такий підхід дозволяє отримувати принципово значимі фізичні результати, що недоступні на реальному обладнанні, що є в наявності.

ДОДАТОК І

Звернемося до основних положень математичного аналізу сучасних наукових даних експериментальних досліджень

загальнофізичного профілю. При проведенні експериментальних досліджень в лазерній фізиці, нелінійній оптиці, квантовій оптиці замість точних даних задачі A і u відомі лише їх наближення з рівнем похибки δ, h

$$\|u - u_\delta\| \leq \delta, \quad \|A - A_h\| \leq h,$$

тобто замість точного

$$u = Av, \quad u \in U, \quad v \in V, \quad A \in \Lambda(V, U), \quad (I.1)$$

розв'язується наближене операторне рівняння

$$A_h v = u_\delta, \quad u_\delta \in U, \quad A_h \in \Lambda(V, U). \quad (I.2)$$

Конструктивний розв'язок задачі полягає в апроксимації нормального розв'язку рівняння (I.1) (або розв'язку (I.1) з найменшою нормою в просторі V) $v^\dagger \in \text{Range}(A^\dagger) = \text{Range}(A^*) = \text{Ker}(A)^\perp$ наближеним розв'язком рівняння (I.2). При цьому мається на увазі, що A^\dagger – лінійний оператор, псевдообернений до оператора A , такий, що $A^\dagger : \text{Range}(A) \oplus \text{Range}(A)^\perp \rightarrow V$, $\text{Range}(A^\dagger) = \text{Range}(A^*) = \text{Ker}(A)^\perp$, A^\dagger – неперервний оператор, якщо $\text{Range}(A) = \overline{\text{Range}(A)}$. Справедливим є твердження [8]: *нормальний розв'язок $v^\dagger = A^\dagger u$ ($u \in \text{Range}(A) \oplus \text{Range}(A)^\perp$) є єдиним розв'язком рівняння $A^* Av = A^* u$ ($v \in \text{Range}(A^*)$).*

Як правило, математичні моделі (I.1) в експериментальних дослідженнях лазерної фізики, нелінійної оптики, квантової оптики мають таку властивість, що $\text{Range}(A) \neq \overline{\text{Range}(A)}$ (наприклад, A – лінійний компактний оператор), тобто розв'язок операторного рівняння $Av = u$ являє собою некоректно поставлену задачу. Вирішити задачу стійкого наближення до точного розв'язку рівняння (I.1) при неточних заданих вихідних даних $u_\delta \in U$, $A_h \in \Lambda(V, U)$, $\|u - u_\delta\| \leq \delta$, $\|A - A_h\| \leq h$ з відомими δ і h можна лише одним із методів регуляризації. Серед них головне місце займає метод, теоретичні основи якого були закладені в роботах А.Н. Тихонова. Відповідно до цього методу, для розв'язання (I.2) до розгляду вводиться згладжуючий функціонал (параметричний функціонал Тихонова) [7]:

$$\Phi_\alpha[v, u_\delta] = \|A_h v - u_\delta\|_U^2 + \alpha \Omega[v], \quad (I.3)$$

де $\Omega[v]$ – стабілізуючий функціонал (стабілізатор, зазвичай $\Omega[v] = \|v\|_V^2$), $1 > \alpha > 0$ – параметр регуляризації, $\|A_h v - u_\delta\|_U^2$ – нев'язка рівняння (I.2) на елементі v .

Визначається елемент v_α такий, що функціонал (I.3) має на ньому мінімальне значення, тобто

$$\Phi_\alpha[v_\alpha, u_\delta] = \inf_{v \in V} \Phi_\alpha[v, u_\delta]. \quad (I.4)$$

Якщо в функціоналі Тихонова (I.3) $\Omega[v] = \|v\|_V^2$, то рівняння Ейлера набуває досить простого вигляду

$$\alpha v_\alpha + A_h^* A_h v_\alpha = A_h^* u_\delta. \quad (I.5)$$

При цьому

$$v_\alpha = (\alpha E + A_h^* A_h)^{-1} A_h^* u_\delta = R_\alpha u_\delta, \quad (I.6)$$

де $R_\alpha = (\alpha E + A_h^* A_h)^{-1} A_h^*$.

