

## ДВОЙСТВЕННАЯ РЕГУЛЯРИЗАЦИЯ В ОДНОМЕРНЫХ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧАХ РАССЕЯНИЯ

© 2012 г. *К.П. Гайкович<sup>1</sup>, П.К. Гайкович<sup>1</sup>, О.Е.Галкин<sup>2</sup>, А.И. Смирнов<sup>3</sup>, М.И. Сумин<sup>2</sup>*<sup>1</sup>Институт физики микроструктур РАН,<sup>2</sup>Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского<sup>3</sup>Институт прикладной физики РАН

gai@ipm.sci-nnov.ru

*Поступила в редакцию*

Предложен метод восстановления подповерхностных профилей диэлектрической проницаемости одномерно неоднородной среды по измерениям рассеянного поля, основанный на лагранжевом формализме в решении нелинейных некорректных обратных задач. Метод позволяет решать задачи в их естественных постановках для исходных уравнений Максвелла. Эффективность метода демонстрируется в численном моделировании восстановления профилей проводимости земной коры и профилей неоднородностей диэлектрической проницаемости в многослойных периодических структурах по данным спектральных измерений.

Ключевые слова: неоднородные среды, многослойные наноструктуры, диэлектрическая проницаемость, проводимость земной коры, рассеянное поле, некорректные обратные задачи, двойственная регуляризация

## ВВЕДЕНИЕ

Необходимость в решении одномерных обратных задач рассеяния возникает в самых разных методах электромагнитной и акустической диагностики одномерно неоднородных сред. Впервые такая задача была сформулирована и решалась А.Н.Тихоновым в рамках развитой им теории некорректных обратных задач [1] для магнитотеллурического зондирования земной коры со слоистой структурой глубинного профиля проводимости по данным многочастотных измерений электромагнитных полей искусственного и естественного происхождения на ультранизких частотах, способных проникать вглубь земной коры на несколько километров [2]. При этом частотная зависимость толщины скин-слоя обеспечивает глубинную чувствительность метода. На классе непрерывных функций эта задача решалась в [3-5] путем ее сведения к нелинейному интегральному уравнению 1-го рода и его решения итерациями, начиная с борновского приближения, методом обобщенной невязки Тихонова [6]. Исследования показали, что такой метод решения этой задачи неэффективен для сильных неоднородностей проводимости, и даже для слабых неоднородностей теряет сходимость после 2-3 итераций.

Более сложные задачи возникают в задачах диагностики неоднородного полупространства по угловой и спектральной зависимости коэффициента отражения [7-10], включая и неоднородности в многослойных структурах [8-10], возникающие из-за диффузии материала в процессе изготовления методом эпитаксии. Эти задачи также сводились к решению нелинейного интегрального уравнения 1-го рода. Однако, даже в случаях, когда борновское приближение обладает достаточной точностью [10], решение может сильно искажаться ошибкой линеаризации при выделении вклада возмущения в измеряемый коэффициент отражения по мощности.

Таким образом, возникает необходимость в альтернативных подходах к решению таких нелинейных обратных задач. Применительно к обратной задаче геомагнитного зондирования в [9] был предложен метод двойственной регуляризации, алгоритм которого в самой простой форме (градиентной минимизации невязки в функции Лагранжа) был исследован в [10], где показано, что он позволяет восстанавливать сильные неоднородности профиля проводимости. Этот метод, основанный на лагранжевом подходе в общей теории методов оптимизации и оптимального управления [11-16], позволяет решать сложные обратные задачи непосредственно в рамках их естественных дифференциальных постановок, без перехода к нелинейному интегральному уравнению.

В данной статье излагается теория построения двойственных алгоритмов одномерных обратных задач рассеяния и приводятся результаты численного моделирования решения задачи геомагнитного зондирования, а также задачи восстановления профиля неоднородностей в периодических структурах рентгеновской оптики, иллюстрирующие эффективность метода.

## ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА МЕТОДА ДВОЙСТВЕННОЙ РЕГУЛЯРИЗАЦИИ

При решении указанных обратных задач, как и большинства обратных задач физической диагностики [4], считается естественным переходить от постановки исходной обратной задачи в терминах дифференциального уравнения (обыкновенного или в частных производных) к постановке, в которой основным объектом является интегральное уравнение. Как правило, для линейных задач – это линейные интегральные уравнения первого рода типа Фредгольма или Вольтерра, для решения которых имеется широкий арсенал эффективных вычислительных алгоритмов, например, таких, как метод Тихонова, метод регуляризации на компактах и ряд других [6].

В то же время, для более сложных нелинейных задач процедура перехода от дифференциальной постановки обратной задачи к ее «интегральному аналогу» становится сама по себе во многих случаях самостоятельной, и подчас весьма сложной задачей. Для указанного перехода к интегральным уравнениям часто приходится использовать те или иные приближения (например, борновское). При этом неизбежно теряется точность и искажается первоначальная, соответствующая сути дела, физическая модель.

Оказывается, однако, что этап перехода от дифференциальной формы обратной задачи к интегральным уравнениям вовсе не обязателен и может быть исключен из процесса решения обратной задачи, в том числе, и в нелинейных случаях. Существуют методы, являющиеся составной частью общей теории методов оптимизации и оптимального управления, которые позволяют решать сложные обратные задачи непосредственно в рамках их естественных дифференциальных постановок. К таким методам относится рассматриваемый в данной работе метод, основанный на теории двойственности или, другими словами, метод двойственной регуляризации [14,16]. Этот метод является устойчивым к ошибкам исходных данных, ориентирован на решение нелинейных оптимизационных задач и в своей основе опирается на одноименный метод [12,13,15,17], разработанный ранее для решения линейно-выпуклых оптимизационных задач, к которым, в частности, сводятся линейные задачи. Его особенностью является то, что, во-первых, он развивает классический в теории оптимизации лагранжев подход; во-вторых, служит удобной универсальной основой для решения различных обратных задач физической диагностики, и, в-третьих, позволяет решать такие обратные задачи в их естественных дифференциальных постановках. Заметим, что к методам, которые позволяют решать обратные задачи непосредственно в рамках их естественных дифференциальных постановок, относятся, в частности, и методы, основанные на минимизации нелинейного функционала невязки (см., например, [18]), на которые можно с формальной точки зрения смотреть как на методы, являющиеся частными случаями описанных выше двойственных методов.

В качестве общей характеристики рассматриваемого подхода следует отметить, что двойственные алгоритмы являются одними из самых эффективных при решении оптимизационных задач с ограничениями [19, 20], в которых непосредственным образом используется классическая идея «снятия» ограничений, заложенная в принципе Лагранжа. Отметим также, что характерной особенностью любого алгоритма, основанного на теории двойственности, является параллельное решение сразу двух задач – исходной и двойственной к ней. При этом процесс решения двойственной задачи, которая всегда является задачей выпуклой оптимизации (с точностью до знака целевой функции), приводит одновременно и к конструктивному построению приближений к решению исходной задачи.

По-видимому, первым двойственным алгоритмом в теории оптимизации явился предложенный в 1958 г. так называемый алгоритм Удзавы [21] (см. также [19]), заключающийся в непосредственном решении на основе градиентного метода задачи, двойственной к исходной оптимизационной задаче, и быстро завоевавший популярность. Вопросы его обоснования рассматривались в [22,23]; при этом предполагалось, что: 1) исходные данные известны точно; 2) функция Лагранжа задачи должна иметь седловую точку. Вместе с тем, оба эти предположения являются весьма ограничительными, так как, во-первых, для практических задач характерным является именно наличие ошибок в исходных данных и, во-вторых, для таких задач, как правило, само доказательство существования или несуществования седловой точки представляет собой нелегкую математическую задачу. Формальное же применение алгоритма в общей ситуации может привести и приводит к стандартным эффектам неустойчивости приближенного решения [13,15,17].

В 1968 г. работы М. Хестенса и М. Пауэлла [24,25] дали толчок дальнейшему интенсивному развитию основанных на двойственности методов решения нелинейных оптимизационных задач с ограничениями. Многие подробности, связанные с двойственными методами решения нелинейных оптимизационных

задач математического программирования в конечномерных пространствах на основе идеологии [24,25], которые называют также методами множителей Лагранжа в условной оптимизации, а также соответствующую библиографию можно найти в [18,26]. Основной конструкцией этих методов служит так называемая модифицированная функция Лагранжа, представляющая собою сумму обычной классической функции Лагранжа и взятого с некоторым положительным весом штрафного слагаемого, которое может иметь различный вид. В силу нелинейности оптимизационной задачи двойственные методы, основанные на конструкциях модифицированной функции Лагранжа, носят локальный характер, и об их сходимости речь можно вести только при условии, что начальное приближение как по основной, так и по двойственной переменной в этом процессе находится достаточно близко к искомой оптимальной паре этих переменных [18,26]. Важнейшими условиями этой сходимости являются некоторые априорные предположения об исходных данных оптимизационных задач, выражающиеся в терминах искомой оптимальной точки  $x^*$  и по этой причине являющиеся практически непроверяемыми. Так, в случае «простейшей» конечномерной задачи математического программирования с ограничениями типа равенства

$$f(x) \rightarrow \min, g(x) = (g_1(x), \dots, g_m(x)) \neq 0, x \in R^n, \quad (1)$$

с дважды непрерывно дифференцируемыми функциями  $f, g_i, i=1 \dots, m$  одним из основных априорных условий локальной сходимости метода множителей Лагранжа в варианте монографии [26, стр. 111-120] является линейная независимость градиентов  $g'_1(x^*), \dots, g'_m(x^*)$ . Наряду с другими важнейшими априорными предположениями, на основе хорошо известной для этой конечномерной задачи теории необходимых и достаточных условий оптимальности второго порядка и классического свойства компактности ограниченного замкнутого множества в конечномерном пространстве (подробности см. на стр. 111-120 в [26]), это предположение приводит к следующему неравенству при некотором  $\varepsilon > 0$  и при некотором достаточно большом коэффициенте штрафа  $c > 0$ :

$$f(x^*) < f(x) + \langle \lambda^*, g(x) \rangle + c \|g(x)\|^2 = L_\varepsilon(x, \lambda^*), x \in S_\varepsilon(x^*), x \neq x^*, \quad (2)$$

где  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  – скалярное произведение,  $\lambda^* \in R^m$  – некоторый вектор,

$S_\varepsilon(x^*) = \{x \in R^m : |x - x^*| \leq \varepsilon\}$ ,  $L_\varepsilon(x, \lambda)$  – модифицированная функция Лагранжа. Последнее

неравенство говорит о том, что вектор  $\lambda^*$  является обобщенным вектором Куна-Таккера в смысле работы [16] и что модифицированная функция Лагранжа, взятая в точке  $\lambda$ , совпадающей с обобщенным вектором Куна-Таккера, принимает строго минимальное значение в искомой оптимальной точке  $x^*$ . Это обстоятельство является определяющим, и именно оно и лежит в основе метода множителей Лагранжа в теории конечномерной оптимизации, предложенного впервые в [24,25] и развитого в дальнейшем для конечномерных оптимизационных задач в огромном числе различных публикаций (см., например, библиографию в [18,26,27]).

