В. Ф. Турчин, Решение уравнения Фредгольма I рода в статистическом ансамбле гладких функций, *Ж. вычисл. матем. и матем. физ.*, 1967, том 7, номер 6, 1270–1284

ЖУРНАЛ
ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ МАТЕМАТИКИ и МАТЕМАТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

Том 7 Ноябрь 1967 Декабрь № 6

УДК 518:517.948

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ФРЕДГОЛЬМА I РОДА В СТАТИСТИЧЕСКОМ АНСАМБЛЕ ГЛАДКИХ ФУНКЦИЙ

В. Ф. ТУРЧИН

(Москва)

§ 1. Постановка задачи

Ввиду конечной разрешающей способности физических приборов, при измерении функции $\varphi(x)$ непрерывного аргумента x в действительности получают

$$f(x)=\int K(x,x')\varphi(x')\,dx', \tag{1.1}$$

где $K(x, x')$ — функция разрешения прибора, которая, как правило, существенно отлична от нуля лишь в некоторой области разрешения $|x-x'|\lessapprox\Delta(x)$. Естественно поставить вопрос о восстановлении истинной функции $\varphi(x)$ по измеренной функции $f(x)$ (обратная задача). Аналогичные задачи (с различными видами ядер $K(x, x')$) возникают и при решении других проблем физики, таких, как определение спектра протонов по измеренному спектру нейтронов отдачи, определение фононного спектра твердого тела по его теплоемкости и т. п.

Если пренебрегать неполнотой и ошибкой измерений, т. е. полагать, что функция $f(x)$ известна точно, то обратная задача сводится к решению интегрального уравнения Фредгольма I рода (1.1) относительно функции $\varphi(x)$ (ядро $K(x, x')$ всегда будем предполагать известным точно). Но это уравнение имеет решение не для всякой функции $f(x)$. Более того, как мы увидим в дальнейшем, для тех функций $f(x)$, которые получаются в результате измерений, уравнение (1.1) заведомо не имеет решений. Однако обратная задача может быть решена, если ограничиться требованием, чтобы равенство (1.1) соблюдалось лишь с точностью до ошибки измерения, и сделать некоторые предположения относительно гладкости функции $\varphi(x)$.

В [1] и [2] был предложен метод нахождения приближенных решений (1.1) различной степени гладкости. С помощью этого метода мы можем, задавшись произвольным, но не превышающим определенного предела числом α, характеризующим гладкость решения, найти функцию $\bar{\varphi}(x)$ такую, что

$$\left|f(x)-\int K(x,x')\bar{\varphi}(x')\,dx'\right|<s(x), \tag{1.2}$$

где $s(x)$ — произвольная, всюду положительная функция (определяющая точность задания $f(x)$).

При применении этого метода на практике возникает вопрос об ошибке восстановленной функции $\bar{\varphi}(x)$. Ответить на этот вопрос — значит указать не одну гладкую функцию $\bar{\varphi}(x)$, а все те функции данной гладкости, которые удовлетворяют (1.2). В настоящей работе делается попытка решить обратную задачу именно при такой постановке вопроса. При этом мы не претендуем на исчерпывающее решение проблемы и ограничиваемся «физическим» уровнем строгости. Наш подход к проблеме является существенно вероятностным. Прежде всего, неравенство (1.2) у нас заменяется аналогичным вероятностным требованием (что полностью соответствует случайному характеру ошибок измерения). Далее, требование определенной гладкости функции также формулируется вероятностным образом, как требование ее принадлежности к определенному статистическому ансамблю гладких функций. Исходя из этих двух требований, мы находим совокупность всех приближенных решений уравнения (1.1) данной степени гладкости; эта совокупность, естественно, определяется также вероятностно, в виде статистического ансамбля. Математическое ожидание по этому ансамблю мы объявляем восстановленной функцией $\bar{\varphi}(x)$, а среднеквадратичное отклонение от $\bar{\varphi}(x)$ определяет ошибку восстановления.

§ 2. Решение в пространстве $S_{\pi/h}$

Сначала мы рассмотрим случай, когда функция разрешения не зависит от x, т. е. ядро (1.1) является разностным: $K(x, x') = R(x-x')$. Характерные особенности решения обратной задачи видны для этого случая особенно ясно и вычисления могут быть доведены до простых конечных формул. Кроме того, этот случай представляет наибольший практический интерес, так как почти при всех измерениях можно выбрать такую переменную x, что функция разрешения не будет зависеть от x или будет зависеть слабо, так что ее изменением на отрезке длиной 2Δ можно пренебречь.

Уравнение (1.1) принимает вид

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} R(x-x')\varphi(x')\,dx'. \tag{2.1}$$

Представим $\varphi(x)$ и $f(x)$ интегралами Фурье:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{f}(\omega)\exp(i\omega x)\,d\omega, \qquad \varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \tilde{\varphi}(\omega)\exp(i\omega x)\,d\omega. \tag{2.2}$$

Уравнение (1.2) для спектральных функций $\tilde{\varphi}(\omega)$ и $\tilde{f}(\omega)$ принимает вид

$$\tilde{f}(\omega) = \lambda(\omega)\tilde{\varphi}(\omega), \tag{2.3}$$

где

$$\lambda(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} R(x)\exp(-i\omega x)\,dx$$

суть собственные значения интегрального оператора $\hat{K}$. Отсюда

$$\tilde{\varphi}(\omega)=\frac{\tilde{f}(\omega)}{\lambda(\omega)} \tag{2.4}$$

в предположении, что $\lambda(\omega)$ нигде не обращается в нуль.

