ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ И МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 21 Май 1981 Июнь № 3

УДК 519.677

ДИСКРЕТНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЙ ТИПА СВЕРТКИ И МАТЕМАТИЧЕСКАЯ ОБРАБОТКА РЕЗОНАНСНЫХ СПЕКТРОВ

ГОЛЬДИН М. Л., ДОРОХОВ А. П., ДЫНЬКИН Е. М., ПОТЕПУН Л. И.

(Ленинград)

Предлагается регуляризация уравнения I рода типа свертки, приспособленная к нахождению дискретных решений. Показана сходимость полученных приближенных решений к точному при уменьшении ошибки правой части уравнения. Описаны применения к разделению перекрывающихся полос в резонансных спектрах.

Введение

Решение интегрального уравнения типа свертки

$$\int_{-\infty}^{\infty} K(x-y)f(y)\,dy=g(x) \tag{1}$$

является классическим примером некорректной задачи [1], [2]. Будучи формально единственным, решение f такого уравнения очень сильно зависит даже от малых возмущений правой части g. Если g задано неточно, то, согласно общей теории некорректных задач А. Н. Тихонова [1], [2], к уравнению (1) нужно добавить априорные предположения о свойствах f. Обычно искомое решение предполагается гладким и из всех приближенных решений выбирается наиболее гладкое.

В настоящей работе, напротив, предполагается, что искомое решение f неотрицательно и дискретно — состоит из нескольких точечных нагрузок, удаленных друг от друга на достаточное расстояние. Подобная ситуация естественно возникает при решении тех обратных задач спектроскопии [2], [3], в которых искомый спектр источника не непрерывен, а состоит из нескольких резких линий. Типичным примером является задача разделения перекрывающихся полос в мессбауэровских спектрах и спектрах ядерного магнитного резонанса (я.м.р.) [4]—[6]. Другой пример доставляет хорошо известная задача теории радиоактивного распада о представлении заданной функции времени $g(t)$ в виде суммы экспонент $g(t)=\Sigma c_k \exp(-\lambda_k t)$, $\lambda_k>0$, $t\geqslant 0$.

Обычная «гладкая» регуляризация [2] уравнения (1) для поиска дискретных решений непригодна. В настоящей работе предлагается другая регуляризация (1), приспособленная к дискретному случаю. Для этого вводится неклассический стабилизирующий функционал дисперсионного типа.

В § 1 изложены точная постановка задачи и описание алгоритма регу-

ляризации. Аккуратная интерпретация дискретных решений приводит, естественно, к небольшому обобщению (1) — к уравнению

$$(2)\qquad \mathscr{K}\mu(x)=\int K(x-y)\,d\mu(y)=g(x),\qquad -\infty<x<+\infty,$$

где неизвестной является вероятностная мера μ на отрезке $[a, b]$.

В § 2 доказана сходимость получаемых таким образом приближенных решений к точному, когда отклонение $\varepsilon=g-g_T$ заданной правой части g от точной g_T стремится к нулю в метрике L^2. Сходимость оказывается неожиданно быстрой: в подходящей норме отклонение приближенного решения от точного имеет порядок $\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}$. (Согласно [2, с. 127], в гладком случае гауссовского ядра типичный порядок отклонения есть $(\log\|\varepsilon\|^{-1})^{-1/2}$.)

В § 3 обсуждается применение полученных результатов к задаче разделения полос в резонансных спектрах, послужившей источником настоящей работы.

Ниже используются пространства L^1, L^2, C и C^1 на вещественной оси с обычными нормами [7].

Пространство W_1^3 состоит из дважды непрерывно дифференцируемых функций на вещественной оси, у которых вторая производная абсолютно непрерывна, с нормой $\|\varphi\|_{W_1^3}=\|\varphi\|_C+\|\varphi'\|_C+\|\varphi''\|_C+\|\varphi'''\|_{L^1}$. В дальнейшем $\|\varphi\|_{W_1^3}$ будем обозначать через $\|\varphi\|$. Сопряженное пространство $(W_1^3)^*$ состоит из непрерывных линейных функционалов на W_1^3 с нормой $\|F\|_{(W_1^3)^*}=\sup\{|F(\varphi)|,\ \|\varphi\|\leqslant 1\}$. В дальнейшем $\|F\|_{(W_1^3)^*}$ будем обозначать через $\|F\|_*$. Полагаем, что $\langle\mu,\varphi\rangle=\int\varphi(x)\,d\mu(x)$ — интеграл функции φ по мере μ, $\langle f, g\rangle=\int f(x)g(x)\,dx$ — скалярное произведение функций f и g.