К сожалению, в задачах бесконечномерной оптимизации, к классу которых принадлежат и рассматриваемые здесь нелинейные обратные задачи поиска минимальных по норме решений, описанная выше ситуация принципиально меняется. Связано это прежде всего с тем, что в бесконечномерных пространствах, и в частности, в бесконечномерных гильбертовых пространствах, несправедливы многие важнейшие факты, лежащие в основе схемы, описанной выше для случая конечномерных задач математического программирования. Например, в бесконечномерном гильбертовом пространстве ограниченное замкнутое множество не обязательно является компактом. Другая неприятность, приводящая к принципиальным затруднениям в обосновании приведенной выше «конечномерной» схемы, связана с отсутствием адекватной теории условий оптимальности второго порядка для задач бесконечномерной оптимизации, аналогичных (1):

$$f(x) \rightarrow \min, g(x) = 0, x \in X, \quad (3)$$

где  $X, H$  – гильбертовы пространства,  $f: X \rightarrow R$  – некоторый функционал,  $g: X \rightarrow H$  – некоторый оператор. Оказывается, однако, что, несмотря на отсутствие этих важных обстоятельств в ситуации бесконечномерных задач (3), их свойство, выражаемое неравенством

$$f(x^*) < f(x) + \langle \lambda^*, g(x) \rangle + c \|g(x)\|^2 = L_\varepsilon(x, \lambda^*), x \in S_\varepsilon(x^*), x \neq x^*, \quad (4)$$

(где  $\lambda^* \in H$  – некоторый элемент,  $S_\varepsilon(x^*) = \{x \in X : |x - x^*| \leq \varepsilon\}$ ), аналогичным неравенству (2) для конечномерного случая, является достаточно характерным. И по этой причине именно оно и может служить тем априорным предположением, на котором основывается «бесконечномерная» двойственная схема [14,16]. Характерность этого свойства обусловлена тем фактом (подробности см. в [16]), что для параметрической задачи

$$f(x) \rightarrow \min, g(x) = h, x \in X \quad (5)$$

(очевидно, задача (3) входит в семейство задач (5) при  $h=0$ ) в любой окрестности любой точки  $h$ , для которой эта задача разрешима, обязательно имеются другие точки  $h'$ , такие, что для соответствующих задач (5) при  $h=h'$  выполняется неравенство

$$f(x^{h^*}) < f(x) + \langle \lambda^*, g(x) - h \rangle + c \|g(x) - h\|^2, x \in S_c(x^{h^*}), x \neq x^{h^*}, \quad (6)$$

где  $x^{h^*}$  – решение задачи (5) при  $h=h'$ . Можно также утверждать, что таким же характерным свойством (подробности см. в [16]) для задачи (3) является выполнение неравенства

$$f(x^*) < f(x) + \langle \lambda^*, g(x) \rangle + c \|g(x)\|^2, x \in S_c(x^*), x \neq x^*, \quad (7)$$

отличающееся от (4) только типом штрафного слагаемого. Именно по этой причине ниже в статье, как и в [14,16], используется комбинированное штрафное слагаемое вида  $c(\|g(x)\| + \|g(x)\|^2)$ . Важнейшими особенностями «нелинейного» двойственного алгоритма [14,16] конструирования минимизирующей последовательности в оптимизационной бесконечномерной задаче являются учет неточного задания исходных данных и применение для решения двойственной задачи процедуры регуляризации по Тихонову. Регуляризация при максимизации двойственной вогнутой функции является необходимой составляющей двойственного алгоритма [14,16], так как неустойчивость при решении бесконечномерных оптимизационных задач, в том числе и выпуклых, на основе стандартных градиентных процедур является хорошо известным фактом оптимизационной теории [19]. Подчеркнем, что в известных нам публикациях [24-25] (см. также библиографию этих работ), посвященных «конечномерному» методу множителей Лагранжа, рассматривались лишь задачи с точными исходными данными и процедуры какой-либо регуляризации для них не применялись.

#### ПОЛЕ В ОДНОМЕРНО НЕОДНОРОДНОЙ СРЕДЕ. СВЕДЕНИЕ УРАВНЕНИЙ МАКСВЕЛЛА К ИНТЕГРАЛЬНЫМ УРАВНЕНИЯМ

В среде с неоднородным распределением комплексной диэлектрической проницаемости  $\varepsilon(\mathbf{r}) = \varepsilon_i + \varepsilon_1(\mathbf{r})$  в весьма общем случае неоднородности  $\varepsilon_1(\mathbf{r})$  в многослойной среде со значениями  $\varepsilon_i$  в  $i$ -м слое распределение комплексных амплитуд векторов гармонического  $[\sim \exp(-i\omega t)]$  электрического  $\mathbf{E}$  и магнитного  $\mathbf{H}$  полей определяется комплексной амплитудой плотности электрического тока источника  $\mathbf{j}$  из уравнений Максвелла:

$$\nabla \times \mathbf{E} = \frac{i\omega}{c} \mathbf{H}, \quad (8)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} + i \frac{\omega}{c} \varepsilon \mathbf{E} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j}, \quad (9)$$

где  $c$  – скорость света,  $\omega$  – циклическая частота. Вклад неоднородности может быть выделен в качестве эффективного источника  $\mathbf{j}_{eff} = -\frac{i\omega}{4\pi} \varepsilon_1(z) \mathbf{E}$  путем перенесения этого вклада в правую часть (9):

$$\nabla \times \mathbf{H} + i \frac{\omega}{c} \varepsilon_i \mathbf{E} = -i \frac{\omega}{c} \varepsilon_1 \mathbf{E} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} = \frac{4\pi}{c} (\mathbf{j}_{eff} + \mathbf{j}). \quad (10)$$

Далее задача может быть сведена к интегральному уравнению [28] с использованием функций Грина для многослойной среды, которые получаются путем разложения поля источника по плоским волнам с использованием формализма входных импедансов:

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) + \mathbf{E}_1(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0(\mathbf{r}) - \frac{i\omega}{4\pi} \int_V \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \varepsilon_1(\mathbf{r}') \mathbf{E}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}', \quad (11)$$

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \int_V \tilde{\mathbf{G}}(\mathbf{r}', \mathbf{r}) \mathbf{j}(\mathbf{r}') d\mathbf{r}'.$$

При решении прямой задачи вычисления поля в среде уравнение (11) является уравнением Фредгольма 2-го рода, а при решении соответствующей обратной задачи рассеяния для определения трехмерного распределения неоднородности диэлектрической проницаемости (задачи томографии), рассмотренной в [28] – нелинейным интегральным уравнением 1-го рода. Одной из трудно преодолимых проблем решения такой трехмерной задачи является расчет поля в среде на основе ряда Неймана или методом моментов, в силу чего обычно приходится ограничиваться при решении борновским

приближением (заменяя в интеграле полное поле  $\mathbf{E}$  на зондирующее поле  $\mathbf{E}_0$ ).

Для случая одномерно неоднородной среды  $\varepsilon(z) = \varepsilon_i + \varepsilon_1(z)$  решение аналогичных прямой и обратной задач существенно упрощается. Рассмотрим такую многослойную среду в полупространстве  $z \geq 0$ , зондируемую плоской электромагнитной волной  $\mathbf{E}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{E}_0 \exp(ik_x x + ik_y y + ik_{1z} z)$ ,

$k_{1z} = \sqrt{k_1^2 - k_x^2 - k_y^2} = \sqrt{k_1^2 - k_x^2}$ , падающей на границу полупространства из вакуума ( $k_1^2 = (\frac{\omega}{c})^2$ ). Пусть

для определенности волновой вектор этой волны лежит в плоскости  $xy$ , так что поле падающей волны на границе может быть представлено как

$$\mathbf{E}_0(z_1) = \mathbf{E}_0^\perp(z_1) + \mathbf{E}_0^\parallel(z_1) = E_0 [\cos \alpha \mathbf{y}_0 + \sin \alpha (\frac{k_{z,1}}{k_1} \mathbf{x}_0 - \frac{k_x}{k_1} \mathbf{z}_0)], \quad (12)$$

где  $\alpha$  - угол, определяющий соотношение между компонентами горизонтальной и вертикальной поляризации, так что  $\langle |\mathbf{E}_0(z_1)|^2 \rangle_\alpha = |E_0|^2$ . Тогда зондирующее поле в  $l$ -м слое многослойной среды  $\mathbf{E}_0(z')$  и отраженное структурой (без учета непрерывной неоднородности) поле  $\mathbf{E}_0^R(z_1)$  на ее границе могут быть вычислены, используя формализм метода входных импедансов [28]:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_0(z') &= \mathbf{E}_0^\perp + \mathbf{E}_0^\parallel = E_0 [\cos \alpha G^\perp(z_1, z') \mathbf{y}_0 + \sin \alpha G^\parallel(z_1, z') (\frac{k_{z,l}}{k_l} \mathbf{x}_0 - \frac{k_x}{k_l} \mathbf{z}_0)] = \\ &= E_0^\perp(z') \cos \alpha \mathbf{y}_0 + E_0^\parallel(z') \sin \alpha (\frac{k_z}{k_l} \mathbf{x}_0 - \frac{k_x}{k_l} \mathbf{z}_0), \end{aligned} \quad (13)$$

$$\mathbf{E}_0^R(z_1) = \mathbf{E}_0^{R,\perp}(z_1) + \mathbf{E}_0^{R,\parallel}(z_1) = E_0 [R_{1,N+1}^\perp \cos \alpha \mathbf{y}_0 + \sin \alpha R_{1,N+1}^\parallel (-\frac{k_{z,1}}{k_1} \mathbf{x}_0 - \frac{k_x}{k_1} \mathbf{z}_0)] \quad (14)$$

$$G^{\parallel,\perp}(z_1, z') = T_{1,l}^{\parallel,\perp} (e^{ik_{z,l}(z'-z_1)} + \frac{z_{in}^{(l)} - z_l}{z_{in}^{(l)} + z_l} e^{-2ik_{z,l}d_l - ik_{z,l}(z'-z_1)}),$$

$$R_{1,N+1}^{\parallel,\perp} = \frac{z_{in}^{(2)} - z_1}{z_{in}^{(2)} + z_1}, \quad T_{1,l}^\perp = \prod_{i=2}^l \frac{z_{in}^{(i)} + z_i}{z_{in}^{(i)} + z_{i-1}} e^{ik_{z,i}d_i}, \quad T_{1,l}^\parallel = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_l}} T_{1,l}^H = \sqrt{\frac{\varepsilon_1}{\varepsilon_l}} \prod_{i=2}^l \frac{z_{in}^{(i)} + z_i}{z_{in}^{(i)} + z_{i-1}} e^{ik_{z,i}d_i},$$

$$z_{in}^{(k)} = \frac{z_{in}^{(k+1)} - i z_k \tan(k_{z,k} d_k)}{z_k - i z_{in}^{(k+1)} \tan(k_{z,k} d_k)} z_k, \quad z_{in}^{(N+1)} = z_{N+1}, \quad z_k^\parallel = \frac{k_{z,k}}{k_0 \varepsilon_k}, \quad z_k^\perp = \frac{k_0}{k_{z,k}}, \quad k_0 = \frac{\omega}{c}, \quad d_{N+1} = 0.$$