Если $\tilde{f}(\omega)$ при $\omega\to\infty$ стремится к нулю медленнее, чем $\lambda(\omega)$, то $\tilde{\varphi}(\omega)$ стремится к бесконечности, т. е. уравнение (2.1) не имеет решения в классе $L(-\infty,\infty)$. Скорость затухания спектральной функции при $\omega\to\infty$ характеризует степень гладкости функции. Действие интегрального оператора $\hat{K}$ сводится к сглаживанию функции $\varphi(x)$, что хорошо видно из (2.3). Эта ситуация известна в радиотехнике под названием фильтрации. Сигнал $\varphi(x)$, проходя через фильтр $\hat{K}$, превращается в сигнал $f(x)$, высшие гармоники которого подавлены функцией пропускания фильтра $\lambda(\omega)$. Если бы функция $f(x)$ была известна точно, то мы всегда могли бы быть уверены, что функция $\tilde{\varphi}(\omega)$, найденная из (2.4), будет стремиться к нулю при $\omega\to\infty$. Однако в действительности функция $f(x)$ является суммой идеальной (гладкой) функции и случайной функции, возникающей за счет ошибок измерения. Последняя или целиком является «белым шумом», т. е. совокупностью не зависящих друг от друга значений, или, по крайней мере, содержит компоненту белого шума. Следовательно, при $\omega\to\infty$ спектральная функция $\tilde{f}(\omega)$ стремится к некоторой константе, величина которой определяется уровнем белого шума, поэтому решения уравнения (2.1) не существует.

Мы видим, что решение уравнения (2.1) отсутствует потому, что функция $\varphi(\omega)$, которая должна быть решением, содержит бесконечно большие высшие гармоники. Однако из экспериментальных данных мы можем определить спектральную функцию $\tilde{f}(\omega)$ лишь в некотором конечном интервале частот $|\omega|<\omega_{\max}$. Уравнение (2.4) показывает, что в этом случае и функция $\tilde{\varphi}(\omega)$ может быть определена лишь в том же интервале частот. Поэтому в качестве первого шага на пути нахождения гладких решений естественно ограничиться рассмотрением лишь таких функций $f(x)$ и $\varphi(x)$, спектр которых обращается в нуль при $|\omega|>\omega_{\max}$, где $\omega_{\max}$ — некоторая предельная частота. Такие функции образуют, очевидно, линейное пространство, которое мы обозначим через $S_{\omega_{\max}}$. Будем предполагать, что функция $f(x)$ измеряется в точках $x_n=nh$, расположенных на оси x с постоянным шагом h, и значения ее в этих точках суть f_n. Так называемая теорема отсчетов, или теорема Котельникова, широко используемая в теории информации (см., например, [3]), утверждает, что существует одна и только одна функция $f(x)$, принимающая в точках x_n значения f_n и обладающая тем свойством, что ее спектральная функция $\tilde{f}(\omega)$ обращается в нуль при $|\omega|>\omega_{\max}=\pi/h$, т. е. принадлежащая пространству $S_{\pi/h}$.

Эта функция может быть записана в виде

$$f(x)=\sum_n f(x_n)\,\sigma(x-x_n), \tag{2.5}$$

где функция

$$\sigma(x)=\frac{h}{2\pi}\int\limits_{-\pi/h}^{\pi/h}\exp(ix\omega)\,d\omega=\frac{\sin(\pi x/h)}{(\pi x/h)},$$

называемая иногда функцией отсчетов, обладает тем свойством, что обращается в единицу в точке $x=0$ и в нуль во всех остальных точках измерения x_n, и, кроме того, ее спектральная функция постоянна в области $-\pi/h<\omega<\pi/h$ и обращается в нуль вне этой области. Из этого уже видно, что функция $f(x)$, построенная согласно (2.5), действительно обладает требуемыми свойствами.

Итак, между наборами измеренных значений f_n и функциями из пространства $S_{\pi/h}$ существует взаимно-однозначное соответствие. Поэтому, ограничиваясь рассмотрением лишь функций, принадлежащих $S_{\pi/h}$, мы не теряем информации, полученной при измерениях.

Если $\lambda(\omega)$ в интервале $-\pi/h<\omega<\pi/h$ нигде не обращается в нуль, то уравнение (2.1) имеет в $S_{\pi/h}$ единственное решение, которое, как это следует из (2.2) и (2.4), равно

$$\varphi(x)=\int\limits_{-\pi/h}^{\pi/h}\frac{\tilde f(\omega)}{\lambda(\omega)}\exp(i\omega x)\,d\omega.$$

С помощью обратного преобразования Фурье

$$\tilde f(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}f(x)\exp(-i\omega x)\,dx,$$

$$\tilde\varphi(\omega)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\varphi(x)\exp(-i\omega x)\,dx$$

решение $\varphi(x)$ может быть записано в виде

$$\varphi(x)=\int\limits_{-\infty}^{\infty}K^{(-1)}(x-x')f(x')\,dx', \tag{2.6}$$

где

$$K^{(-1)}(x)=\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\pi/h}^{\pi/h}\frac{\exp(i\omega x)}{\lambda(\omega)}\,d\omega$$

есть ядро обратного оператора $\hat K^{-1}$, которое, так же как и ядро оператора $\hat K$, является разностным.

Выбор пространства $S_{\pi/h}$ в качестве основного класса функций позволяет свести решение интегрального уравнения (1.1) (в общем случае) к решению системы линейных уравнений (требование принадлежности функции $\varphi(x)$ к $S_{\pi/h}$ эквивалентно использованию некоторой квадратурной формулы). Выражая $\varphi(x)$ через $\varphi_m=\varphi(x_m)$ по аналогии с (2.5) и подставляя в (1.1), получаем

$$f_n = \sum_m K_{nm}\varphi_m, \tag{2.7}$$

где

$$K_{nm} = \int_{-\infty}^{\infty} K(x_n, x')\,\sigma(x' - x_m)\,dx'.$$

Если детерминант матрицы $\|K_{nm}\|$ отличен от нуля, то из (2.7) можно найти совокупность значений φ_m, которая однозначно определяет функцию $\varphi(x)$.