Любая конечная мера μ на вещественной оси является функционалом из $(W_1^3)^*$. В частности, $\|\mu\|_*=\sup\{|\langle\mu,\varphi\rangle|,\ \varphi\in W_1^3,\ \|\varphi\|\leqslant 1\}$. Через

$$\hat{f}(t)=\int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{2\pi ixt}\,dx$$

обозначим преобразование Фурье функции f.

§ 1. Описание алгоритма

1. Постановка задачи. Рассмотрим уравнение I рода типа свертки (2).

Предположим о ядре K этого уравнения, что

$$K\geqslant 0,\qquad K\in W_1^3 \text{ и } \int_{-\infty}^{\infty} K(x)\,dx=1.$$

Кроме того, пусть ядро K таково, что $\hat{K}(t)\neq 0$ при $-\infty<t<\infty$ и

$$(1.1)\qquad \int_{-\infty}^{\infty}\sup_{|x-y|<R}|K'(y)|^2\,dx<\infty,\quad R>0.$$

Предположим о точной правой части g_T уравнения (2), что

$$g_T\geqslant 0,\qquad g_T\in L^2 \text{ и } \int_{-\infty}^{\infty} g_T(x)\,dx=1.$$

Пусть уравнение $\mathscr{K}\mu=g_T$ имеет решение μ_T, являющееся вероятностной мерой на $[a, b]$. Меру μ_T будем называть точным решением. Условие $\hat{K}(t)\neq 0$ обеспечивает его единственность.

Вероятностную меру μ на $[a, b]$ назовем h-дискретной, где $h>0$, если μ имеет вид

$$(1.2)\qquad \mu=\sum c_k\delta_{x_k},\qquad |x_i-x_k|\geqslant h,\quad i\neq k,$$

т. е. μ представляет собой сумму точечных нагрузок, удаленных более чем на h.

Предположим, что точное решение μ_T является h-дискретным при заданном h.

Наконец, предположим, что вместо g_T задана функция

$$g,\qquad g\geqslant 0,\quad g\in L^2,\quad \int_{-\infty}^{\infty} g(x)\,dx=1,$$

такая, что L^2 — норма шума $\varepsilon=g-g_T$ — мала.

Задача настоящей работы состоит в приближенном определении μ_T по заданному g.

Ясно, что для этой цели бесполезно просто решать приближенное уравнение $\mathscr{K}\mu=g$, так как, во-первых, оно может не иметь вероятностного решения и, во-вторых, из-за некорректности задачи оно может быть далеко от μ_T.

Замечание 1. Если ограничиться положительными конечными мерами μ, то, согласно лемме 2 (см. ниже), все же имеет место непрерывная зависимость μ от $\mathscr{K}\mu$ (что, впрочем, вытекает уже из теоремы Хелли о слабой компактности вероятностных мер [7]). Но это обстоятельство не обеспечивает разрешимости приближенного уравнения $\mathscr{K}\mu=g$. С другой стороны, учет условия дискретности позволяет добиться значительно большей скорости сходимости к μ_T, даже если приближенное уравнение считать разрешимым.

Для приближенного отыскания μ_T применим общую вариационную схему регуляризации Тихонова [1], [2] со специально построенным стабилизирующим функционалом.

2. Стабилизирующий функционал. Рассмотрим квадратичный функционал

$$(1.3)\qquad S(\mu)=\frac{1}{h^3}\iint\limits_{|x-y|<h}(x-y)^2\,d\mu(x)\,d\mu(y)$$

от вероятностной меры μ.

Ясно, что $S(\mu)\geqslant 0$ и $S(\mu)=0$ в том и только том случае, когда мера μ является h-дискретной. Заметим, что при сближении двух нагрузок в (1.2) на расстояние, меньшее h, функционал (1.3) возрастает сильнее, чем при «размазывании» одной из них.

Опишем процедуру дискретизации. Она, в частности, показывает, что функционал (1.3) может измерять расстояние от μ до множества h-дискретных мер.

Лемма 1. *Пусть μ — вероятностная мера на $[a, b]$. Существует*

h-дискретная мера μ^d на $[a, b]$ такая, что

(1.4) $$\|\mu-\mu^d\|_*\leqslant \mathrm{const}\, S(\mu)^{1/3},$$

(1.5) $$\|\mathcal{K}\mu-\mathcal{K}\mu^d\|_{L^2}\leqslant \mathrm{const}\, S(\mu)^{1/3}.$$

Доказательство. Пусть $S(\mu)=t$,

$$\xi(x)=\frac{1}{h^3}\iint\limits_{|x-y|<h}(x-y)^2\,d\mu(y),\qquad E=\{x\in[a, b],\ \xi(x)<t^{2/3}\}.$$