Полное поле от среды создается суммой поля, отраженного основной структурой, и рассеянного поля, которое представляется одномерным аналогом формулы (11):

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(z) &= \mathbf{E}_0^R(z) + \mathbf{E}_1(z) = \mathbf{E}_0^R(z) + \frac{i}{2\varepsilon} \int_{z'} \varepsilon_1(z') \frac{\exp\{\pm ik_z(z-z')\}}{k_z} \\ &\times \left\{ E_x(z') \left[ k_z^2 \mathbf{x}_0 \mp k_x k_z \mathbf{z}_0 \pm k_x k_z \frac{\varepsilon_1(z)}{\varepsilon + \varepsilon_1(z)} \mathbf{z}_0 \right] \right. \\ &+ E_y(z') [k^2 \mathbf{y}_0] \\ &+ E_z(z') \left[ \mp k_x k_z \mathbf{x}_0 + k_x^2 \mathbf{z}_0 - k_x^2 \frac{\varepsilon_1(z)}{\varepsilon + \varepsilon_1(z)} \mathbf{z}_0 \right] \left. \right\} dz' - \\ &- \frac{\varepsilon_1(z)}{\varepsilon + \varepsilon_1(z)} E_{0z}(z) \mathbf{z}_0 \end{aligned} \quad (15)$$

Это уравнение может решаться итерационно, начиная с борновского приближения (заменяя полное поле на зондирующее под интегралом), для которого получаем сумму отраженного и рассеянного полей на границе структуры:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(z_1) = \mathbf{E}_0^R(z_1) + \mathbf{E}_1(z_1) = E_0 [\cos \alpha R_{1,N+1}^\perp \mathbf{y}_0 + \sin \alpha R_{1,N+1}^\parallel (-\frac{k_{z1}}{k_1} \mathbf{x}_0 - \frac{k_x}{k_1} \mathbf{z}_0)] + \\ + E_0 \cos \alpha \int_{z'} \varepsilon_1(z') \frac{i k_0^2}{2 k_{z_i}} \mathbf{G}^\perp(z_1, z') \mathbf{G}^\perp(z', z_1) dz' \mathbf{y}_0 - \\ - E_0 \sin \alpha \int_{z'} \varepsilon_1(z') \frac{i}{2 \varepsilon_i} (\frac{k_{z_i}^2 - k_x^2}{k_{z_i}}) \mathbf{G}^\parallel(z_1, z') \mathbf{G}^\parallel(z', z_1) dz' (-\frac{k_{z1}}{k_1} \mathbf{x}_0 - \frac{k_x}{k_1} \mathbf{z}_0), \end{aligned} \quad (16)$$

$$\mathbf{G}^{\parallel, \perp}(z', z_1) = \frac{T_{l,1}^{\parallel, \perp}}{1 - R_{l,1}^{\parallel, \perp} R_{l,N+1}^{\parallel, \perp}} (e^{-ik_{z,l}(z_{l-1}-z')} + R_{l,N+1}^{\parallel, \perp} e^{-ik_{z,l}(z'-z_{l-1}-2d_l)}),$$

$$R_{l,1}^{\parallel, \perp} = \frac{z_{in}^{(l-1)} - z_l}{z_{in}^{(l-1)} + z_l}, T_{l,1}^\perp = \prod_{i=1}^{l-1} \frac{z_{in}^{(i)} + z_i}{z_{in}^{(i)} + z_{i+1}} e^{ik_{z,i} d_i}, T_{l,1}^\parallel = \sqrt{\frac{\varepsilon_l}{\varepsilon_1}} \prod_{i=1}^{l-1} \frac{z_{in}^{(i)} + z_i}{z_{in}^{(i)} + z_{i+1}} e^{ik_{z,i} d_i}$$

$$z_{in}^{(l)} = \frac{z_{in}^{(l-1)} - i z_l \tan(k_{z,l} d_l)}{z_l - i z_{in}^{(l-1)} \tan(k_{z,l} d_l)} z_l, z_{in}^{(1)} = z_1, z_l^\parallel = \frac{k_{z,l}}{k_0 \varepsilon_l}, z_l^\perp = \frac{k_0}{k_{z,l}}, d_1 = 0.$$

Интегральное уравнение (16) может служить основой для решения обратной задачи восстановления профиля неоднородности  $\varepsilon_1(z)$  по данным спектральных или угловых измерений рассеянного на неоднородности поля. Известно, однако, что в оптическом и более высокочастотных диапазонах измерения комплексных амплитуд поля затруднены, и там чаще используются измерения коэффициента отражения сигнала по мощности. Из уравнения (16) для неполяризованного излучения имеем:

$$\begin{aligned} \langle |\mathbf{E}(z_1)|^2 \rangle = \frac{1}{2} [|\mathbf{E}_0^{\perp R}(z_1)|^2 + |\mathbf{E}_0^{\parallel R}(z_1)|^2 + \\ + |\mathbf{E}_1^\perp(z_1)|^2 + |\mathbf{E}_1^\parallel(z_1)|^2 + \\ + 2 \operatorname{Re}(\mathbf{E}_0^{\perp R*}(z_1) \mathbf{E}_1^\perp(z_1)) + 2 \operatorname{Re}(\mathbf{E}_0^{\parallel R*}(z_1) \mathbf{E}_1^\parallel(z_1))], \end{aligned} \quad (17)$$

где  $\langle \rangle$  – усреднение по углу  $\alpha$ . Из (17) получаем полный коэффициент отражения структуры:

$$|R|^2 = \frac{\langle |\mathbf{E}|^2 \rangle}{\langle |\mathbf{E}_0|^2 \rangle} = |R_0|^2 + |R_1|^2 + \frac{2}{|E_0|^2} \langle \operatorname{Re}[(\mathbf{E}_0^{\perp R*}(z_1) \mathbf{E}_1^\perp(z_1)) + (\mathbf{E}_0^{\parallel R*}(z_1) \mathbf{E}_1^\parallel(z_1))] \rangle, \quad (18)$$

где  $|R_0|^2 = \frac{1}{2} (|R_{1,N+1}^\perp|^2 + |R_{1,N+1}^\parallel|^2)$ , а звездочкой обозначено комплексное сопряжение. Для решения обратной задачи удобно использовать разность наблюдаемого коэффициента отражения и его значения для структуры без неоднородности:

$$\Delta r = |R|^2 - |R_0|^2 = \frac{2}{|E_0|^2} \langle \operatorname{Re}[(\mathbf{E}_0^{\perp R*}(z_1) \mathbf{E}_1^\perp(z_1)) + (\mathbf{E}_0^{\parallel R*}(z_1) \mathbf{E}_1^\parallel(z_1))] \rangle + |R_1|^2, \quad (19)$$

для которого имеем

$$\Delta r = |R_1|^2 + \operatorname{Re} \left\{ \int_{z'} \varepsilon_1(z') \frac{i}{\varepsilon} \left[ \frac{k^2}{k_z} R_{1,N+1}^{\perp*} \mathbf{G}^\perp(z_1, z') \mathbf{G}^\perp(z', z_1) - \frac{k_z^2 - k_x^2}{k_z} R_{1,N+1}^{\parallel*} \mathbf{G}^\parallel(z_1, z') \mathbf{G}^\parallel(z', z_1) \right] dz' \right\}. \quad (20)$$

Неоднородности профиля приводят к уменьшению максимума коэффициента отражения структуры, поэтому значения этой разности вблизи этого максимума отрицательны. Из уравнения (20) видно, что потеря фазы в коэффициенте отражения по мощности не позволяет определить неоднородность комплексной диэлектрической проницаемости. Однако, если эта неоднородность чисто действительная, уравнение (20) может быть в принципе решено. При этом первое (квадратичное) слагаемое в рамках борновского приближения мало, что позволяет в первом приближении положить его равным нулю (или, если решение ищется как отклонение от первого приближения, используя его значение, вычисленное для этого первого приближения), а потом уточнять решение в последующих итерациях.

*Задача геомагнитного зондирования.* Для УНЧ-СНЧ диапазонов радиоволн на земной поверхности выполняются граничные условия Леонтовича, в силу чего можно считать волну распространяющейся вглубь по нормали к земной поверхности  $z = 0$ , а земную кору можно считать проводником с чисто мнимой комплексной диэлектрической проницаемостью  $\varepsilon = \varepsilon' + i\varepsilon'' \approx i4\pi\sigma/\omega$ , которую определяет профиль проводимости  $\sigma = \sigma(z)$ . Для определенности будем считать, что поле имеет компоненты  $E_y, H_x$ , и в дальнейшем опускаем их индексы.

В этом случае уравнения Максвелла предельно упрощаются:

$$\frac{d^2 E}{dz^2} + i \frac{4\pi\sigma(z)\omega}{c^2} E = 0, \quad H = -i \frac{c}{\omega} \frac{dE}{dz}, \quad z_n \leq z \leq 0, \quad (21)$$

где  $z_n < 0$  – нижняя граница интервала анализа, в котором заведомо находится область искомой неоднородности профиля проводимости, а измеренными считаются электрические и магнитные поля на поверхности  $z = 0$  в диапазоне частот  $[\omega_1, \omega_2]$ :

$$E(z = 0, \omega) = E_0(\omega), \quad H(z = 0, \omega) = H_0(\omega), \quad \omega \in [\omega_1, \omega_2]. \quad (22)$$

Следует отметить, что измерения полей не являются независимыми: так, при фиксированном электрическом поле соответствующее спектральное распределение магнитного поля будет определяться профилем проводимости среды. Поэтому в геомагнитном зондировании измеряемой величиной зачастую является отношение полей (комплексный импеданс).