Для разностного ядра матричный элемент K_{nm} будет зависеть только от разности $n - m$, а именно, $K_{nm} = R_{n-m}$, где

$$R_l = \int_{-\infty}^{\infty} R(x_l - x')\,\sigma(x')\,dx'.$$

Можно показать, что если $R(x)$ также принадлежит $S_{\pi/h}$ (что, вообще говоря, не обязательно), то $R_l = hR(x_l)$.

Система линейных алгебраических уравнений (2.7), вообще говоря, бесконечна. Однако на практике мы всегда имеем дело с конечными наборами величин. Кроме того, в следующем разделе для записи плотности вероятности нам будет необходимо, чтобы число переменных было конечным (хотя и сколь угодно большим). Поэтому мы сведем (2.7) к конечной системе с помощью известного приема периодического продолжения функций, заданных первоначально на конечном отрезке.

Итак, пусть все рассматриваемые функции $f(x)$ и $\varphi(x)$ определены в точках $x_n = nh$ при $n = -N_0, -N_0 + 1, \ldots, N_0 - 1, N_0$ и периодически продолжены за пределами этого отрезка с периодом Nh, где $N = 2N_0 + 1$. Совокупности N значений f_n и φ_n определяют векторы $\mathbf{f}$ и $\boldsymbol{\varphi}$ в N-мерном евклидовом пространстве. Но в (2.7) нам удобнее сохранить суммирование в бесконечных пределах, считая векторы $\mathbf{f}$ и $\boldsymbol{\varphi}$ бесконечномерными с периодически повторяющимися компонентами. Собственные векторы ψ разностной матрицы $\hat{K}$ имеют компоненты

$$\psi_n = \exp(i\omega hn), \qquad n = -N_0, \quad -N_0 + 1, \ldots, N_0,$$

где допустимые значения ω

$$\omega = \omega_q = \frac{2\pi}{Nh}q, \qquad q = -N_0, \ -N_0 + 1, \ldots, N_0,$$

определяют N различных собственных векторов. (Для единообразия и удобства записи будем считать N нечетным.) Соответствующие собственные значения суть

$$\lambda_q = \sum_l R_l \exp(-i\omega_q hl).$$

Легко показать, что $\lambda_q = \lambda(\omega_q)$. Действительно, по определению R_l получаем

$$\lambda_q = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, R(x) \sum_l \sigma(x - hl) \exp(-i\omega_q hl). \tag{2.8}$$

Но поскольку $|\omega_q| < \pi / h$, то, согласно (2.5),

$$\exp(-i\omega_q x) = \sum_l \exp(-i\omega_q hl)\, \sigma(x - hl).$$

Используя это равенство, из (2.8) получаем

$$\lambda_q = \int_{-\infty}^{\infty} dx\, R(x) \exp(-i\omega_q x) = \lambda(\omega_q).$$

Разложение $\mathbf{f}$ и $\boldsymbol{\varphi}$ по собственным векторам запишем в виде

$$\begin{aligned} f_n &= \sum_{q=-N_0}^{N_0} \tilde{f}_q \exp(i\omega_q hn), \\ \varphi_n &= \sum_{q=-N_0}^{N_0} \tilde{\varphi}_q \exp(i\omega_q hn) \end{aligned} \tag{2.9}$$

Имеем

$$\tilde{f}_q = \frac{1}{N} \sum_{n=-N_0}^{N_0} f_n \exp(-i\omega_q hn),$$

$$\tilde{\varphi}_q = \frac{1}{N} \sum_{n=-N_0}^{N_0} \varphi_n \exp(-i\omega_q hn).$$

Уравнения (2.7) в системе координат, связанной с собственными векторами, принимают вид

$$\tilde{f}_q = \lambda_q \tilde{\varphi}_q,$$

откуда, если все $\lambda_q \neq 0$, получаем решение

$$\varphi_n = \sum_{n'=-N_0}^{N_0} K_{n-n'}^{(-1)} f_{n'}, \tag{2.10}$$

где

$$K_l^{(-1)} = \frac{1}{N} \sum_{q=-N_0}^{N_0} \frac{1}{\lambda_q} \exp\left(i \frac{2\pi}{N} ql \right).$$

Решение, определяемое этими формулами, в точности совпадает с решением, определяемым по формулам (2.6), если, конечно, на функции $f(x)$ и $\varphi(x)$ наложить условие периодичности с периодом Nh. Периодичность функций ведет к дискретности спектра частот, и интеграл сводится к сумме.

Найденное нами точное решение уравнения (2.1) вполне удовлетворяло бы нас, если бы функция $f(x)$ была известна точно. Однако в действительности $f(x)$ всегда содержит ошибку измерения, поэтому необходимо исследовать наше решение на устойчивость, т. е. определить, к какой погрешности в $\varphi(x)$ приводит погрешность в $f(x)$. Из (2.10) мы находим, что если ошибка в f_n есть ε_n, то ошибка в φ_n есть

$$E_n = \sum_{n'=-N_0}^{N_0} K_{n-n'}^{(-1)} \varepsilon_{n'}.$$

Пусть значения ошибки в различных точках не коррелированы («белый шум») и среднеквадратичная ошибка в каждой точке равна s. Тогда нетрудно показать, что среднеквадратичная ошибка в φ_n есть

$$\sigma = s\left[\frac{1}{N}\sum_{q=-N_0}^{N_0}\frac{1}{|\lambda_q|^2}\right]^{1/2}. \tag{2.11}$$

В практически важных случаях величина σ / s, характеризующая возрастание ошибки, оказывается чрезвычайно большой. Действительно, чтобы функция из $S_{\pi/h}$ (см. (2.5)) была хорошим приближением, шаг h должен быть хотя бы в два — три раза меньше полуширины функции разрешения. При этом значение «функции пропускания» на границе диапазона частот $\lambda(\pi / h)$ может быть очень мало, что приводит к большой величине σ / s. Если, например, функция разрешения является гауссовой и шаг h равен одной трети ее полуширины, то $\sigma / s \approx 500$.