Ясно, что $\mu([a, b]\setminus E)<t^{1/3}$. Множество E можно считать непустым и замкнутым. Положим $x_1=\inf E$ и определим конечную последовательность $x_1,\ldots,x_N$ следующим образом. Пусть $x_1,\ldots,x_n$ уже построены. Если $x<x_n+h$ для всех $x\in E$, то положим $N=n$ и прервем построение. В противном случае пусть $x_{n+1}=\inf\{x\in E,\ x\geqslant x_n+h\}$. Ясно, что этот процесс конечен, $N\leqslant(b-a)/h$, $|x_n-x_{n-1}|\geqslant h$ и

$$E\subset\bigcup_{n=1}^{N}[x_n, x_n+h].$$

Положим теперь

(1.6) $$\mu^d=\sum_{k=1}^{N}\mu[x_k, x_k+h]\delta_{x_k}.$$

Проверим, например, (1.4). Пусть $\varphi\in W_1^3$. Тогда

$$\left|\int\limits_{x_k}^{x_k+ht^{1/3}}\varphi(y)\,d(\mu(y)-\mu^d(y))\right|\leqslant\|\varphi'\|_C\,ht^{1/3}\mu[x_k, x_k+ht^{1/3}],$$

$$\left|\int\limits_{x_k+ht^{1/3}}^{x_k+h}\varphi(y)\,d(\mu(y)-\mu^d(y))\right|\leqslant\|\varphi'\|_C\,ht^{-1/3}\int\limits_{x_k}^{x_k+h}(y-x_k)^2\,d\mu(y)\leqslant$$

$$\leqslant\|\varphi'\|_C\,t^{-1/3}h^2\xi(x_k)\leqslant\|\varphi'\|_C\,h^2t^{1/3}.$$

Отсюда $|\langle\mu-\mu^d,\varphi\rangle|\leqslant\|\varphi'\|_C\,t^{1/3}+\|\varphi'\|_C\,t^{1/3}+\|\varphi'\|_C\,t^{1/3}Nh^2$.

Оценка (1.5) проверяется аналогично, с учетом того, что $K\in W_1^3$, и условия (1.1). Лемма доказана.

3. Описание алгоритма. Положим при $\alpha>0$

(1.7) $$F_\alpha(\mu)=\|\mathcal{K}\mu-g\|_{L^2}^2+\alpha S(\mu).$$

Пусть μ_α — мера, доставляющая функционалу F_α минимум среди всех вероятностных мер на $[a, b]$. Пусть μ_α^d — соответствующая h-дискретная мера, построенная по формуле (1.6).

Предлагаем рассматривать меру μ_α^d в качестве приближенного решения нашей задачи.

Параметр регуляризации α можно определять различными способами, например по невязке [2]. Другим возможным выбором является $\alpha=\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}$. Ниже увидим, что при таком выборе α меры μ_α^d будут при $\|\varepsilon\|_{L^2}\to 0$ быстро сходиться к μ_T.

4. Замечания о реализации. Реализация описанного алгорит-

ма на ЭВМ сводится к поиску минимума функционала (1.7). Меру μ можно приближенно представить в виде $\mu=\Sigma c_j\delta_{x_j}$, где $\{x_j\}$ — узлы заранее выбранной сетки. Задача сводится к минимизации квадратичной функции от переменных $\{c_j\}$ при ограничении $c_j\geqslant 0$. Отбросить ограничения нельзя, так как функционал (1.3) не является положительно-определенным и, по-видимому, не существует положительно-определенного функционала с теми же свойствами. Для такой минимизации известны стандартные методы [8]. В дополнительной дискретизации по формуле (1.6) обычно нет необходимости, так как μ_α уже получается почти дискретным. Кроме того, в приложениях строгая дискретность μ_T не имеет физического смысла. Во многих случаях заранее известны запретные интервалы, в которых не должно быть носителя μ_T. Располагая узлы сетки вне этих интервалов, можно понизить размерность задачи.

Пример. Приведем пример поиска дискретного решения уравнения (0.2). Положим $K(x)=[\sigma(2\pi)^{1/2}]^{-1}\exp(-x^2/2\sigma^2)$, $g_0(x)=2K(x)+5K(x-1.5\sigma)+7K(x-3\sigma)+5K(x-4.5\sigma)$, $g(x)=[1+\varepsilon_1(x)]g_0(x)+\varepsilon_2(x)$, где $\varepsilon_1(x)$ — случайный шум, равномерно распределенный в интервале $[-0.05, 0.05]$, а $\varepsilon_2(x)$ — такой же шум, но в интервале $[-0.01, 0.01]$. Иными словами, $g_0(x)$ — сумма четырех гауссовских пиков с амплитудами $2:5:7:5$ на расстоянии 1.5σ друг от друга, а g отличается от g_0, во-первых, случайной относительной ошибкой до 5% сигнала и, во-вторых, случайной абсолютной ошибкой до 0.01 (значение g в максимуме порядка 1). Шумы ε_1, ε_2 генерировались с помощью датчика случайных чисел. График $g(x)$ приведен на фиг. 1. На фиг. 2 приведен результат обработки g по описанному выше алгоритму при $\alpha=0.01$, $h=1.3\sigma$. Мера μ_α изображена на фиг. 2, как сумма точечных нагрузок в узлах сетки. Видно, что она распадается на сумму четырех почти точечных компонент, отношение масс которых есть $2:5:7:5$ с точностью 0.1.

