MA206 Project3

王铎磊, 袁文璐, 赵 钊

目录

1 文献报告 **2**

1.1 概要 2

1.2 出发点 2

1.3 公式化 2

1.4 Lagrangian 表达 3

1.5 逼近流程 3

1.6 总结 3

2 有限差分法解一维边值问题 **3**

3 有限差分的高维扩展 **5**

4 其他方法解边值问题 **5**

4.1 神经网络方法 5

5 一维边值问题的推广 **6**

6 参数估计的其他应用 **6**

1 文献报告

1.1 概要

这篇论文的主要内容是围绕如何通过使用正则化方法和数值优化算法来鲁棒地解决具有扰动噪声数据的椭圆型偏微分方程的参数识别问题。该方程用于描述许多实际的现象和过程，如热传导、扩散、变形等等。本论文的主要贡献包括：提供了一种新的正则化方法来处理添加了噪声的数据；研究了参数识别问题的数值算法，并且通过一些数值实验来验证了该算法的可行性及鲁棒性。

具体来说，本文提出了一种双边正则化方法，并且通过交替方向乘子法来解决优化问题，同时也给出了一些数值实验结果。此外，还探讨了当数据噪声较大时如何选择合适的正则化参数，并且发现了一些选取正则化参数的经验公式。最终，该算法被证明在实际应用中具有很好的效果。

总的来说，本论文提供了一种新的正则化方法，在解决具有扰动噪声数据的偏微分方程参数识别问题方面具有很好的应用前景。

1.2 出发点

该问题的出发点是 Dirichlet 齐次方程，也就是

$$\begin{cases} -div(q\nabla u) = f & in\ \Omega \\ u = 0 & on\ \Omega \end{cases}$$

这可以转化成求下式最小值的问题

$$\min_{(q,u)\in H_1\times H_0^1} \frac{1}{2}||u-z||^2_{H_0^1} + \frac{1}{2}\beta||q||^2_{H^1}$$

即

$$e(q,u) = (-\Delta)^{-1}(\nabla\cdot(q\nabla u)+f) = 0$$

1.3 公式化

在一定的限制条件（Dirichlet 限制条件）下，问题被转化为

$$\min_{q\in\subset^1(\Omega)} \frac{1}{2}||q||^2_{H^1}$$

条件是

$$\begin{cases} -div(q\nabla u) = f & in\ \Omega \\ q \geq \gamma > 0 \\ ||u-z|| \leq \delta||z|| \end{cases}$$

而可以保证，在上述限制条件下，最小值一定有解。

1.4 Lagrangian 表达

存在一个拉格朗日乘子 $\lambda^* \in H_0^1(\Omega)$ 使得下式成立

$$\nabla L(\overline{q}, \overline{u}; \lambda^*)(h, v) = 0 \quad \forall (h, v) \in \subset^1 (\overline{\Omega}) \times H_0^1(\Omega)$$

其中等式左边代表 $L(\cdot, \cdot; \lambda^*)(h, v)$ 在 $(\overline{q}, \overline{u})$ 处沿 $(h, v) \in \subset^1 (\overline{\Omega}) \times H_0^1(\Omega)$ 方向的弗雷歇导数

1.5 逼近流程

文章中采取以下步骤进行循环迭代，从而希望求出近似的数值解

1. 选择一个全部由正实数组成的递增子列 $\{c_k\}_{k=1}^{\infty}$
2. 设 $k = 1$，$q_0 = q_{guess}$
3. 从下式求出 q_k

$$min\frac{1}{2}||q||_{H^1}^2 + (\lambda, e(q, u))_{H_0^1} + \frac{1}{2}c_k||l(q)||^2 + \frac{1}{2}c_k g^2(u)$$

   其中 u 是 $(q\nabla u, \nabla v) = (f, v) \quad \forall v \in H_0^1(\Omega)$ 的解，λ 是拉格朗日乘子

4. 如果收敛达到了预期，停止迭代；否则，$k = k + 1$，返回步骤 3

1.6 总结

以上是对文章理论部分的一个基本的总结，随后文章内容是很多的实际例子用于检测这个算法模型，结果相对良好。可以发现，数值解问题经常使用迭代类的算法逐步逼近至我们所期望的精度。这个思路在 Q 类型聚类"K-means" 算法、蚁群算法 (ACO)、遗传算法、模拟退火算法中都有用到。

2 有限差分法解一维边值问题

采用有限差分法对一维边值问题进行离散化。为了对一维边值问题进行离散化，我们可以采用有限差分法。假设 $x_i = x_0 + i\Delta x$，其中 $\Delta x = (b - a)/N$，$i = 0, 1, \ldots, N$，是区间 $[a, b]$ 中 $N + 1$ 个点的一组均匀网格。我们将每个网格点 x_i 处的解 $u(x)$ 近似为 $v_i = u(x_i)$，类似地处理强迫项 $f(x)$。然后，我们可以将边值问题离散化为如下形式：

$$
\begin{aligned}
v_0 &= 0 \\
-\frac{d^2 v_i}{dx^2} &= f(x_i), \quad i = 1, \ldots, N-1 \\
v_N &= 0
\end{aligned}
$$