При $\delta, h \rightarrow 0$, повинно і $\alpha \rightarrow 0$ в силу означення регуляризаторного оператора. Тому в ролі розв'язку задачі (I.4) необхідно брати

$$v^\dagger = \lim_{\alpha \rightarrow 0} (\alpha E + A^* A)^{-1} A^* u, \quad (I.7)$$

якщо $\Omega[v] = \|v\|_V^2$.

Розв'язок (I.7) – нормальний розв'язок, тобто при точних v і A із усіх розв'язків рівняння $Av = u, v \in V, u \in U$, в методі Тихонова вибирається нормальний розв'язок. Формула (I.7) може бути записана інакше:

$$v^\dagger = A^\dagger u,$$

де $A^\dagger = \lim_{\alpha \rightarrow 0} (\alpha E + A^* A)^{-1} A^*$ – оператор, псевдозворотний до A . Якщо ж $\delta \neq 0$ і/або $h \neq 0$, то метод дає розв'язок v_α , який є наближенням до нормального розв'язку v^\dagger . Щодо апроксимаційних і регуляризованих властивостей R_α справедливо таке твердження [11]

Теорема 2. *Нехай $v^\dagger \in V$ – нормальний розв'язок рівняння (I.1). В рамках методу (I.6), якщо $\alpha(\delta, h) \rightarrow 0$ так, що $\lim_{\delta, h \rightarrow 0} \frac{h^2 + \delta^2}{\alpha(\delta, h)} = 0$, то $\lim_{\delta, h \rightarrow 0} \|v_{\alpha(\delta, h)} - v^\dagger\| = 0$.*

Найбільш використовуваним простором у прикладних розрахунках є гільбертовий простір $L_2(G)$ – простір, що складається із класів еквівалентних між собою функцій із інтегрованими по Лебегу квадратами, тобто таких, що інтеграл $\int_G |u|^2(x) dx$ визначений і скінченний [6]. Скалярний добуток на просторі $L_2(G)$ із дійсних функцій задається рівністю

$$(u, v) = \int_G u(x) v(x) dx.$$

В задачах оптики, де шукані функції мають досить високий рівень гладкості, широке застосування знаходять простори Соболева [12].

Простір Соболева $W_p^k(G)$ – функціональний простір, що включає функції із простору Лебега $L_p(G)$. Ці функції мають узагальнені похідні заданого порядку також із $L_p(G)$ ($G \subset R^n$). Іншими словами, $W_p^k(G)$ – простір функцій $u = u(x) = u(x_1, x_2, \dots, x_n)$, що визначені на множині $G \subset R^n$ і є інтегрованими із p -м степенем їх модуля разом із своїми узагальненими похідними до порядку k включно. При $1 \leq p < \infty$ простори Соболева є банаховими просторами, а при $p = 2$ – гільбертовими (вони позначаються, як правило, $H^k(\Omega)$). Норма функції $u \in W_p^k(\Omega)$ вводиться за формулою:

$$\begin{aligned} \|u\|_{W_p^k(G)} &= \left(\sum_{0 \leq |\sigma| \leq k} \int_G |D^\sigma u|^p \right)^{1/p} = \\ &= \sum_{0 \leq |\sigma| \leq k} \|D^\sigma u\|_{L_p(G)} \quad (1 \leq p < \infty), \end{aligned} \quad (I.8)$$

де $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_n)$ – мультиіндекс, $D^\sigma u$ – узагальнена часткова похідна по мультиіндексу порядку $|\sigma| = \sum_{m=1}^n \sigma_m$:

$$D^\sigma u = \frac{\partial^{|\sigma|} u}{\partial x_1^{\sigma_1} \partial x_2^{\sigma_2} \dots \partial x_n^{\sigma_n}}, \quad D^{(0)} u = u.$$

612

Скалярний добуток в $H^k(\Omega)$ визначається виразом

$$(u, v) = \sum_{0 \leq |\sigma| \leq k} (D^\sigma u, D^\sigma v).$$

Простори Соболева мають принципове значення в теорії і практиці чисельних методів, у варіаційних задачах, в теорії диференціальних рівнянь із частковими похідними, теорії функцій, теорії наближень, теорії керування і багатьох інших розділах аналізу і його додатків.