§ 2. Сходимость приближенных решений

1. Формулировка теоремы. Напомним, что $\varepsilon=g-g_T$ — отклонение известной правой части (2) от точной.

Теорема. *При* $\alpha=\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}$ *и* $\|\varepsilon\|_{L^2}\to 0$ *имеем*

$$\|\mu_\alpha{}^d-\mu_T\|_*\leqslant \mathrm{const}\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}. \tag{2.1}$$

Следствие. Алгоритм § 1 является регуляризацией уравнения (2) в смысле Тихонова.

Замечание 2. На множестве вероятностных мер рассматривают различные топологии [7]. Например, по вариации две δ-меры удалены на расстояние 2. Но малый сдвиг носителя h-дискретной меры μ, очевидно, сколь угодно мало меняет $\mathscr{K}\mu$ в метрике L^2. Поэтому сходимость по вариации в нашей задаче непригодна. Следует слегка ослабить топологию пространства мер так, чтобы можно было ожидать непрерывной зависимости μ от $\mathscr{K}\mu$. Удобные примеры доставляют метрики сопряженных пространств к различным пространствам гладких функций. Выбор метрики из этого набора практически произволен. Здесь в качестве пространства пробных функций выбрано $W_1{}^3$ и измерена сходимость мер-решений в метрике $\|\cdot\|_*$.

Доказательство теоремы проведем в несколько этапов. Прежде всего, так как μ_T — одна из конкурирующих мер при минимизации (1.7), то $F_\alpha(\mu_\alpha)\leqslant F_\alpha(\mu_T)=\|\varepsilon\|_{L^2}^2$, что при $\alpha=\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}$ дает $\|\mathscr{K}\mu-g\|_{L^2}\leqslant\|\varepsilon\|_{L^2}$, $S(\mu_\alpha)\leqslant\leqslant\|\varepsilon\|_{L^2}^{3/2}$.

По лемме 1, имеем

$$\|\mu_\alpha-\mu_\alpha{}^d\|_*\leqslant \mathrm{const}\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2},\ \|\mathscr{K}\mu_\alpha{}^d-g_T\|_{L^2}\leqslant \mathrm{const}\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}. \tag{2.2}$$

2. Регуляризация сопряженного уравнения. Введем сопряженный к $\mathscr{K}$ оператор $\mathscr{K}^*$:

$$\mathscr{K}^*\psi(y)=\int_{-\infty}^{\infty}K(x-y)\psi(x)\,dx.$$

Ясно, что для любых μ и ψ

$$\langle\mathscr{K}\mu,\ \psi\rangle=\langle\mu,\ \mathscr{K}^*\psi\rangle. \tag{2.3}$$

Пусть

$$\lambda(\beta)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\beta}{|\hat{K}(t)|^2+\beta t^2}\,dt,\qquad \beta>0.$$

Ясно, что функция $\lambda(\beta)$ возрастает, $\lambda(\beta)/\beta$ убывает,

$$\lim_{\beta\to 0}\lambda(\beta)=0,\qquad \lim_{\beta\to 0}\frac{\lambda(\beta)}{\beta}=\infty.$$

Применяя стандартные оценки из теории гладкой регуляризации [2] к сопряженному уравнению $\mathscr{K}^*\psi=\varphi$, легко получить следующее утверждение.

Лемма 2. *Пусть* $\varphi\in W_1{}^3$ *и* $\beta>0$. *Существует функция* $\psi\in L^2$ *такая, что* $\|\psi\|_{L^2}\leqslant\mathrm{const}[\lambda(\beta)/\beta]^{1/2}\|\varphi\|$, $\|\mathscr{K}^*\psi-\varphi\|_{C^1}\leqslant\mathrm{const}\,\lambda(\beta)\|\varphi\|$.

Доказательство. Перейдем к преобразованиям Фурье и положим, следуя [2], $\hat{\psi}(t)=\hat{\varphi}(t)\overline{\hat{K}(t)}/(|\hat{K}(t)|^2+\beta t^2)$, $-\infty<t<\infty$. Тогда нужные оценки вытекают из очевидного неравенства $|\hat{\varphi}(t)|\leqslant\mathrm{const}[\|\varphi\|(1+|t|)^{-3}]$. Так, например,

$$\|\mathscr{K}^*\psi-\varphi\|_{C^1}\leqslant\mathrm{const}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\beta t^3+\beta t^2}{|\hat{K}(t)|^2+\beta t^2}\frac{\|\varphi\|}{(1+|t|)^3}\leqslant\mathrm{const}\,\lambda(\beta)\|\varphi\|.$$

Лемма доказана.