使用二阶中心有限差分逼近，我们有

$$\frac{d^2 v_i}{dx^2} \approx \frac{v_{i-1} - 2v_i + v_{i+1}}{\Delta x^2}$$

将其代入上述方程，我们得到形如 $Av = b$ 的线性方程组，其中

$$A = \frac{1}{\Delta x^2} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 0 & \ldots & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \ldots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & \ldots & -1 & 2 & -1 \\ 0 & \ldots & 0 & -1 & 2 \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(N-1)\times(N-1)},$$

以及

$$b = \begin{bmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{N-1}) \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{N-1}.$$

为了求解这个方程组，我们可以使用任何直接或迭代方法。然而，解可能不稳定，也就是说，$f(x)$ 或 v 的微小变化可能导致解的大幅变化，从而使得方法无法收敛或者不产生准确的结果。这就是正则化方法发挥作用的地方。

一种可能的正则化方法是截断奇异值分解（SVD）。我们可以计算 $A = U\Sigma V^T$ 的 SVD，其中 Σ 是奇异值的对角矩阵，U 和 V 是正交矩阵。然后，我们可以通过将小的奇异值设置为零并重新计算 A 为 $\tilde{A} = U\tilde{\Sigma}V^T$ 来截断 SVD，其中 $\tilde{\Sigma}$ 是截断奇异值的对角矩阵。然后，我们可以使用任何直接或迭代方法来解决正则化方程 $\tilde{A}v = \tilde{b}$。这种方法倾向于具有良好的数值稳定性，并且对于较小的问题而言可能是有效的，但对于较大的问题可能不可扩展。

另一种可能的正则化方法是 Tikhonov 正则化，它向线性系统添加了一个惩罚项，以鼓励解的平滑性。具体来说，我们求解正则化方程

$$(A^T A + \alpha^2 I)v = A^T b$$

其中 $\alpha > 0$ 是正则化参数，它控制拟合数据和解的平滑性之间的平衡。这种方法可以产生更平滑的解，并且对于较大的问题而言可能具有可扩展性，但可能需要更多的计算时间和正则化参数的调整。

Landweber 迭代是一种迭代正则化方法，它通过对线性系统的残差进行梯度下降步骤来迭代地更新解决方案。具体来说，我们从一个初始猜测 v_0 开始，通过以下方式迭代地更新解决方案：

$$v_{k+1} = v_k + \gamma A^T(b - Av_k)$$

其中 $\gamma > 0$ 是一个步长参数，控制收敛速度。这种方法可能简单而且计算效率高，但可能需要仔细调整步长参数以确保收敛和精度。

3 有限差分的高维扩展

利用有限差分法求解偏微分方程的实质是把一个无限维空间中的问题，转化为用有限维空间中的函数进行逼近。这就要求这个有限维空间是原空间的一个子空间，而每一点处在原空间中的导数值是确切存在的，进而采用有限维空间中的函数进行导数的逼近，常用差商作为数值计算的办法。

但是维度的提升使得差商公式的计算复杂度迅速提升，进而导致总体计算量是极其病态的上升的。这也是高维情况下使用有限差分办法的重大困难之一。此外，差分格式的构造也会根据方程类型的不同而产生不同。

4 其他方法解边值问题

4.1 神经网络方法

一个简单的思路是使用神经网络作为逼近函数。如果仅仅考虑偏微分方程的约束条件 $L(u) = f$，和初边值条件 $u(0, x) = \phi(x), u(t, x)_{x\in\partial\Omega} = \psi(t)$，可以把求解偏微分方程简单的改写为优化问题：

$$u^* = \arg\min_{u^*} \|L(u^*) - f\|_2^2 + \|u^*(0, x) - \phi(x)\|_2^2 + \|u^*(t, x)_{x\in\partial\Omega} - \psi(x)\|_2^2$$

进而基于梯度下降等优化算法，可以用神经网络拟合。上述拟合方式考虑了偏微分方程的方程性质等条件，被叫做 PINNS(Physics Informed Neural Networks)。基于 PINNS，如果额外考虑能量变分等条件将其加入到约束中，可以得到更为精细的针对某一类方程的神经网络。

此外，如果考虑卷积神经网络的卷积核在约束条件下具有偏微分算子的特征，可以考虑用 CNN(卷积神经网络) 来对偏微分算子本身进行拟合。

5 一维边值问题的推广

将该方法推广到 2D 或 3D 中需要使用类似的方法对 PDE 进行离散化，通过在域中的均匀网格点上近似解和强迫项，并使用有限差分逼近导数来进行处理。更高维度中的主要难点在于线性系统的复杂性增加，这可能需要更多的内存和计算时间来求解，并且可能高度不稳定，使正则化更为重要。此外，迭代方法（如 Landweber 迭代）的收敛速度在更高的维度中可能会变慢，并且直接方法对于更大的问题可能变得不切实际。

6 参数估计的其他应用

对于实际问题中的参数识别，一个例子可能是在材料科学中，我们可能希望根据变形测量来确定材料的弹性属性。在这种情况下，可以使用有限元方法对空间和时间进行离散化，然后使用正则化方法来根据变形数据求解弹性属性。其他例子可能包括图像或信号处理问题，其中我们可能希望根据噪声或失真的测量值来去噪或去模糊图像或信号，并使用正则化方法来获得平滑或明确定义的解。