Из (21) легко получить эквивалентное интегральное уравнение [4]:

$$H(\omega, z) = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \int_{-\infty}^z \left[ \int_{-\infty}^{z'} H(\omega, z'') dz'' \right] \sigma(z') dz'. \quad (23)$$

Если в (23) положить  $z = 0$ , получаем интегральное уравнение, связывающее измеренную на поверхности компоненту поля  $H_0 = H(\omega, 0)$  и профиль  $\sigma(z)$ :

$$H_0(\omega) = \frac{4\pi i \omega}{c^2} \int_{-\infty}^0 \left[ \int_{-\infty}^{z'} H(\omega, z'') dz'' \right] \sigma(z') dz'. \quad (24)$$

Аналогичные соотношения можно получить и для электрического поля.

Ядром уравнения (24) служит интеграл от неизвестного распределения поля  $H(\omega, z)$ , и задача определения профиля  $\sigma(z)$  является нелинейной. Анализ начинается с естественного выбора однородного профиля проводимости  $\sigma(z) = \sigma_0 = const$  в качестве первого приближения. Если на поверхности такой однородной среды источником создается электрическое поле с распределением по частоте  $E_0(\omega) = E_0^0(\omega)$ , то ему соответствует вполне определенная частотная зависимость магнитного поля  $H_0(\omega) = H_0^0(\omega)$ , а соответствующие распределения полей в среде выражаются как:

$$E^0(\omega, z) = E_0^0(\omega) \exp\left(\frac{z}{\delta} - i \frac{z}{\delta}\right), \quad (25)$$

$$H^0(\omega, z) = \frac{c(i-1)}{\omega\delta} E_0^0(\omega) \left(\frac{z}{\delta} - i \frac{z}{\delta}\right) = H_0^0(\omega) \exp\left(\frac{z}{\delta} - i \frac{z}{\delta}\right), \quad (26)$$

где  $\delta = \frac{c}{\sqrt{2\pi\omega\sigma_0}}$  толщина скин-слоя. Тогда отклонение  $\Delta H_0(\omega) = H_0(\omega) - H_0^0(\omega)$  от реально

измеренной зависимости свидетельствует о неоднородности подповерхностного профиля проводимости. Таким образом, в первом приближении, которое по существу является борновским, в ядре интегрального уравнения (24) используется  $H^0(\omega, z)$ . В качестве  $\sigma_0$  естественно выбрать приповерхностное значение проводимости, которое полагается известным. Такой подход позволяет свести задачу к решению интегрального уравнения Фредгольма 1-го рода и решать их итерационным методом относительно  $\sigma(z)$ :

$$\Delta H_0(\omega) = \int_{-\infty}^0 K^i(\omega, z') \Delta\sigma_{i+1}(z') dz', \quad (27)$$

$$K^i(\omega, z') = -\frac{4\pi i \omega}{c^2} \int_{-\infty}^{z'} H^i(z'', \omega) dz'',$$

где ядро  $K$  пересчитывается на  $(i + 1)$ -м шаге итерационного процесса по восстановленному профилю  $\sigma_i(z)$ . Регуляризованное решение задачи (27) получается на каждом шаге с использованием алгоритма метода обобщенной невязки, разработанным в [28] для решения на классе комплекснозначных функций в гильбертовом пространстве  $W_2^1$  (пространство Соболева). В этом методе невязка минимизируется до уровня погрешности данных  $\delta H$ , вычисляемой в интегральной метрике  $L_2[\omega_1, \omega_2]$ .

Программа, реализующая описанный алгоритм, была протестирована в численном моделировании по замкнутой схеме: задавался неоднородный по глубине профиль проводимости; по этому профилю рассчитывались частотные зависимости поверхностных значений электрического и магнитного полей; на эти значения набрасывалась нормально распределенная случайная погрешность с заданным среднеквадратичным отклонением, моделирующая ошибку измерений; решалась обратная задача, и результат решения сравнивался с исходным профилем  $\sigma(z)$ . Выбор условных единиц измерения связан с реально имеющимся произволом такого выбора.

Интервал частот «измерений» выбирался из естественных физических соображений таким образом, чтобы толщина скин-слоя на минимальной частоте была больше слоя, в котором ищутся неоднородности проводимости, а на максимальной частоте зондировался бы тонкий поверхностный слой, в котором проводимость не отличается от поверхностной. В примере, представленном на рис.1, где восстанавливается относительно слабая (20% от невозмущенного уровня) неоднородность проводимости на глубине 1 км, при изменении частоты от 3 до 200 Гц толщина скин-слоя изменяется от 3 до 0,35 км.

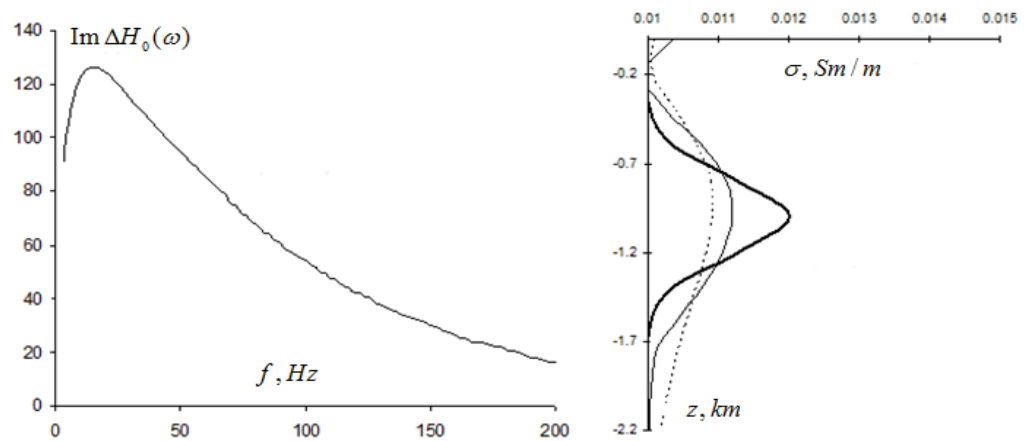


Рис. 1. Слева: исходные «данные измерений» при среднеквадратичном значении случайной погрешности  $\delta H_0 = 1$  в зависимости от частоты  $f = \omega/2\pi$  (в условных единицах); справа: жирная сплошная кривая – исходный профиль проводимости, точки – результат восстановления (1-я итерация), сплошная – результат восстановления (3-я итерация).

«Данные измерений»  $\Delta H_0(\omega)$  рассчитывались для неоднородного профиля, показанного рис.1, при значении  $\sigma_0 = 0,01$  См/м и использовались в уравнении (9) для решения задачи при среднеквадратичном уровне моделируемой погрешности измерения мнимой части комплексной амплитуды  $\delta H^1_0 = 1$ . Качество решения возрастает в процессе итераций, однако при данном уровне погрешности результат практически не улучшается после 3-й итерации. Выполненный анализ показал, что для сильных неоднородностей проводимости, которые чаще всего встречаются в реальных условиях, рассмотренный итерационный алгоритм приводит к существенным погрешностям восстановления. Это объясняется тем, что ядро, используемое в первом приближении, очень сильно отклоняется от реального, и, как следствие, результат решения на значительной части интервала восстановления может не приближаться, а удаляться от точного решения, что приводит к раскату неустойчивости в последующих итерациях.

Такая неустойчивость решения требует применения альтернативных методов, и в данной работе для этой цели исследован алгоритм метода двойственной регуляризации.

Математическая постановка задачи осуществлялась в следующих предположениях:

1) Область искомой неоднородности профиля проводимости  $\sigma(z)$  заведомо находится в некотором конечном промежутке  $z_n < z < 0$ , где  $z_n < 0$  – нижняя граница интервала анализа. Поэтому при  $z < z_n$  проводимость  $\sigma(z)$  считается величиной постоянной.

2) Используется естественное предположение, что при  $z < z_n$  величины полей  $E$  и  $H$  ограничены при любой фиксированной частоте  $\omega$ .



Это позволяет использовать классы функций, задаваемых лишь на конечном промежутке  $[z_n, 0]$ , что облегчает обоснование сходимости метода регуляризации. Отметим также, что изучение исходной обратной задачи УНЧ зондирования на бесконечном полуинтервале  $(-\infty, 0]$  приводит формально к иной постановке оптимизационной задачи, в которой все равно приходится определять некий конечный интервал, за пределами которого измерения уже становятся неинформативными. В силу названных причин такая постановка в данной работе не рассматривается.

В принципе, возможны два варианта постановки обратной задачи УНЧ зондирования.

В первом варианте мы считаем значения полей  $E(z = z_n, \omega)$ ,  $H(z = z_n, \omega)$  на нижней границе  $z_n$  дополнительными вспомогательными неизвестными, подлежащими нахождению наряду с проводимостью  $\sigma(z)$ . Существенно, что при введении вспомогательных дополнительных неизвестных рассматриваемая задача оказывается линейной по этим вспомогательным переменным. Алгоритм, реализующий такой подход, описан нами в [7].