Следствие. Если μ и ν — вероятностные меры, то

$$\|\mu-\nu\|_*\leqslant\mathrm{const}\,\lambda(\|\mathscr{K}\mu-\mathscr{K}\nu\|_{L^2}).$$

В частности, при $\alpha=\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}$

$$\|\mu_\alpha{}^d-\mu_T\|_*\leqslant\mathrm{const}\,\lambda(\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}). \tag{2.4}$$

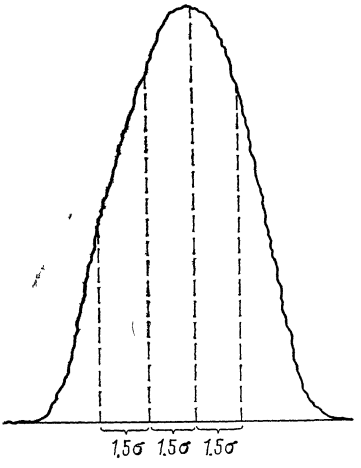
Доказательство. Пусть $\varphi\in W_1{}^3$ и $\beta=\|\mathscr{K}\mu-\mathscr{K}\nu\|_{L^2}$. Тогда ввиду (2.3) имеем

$$\langle\mu-\nu,\ \varphi\rangle=\langle\mu-\nu,\ \mathscr{K}^*\psi\rangle+\langle\mu-\nu,\ \varphi-\mathscr{K}^*\psi\rangle=$$
$$=\langle\mathscr{K}\mu-\mathscr{K}\nu,\ \psi\rangle+\langle\mu-\nu,\ \varphi-\mathscr{K}^*\psi\rangle,$$

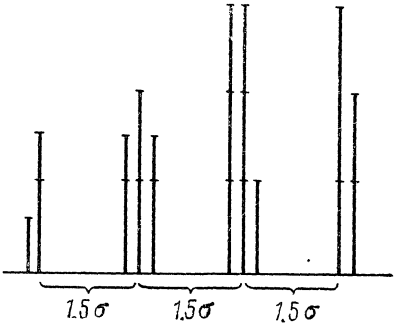
$$|\langle\mu-\nu, \varphi\rangle| \leqslant \|\mathscr{K}\mu-\mathscr{K}\nu\|_{L^2}\|\psi\|_{L^2}+2\|\mathscr{K}^*\psi-\varphi\|_C \leqslant$$
$$\leqslant \mathrm{const}\{\|\varphi\|\,[\beta^{1/2}\lambda(\beta)^{1/2}+\lambda(\beta)]\} \leqslant \mathrm{const}\,\lambda(\beta)\,\|\varphi\|.$$

Следствие доказано.

Замечание 3. Для типичных ядер $K(x)=(1+x^2)^{-1}$ и $K(x)=\exp(-x^2)$ имеем $\lambda(\beta)\asymp(\log\beta^{-1})^{-\gamma}$, где $\gamma=1$, 0.5. Поэтому оценка (2.4) очень слаба в сравнении с (2.1). Именно явное использование h-дискретности $\mu_\alpha{}^d$, т. е. члена $\alpha S(\mu)$ в (1.7), позволит нам сейчас усилить оценку.



Фиг. 1



Фиг. 2

3. Конечномерная параметризация. Число нагрузок h-дискретной меры в интервале $[a, b]$ не превышает $N[(b-a)/h]+1$. Если мера имеет менее N нагрузок, можно формально добавить к ней недостающее число нулевых нагрузок в интервале $[b, 2b-a]$, не нарушая h-дискретности. Поэтому любая h-дискретная мера в $[a, b]$ может быть единственным образом записана в виде

$$\sum_{j=1}^{N} c_j\delta x_j, \quad \text{где} \quad c_j\geqslant 0, \quad \sum_{j=1}^{N} c_j=1,$$
$$a\leqslant x_1<\ldots<x_N\leqslant 2b-a, \qquad |x_{j+1}-x_j|\geqslant h.$$

В частности, такой вид имеет μ_T. Аналогично,

$$\mu_\alpha{}^d=\sum_{j=1}^{N} d_j\delta_{y_j}.$$

Положим $\eta_j=y_j-x_j$, $j=1, 2, \ldots, N$.