Причина резкого возрастания ошибки при восстановлении функции $\varphi(x)$ заключается в возрастании веса высших гармоник. Если не делать никаких предположений о функции $\varphi(x)$, кроме уже оговоренной принадлежности ее к пространству $S_{\pi/h}$, то возрастание ошибки является неизбежным. Однако, как правило, ожидается, что функция $\varphi(x)$ должна удовлетворять некоторым требованиям гладкости, так что появление интенсивных высших гармоник в восстановленной функции следует приписать ошибке в функции $f(x)$. Чтобы избежать появления высших гармоник, мы должны искать решение в некотором классе гладких функций, более узком, чем класс $S_{\pi/h}$. Очевидно, что такое решение будет, вообще говоря, приближенным.

§ 3. Решение в ансамбле гладких функций

Класс гладких функций, в котором предполагается искать решение $\varphi(x)$, можно определить множеством различных способов. Можно, например, наложить ограничение на норму одной или нескольких производных $\varphi(x)$. Однако для установления жестких ограничений на нормы производных или какие-либо другие характеристики гладкости функций не бывает оснований. Более правильным с точки зрения приложений и в то же время более общим способом определения некоторого класса функций является вероятностное определение, т. е. задание в пространстве функций $S_{\pi/h}$ некоторой плотности вероятности $P(\varphi)$ такой, что выбранный наудачу представитель этого класса с вероятностью $P(\varphi)d\varphi$ есть функция φ. Под статистическим ансамблем функций, определяемым плотностью вероятности $P(\varphi)$, мы понимаем случайную совокупность функций, элементы которой получаются последовательными случайными выборками в соответствии с плотностью вероятности $P(\varphi)$. Если функция $P(\varphi)$ постоянна в какой-то области пространства функций и обращается в нуль вне этой области, то задание такого ансамбля эквивалентно заданию класса функций в обычном смысле слова.

Так как пространство функций φ должно быть конечномерным, мы, как и в конце предыдущего раздела, ограничимся функциями, принадлежащими пространству $S_{\pi/h}$ и периодичными с периодом Nh (как было отмечено, они образуют N-мерное евклидово пространство). Однако если раньше ограничение, накладываемое на функции принадлежностью к $S_{\pi/h}$, отражало степень сглаживания и решение существенно зависело от h, то теперь степень сглаживания будет определяться выбором самого ансамбля, а введение пространства $S_{\pi/h}$ носит чисто вспомогательный характер. Величину h можно считать сколь угодно малой, и в конечных формулах мы всегда будем иметь возможность перейти к пределу при $h \to 0$, $N \to \infty$.

Статистический ансамбль гладких функций φ мы определим путем задания распределений вероятности для каждой гармонической амплитуды $\tilde{\varphi}_q$, точнее говоря, для ее действительной и мнимой частей $\tilde{\varphi}_q{}^R$ и $\tilde{\varphi}_q{}^I$. Будем считать, что эти распределения являются нормальными, с математическим ожиданием, равным нулю, и с дисперсией

$$\langle |\tilde{\varphi}_q|^2 \rangle = \frac{1}{N}\gamma_q{}^2 = \frac{1}{N}\gamma^2(\omega_q),$$

разделенной поровну между действительной и мнимой частями $\tilde{\varphi}_q$ при $q \neq 0$. Здесь $\gamma(\omega)$ — произвольная функция, характеризующая данный статистический ансамбль. Чтобы ансамбль действительно состоял из гладких функций, $\gamma(\omega)$ должна быть мала при больших ω. Итак, вероятность того, что в результате случайной выборки из нашего ансамбля мы получим функцию, определяемую произвольным вектором φ, есть

$$P_\Gamma(\varphi)\,d\tilde{\varphi} = (2\pi\gamma_0{}^2N^{-1})^{-1/2}\exp\left\{-\frac{N\tilde{\varphi}_0{}^2}{2\gamma_0{}^2}\right\}\times \tag{3.1}$$
$$\times\prod_q \frac{N}{\pi\gamma_q{}^2}\exp\left\{-\frac{N}{\gamma_q{}^2}[(\tilde{\varphi}_q{}^R)^2+(\tilde{\varphi}_q{}^I)^2]\right\}d\tilde{\varphi}_0\,d\tilde{\varphi}_1{}^R\,d\tilde{\varphi}_1{}^I\ldots d\tilde{\varphi}_{N_0}^R\,d\tilde{\varphi}_{N_0}^I.$$

Запись плотности вероятности через переменные $\tilde{\varphi}_q$ является законной вследствие невырожденности преобразования (2.9).

Теперь наша задача заключается в том, чтобы из числа функций φ, принадлежащих этому ансамблю, отобрать те, которые приближенно удовлетворяют (2.1), т. е. для которых $\hat{K}\varphi$ близко к $\mathbf{f}$. Степень близости, которую мы должны потребовать, определяется среднеквадратичной ошибкой измерения s. Так как ошибки измерений являются случайными величинами, функции, удовлетворяющие этому требованию, также образуют статистический ансамбль. Предполагая нормальное распределение ошибок измерения, получаем следующее выражение для вероятности, определяющее ансамбль функций, близких к решению:

$$P_{\text{Б}}(\varphi)\,d\varphi = \prod_{n=-N_0}^{N_0} \frac{1}{\sqrt{(2\pi s^2)}} \exp\left\{ -\frac{|f_n - (K\varphi)_n|^2}{2s^2} \right\} \times \\ \times |J|\, d\varphi_{-N_0}\, d\varphi_{-N_0+1} \ldots d\varphi_{N_0}, \tag{3.2}$$

где J — якобиан перехода от $(\tilde{K}\varphi)_n$ к φ_n, не зависящий от φ_n вследствие линейности преобразования.