Во втором варианте постановки задачи мы считаем, что все неоднородности искомого профиля проводимости локализуются внутри промежутка восстановления  $[z_n, 0]$ , то есть за пределами этого промежутка проводимость является постоянной и равной поверхностной проводимости  $\sigma_n = \sigma(z = z_n) = \sigma_0$ , которая доступна измерению. Поскольку численный эксперимент проводился именно для такого варианта постановки задачи, то все дальнейшее изложение следует данному варианту. Итак, на интервале  $z \leq z_n$  предполагаем, что  $\sigma(z) = \sigma_n$ . Решение уравнения (21) на этом интервале и граничное условие при  $z = z_n$  дают формулы (25) - (26), поэтому обратную задачу геомагнитного зондирования в комплексной форме на промежутке  $[z_n, 0]$  можно поставить следующим образом: подобрать профиль проводимости  $\sigma(z)$ ,  $z \in [z_n, 0]$  так, чтобы при любой частоте  $\omega \in [\omega_1, \omega_2]$  решения  $E[\sigma, \omega](z)$  и  $H[\sigma, \omega](z)$  системы (21) с краевыми условиями

$$H(z = z_n) = (i - 1)\sqrt{2\pi\sigma_n / \omega} E(z = z_n), \quad (28)$$

$$E[\sigma, \omega](z = 0) = E_0(\omega) \quad (29)$$

удовлетворяли условию

$$H[\sigma, \omega](z = 0) = H_0(\omega). \quad (30)$$

Переформулируем эту задачу в вещественной форме, введя новые обозначения:

$$x_1 = \text{Re } E, \quad x_2 = \text{Im } E, \quad x_3 = \text{Re } H, \quad x_4 = \text{Im } H, \quad x_{10} = \text{Re } E_0, \quad x_{20} = \text{Im } E_0, \quad x_{30} = \text{Re } H_0, \quad x_{40} = \text{Im } H_0.$$

Тогда система уравнений (21) примет вид:

$$\begin{cases} \frac{dx_1}{dz} = -\frac{\omega}{c} x_4, & \frac{dx_3}{dz} = -\frac{4\pi\sigma(z)}{c} x_1, \\ \frac{dx_2}{dz} = \frac{\omega}{c} x_3, & \frac{dx_4}{dz} = -\frac{4\pi\sigma(z)}{c} x_2, \end{cases} \quad (31)$$

или

$$\frac{dx}{dz} = A(\omega, \sigma(z))x, \quad (32)$$

$$x = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ x_4 \end{pmatrix}, \quad A(\omega, \sigma(z)) = \frac{1}{c} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\omega \\ 0 & 0 & \omega & 0 \\ -4\pi\sigma(z) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -4\pi\sigma(z) & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Соответственно, обратная задача геомагнитного зондирования в вещественной форме на промежутке  $[z_n, 0]$  примет следующий вид: подобрать профиль проводимости  $\sigma(z)$ ,  $z \in [z_n, 0]$  так, чтобы при любой частоте  $\omega \in [\omega_1, \omega_2]$  решения  $x_1[\sigma, \omega](z)$ ,  $x_2[\sigma, \omega](z)$ ,  $x_3[\sigma, \omega](z)$  и  $x_4[\sigma, \omega](z)$  системы (31) с краевыми условиями

$$\begin{cases} x_3[\sigma, \omega](z = z_n) = \sqrt{2\pi\sigma_n / \omega} \cdot (-x_1[\sigma, \omega](z = z_n) - x_2[\sigma, \omega](z = z_n)) \\ x_4[\sigma, \omega](z = z_n) = \sqrt{2\pi\sigma_n / \omega} \cdot (x_1[\sigma, \omega](z = z_n) - x_2[\sigma, \omega](z = z_n)) \end{cases} \quad (33)$$

$$\begin{cases} x_1[\sigma, \omega](z=0) = x_{10}(\omega), \\ x_2[\sigma, \omega](z=0) = x_{20}(\omega) \end{cases}$$

удовлетворяли условиям

$$\begin{cases} x_3[\sigma, \omega](z=0) = x_{30}(\omega), \\ x_4[\sigma, \omega](z=0) = x_{40}(\omega) \end{cases} \quad (34)$$

Эту задачу можно сформулировать в виде эквивалентной задачи минимизации: минимизировать функционал

$$I_0(\sigma) \equiv \|\sigma\|^2 = \int_{z_n}^0 \sigma^2(z) dz \rightarrow \min_{\sigma} \quad (35)$$

по всем тем функциям  $\sigma(z)$  из множества

$D \equiv \{\sigma \in L_2[z_n, 0] : 0 \leq \sigma(z) \leq M\}$  (где  $M$  - достаточно большое положительное число), которые для любых  $\omega \in [\omega_1, \omega_2]$  удовлетворяют условиям (34), где  $x_3[\sigma, \omega](z)$  и  $x_4[\sigma, \omega](z)$  - решения системы (31) с краевыми условиями (33).

Можно доказать, что сформулированная задача минимизации имеет решение  $\sigma_*(z)$ . В то же время, нельзя гарантировать единственность оптимального элемента из-за нелинейности в ограничении этой задачи (нелинейность типа произведения управления на траекторию).

В случае линейных обратных задач, которые сводятся к эквивалентным линейно выпуклым оптимизационным задачам, для их решения на основе двойственной регуляризации достаточно конструкции классической функции Лагранжа. В нелинейных случаях необходимо использовать конструкции модифицированных функций Лагранжа, то есть обычных функций Лагранжа с добавленными к ним штрафными слагаемыми того или иного вида. Рассмотрим здесь один из возможных случаев модифицированной функции Лагранжа сформулированной задачи:

$$\begin{aligned} L_{\mu}(\sigma, \omega) = & \|\sigma\|^2 + \int_{\omega_1}^{\omega_2} [\lambda_1(\omega)(x_3[\sigma, \omega](z=0) - x_{30}(\omega)) + \lambda_2(\omega)(x_4[\sigma, \omega](z=0) - x_{40}(\omega))] d\omega \\ & + \mu \left\{ \left( \int_{\omega_1}^{\omega_2} |x_3[\sigma, \omega](z=0) - x_{30}(\omega)|^2 d\omega \right)^{1/2} + \left( \int_{\omega_1}^{\omega_2} |x_4[\sigma, \omega](z=0) - x_{40}(\omega)|^2 d\omega \right)^{1/2} \right. \\ & \left. + \int_{\omega_1}^{\omega_2} |x_3[\sigma, \omega](z=0) - x_{30}(\omega)|^2 d\omega + \int_{\omega_1}^{\omega_2} |x_4[\sigma, \omega](z=0) - x_{40}(\omega)|^2 d\omega \right\} \end{aligned} \quad (36)$$

или

$$\begin{aligned} L_{\mu}(\sigma, \omega) = & \|\sigma\|^2 + (\lambda_1(\omega), (x_3[\sigma, \omega](z=0) - x_{30}(\omega))) + (\lambda_2(\omega), (x_4[\sigma, \omega](z=0) - x_{40}(\omega))) \\ & + \mu \{ \|x_3[\sigma, \omega](z=0) - x_{30}(\omega)\| + \|x_4[\sigma, \omega](z=0) - x_{40}(\omega)\| \\ & + \|x_3[\sigma, \omega](z=0) - x_{30}(\omega)\|^2 + \|x_4[\sigma, \omega](z=0) - x_{40}(\omega)\|^2 \} \end{aligned}$$

где  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2)$ ,  $\mu > 0$ . Смысл параметра  $\mu$  состоит в том, что при достаточно большом его значении для любых  $\lambda(\omega) = (\lambda_1(\omega), \lambda_2(\omega))$  гарантированно существует минимум модифицированной функции Лагранжа  $L_{\mu}(\sigma, \lambda)$  по  $\sigma(z)$ . Правда, элемент, на котором достигается минимум, вообще говоря, не единственный.

В соответствии с результатами [14,15] запишем регуляризованную по Тихонову с параметром регуляризации  $\alpha$  модифицированную двойственную задачу, представляющую собой задачу максимизации вогнутого функционала на гильбертовом пространстве  $L_2^2(\omega_1, \omega_2) = L_2(\omega_1, \omega_2) \times L_2(\omega_1, \omega_2)$ :

$$V_{\mu}^{\alpha}(\lambda) = V_{\mu}(\lambda) - \alpha \|\lambda\|^2 \equiv \min_{\sigma \in D} L_{\mu}(\sigma, \lambda) - \alpha \|\lambda\|^2 \rightarrow \max_{\|\lambda\| \leq \mu} \quad (37)$$

где  $\lambda = (\lambda_1, \lambda_2) \in L_2^2(\omega_1, \omega_2)$ , максимум берётся по  $\lambda$  из множества  $\Lambda_{\mu} \equiv \{\lambda \in L_2^2(\omega_1, \omega_2) : \|\lambda\| \leq \mu\}$ .

Алгоритм, реализующий решение этой задачи, описан нами в [7], и использован здесь в программной реализации для решения поставленной обратной задачи. Его исследования в численном моделировании по замкнутой схеме выполнялись аналогично описанной выше процедуре для метода итерационного решения интегрального уравнения. На рис.2. представлен пример восстановления сильной неоднородности при том же уровне невозмущенной проводимости  $\sigma_0 = 0.01$  См/м, что и на рис.1.

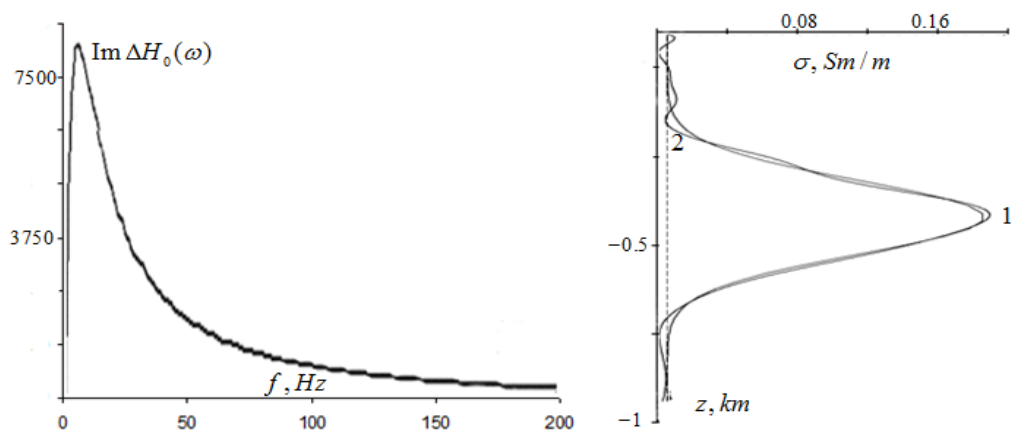


Рис. 2. Слева: исходные «данные измерений» при среднеквадратичном значении случайной погрешности  $\delta H_0 = 1$  в зависимости от частоты; справа: 1 – исходный профиль проводимости, 2 – результат восстановления.

Можно видеть, что результат восстановления практически безупречен.

На рис. 3 представлен пример неоднородности в форме меандра, характерной для слоев земной коры.