Лемма 3. *Для любого* $\eta>0$ *существует такое* $\varepsilon_0>0$, *что*

$$\max_j |\eta_j|<\eta \quad \textit{при} \quad \|\varepsilon\|_{L^2}<\varepsilon_0.$$

Доказательство. Соответствие

$$(x_1, \ldots, x_N, c_1, \ldots, c_N) \to \sum_{j=1}^{N} c_j\delta_{x_j}$$

является непрерывным взаимно-однозначным отображением некоторого компакта в R^{2N} на множество h-дискретных мер с не более чем N нагрузками. Обратное отображение также должно быть непрерывно. Поэтому для завершения доказательства достаточно сослаться на оценку (2.4). Лемма доказана.

4. Интерполяционная задача.

Лемма 4. *Существуют числа* $\eta>0$ *и* $0<C<\infty$ *такие, что при* $\max|\eta_j|<\eta$ *для любой функции* $\varphi\in W_1^3$ *найдется функция* $\psi\in L^2$ *со следующими свойствами*:

$$\|\psi\|_{L^2}\leqslant C\|\varphi\|, \qquad \mathscr{K}^*\psi(x_j)=\varphi(x_j), \qquad \mathscr{K}^*\psi(y_j)=\varphi(y_i),$$
$$j=1,2,\ldots,N.$$

Доказательство. Пусть функция $\chi_j\in W_1^3$, такова, что $\chi_j(x_j)=1$, $\chi_j'(x_j)=0$ и $\chi_j(x_k)=\chi_j'(x_k)=0$, $k\neq j$. Можно считать, что $\|\chi_j\|\leqslant C_1$, где C_1 зависит только от h. По лемме 2, при любом $\rho>0$ найдется функция $\xi_j\in L^2$ такая, что $\|\xi_j\|_{L^2}\leqslant C_2=C_2(\beta)$, и если $u_j=\mathscr{K}^*\xi_j$, то $|u_j(x_j)-1|+|u_j'(x_j)|<\rho$, $|u_j(x_k)|+|u_j'(x_k)|<\rho$, $k\neq j$.

Аналогично, заменяя функцию χ_j функцией $\tilde{\chi}_j$ такой, что $\tilde{\chi}_j(x_j)=0$, $\tilde{\chi}_j'(x_j)=1$, $\tilde{\chi}_j(x_k)=\tilde{\chi}_j'(x_k)=0$, $j\neq k$, получаем функции $\tilde{\xi}_j\in L^2$ и $v_j=\mathscr{K}^*\tilde{\xi}_j$ такие, что $\|\tilde{\xi}_j\|_{L^2}\leqslant C_2$ и $|v_j(x_j)|+|v_j'(x_j)-1|<\rho$, $|v_j(x_k)|+|v_j'(x_k)|<\rho$, $k\neq j$.

Ясно, что если выбрать $\eta=\eta(\rho)$ достаточно малым, то при $\max|\eta_j|<\eta$ будем иметь

$$\max\,[|u_j(y_k)-u_j(x_k)|+|v_j(y_k)-v_j(x_k)|]<4\rho|\eta_k|, \quad k=1,2,\ldots,N,$$

Пусть теперь φ — исходная функция. Положим

$$\psi=\sum_{j=1}^{N}(p_j\xi_j+q_j\tilde{\xi}_j).$$

Для определения коэффициентов p_j и q_j получаем систему линейных уравнений порядка $2N$:

$$\sum_j p_ju_j(x_k)+q_jv_j(x_k)=\varphi(x_k),$$
$$(2.5)\qquad \sum_j p_ju_j(y_k)+q_jv_j(y_k)=\varphi(y_k), \qquad k=1,2,\ldots,N.$$

Достаточно доказать, что система (2.5) имеет решение, причем

$$(2.6)\qquad \sum_j |p_j|+|q_j|\leqslant \mathrm{const}\,\|\varphi\|.$$

Определитель D системы имеет вид

$$D=\begin{vmatrix} u_1(x_1) & u_1(y_1)\ldots u_1(y_N) \\ v_1(x_1) & v_1(y_1)\ldots v_1(y_N) \\ \cdots & \cdots\cdots\cdots \\ u_N(x_1) & u_N(y_1)\ldots u_N(y_N) \\ v_N(x_1) & v_N(y_1)\ldots v_N(y_N) \end{vmatrix}.$$

Вычтем из столбца номер $2k$ столбец номер $2k-1$, $k=1, 2, \ldots, N$. Все элементы столбца номер $2k$ станут равны $u_j(y_k)-u_j(x_k)$ или $v_j(y_k)-v_j(x_k)$. При $j=k$, очевидно, $|v_j(y_k)-v_j(x_k)-\eta_k|<2\rho|\eta_k|$. Все остальные элементы столбца не превосходят $4\rho|\eta_k|$. Следовательно, вынося множитель η_k из всех элементов столбца номер $2k$, получаем $D=\eta_1\ldots\eta_N\det(I+B)$, где I — единичная $2N$-матрица, а все элементы матрицы B не превосходят 4ρ. Следовательно, при $\rho=\rho(N)$ достаточно малом $|D|\geqslant\text{const}|\eta_1\ldots\eta_N|$.