Мы поставили перед собой задачу найти все функции $\varphi(x)$, которые, во-первых, удовлетворяют приближенному уравнению (2.1) и, во-вторых, являются гладкими в определенном нами смысле слова. Но вероятность того, что произвольная функция удовлетворяет первому условию, пропорциональна $P_{\text{Б}}(\varphi)$, а второму условию — пропорциональна $P_{\text{Г}}(\varphi)$. Вероятность того, что произвольная функция φ удовлетворяет обоим условиям одновременно, пропорциональна, следовательно, произведению $P_{\text{Б}}(\varphi)P_{\text{Г}}(\varphi)$. Итак, искомая совокупность функций есть статистический ансамбль, характеризующийся плотностью вероятности

$$P_{\text{БГ}}(\varphi) = \text{const}\, P_{\text{Б}}(\varphi) P_{\text{Г}}(\varphi). \tag{3.3}$$

Этот ансамбль функций (при соблюдении некоего дополнительного условия, о котором будет речь ниже) и есть решение обратной задачи.

Формулу (3.3) можно понимать так же, как формулу Байеса, в которой $P_{\text{Г}}(\varphi)$ — априорная вероятность функции φ, $P_{\text{Б}}(\varphi)$ — условная вероятность функции $\mathbf{f}$ при заданной функции φ, а $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ — условная вероятность функции φ при заданной $\mathbf{f}$. В то же время следует отметить, что определение φ путем усреднения по $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ можно считать байесовой стратегией, только если $P_{\text{Б}}(\varphi)$ полностью задана априори. При определении параметра регуляризации α мы отступаем, строго говоря, от байесовой стратегии.

Мы можем теперь организовать процесс случайной выборки в соответствии с плотностью вероятности $P_{\text{БГ}}(\varphi)$, который даст нам сколько угодно функций, удовлетворяющих поставленным нами условиям. Таким образом, мы нашли не одно решение, а целый «жгут» решений. В качестве восстановленной функции $\bar{\varphi}(x)$ естественно выбрать среднюю функцию этого «жгута», т. е. математическое ожидание функции $\varphi(x)$ по ансамблю $P_{\text{БГ}}$. Далее, из построения ансамбля $P_{\text{БГ}}$ следует, что в него входят все функции, удовлетворяющие указанным требованиям. Следовательно, среднеквадратичное отклонение от $\langle\varphi(x)\rangle$ мы можем считать ошибкой восстановления *).

Переходя в (3.2) к переменным $\tilde{\varphi}_q$ и совершая в (3.1) некоторые преобразования, опирающиеся на действительность φ, находим

$$P_{\text{БГ}}(\varphi)\,d\tilde{\varphi} = \text{const}\exp\left\{ -\sum_{q=-N_0}^{N_0} \left[\frac{N}{2\gamma_q^2} |\tilde{\varphi}_q|^2 + \right.\right. \\ \left.\left. + \frac{N}{2s^2} |\lambda_q \tilde{\varphi}_q - \tilde{f}_q|^2 \right] \right\} d\tilde{\varphi}_0\, d\tilde{\varphi}_1^R \ldots d\tilde{\varphi}_{N_0}^I.$$

*) Нельзя смешивать среднеквадратичную ошибку восстановления, рассматриваемую здесь, с оценкой ошибки восстановления сверху, обсуждаемой в [2].

Мы видим, что это распределение является нормальным, причем квадратичная форма, стоящая в показателе, диагональна по $\tilde{\varphi}_q$. Это делает чрезвычайно простым вычисление математического ожидания и дисперсии. Вычисляя математическое ожидание, получаем восстановленную функцию в представлении Фурье:

$$\langle\tilde{\varphi}_q\rangle = \frac{\lambda_q{}^*}{|\lambda_q|^2 + s^2/\gamma_q{}^2}\tilde{f}_q = z_q\frac{\tilde{f}_q}{\lambda_q}, \tag{3.4}$$

где

$$z_q = z(\omega_q) = \frac{|\lambda(\omega_q)|^2}{|\lambda(\omega_q)|^2 + s^2/\gamma^2(\omega_q)}. \tag{3.5}$$

Следовательно, $\langle\varphi_n\rangle$ получается из f_n действием разностного оператора (см. (2.10)) с матричными элементами

$$\langle K_l^{(-1)}\rangle = \frac{1}{N}\sum_{q=-N_0}^{N_0} z_q \exp\left(i\frac{2\pi}{N}ql\right)\Big/\lambda_q. \tag{3.6}$$

Таким образом, полученное нами решение отличается от точного тем, что его спектральная функция $\tilde{\varphi}(\omega)$ помножается на функцию $z(\omega)$, подавляющую высшие гармоники, вследствие чего $\varphi(x)$ сглаживается. Если положить $s = 0$, то $z(\omega)$ становится равным единице и решение (3.4) обращается в точное. Если положить $\gamma(\omega) = \infty$, то ансамбль гладких функций совпадает со всем пространством $S_{\pi/h}$ и решение (3.4) опять обращается в точное. Если же для некоторых гармоник $\gamma(\omega) = 0$, то $z(\omega) = 0$, и эти гармоники в восстановленной функции будут отсутствовать. Простейшей сглаживающей функцией $\gamma(\omega)$ является функция

$$\gamma(\omega) = \begin{cases} \infty & \text{при} \quad \omega < \omega_0, \\ 0 & \text{при} \quad \omega > \omega_0, \end{cases}$$

которая оставляет без изменения частоты $|\omega| < \omega_0$ и уничтожает частоты $|\omega| < \omega_0$, проектируя тем самым решение из пространства $S_{\pi/h}$ в пространство S_{ω_0}.