ДОДАТОК II

Як правило, для розв'язання тієї чи іншої складної задачі існує декілька методів. Це зауваження в повній мірі відноситься і до некоректно поставленої задачі. В даному випадку доцільно послатися на важливий клас регуляризованих алгоритмів, запропонований А.В. Бакушинським [11]. Ідея підходу полягає в побудові параметричного сімейства функцій $G = \{g_\alpha(\lambda), \alpha \in (0, 1)\}$, що є вимірюваними по Борелю на півосі $[0, \infty)$ і задовольняють при $\forall v \in [0, v_*]$ умови:

$$\sup_{0 \leq \lambda < \infty} \lambda^v |1 - \lambda g_\alpha(\lambda)| \leq \chi_v \alpha^v, \quad (II.1)$$

$$\sup_{0 \leq \lambda < \infty} \sqrt{\lambda} |g_\alpha(\lambda)| \leq \chi_* \alpha^{-1/2}, \quad (II.2)$$

де v_* , χ_v , χ_* – деякі позитивні константи, що не залежать від α . Система функцій G називається породжуючою для методу регуляризації

$$R = R_\alpha = g_\alpha(A_h^* A_h) A_h^*, \quad g_\alpha \in G. \quad (II.3)$$

Параметр v_* функції g_α називають кваліфікацією метода R_α , а параметр $\alpha = \alpha(\delta, h)$ – параметром регуляризації. Регуляризатори (II.3) дозволяють досягнути оптимального порядку точності на класах рівнянь (I.1) з виокремлюваними розв'язками. При дослідженні задачі побудови оптимальних методів розв'язання некоректного рівняння (I.1) до розгляду вводиться деяка центрально-симетрична множина M , яка в теорії некоректних задач має вигляд [13]:

$$M_{v, \rho}(A) := \{z : z = |A|^v w, \|w\|_V \leq \rho\},$$

де $v > 0, \rho > 0, |A| = (A^* A)^{1/2}$.

Елементи множини $M_{v, \rho}(A)$ називаються виокремлюваними. Відомо, якщо рівняння (I.1) має виокремлюваний розв'язок $v^\dagger \in M_{v, \rho}(A)$, то v^\dagger – найменший в метриці V розв'язок рівняння (I.1). Крім того, для $\forall v > 0$ має місце співвідношення $\text{Range}(|A|^v) = \text{Range}(A^*)$, тобто елементи $|A|^v w$ утворюють усюди щільну множину в підпросторі $\text{Ker}(A)^\perp$, якому належить нормальний розв'язок рівняння (I.1).

Множина регуляризаторів $R_0 = \{g_\alpha(A_h^* A_h) A_h^*, g_\alpha \in G\} \subset R$ включає у себе більшість відомих методів регуляризації [14]:

1. Регуляризатор метода Тихонова

$$R_\alpha = (\alpha E + A_h^* A_h)^{-1} A_h^*$$

є елементом множини R_0 з породжуючою функцією

$$g_\alpha(\lambda) = (\alpha + \lambda)^{-1}$$

і параметрами $\chi_* = 1/2$, $\chi_v = v^v(1-v)^{(1-v)}$. Кваліфікація методу Тихонова $v_* = 1$.

2. Узагальнений регуляризатор метода Тихонова:

$$R_\alpha = (\alpha^{q+1} E + (A_h^* A_h)^{q+1})^{-1} (A_h^* A_h)^q A_h^* \in R_0, \quad (II.4)$$

при $q \geq -1/2$. Регуляризатор (II.4) породжується функцією $g_\alpha(\lambda) = \lambda^q (\alpha^{q+1} + \lambda^{q+1})^{-1}$

при $v_* = q + 1$.