По формулам Крамера, $p_j=D_j/D$, $q_j=D_j^*/D$, где определители D_j и D_j^* отличаются от D заменой одной из строк на строку $\|\varphi(x_1)\varphi(y_1)\ldots\ldots\varphi(x_N)\varphi(y_N)\|$. Так как $|\varphi(y_k)-\varphi(x_k)|\leqslant|\eta_k|\|\varphi\|$, то такое же вычитание столбцов дает

$$\max_j(|D_j|+|D_j^*|)\leqslant\text{const}\,|\eta_1\ldots\eta_N|\,\|\varphi\|.$$

Следовательно, оценка (2.6), а с ней и лемма доказаны.

5. Окончание доказательства теоремы. Пусть $\varphi\in W_1^3$. По лемме 4 с учетом (2.3) имеем

$$\langle\mu_\alpha^d-\mu_T,\varphi\rangle=\sum_{j=1}^N c_j\varphi(x_j)-d_j\varphi(y_j)=$$

$$=\sum_{j=1}^N c_j\mathcal{K}^*\psi(x_j)-d_j\mathcal{K}^*\psi(y_j)=\langle\mu_\alpha^d-\mu_T,\mathcal{K}^*\psi\rangle=\langle\mathcal{K}\mu_\alpha^d-\mathcal{K}\mu_T,\psi\rangle,$$

$$|\langle\mu_\alpha^d-\mu_T,\varphi\rangle|\leqslant\|\mathcal{K}\mu_\alpha^d-g_T\|_{L^2}\|\psi\|_{L^2}\leqslant\text{const}\,\|\varepsilon\|_{L^2}^{1/2}\,\|\varphi\|.$$

Теорема доказана.

§ 3. Задача разделения полос в резонансных спектрах

1. Метод наименьших квадратов. Разделение перекрывающихся полос — одна из основных задач математической обработки резонансных спектров (я.м.р., мессбауэровская спектроскопия). Типичный спектр состоит из нескольких частично перекрывающихся пиков, и задача состоит в определении их индивидуальных характеристик. Экспериментальный сигнал $g(x)$ есть сумма $g(x)=g_1(x)+\ldots+g_n(x)$. Обычно координата x связана с частотой излучения, а $g(x)$ — с интенсивностью поглощения образца на этой частоте.

Предполагается, что каждый пик $g_j(x)$ по форме близок к некоторому стандартному пику $K(x)$, отличаясь от него прежде всего положением и интегральной интенсивностью $\int g_k(x)\,dx$. Обычно такие задачи решаются подбором по методу наименьших квадратов [4]—[6]. Выбирается модель отдельного пика $g_j(x)=I_j\chi(x-a_j, b_j, c_j, \ldots)$, где χ — известная функция, а параметры I_j, a_j, $b_j, \ldots$ у каждого пика свои. При надлежащей нормировке χ параметр I_j — интегральная интенсивность пика, a_j — его положение. Числа b_j, $c_j, \ldots$ называются параметрами формы; можно считать, что $\chi(x, 0, \ldots, 0)=\mathcal{K}(x)$. Параметры I_j, a_j, $b_j, \ldots$ подбираются из условия

минимума среднего квадратичного отклонения

$$F(\{I, a, b, \ldots\}) = \int \left| g(x) - \sum I_j \chi_j (x - a_j, b_j, \ldots) \right|^2 dx.$$

Метод наименьших квадратов универсален и позволяет учесть значительные расхождения в форме пиков. Однако минимизация F — трудная задача даже для крупной ЭВМ. Параметры формы входят в χ нелинейно и редко имеют непосредственный физический смысл. Если число пиков n не мало или неверно оценено, задача становится плохо обусловленной. Поэтому на практике редко удается определить более одного параметра формы на каждый пик и, следовательно, возрастает влияние на результат априорного выбора функции χ. Все это делает естественным вопрос о дополнении метода наименьших квадратов методами иной природы.

2. Интегральная модель. Вместо явной формулы п. 1 можно считать, что искаженная полоса g_j возникает при наложении нескольких близко расположенных пиков стандартной формы, т. е.

$$g_j(x) = \int K(x-y)\, d\mu_j(y),$$

где мера μ_j сосредоточена в узком интервале, ширина которого мала по сравнению с расстоянием между разными интервалами. Если g_j в точности совпадает со стандартным пиком, то $\mu = \delta_{yj}$; иначе μ_j описывает отклонение формы g_j от стандарта. Полный же сигнал равен

$$g(x) = \int_a^b K(x-y)\, d\mu(y), \qquad \mu = \sum_{j=1}^{n} \mu_j, \tag{3.1}$$

где $[a, b]$ — спектральный интервал, в котором проводятся наблюдения.