Весьма важным свойством $z(\omega)$ является то, что при любой конечной ошибке s она обращается в нуль не только когда $\gamma(\omega) = 0$, но и когда $\lambda(\omega) = 0$. Из (3.5) мы видим, что если для некоторого q

$$|\lambda(\omega_q)|^2\gamma^2(\omega_q) \ll s^2, \tag{3.7}$$

то $z(\omega_q) \ll 1$. Величина s^2 есть средний квадрат отклонения $(\hat{K}\varphi)_n$ от f_n в ансамбле $P_Б$, т. е. средний квадрат ошибки измерения $\langle\varepsilon_n{}^2\rangle$. Следовательно, средняя норма ошибки $\langle|\varepsilon|^2\rangle$ есть Ns^2, средняя норма ошибки в представлении Фурье $\langle|\tilde{\boldsymbol{\varepsilon}}|^2\rangle$ есть s^2, а дисперсия одной компоненты $\langle|\tilde{\varepsilon}_q|^2\rangle$ есть s^2/N. Так как, с другой стороны, $\gamma^2(\omega_q)/N$ есть дисперсия q-й фурье-компоненты в нашем ансамбле гладких функций, то неравенство (3.7) означает, что средняя величина этой компоненты в функции $\mathbf{f} = \hat{K}\boldsymbol{\varphi}$ много меньше ошибки измерения, иначе говоря, полезный сигнал много меньше шума. При точном восстановлении функции $\varphi(x)$ мы получили бы интенсивную q-ю гармонику, целиком обязанную ошибкам измерения.

Множитель $z(\omega_q) \ll 1$ подавляет эту ложную гармонику. Если же, напротив,

$$|\lambda(\omega_q)|^2\gamma^2(\omega_q) \gg s^2,$$

т. е. в q-й гармонике полезный сигнал много больше шума, то $z(\omega_q)$ весьма близко к единице и эта гармоника по сравнению с точным решением почти не меняется.

Так как при $\lambda(\omega_q) \to 0$ не только $z(\omega_q) \to 0$, но и $z(\omega_q) / \lambda(\omega_q) \to 0$, то требование $\lambda(\omega_q) = 0$ для всех q, которое было необходимо для существования точного решения в $S_{\pi/h}$, теперь излишне. Переходя к пределу $N \to \infty$, мы полагаем $h \to 0$, в результате чего получаем ядро обратного интегрального оператора

$$K^{(-1)}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} z(\omega) \frac{\exp(i\omega x)}{\lambda(\omega)} d\omega.$$

Чтобы интеграл сходился, нет необходимости предполагать даже, что $\gamma(\omega) \to 0$ при $\omega \to \infty$, достаточно потребовать лишь ограниченность $\gamma(\omega)$ на бесконечности.

Заметим, что если точное решение уравнения (2.1) существует, т. е. существует интеграл

$$\varphi(x) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\exp(i\omega x)}{\lambda(\omega)} \tilde{f}(\omega) d\omega,$$

то умножение спектральной функции на $z(\omega)$ эквивалентно свертке функции $\varphi(x)$ с функцией

$$\bar{R}(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} z(\omega) \exp(i\omega x) d\omega.$$

Следовательно, найденное нами гладкое решение, являющееся сверткой точного решения с функцией $\bar{R}(x)$, можно трактовать как ту функцию, которая получилась бы в результате измерений, если бы функция разрешения прибора была не $R(x)$, а $\bar{R}(x)$.

Хотя мы проводим рассмотрение в комплексной области, но функции $f(x)$, $\varphi(x)$ и ядро интегрального оператора $R(x - x')$ мы считаем действительными, поэтому окончательные формулы для обратного оператора имеет смысл записать в действительной форме. Вводя обозначения

$$\lambda_R(\omega) = \mathrm{Re}[\lambda(\omega)] = \int_{-\infty}^{\infty} R(x) \cos \omega x \, dx,$$

$$\lambda_I(\omega) = \mathrm{Im}[\lambda(\omega)] = -\int_{-\infty}^{\infty} R(x) \sin \omega x \, dx,$$

преобразуем формулу (3.6) к виду

$$\langle K_l^{-1} \rangle = \frac{1}{N} \left\{ \frac{z(0)}{\lambda_R(0)} + 2 \sum_{q=1}^{N_0} z(\alpha q) \frac{\lambda_R(\alpha q) \cos(\beta l q) + \lambda_I(\alpha q) \sin(\beta l q)}{\lambda_R^2(\alpha q) + \lambda_I^2(\alpha q)} \right\}$$

где

$$\alpha = \frac{2\pi}{Nh}, \qquad \beta = \frac{2\pi}{N}.$$

Вычисляя дисперсию $\tilde{\varphi}_q$, получаем

$$\langle |\tilde{\varphi}_q - \langle \tilde{\varphi}_q \rangle|^2 \rangle = \frac{1}{N} \frac{\gamma_q{}^2 s^2}{|\lambda_q|^2 \gamma_q{}^2 + s^2},$$

откуда

$$\sigma^2 \equiv \frac{1}{N} \langle |\varphi - \langle \varphi \rangle|^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{q=-N_0}^{N_0} \frac{\gamma_q{}^2 s^2}{|\lambda_q|^2 \gamma_q{}^2 + s^2}.$$

Те гармоники, для которых $|\lambda(\omega_q)|^2 \gamma^2(\omega_q) \gg s^2$ и которые, следовательно, не подвергаются подавлению, вносят в ошибку такой же вклад $s^2 / (|\lambda(\omega_q)|^2 N)$, как и в точном решении (см. (2.11)). Гармоники, для которых $|\lambda(\omega_q)|^2 \gamma^2(\omega_q) \ll s^2$ и которые, следовательно, в восстановленной функции $\langle \varphi(x) \rangle$ сильно подавлены, вносят в ошибку вклад $\gamma^2(\omega) / N$, равный их дисперсии в исходном ансамбле гладких функций $P_{\text{Г}}(\varphi)$. Хотя $\langle \varphi(x) \rangle$ и не содержит этих гармоник, в функциях ансамбля $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ они встречаются столь же часто, как и в функциях ансамбля $P_{\text{Г}}(\varphi)$.