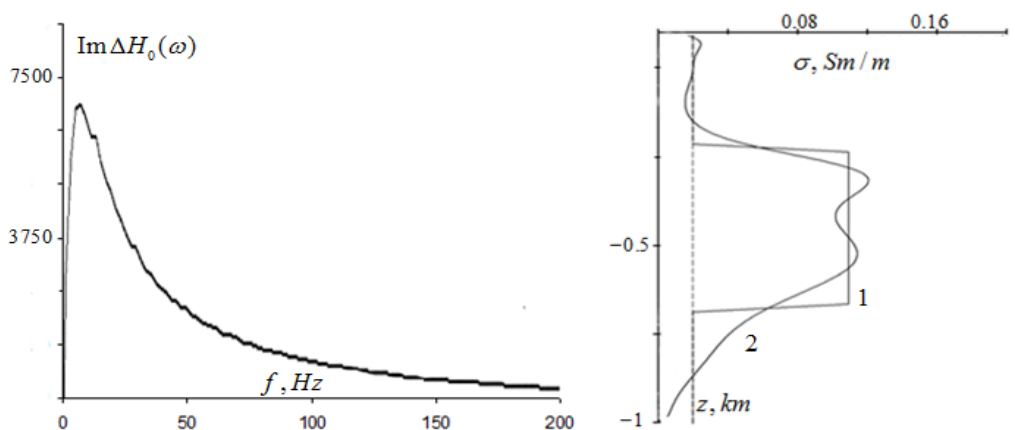


Рис. 3. Слева: исходные «данные измерений» при среднеквадратичном значении случайной погрешности  $\delta H_0 = 1$  в зависимости от частоты; справа: 1 – исходный профиль проводимости, 2 – результат восстановления.

Результат показывает, что восстановление профиля со скачком восстанавливаемой функции является более сложной задачей и качество восстановления оказывается хуже, чем для гладкого профиля. Тем не менее, результат позволяет верно судить о форме проводимости и дает хорошую количественную оценку амплитуды неоднородности. На практике, если есть основания полагать, что мы имеем дело с однородным слоем, можно аппроксимировать результат решения ступенчатой функцией и повторить решение, используя эту функцию в качестве 1-го приближения.

На рис. 4 представлен пример еще более сложной неоднородности с двумя максимумами. Результат решения весьма точно воспроизводит первую неоднородность, и хотя точность решения убывает с глубиной, как это обычно и бывает в задачах такого типа [4], но и второй максимум на большей глубине восстанавливается качественно неплохо.

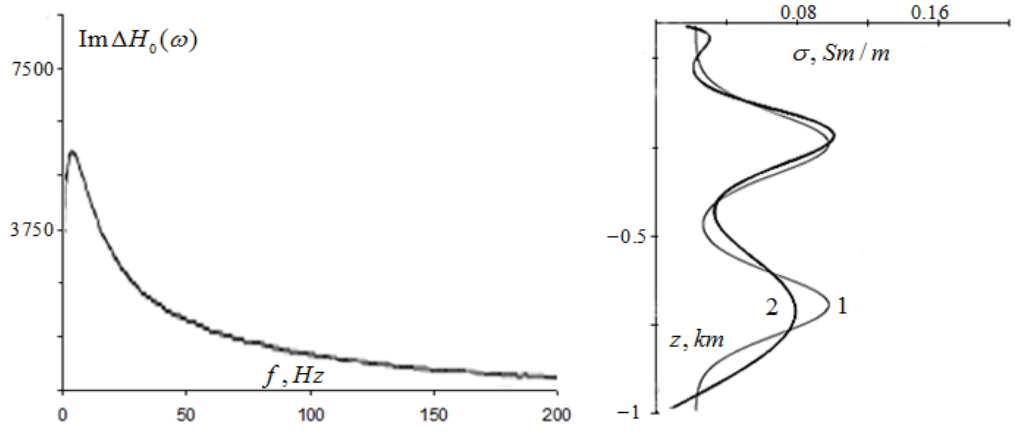


Рис. 4. Слева: исходные «данные измерений» при среднеквадратичном значении случайной погрешности  $\delta H_0 = 1$  в зависимости от частоты; справа: 1 – исходный профиль проводимости, 2 – результат восстановления.

Таким образом, можно видеть, что алгоритм метода двойственной регуляризации позволил эффективно преодолеть трудности решения рассмотренной сильно нелинейной обратной задачи.

*Задача восстановления профиля диэлектрической проницаемости периодически неоднородной среды по коэффициенту отражения*

Рассмотрим существенно более сложную задачу восстановления неоднородности в периодической эпитаксиальной структуре – такой, которая используется в рентгеновских зеркалах [8] – по частотной зависимости коэффициента отражения по мощности в одном из брэгговских максимумов отражения. Неоднородность правильной периодической структуры с периодом  $d$  из двух веществ с параметрами  $\varepsilon_{01}$  и  $\varepsilon_{02}$ , связанная с процессом диффузии материалов при ее изготовлении и шероховатостью поверхностей раздела сред, также может рассматриваться как периодическая, так что можно решать задачу восстановления профиля такой неоднородности на периоде решетки. Поскольку неоднородность образована смесью, профиль неоднородности может меняться только между  $\varepsilon_{01}$  и  $\varepsilon_{02}$ , и его можно определить действительной функцией  $\varepsilon(z) = \varepsilon_{01} + (\varepsilon_{02} - \varepsilon_{01})f(z)$ ,  $f(z) = f(z + d)$ . Будем считать, что за периодической структурой находится подложка большой толщины, в которой диэлектрическая проницаемость является постоянной. Используя уравнение (13) для  $N$ -слойной периодической структуры, такую задачу, как показано в [8,9], можно свести к решению интегрального уравнения. Из (20) имеем:

$$\Delta r = |R|^2 - |R_0|^2 = |R_1|^2 + \int_{z'} f(z') \operatorname{Re} \left\{ \Delta \varepsilon \frac{i}{\varepsilon} \left[ \frac{k^2}{k_z} R_{1,N+1}^{\perp*} G^{\perp}(z_1, z') G^{\perp}(z', z_1) - \frac{k_z^2 - k_x^2}{k_z} R_{1,N+1}^{\parallel*} G^{\parallel}(z_1, z') G^{\parallel}(z', z_1) \right] \right\} dz' \quad (38)$$

Или, в компактной форме,

$$\Delta r(\omega) = |R_1|^2 + \int_{z'} f(z') g(\theta, \omega, z') dz'. \quad (39)$$

Используя условие периодичности, получаем:

$$\Delta r(\omega) = |R_1|^2 + \int_d f(z) \sum_{i=1}^{\frac{N-1}{2}} g[\theta, \omega, z + (i-1)d] dz \approx \int_d f^0(z) \sum_{i=1}^{\frac{N-1}{2}} g[\theta, \omega, z + (i-1)d] dz, \quad (40)$$

что позволяет свести задачу к решению интегрального уравнения

$$\Delta r(\omega, \theta) = \int_0^d f(z) K(\theta, \omega, z) dz = \int_0^d f^0(z) K(\theta, \omega, z) dz \quad (41)$$

и применить итерационный алгоритм

$$\Delta r(\theta, \omega) = \int_d f^{(k)}(z) K(\theta, \omega, z) dz + |R_1(f^{(k-1)}(\varepsilon))|^2. \quad (42)$$

Постановка обратной задачи для решения (42) возможна на основе как угловой, так и спектральной

зависимости коэффициента отражения. В данной работе мы исследуем спектральную зависимость. Решение начинается с начального приближения  $f^{(0)} = 0$ , либо выбранного с учетом имеющейся априорной информации или модели распределения неоднородности по периоду структуры. На каждом шаге итераций уравнение (42) решается как интегральное уравнение Фредгольма 1-го рода методом обобщенной невязки [28].

Численное моделирование этого метода было выполнено для 50-периодной структуры Mo-Si, используемой в рентгеновских зеркалах [8,9]. При решении полагалось, что период и толщины слоев основной структуры известны, поскольку они хорошо определяются по положению брегговских пиков в угловой структуре коэффициента отражения в жестком рентгеновском диапазоне [8], тогда как влияние неоднородности на периоде структуры проявляется в частотной зависимости брегговского пика в мягком рентгеновском диапазоне. Для рассматриваемой структуры этот пик расположен в спектральной области  $\lambda = 12,5 \div 14,5$  nm при угле падения  $\theta = 85^\circ$ , на котором поляризация падающего излучения близка к горизонтальной.

Для успешного решения уравнения (42) необходимо, чтобы измерения были достаточно чувствительны к вариациям профиля  $f(z)$ , что предполагает достаточно сильные вариации частотной зависимости ядра уравнения в зависимости от  $z$ . На рис.5 представлен вид ядра уравнения (42) для рассматриваемой структуры, иллюстрирующие его чувствительность по отношению к положению неоднородности.

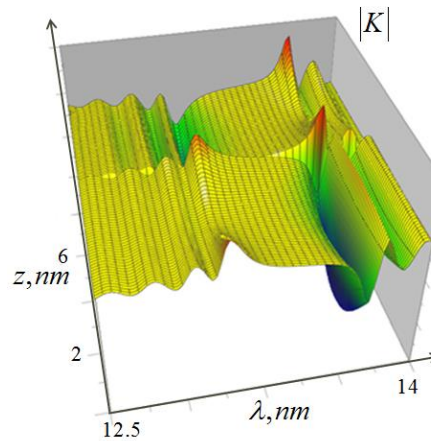


Рис. 5. Функция ядра  $|K(\lambda, z)|$  уравнения (42) в зависимости от длины волны на одном периоде структуры Mo-Si.

На рис.6,7 представлены примеры численного моделирования по замкнутой схеме решения обратной задачи при моделируемом уровне случайной погрешности со стандартным отклонением  $\delta r = 0,012$ . Значения диэлектрической проницаемости здесь и далее представлены для средней длины волны  $\lambda = 13,3$  nm из диапазона измерений.

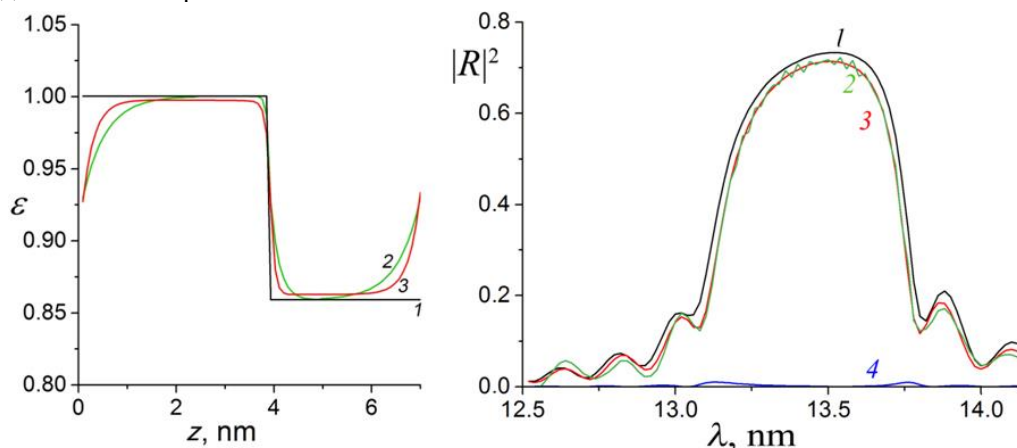


Рис. 6. Слева: 1 – профиль основной структуры, 2 – исходный профиль проводимости, 3 – результат восстановления. Справа: 1 – коэффициент отражения идеальной периодической структуры без неоднородностей  $|R_0(\lambda)|^2$ , 2 – исходные «данные измерений»  $|R(\lambda)|^2 + \delta r$  при среднеквадратичном

значении случайной погрешности  $\delta R^2 = 0,012$  в зависимости от частоты, 3 – коэффициент отражения, вычисленный по восстановленному профилю, 4 – значения квадратичного слагаемого  $|R_1(\varepsilon_1(z))|^2$ , рассчитанные для первого приближения.