Таким образом, задача разделения полос приводится к отысканию дискретного или близкого к дискретному решения уравнения (0.2) и к ней может быть применен описанный выше алгоритм.

Интегральная модель спектра линейна относительно неизвестной меры μ и не требует априорного задания числа полос n. Нужно только иметь оценку снизу для допустимого расстояния h между различными полосами.

3. Некоторые замечания. Модель (3.1), т. е. описание полос с помощью локального уширения пика K, удовлетворительно соответствует реальной ситуации в мессбауэровской спектроскопии и в спектрах я.м.р. в отсутствие обмена. Для нее существенно предположение о близости форм всех g_j. В качестве K обычно используется стандартное гауссовское ядро

$$K_\sigma(x) = \frac{1}{\sigma(2\pi)^{1/2}} \exp\left(-\frac{x^2}{2\sigma^2}\right)$$

или стандартное лоренцевское ядро

$$K_\sigma(x) = \frac{1}{\pi} \frac{\sigma}{\sigma^2 + x^2}.$$

Кроме того, в специальном эксперименте можно получить контур «чистой линии», который можно использовать в роли K.

Как уже отмечалось во введении, для поиска дискретных решений

(0.2) гладкая регуляризация непригодна. Рассмотрим, однако, гауссовское ядро K_σ и «контрастированный спектр»

$$g_1(x)=\int K_{\sigma/2}(x-y)\,d\mu(y).$$

Сигнал g_1 состоит из тех же пиков, что и g, но более узких. Может оказаться, что их легче разделить. Очевидно,

$$g(x)=\int K_{\sigma/2}(x-y)\,g_1(y)\,dy, \tag{3.2}$$

и g_1 можно получить, решая интегральное уравнение (3.2). Так как g_1 — весьма гладкая функция, здесь применима гладкая регуляризация. Такой подход к задаче разделения полос применялся в [8]—[10]. Однако для окончательного определения характеристик полос к g_1 все равно нужно применять метод наименьших квадратов или алгоритм настоящей работы.

Описанный в настоящей работе подход к разделению полос применялся к обработке спектров я.м.р. полиметиларилсилоксанов и мессбауэровских спектров твердых растворов на основе железа. Расчеты показали, что он является полезным дополнением к стандартному методу наименьших квадратов.

Авторы приносят искреннюю благодарность за многочисленные обсуждения Б. С. Павлову, В. Н. Гитцовичу и Л. С. Бреслер с сотрудниками.

Литература

1. *Тихонов А. Н.* О методах решения некорректно поставленных задач.— Тр. Междунар. конгр. математиков, М., 1966 г. М.: Мир, 1968, с. 720–722.
2. *Тихонов А. Н., Арсенин В. Я.* Методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1974.
3. *Раутиан С. Г.* Реальные спектральные приборы.— Успехи физ. наук, 1958, т. 66, с. 475–517.
4. *Лагунов В. А.* Программа статистической обработки мессбауэровских и инфракрасных спектров.— В кн.: Алгоритмы и матем. обеспечение для физ. задач. Л.: ФТИ АН СССР, 1978, с. 14–52.
5. *Плате И. А., Строганов Л. Б.* Применение спектроскопии ЯМР для анализа структуры полимерных цепей.— Высокомолекул. соединения, 1971, т. 18 (А), № 5, с. 955–979.
6. *Best M. F., Persson B. T., Agresti D. G.* Versatile program for analysis of Mössbauer spectra.— Comput. Phys. Communs, 1969, v. 1, p. 67–87.
7. *Рудин У.* Функциональный анализ. М.: Мир, 1975.
8. *Пшеничный Б. Н., Данилин Ю. М.* Численные методы в экстремальных задачах. М.: Наука, 1975.
9. *Картавцев О. И. и др.* О некоторых возможностях математической обработки ЯМР-спектров.— Докл. АН СССР, 1977, т. 234, № 2, с. 369–372.
10. *Храмов В. И., Макаров Е. Ф., Плачинда А. С.* Использование метода статистической регуляризации для анализа мессбауэровских спектров.— In: Proc. Internat. Conf. Mössbauer Spectroscopy. Vol. 1. Bucharest, 1977, p. 25–26.
11. *Ткач Ю. Г., Добряков С. Н., Лебедев Я. С.* Простой метод улучшения разрешенности спектров.— Ж. физ. химии, 1977, т. 51, № 8, с. 1920.

Поступила в редакцию 3.III.1980