3. Нестационарна ітераційна схема методу Тихонова. Задається $v_0 = 0$. Послідовно знаходяться елементи v_k ($k = 1, 2, \dots$), як розв'язки рівнянь:

$$\alpha_k v_k + A_h^* A_h v_k = \alpha_k v_{k-1} + A_h^* u_\delta \quad (II.5)$$

($0 < \alpha_k < \alpha_{k-1}$, наприклад, $\alpha_k = q^k$, $0 < q < 1$). Метод (II.5) породжується функцією

$$g_\alpha(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \left(1 - \prod_{i=1}^k \frac{\alpha_i}{\alpha_i + \lambda} \right), \quad \lambda \neq 0,$$

і задовольняє умови (II.1), (II.2) для $\chi_v = O(v^v)$ при $0 < v \leq 1$ і $\chi_v = O(c^{v^v})$ при $1 < v$. Кваліфікація метода $v_* = \infty$.

4. Неявна ітераційна схема (метод Факеева-Ларді). Задається $v_0 = 0$. Послідовно знаходяться елементи v_k із рівняння:

$$\mu v_k + A_h^* A_h v_k = \mu v_{k-1} + A_h^* u_\delta, \quad k = 1, 2, \dots \quad (0 < \mu = \text{const}). \quad (II.6)$$

Ітераційний метод (II.6) виявляється регуляризуючим (II.3), якщо

$$g_\alpha(\lambda) = \frac{1}{\lambda} \left(1 - \left(\frac{\mu}{\mu + \lambda} \right)^{1/\alpha} \right), \quad \lambda \neq 0, \quad 1/\alpha = k = 1, 2, \dots$$

Умови (II.1), (II.2) виконуються при $\chi_* = \mu^{-1/2}$, $\chi_v = (v \mu)^v$ і $k \geq v$. Кваліфікація метода $v_* = \infty$.

5. Метод асимптотичної регуляризації. Породжуюча функція цього методу має вигляд

$$g_t(\lambda) = \int_0^t e^{-(t-s)\lambda} ds = \frac{1}{\lambda} (1 - e^{-t\lambda}),$$

так що $1 - \lambda g_t(\lambda) = e^{-t\lambda}$, а наближений розв'язок визначається формулою

$$v_t = (E - A_h^* A_h g_t(A_h^* A_h)) v_0 + g_t(A_h^* A_h) A_h^* u_\delta, \quad (II.7)$$

для довільних $t = \alpha^{-1}$. Умови (II.1), (II.2) виконуються при $\chi_* = 0,6382$, $\chi_v = (ve)^v$ з кваліфікацією метода $v_* = \infty$.

6. Явна ітераційна схема (метод Ландвебера). Задається $v_0 = 0$. Послідовно знаходяться елементи v_k із рівняння:

$$v_k = (E - \mu A_h^* A_h) v_{k-1} + \mu A_h^* u_\delta, \quad k = 1, 2, \dots \quad (0 < \mu < 2/\|A_h\|^2). \quad (II.8)$$

Ітераційний метод (II.8) породжується функцією

$$g_\alpha(\lambda) = \frac{1}{\lambda} (1 - (1 - \mu\lambda)^{1/\alpha}), \quad \lambda \neq 0,$$

де параметр регуляризації α є таким, що величина $1/\alpha$ набуває лише цілочисельних значень $1/\alpha = k = 1, 2, \dots$. Умови (II.1), (II.2) виконуються при $\chi_* = \mu^{1/2}$, $\chi_v = (v/\mu e)^v$. Кваліфікація метода $v_* = \infty$.

Основний результат теорії некоректних задач по обчисленню точних оцінок наближення для рівняння (I.2) можна сформулювати таким чином. Для рівняння (I.2) з наближено заданим оператором A_h і правою частиною u_δ при $\forall \nu > 0$ порядок збіжності до вищепредставимого нормального розв'язку $v^\dagger \in M_{v,\rho}(A)$ не перевищує величину $\frac{\nu}{v+1}$, тобто $\|v^\dagger - R_\alpha u_\delta\| = O((\delta+h)^{\nu/(v+1)})$. Оптимальний порядок точності при вказаних припущеннях априорі забезпечує вибір параметра регуляризації α , що задовольняє умову $\alpha = c(\delta+h)^{2/(v+1)}$, $c = \text{const} > 0$.