В отличие от ошибки в экспериментальной функции $f(x)$, ошибка в восстановленной функции отнюдь не является статистически независимой в различных точках. Требование гладкости, наложенное на $\varphi(x)$, приводит к наличию сильных корреляций между значениями $\varphi(x)$ в близких точках x. Вычислим корреляционную функцию для $\varphi(x)$ из ансамбля $P_{\text{БГ}}(\varphi)$:

$$\rho(x) = \frac{\langle \varphi(x')\varphi(x'+x) \rangle_{\text{БГ}} - \langle \varphi(x') \rangle_{\text{БГ}} \langle \varphi(x'+x) \rangle_{\text{БГ}}}{\langle [\varphi(x')]^2 \rangle_{\text{БГ}} - [\langle \varphi(x') \rangle_{\text{БГ}}]^2}.$$

В дискретном варианте

$$\rho_n = \frac{1}{\sigma^2} [\langle \varphi_{n'} \varphi_{n'+n} \rangle_{\text{БГ}} - \langle \varphi_{n'} \rangle_{\text{БГ}} \langle \varphi_{n'+n} \rangle_{\text{БГ}}].$$

После несложных преобразований находим

$$\rho_n = \frac{s^2}{\sigma^2} \frac{1}{N} \sum_{q=-N_0}^{N_0} \frac{\gamma_q{}^2}{|\lambda_q|^2 \gamma_q{}^2 + s^2} \exp(i\omega_q n).$$

Ансамбль $P_{\text{Б}}(\varphi)$ определялся нами таким образом, чтобы

$$\langle [f_n - (K\varphi)_n]^2 \rangle_{\text{Б}} = \frac{1}{N} \langle |\mathbf{f} - \hat{K}\varphi|^2 \rangle_{\text{Б}} = s^2.$$

Для ансамбля $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ эта величина будет, вообще говоря, другая. С помощью преобразования

$$\langle |\lambda_q \tilde{\varphi}_q - \tilde{f}_q|^2 \rangle = |\lambda_q{}^2| \langle |\tilde{\varphi}_q - \langle \tilde{\varphi}_q \rangle|^2 \rangle + |\lambda_q \langle \tilde{\varphi}_q \rangle - \tilde{f}_q|^2$$

находим

$$s'^2 = \frac{1}{N}\langle|\mathbf{f} - K\varphi|^2\rangle_{\text{БГ}} = s^2\frac{1}{N}\sum_{q=-N_0}^{N_0} z_q + \sum_{q=-N_0}^{N_0}(1-z_q)^2|\tilde{f}_q|^2. \tag{3.8}$$

Теперь мы можем сформулировать условие (о нем мы упоминали выше), выполнение которого необходимо, чтобы ансамбль $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ действительно был решением обратной задачи в данном ансамбле $P_{\text{Г}}(\varphi)$. Это условие выражается неравенством $s'^2 \leqslant s^2$, означающим, что среднеквадратичное отклонение $(\hat{K}\varphi)_n$ от f_n, где φ — произвольная функция ансамбля $P_{\text{БГ}}(\varphi)$, не превышает ошибки измерения s. Ансамбль $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ мы получили путем отбора гладких функций из всего множества функций, близких к решению (ансамбль $P_{\text{Б}}(\varphi)$). Если в результате этого отбора среднеквадратичное отклонение $\hat{K}\varphi$ от $\mathbf{f}$ не увеличилось, т. е. $s'^2 \leqslant s^2$, то это значит, что требование гладкости не противоречит (2.1) и $P_{\text{БГ}}(\varphi)$ можно рассматривать как полное решение обратной задачи в данном ансамбле. Если же $s'^2 > s^2$, то это значит, что предъявленное к функциям $\varphi(x)$ требование гладкости несовместимо (статистически) с соблюдением (2.1) с точностью до s, т. е. решения обратной задачи в данном ансамбле гладких функций не существует.

Возникает следующий важный вопрос. Допустим, что функция $\varphi(x)$ действительно принадлежит к некоторому ансамблю гладких функций $P_{\text{Г}}(\varphi)$ и что этот ансамбль нам известен и мы пользуемся им при восстановлении $\varphi(x)$ по измеренной функции $f(x)$. Каково будет значение величины s'^2? Не окажется ли, вопреки здравому смыслу, что решения в этом случае не существует?

Чтобы сделать более ясной постановку вопроса, представим себе, что мы выбираем наудачу функцию $\varphi(x)$ из ансамбля $P_{\text{Г}}(\varphi)$, пропускаем ее через прибор, добавляем случайную функцию $\varepsilon(x)$ и получаем таким образом некую функцию $f(x)$. Затем мы повторяем этот процесс до бесконечности и получаем бесконечную последовательность функций $f(x)$. Применяя к каждой из них процедуру восстановления, получаем бесконечную последовательность величин s'^2. Все они, вообще говоря, различны, но мы можем вычислить среднее значение s'^2 в этой последовательности. Поскольку

$$f(x) = \hat{K}\varphi(x) + \varepsilon(x),$$

где $\varphi(x)$ принадлежит ансамблю $P_{\text{Г}}(\varphi)$, то

$$\langle|\tilde{f}_q|^2\rangle = \frac{1}{N}[|\lambda_q|^2\gamma_q^2 + s^2]. \tag{3.9}$$

Подставляя (3.9) в (3.8), получаем $\langle s'^2\rangle = s^2$; таким образом, в среднем s'^2 должно совпадать с s^2, а так как s'^2 является суммой N случайных независимых членов, то относительные отклонения от среднего, превышающие по порядку величины $1/N$, маловероятны. Таким образом, если мы правильно угадали ансамбль гладких функций, то $s'^2 \approx s^2$.