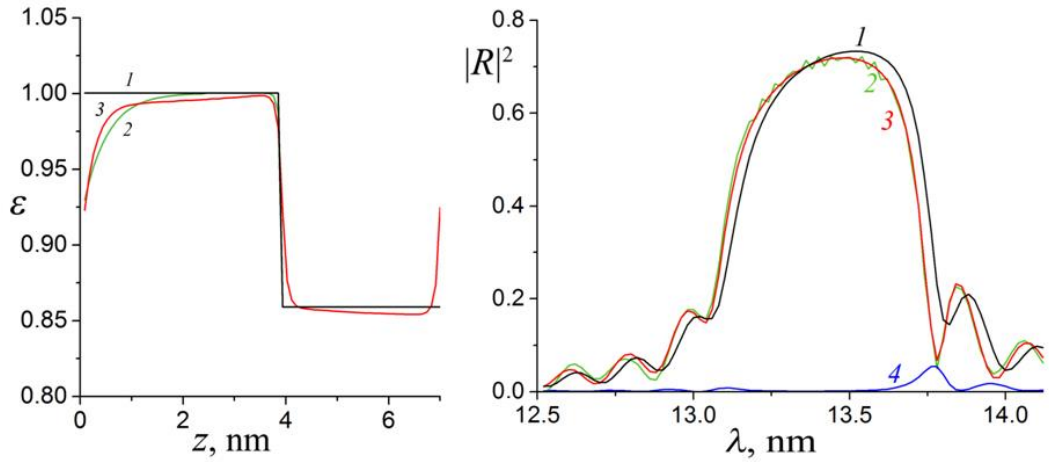


Рис. 7. Обозначения аналогичны рис.6.

Результаты моделирования показывают, что характерные масштабы моделируемых неоднородностей 0,5 – 2 нм восстанавливаются с точностью 20-40%. При этом коэффициент отражения, вычисленный по восстановленному профилю, удовлетворяет условию невязки с заданной точностью. Вместе с тем, как видно из рис.7, значения  $|R_1(\varepsilon_1(z))|^2$  в первом приближении могут существенно превышать уровень погрешности измерений, что в ряде случаев приводит к расходимости алгоритма, причем в получаемом решении условие невязки может быть как выполнено, так и не достигаться. К такой же расходимости могут приводить и погрешности борновского приближения, в рамках которого получено решаемое уравнение. Для примера, представленного на рис. 6, первая поправка к борновскому приближению оказывается достаточно мала, что можно видеть на рис. 8.

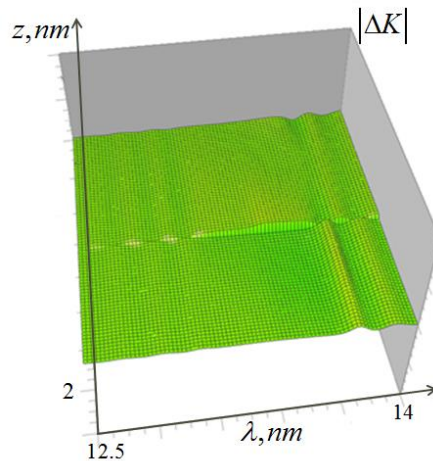


Рис. 8. Поправка к борновскому приближению в ядре уравнения (42) для примера на рис.6.

Однако погрешностью борновского приближения не всегда можно пренебречь. В большинстве случаев, когда роль указанных дополнительных источников ошибок существенна, алгоритм решения не может выполнить минимизацию до уровня заданной погрешности. Часто проблема решается выбором более удачного первого приближения, но на практике, когда истинный профиль неоднородности неизвестен, результат решения может содержать существенные ошибки. Отсюда вытекает необходимость поиска альтернативных методов решения задачи, и далее в качестве такой альтернативы рассматривается подход к решению этой нелинейной задачи методом двойственной регуляризации.

Тогда обратная задача формулируется следующим образом: подобрать профиль неоднородности структуры  $f(z)$  так, чтобы при любой частоте  $\omega \in [\omega_1, \omega_2]$  решения системы (8)-(9) удовлетворяли

условию

$$\Delta r[f](\omega) = \Delta r_0(\omega). \quad (43)$$

Эту задачу можно сформулировать в виде эквивалентной задачи условной минимизации функционала

$$I_0(f) \equiv \|f\|^2 \rightarrow \min, \Delta r[f](\omega) = \Delta r_0(\omega), f \in L_2(0, d) \equiv D, \omega \in \Phi_1, \omega_2. \quad (44)$$

Модифицированный функционал Лагранжа для этой задачи имеет вид:

$$L_\mu(f, \lambda) \equiv \|f\|^2 + \int_{\omega_1}^{\omega_2} \lambda(\omega) (\Delta r[f](\omega) - \Delta r_0(\omega)) d\omega + \mu \left( \sqrt{\int_{\omega_1}^{\omega_2} (\Delta r[f](\omega) - \Delta r_0(\omega))^2 d\omega} + \int_{\omega_1}^{\omega_2} (\Delta r[f](\omega) - \Delta r_0(\omega))^2 d\omega \right), \quad (45)$$

а регуляризованная модифицированная двойственная задача –

$$V_\mu^\alpha = V_\mu(\lambda) - \alpha \|\lambda\|^2 \equiv \min_{f \in L_2(0, z_n)} L_\mu(f, \lambda) - \alpha \|\lambda\|^2 \rightarrow \max, \quad (46)$$

$$\lambda \in \Lambda_\mu \equiv \{\lambda \in L_2(\omega_1, \omega_2) : \|\lambda\| \leq \mu\}.$$

Далее схема решения повторяет алгоритм [7]. При измерениях отражения в зависимости от угла падения зондирующей волны в алгоритме нужно сделать соответствующие очевидные замены аргументов и переменных интегрирования. Все утверждения, сделанные выше, по поводу решения задачи УНЧ зондирования, справедливы и в данном случае.

**ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ** Была создана численная реализация описанного алгоритма метода двойственной регуляризации решения задачи. Его исследование в численном моделировании показало, что отсутствие информации о фазе отраженного сигнала приводит к серьезным трудностям в решении. Зачастую при градиентной минимизации модифицированного функционала Лагранжа (45) невязка легко минимизируется до заданного уровня погрешности, но, в отличие от задачи УНЧ зондирования, соответствующий профиль может сильно отличаться от моделируемого, т.е. решение попадает в локальный минимум. В процессе максимизации функционала (46) двойственной задачи решение может быть выведено из таких локальных минимумов, но чтобы реализовать это преимущество двойственного подхода в полной мере, необходимо в численном моделировании подобрать оптимальную последовательность параметров итерационной схемы в алгоритме, пользуясь большей свободой их выбора [7], или использовать разумно выбранное первое приближение. Численное моделирование показало, что сходимость алгоритма существенно улучшается, если в качестве первого приближения используется, например, решение линеаризованной задачи, полученное с применением метода Тихонова. Этот способ введения дополнительной априорной информации, как правило, приводит к радикальному улучшению качества решения некорректных задач (см. примеры в [4]). Вместе с тем вряд ли возможно создать какой-либо автоматически работающий алгоритм для решения столь сложной нелинейной обратной задачи для произвольного профиля неоднородности – достоверность полученного решения в каждом случае должна подробно исследоваться в численном моделировании для каждого конкретного случая. В рассматриваемом случае неоднородностей диффузионного типа, когда профили являются монотонно убывающими от границ раздела, удалось создать такой алгоритм, обеспечивающий хорошие результаты в широком диапазоне параметров неоднородности.

На рис.9 представлен пример моделирования решения задачи стандартным методом минимизации функционала невязки (4-е слагаемое в (45)) градиентным методом для заданного профиля неоднородности по рассчитанным значениям коэффициента отражения без набрасывания случайной погрешности  $\delta r = 0$ . Результат демонстрирует, как решение в процессе минимизации попадает в локальный минимум (при уровне невязки 0,0040), где оно сильно отличается от исходного профиля, в то время как вычисленный по этому решению коэффициент отражения с большой точностью (0,004) совпадает с заданным, так что эту разницу трудно различить на рисунке. На рис.10 можно видеть результат восстановления профиля неоднородности методом двойственной регуляризации по вычисленным значениям коэффициента отражения, на которые набрасывалась случайная погрешность. Эта погрешность моделировалась случайными числами, имеющими нормальное распределение с таким же значением стандартного отклонения  $\delta r = 0,012$ , как и на рис.6,7. Максимум функционала регуляризованной модифицированной двойственной задачи (46) достигнут при значении невязки 0,0118, весьма близком к уровню моделируемой погрешности. При градиентной минимизации функционала Лагранжа (45) использовалось естественное априорное ограничение  $0 \leq f \leq 1$ .

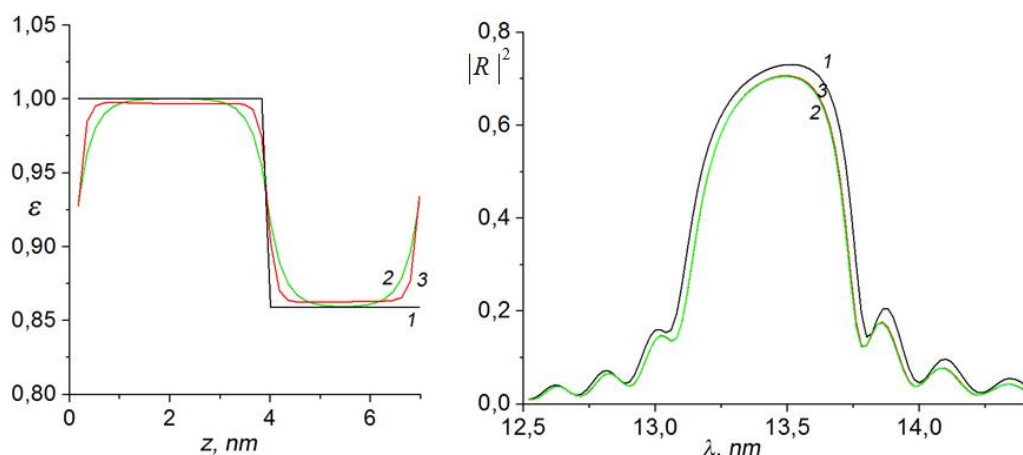


Рис. 9. Метод минимизации невязки. Слева: 1 – профиль основной структуры, 2 – исходный профиль проводимости, 3 – результат восстановления. Справа: 1 – коэффициент отражения идеальной периодической структуры без неоднородностей  $|R_0(\lambda)|^2$ , 2 – исходные «данные измерений» при  $\delta r = 0$ , 3 – коэффициент отражения, вычисленный по восстановленному профилю.