В умовах відсутності інформації про точне значення параметра v , що визначає множину $M_{v,\rho}(A)$, при практичному розв'язанні задачі (I.2) значення параметра регуляризації визначається безпосередньо в процесі розв'язання, тобто здійснюється апостеріорний вибір α . Один із найбільш ефективних і поширених методів апостеріорного вибору параметра регуляризації α при розв'язанні (I.2) методом Тихонова (I.6) (у випадку, коли $A = A_h$, $h = 0$) носить назву принципу нев'язки, він був запропонований і обґрунтований В.А. Морозовим [15]. Відповідно до принципу нев'язки, параметр α вибирається із умови:

$$\|A v_\alpha - u_\delta\| = \delta, \quad (II.9)$$

де $v_\alpha = (\alpha E + A^* A)^{-1} A^* u_\delta$.

На практиці α вибирають таким чином, щоб функціонал $\|A v_\alpha - u_\delta\|$ задовольняв умову:

$$\|A v_\alpha - u_\delta\| \in [a_1 \delta, a_2 \delta], \quad (II.10)$$

при цьому $1 < a_1 < a_2$ - деякі заздалегідь задані числа.

У випадку неточно заданого оператора A_h А.В. Гончарським, А.С. Леоновим і А.Г. Яголой [16, 17] був запропонований узагальнений принцип нев'язки, відповідно до якого необхідно, щоб

$$\|A_h v_\alpha - u_\delta\| \in [a_1(\delta + \|v_\alpha\|h), a_2(\delta + \|v_\alpha\|h)]. \quad (II.11)$$

Відомо [13, 14], що регуляризуючі алгоритми (II.3), що задовольняють умови (II.1), (II.2) спільно із принципом нев'язки В.А. Морозова (II.10) або узагальненим принципом нев'язки (II.11) дозволяють визначити розв'язок задачі (I.2) з оптимальною по порядку точністю на множині $M_{v,\rho}(A)$ для усіх v таких, що $0 < v < (2v_* - 1)$.

В роботі [18] для розв'язку задачі (I.2) об'єднано ітераційний метод Ландвебера з апостеріорним вибором параметра регуляризації α (числа ітерацій $1/\alpha = k_*$). Зміст правила зупинки полягає у такому: ітераційний процес (I.6) продовжується, якщо

$$\|A_h v_k - u_\delta\| > \frac{2\delta}{2\delta - \mu\|A_h\|^2}, \quad (II.12)$$

і припиняється якщо нерівність

$$\|A_h v_{k_*} - u_\delta\| \leq \frac{2\delta}{2\delta - \mu\|A_h\|^2} \quad (II.13)$$

виконується вперше. В ролі наближеного розв'язку рівняння (1.2) приймається v_{k*} .

Особливістю принципів (II.9), (II.11) і (II.13), як і багатьох інших, являється та обставина, що в них величина похибки δ правої частини u_δ в рівнянні (1.2) присутня в явному вигляді. Однак, досить часто в наукових експериментальних дослідженнях в силу їх унікальності визначення похибки δ носить досить суб'єктивний характер, як і вибір величин a_1 і a_2 в (II.10) або (II.11). Особливо гостро така проблема постає в ситуації проведення унікального експерименту.

Нарівні з проблемою визначення похибки δ значний рівень суб'єктивності наявний і в ситуації при виборі того чи іншого методу регуляризації. Важливу роль в цьому випадку відіграє наявність апріорної або апостеріорної інформації про розв'язок задачі [8], а також досвід проведення обчислювальних експериментів.