§ 4. Случай произвольного ядра $K(x, x')$

Если ядро интегрального уравнения (1.1) $K(x, x')$ не обладает трансляционной симметрией, то $\exp(i\omega_q x)$ не являются собственными функциями и уравнение (1.1) не решается так легко, как в случае ядра $R(x-x')$. Однако принципиально подход к проблеме остается таким же. В пространстве $S_{\pi/h}$ решение, вообще говоря, существует и является единственным. Оно может быть найдено путем решения системы линейных уравнений (2.7). В ансамбле гладких функций $P_\Gamma(\varphi)$ решением является ансамбль $P_{Б\Gamma}(\varphi)$:

$$P_{Б\Gamma}(\varphi)=\operatorname{const}\exp\left\{-\sum_{q=-N_0}^{N_0}\left[\frac{N|\tilde{\varphi}_q|^2}{2\gamma_q^2}+\frac{N}{2s^2}\left|\sum_{q'}K_{qq'}\tilde{\varphi}_{q'}-\tilde{f}_q\right|^2\right]\right\}, \quad (4.1)$$

где

$$K_{qq'}=\frac{1}{N}\sum_{n,n'}\exp(-i\omega_q hn)K_{n,n'}\exp(i\omega_{q'}hn')$$

есть матричный элемент оператора $\hat{K}$ в представлении Фурье.

В x-представлении ансамбль (4.1) имеет вид

$$P_{Б\Gamma}(\varphi)=\operatorname{const}\exp\left\{-\sum_{n}\left[\sum_{n'}G_{n-n'}\varphi_n\varphi_{n'}+\frac{1}{2s^2}\left(\sum_{n'}K_{nn'}\varphi_{n'}-f_n\right)^2\right]\right\}, \quad (4.2)$$

где

$$G_l=\frac{1}{N}\sum_q\frac{\exp(-i\omega_q hl)}{2\gamma_q^2}.$$

Прямое вычисление G_l по этой формуле может оказаться затруднительным, так как γ_q^2 убывает с возрастанием q, а переход к пределу $h\to 0$ и вовсе невозможен. Это объясняется тем, что квадратичная форма, стоящая в показателе экспоненты в ансамбле $P_\Gamma(\varphi)$, в пределе $h\to 0$ выражается не в виде свертки, а в виде дифференциальной квадратичной формы. Например, норму производной можно представить в виде

$$\int\limits_{-\infty}|\varphi'(x)|^2dx\approx\frac{4\pi^2}{hN}\sum_q\omega_q^2|\tilde{\varphi}(\omega_q)|^2.$$

Следовательно, если положить $\gamma(\omega)=hN^2/8\pi^2\omega^2$, то квадратичная форма переходит в норму производной. И вообще, если взять ансамбль гладких функций в виде

$$P_\Gamma(\varphi)=\operatorname{const}\cdot\exp\{-\beta F_\Gamma[\varphi(x)]\}, \quad (4.3)$$

где

$$F_\Gamma[\varphi(x)]=A_1\int|\varphi'(x)|^2dx+A_2\int|\varphi''(x)|^2dx+\ldots, \quad (4.4)$$

то этот ансамбль может быть получен как предельный случай при $h\to 0$ из ансамбля (3.1) с функцией

$$\gamma^2(\omega)=\frac{1}{\beta}\frac{hN^2}{8\pi^2}\frac{1}{A_1\omega^2+A_2\omega^4+\ldots}$$

Поэтому для функций $\gamma^2(\omega)$ этого вида мы можем вычислить $G_{n-n'}$ как конечноразностное приближение к (4.4).

Нахождение $\langle\varphi\rangle$ сводится к минимизации квадратичной формы, стоящей в (4.2) или (4.1). Заметим, что решение задачи по методу А. Н. Тихонова [2] также сводится к минимизации квадратичной формы

$$\alpha F_{\Gamma}[\varphi(x)] + \int dx \left[\int dx' K(x, x') \varphi(x') - f(x) \right]^2,$$

где $F_{\Gamma}[\varphi(x)]$ — некий регуляризирующий функционал. Следовательно, решение, полученное по методу А. Н. Тихонова, можно интерпретировать как математическое ожидание решения в ансамбле гладких функций (4.3), где $\beta = \alpha / 2s^2$.

Обозначая через G эрмитову матрицу с элементами $G_{nn'} = G_{n-n'}$, запишем квадратичную форму в (4.2) следующим образом:

$$\varphi \left(G + \frac{1}{2s^2} K^+ K \right) \varphi - \frac{1}{s^2} \mathbf{f} K \varphi + \frac{1}{2s^2} \mathbf{f}\mathbf{f}, \tag{4.5}$$

откуда для $\langle\varphi\rangle$ получаем уравнение

$$(2s^2 G + K^+ K) \langle\varphi\rangle = K^+ \mathbf{f}.$$

Чтобы найти дисперсию σ^2, приведем однородную часть (4.5) к диагональному виду. В силу ее эрмитовости соответствующее преобразование будет унитарным. Дисперсия определится через сумму обратных диагональных элементов. Пользуясь инвариантностью следа матрицы и нормы вектора при унитарных преобразованиях, получаем

$$\sigma^2 = \frac{1}{2N} \operatorname{Sp} \left\{ \left(G + \frac{1}{2s^2} K^+ K \right)^{-1} \right\} .$$

Для дисперсии s'^2 находим

$$s'^2 = \frac{1}{2N} \operatorname{Sp} \left\{ K^+ K \left(G + \frac{1}{2s^2} K^+ K \right)^{-1} \right\} + \frac{1}{N} |\mathbf{f} - K \langle\varphi\rangle|^2.$$

Автор выражает благодарность А. Н. Тихонову и Л. В. Майорову за обсуждение полученных результатов.

Поступила в редакцию
4.01.1966

Цитированная литература

1. D. L. Phillips. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. J. Assoc. Comput. Machinery, 1962, 9, № 1, 84—97.
2. А. Н. Тихонов. Решение некорректно поставленных задач и метод регуляризации. Докл. АН СССР, 1963, 151, № 3, 501—504.
3. С. Голдман. Теория информации. М., Изд-во ин. лит., 1957.