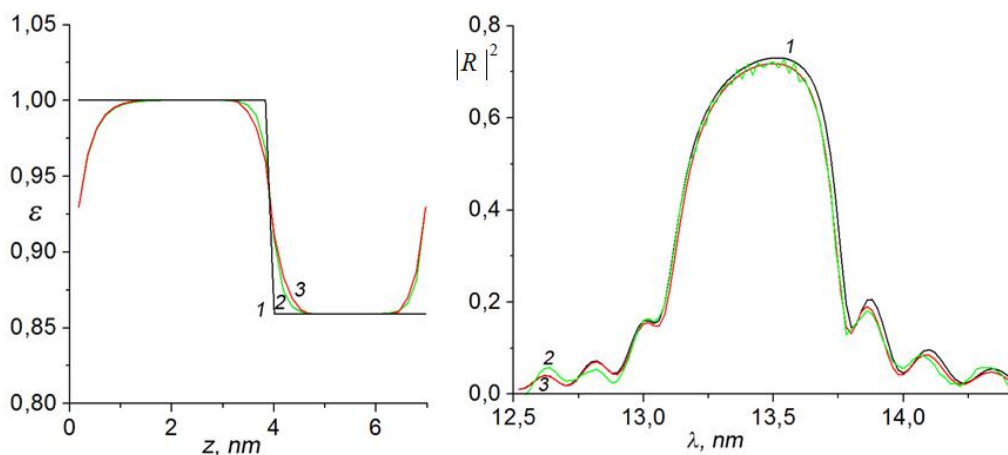


Рис. 10. Метод двойственной регуляризации. Обозначения аналогичны рис.9, но при  $\delta r = 0,012$ .

Результаты демонстрирует хорошее количественное согласие с параметрами заданного профиля неоднородности, который содержит переходы с сильными градиентами диэлектрической проницаемости.

Сравнивая результаты моделирования рассмотренных задач низкочастотного зондирования и диагностики неоднородностей многослойной структуры, можно видеть, что в последнем случае – в отличие от первого – метод Тихонова позволяет получить неплохие результаты, что является следствием лучшей применимости борновского приближения. Однако потеря информации о фазе рассеянного сигнала при измерениях коэффициента отражения по мощности создает трудно устранимый дефицит информации, что дает для решения много больше свободы попасть при решении задачи в ложный минимум. Вместе с тем результаты метода двойственной регуляризации и в этом случае надежнее, поскольку не зависят от непредсказуемых ошибок линеаризации задачи и точности борновского приближения.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Подытоживая полученные результаты, можно утверждать, что метод двойственной регуляризации для некорректных нелинейных обратных задач открывает новые возможности для построения более эффективных алгоритмов их решения.

### БЛАГОДАРНОСТИ

Представленные результаты получены по программе фундаментальных исследований Отделения физических наук РАН и поддержаны грантами РФФИ (№11-02-97060\_р\_поволжье, №12-01-00199, №13-07-97028\_р\_поволжье), а также грантом Минобрнауки РФ в рамках государственного задания на оказание услуг в 2012-2014 гг. подведомственными высшими учебными заведениями (шифр заявки 1.1907.2011).



### Список литературы

1. Тихонов А. Н. Об определении электрических характеристик глубоких слоев земной коры // Доклады АН СССР. Нов. сер. – 1950. – Т.73, №2. – С.295-297.
2. Велихов Е. П., Жамалетдинов А. А., Собчаков Л. А. и др. Опыт частотного электромагнитного зондирования земной коры с применением мощной антенны СНЧ-диапазона // Доклады РАН – 1994. – Т. 338, №1. – С. 106-109.
3. Поляков С. В., Ермакова Е. Н., Поляков А. С., Якунин М. Н. Формирование спектров и поляризации фонового ультранизкочастотного электромагнитного шума на поверхности земли// Геомагнетизм и аэрономия – 2003 – Т.42, № 2. – С. 240-248.
4. Gaikovich K. P. Inverse Problems in Physical Diagnostics. – Nova Science Publishers Inc.: New York, 2004.
5. Гайкович К. П., Смирнов А. И. Обратные задачи низкочастотного когерентного зондирования земной коры. Вестник Нижегородского университета им. Н.И.Лобачевского, Н.Новгород: Изд-во ННГУ им. Н.И.Лобачевского, 2007, № 2, с. 73-80.
6. Тихонов А. Н., Гончарский А. В., Степанов В. В., Ягола А. Г. Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. – М.: Наука, 1983.
7. Гайкович К. П., Кутерин Ф. А., Смирнов А. И., Сумин М. И. Двойственная регуляризация в обратной задаче УНЧ зондирования земной коры. Вестник Нижегородского университета им. Н. И. Лобачевского, 2009, №1. с.47-52.
8. Barisheva M. M., Gaikovich K. P., Gaikovich P. K., Polkovnikov V. N., Vainer Yu. A., Zuev S. Yu. Reflectometry Sounding of Inhomogeneities in Periodic Multilayer Structures // Proceedings of 12<sup>th</sup> International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON 2010, Munich, Germany, June 27-July 1, 2010), pp.Tu.P5 (1-4).
9. Gaikovich P. K., Sumin M. I., Gaikovich K. P. One-dimensional inverse scattering problem. Proceedings of 2011 13<sup>th</sup> International Conference on Transparent Optical Networks (ICTON 2011, Stockholm, Sweden, June 26 – 30, 2011), pp.We.A2.4 (1-4).
10. Gaikovich K. P., Gaikovich P. K., Galkin O. E., Sumin M. I. Dual regularization in one-dimensional inverse scattering problem // Proceedings of 5<sup>th</sup> International Conference “Ultrawideband and Ultrashort Impulse Signals” (6-10 September, 2010, Sevastopol, Ukraine), Sevastopol: IEEE, ISBN: 978-1-4244-7468-4, pp.90-92.
11. Бакушинский А. Б., Гончарский А. В. Некорректные задачи. Численные методы и приложения. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989.
12. Сумин М. И. Регуляризованный градиентный двойственный метод решения обратной задачи финального наблюдения для параболического уравнения // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2004. Т. 44. №11. С.2001-2019.
13. Сумин М. И. Регуляризация в линейно-выпуклой задаче математического программирования на основе теории двойственности // Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47. №4. С.602-625.
14. Сумин М. И. Сумин М. И. Регуляризованный двойственный метод решения нелинейной задачи математического программирования// Ж. вычисл. матем. и матем. физ. 2007. Т. 47. №5. С.796-816.
15. Sumin M. I. Parametric dual regularization in a linear-convex mathematical programming // In “Computational Optimization: New Research Developments”, Chapter 10, New-York:Nova Science Publishers Inc. 2010. pp.265-311.
16. Sumin M. I. Parametric dual regularization in a nonlinear mathematical programming // In “Advances in Mathematics Research, Volume 11”, Chapter 5, New-York: Nova Science Publishers Inc. 2010. pp.103-134.
17. Сумин М. И. Некорректные задачи и методы их решения. Материалы к лекциям для студентов старших курсов: Учебное пособие. Нижний Новгород: Изд-во Нижегородского госуниверситета, 2009. 289 с.
18. Короткий А. И., Цепелев И. А. Решение ретроспективной обратной задачи для одной нелинейной эволюционной модели // Труды института математики и механики УрО РАН. Т.9. 2. Динамика жидкости и газа. Екатеринбург: Изд-во УрО РАН, 2003, С.73-86.

19. Мину М. Математическое программирование. Теория и алгоритмы. М.: Наука, 1990.
20. Васильев Ф. П. Методы оптимизации. М.: Факториал Пресс, 2002.
21. Эрроу К. Дж., Гурвиц Л., Удзава Х. Исследования по линейному и нелинейному программированию. М.: ИЛ, 1962. -- 336~с. [Англ. оригинал: Arrow K. J., Hurwicz L., Uzawa H. Studies in linear and nonlinear programming. Stanford University Press. 1958.]
22. Экланд И., Темам Р. Выпуклый анализ и вариационные проблемы. М.: Мир, 1979.
23. Гловински Р., Лионс Ж.-Л., Трёмольер Р. Численное исследование вариационных неравенств. М.: Мир, 1979.
24. Hestenes M. R. Multipliers and gradient methods // J. Optim. Theory Appl. 1969. Vol. 4. pp. 303-320.
25. Powell M. J. D. A method for nonlinear constraints in minimization problems // Optimization (R.Fletcher, ed.). Academic Press, New-York, 1969, pp.293-298.
26. Бертсекас Д. Условная оптимизация и методы множителей Лагранжа. М.: Радио и связь, 1987.
27. Гольштейн Е. Г., Третьяков Н. В. Модифицированные функции Лагранжа. Теория и методы оптимизации. М.: Наука, 1989.
28. Gaikovich K. P., Gaikovich P. K. Inverse problem of near-field scattering in multilayer media // Inverse Problems, 2010, v.26, No.12, p. 125013 (17 pp.).

### **Dual regularization in one-dimensional inverse problems**

К. Р. Gaikovich, P. K. Gaikovich, O. E. Galkin, A. I. Smirnov, M. I. Sumin

1. Институт физики микроструктур РАН,
2. Институт прикладной физики РАН
3. Нижегородский госуниверситет им. Н.И. Лобачевского  
[gai@ipm.sci-nnov.ru](mailto:gai@ipm.sci-nnov.ru)

Dual regularization method to retrieve subsurface permittivity profiles by measurements of scattered field based on the Lagrange formalism in the solution of nonlinear ill-posed problems is proposed. This method enables to solve problems in their natural statements for initial Maxwell equations. Its efficiency is demonstrated in the numerical simulation of the retrieval of conductivity profiles of earth crust and profiles of permittivity inhomogeneities in multilayer periodic structures by spectral measurement data.

Key words: Inhomogeneous media, multilayer nanostructures, permittivity, Earth crust conductivity, scattered field, ill-posed inverse problems, dual regularization