1. А.Ф. Верлань, В.С. Сизиков, *Интегральные уравнения: методы, алгоритмы, программы. Спр. пособие* (Наук. думка, Киев, 1986).
2. В.В. Иванов, *Методы вычислений на ЭВМ. Спр. пособие* (Наук. думка, Киев, 1986).
3. В.Я. Гайворонський, В.М. Старков, М.А. Копиловський, М.С. Бродин, Є.О. Вишняков, О.Ю. Боярчук, І.М. Притула, УФЖ **55**, 875 (2010).
4. В.Н. Старков, *Конструктивные методы вычислительной физики в задачах интерпретации* (Наук. думка, Киев, 2002).
5. В.Н. Старков, А.Ю. Боярчук, *Питання оптимізації обчислень* (Ин-т кібернетики ім. В.М. Глушкова НАН України, Київ, 2009), **2**, С. 339-344.
6. А.Н. Колмогоров, С.В. Фомин, *Элементы теории функций и функционального анализа* (Наука, Москва, 1972).
7. А.Н. Тихонов, В.Я. Арсенин, *Методы решения некорректных задач* (Наука, Москва, 1966).
8. В.В. Васин, А.Л. Агеев, *Некорректные задачи с априорной информацией* (Уральская издательская фирма Наука, Екатеринбург, 1993).
9. В.С. Сизиков, *Обратные прикладные задачи и MatLab: Учебное пособие* (Издательство "Лань", 2011).
10. А.К. Lowes, *Inverse und schlecht gestellte Probleme* (Teubner, Stuttgart, 1989).
11. А.Б. Бакушинский, А.В. Гончарский, *Некорректные задачи. Численные методы и приложения* (Изд-во Моск. ун-та, Москва, 1989).
12. *Математическая энциклопедия*, гл. ред. И.М. Виноградов (Советская Энциклопедия, Москва, 1984).
13. Г.М. Вайникко, А.Ю. Веретенников, *Итерационные процедуры в некорректных задачах* (Наука, Москва, 1986).

14. С.Г. Солодкий, *Оптимальные схемы дискретизации операторных уравнений. Дисс. доктора физ.-мат. наук* (Ин-т математики НАНУ, Киев, 2003).
15. В.А. Морозов, *Регулярные методы решения некорректно поставленных задач* (Изд-во Моск. ун-та, Москва, 1974).
16. А.В. Гончарский, А.С. Леонов, А.Г. Ягола, Докл. АН СССР **203**, № 6, 1238 (1972).
17. А.В. Гончарский, А.С. Леонов, А.Г. Ягола, Журн. вычисл. математики и мат. физики **13**, № 2, 294 (1973).
18. M. Defriese and C. De Mol, in *Inverse Problems: An Interdisciplinary Study*, edited by P.C. Sabatier (Academic Press, New York, 1987), p. 261.

Одержано 20.12.14

В.Н. Старков, М.С. Бродин,
П.М. Томчук, В.Я. Гайворонский, А.Ю. Боярчук

МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ
РЕЗУЛЬТАТОВ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ СВОЙСТВ
НЕЛИНЕЙНО-ОПТИЧЕСКОГО МАТЕРИАЛА

Резюме

С использованием методов вычислительной физики формулируется и решается проблема математической интерпретации результатов экспериментальных исследований влияния инкорпорированных наночастиц TiO_2 на оптические свойства нелинейно-оптического материала КДР. Математическая модель представляется в виде интегрального уравнения Фредгольма первого рода. Предлагается сплайн-итерационная модификация метода регуляризации Ландвебера решения некорректно поставленной задачи. Результаты проведенных вычислительных экспериментов сопоставляются с апостериори известными данными физических экспериментов.

V.N. Starkov, M.S. Brodyn,
P.M. Tomchuk, V.Ya. Gayvoronsky, A.Yu. Boyarchuk

MATHEMATICAL INTERPRETATION
OF EXPERIMENTAL RESEARCH RESULTS
ON NONLINEAR OPTICAL MATERIAL PROPERTIES

Summary

The problem of mathematical interpretation of experimental research results concerning the influence of incorporated TiO_2 nanoparticles on the optical properties of the nonlinear optical material potassium dihydrogen phosphate has been formulated and solved, by using the computational physics methods. The mathematical model is reduced to a Fredholm integral equation of the first kind. A spline-iteration modification of the Landweber regularization method is suggested for solving the ill-posed problem. The results of computational experiments are compared with those of physical ones.