

Содержание

1	Математическая постановка задачи	2
1.1	Постановка задачи	2
1.2	Обратные задачи	2
1.3	Некорректность обратных задач	2
1.4	Регуляризация обратных задач	3
1.5	Выбор функционала потерь	4
1.6	Проксимальные алгоритмы	4
2	Расчёты	4

1 Математическая постановка задачи

1.1 Постановка задачи

В экспериментальных исследованиях результатом измерения является конечный набор значений $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)$, где ξ_i – наклонное содержание NO_2 для зинитного угла направления визирования z_i . По набору этих значений требуется оценить значения вертикального распределения NO_2 $n(h)$ в заданном наборе точек области определения.

В задаче восстановления NO_2 результат измерения имеет вид:

$$\xi_i = \int_0^H m(z_i, h)n(h)dh + \nu_i = \sum_{j=1}^M m(z_i, h_j)n(h_j)\Delta h + \nu_i = (a_i, n) + \nu_i \quad (1)$$

где a_i – послойная воздушная масса, которая рассчитывается из модели переноса излучения. Она связывает наклонное содержание NO_2 ξ с вертикальным распределением концентраций $n(h)$.

Схему измерений можно представить в виде:

$$\xi = An + \nu \quad (2)$$

На основании измерения вектора $\xi = (\xi_1, \dots, \xi_N)$ требуется оценить значение вектора $Un \in \mathbb{R}^N$, где $U : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^N$ – оператор, которому сопоставляется матрица с учётом априорной информации о значениях координат вектора n .

1.2 Обратные задачи

Рассмотрим неизвестный сигнал $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ и предположим, что последний проверяется каким-либо сенсорным устройством, что приводит к вектору данных $y = [y_1, \dots, y_L]$ из L измерения. Восстановление f из вектора данных y называется обратной задачей.

Следующие допущения являются стандартными:

- Чтобы учесть неточности датчиков предполагается, что вектор данных y это результат случайного вектора $Y = [Y_1, \dots, Y_L] = [\langle f, \phi_1 \rangle, \dots, \langle f, \phi_L \rangle]$, колеблющийся в соответствии с некоторым распределением шума. Записи $\mathbb{E}[Y] = \tilde{y}$ называются идеальными измерениями (измерения, которые были бы получены в отсутствие шума).
- Измерения предполагаются несмещенными и линейными, т.е. $\mathbb{E}[Y] = \Phi^* f$, для некоторых функционалов выборки $\{\phi_1, \dots, \phi_L\} \subset \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^d)$ моделирующих систему сбора данных.

1.3 Некорректность обратных задач

Для решения обратной задачи можно аппроксимировать среднее $\mathbb{E}[Y]$ по его одновыборочной эмпирической оценке y и решить линейную задачу:

$$y = G\alpha \quad (3)$$

К сожалению, такие задачи в целом некорректны:

- **Решений может не быть.** Если \mathbf{G} не сюръективен, $\mathcal{R}(\mathbf{G}) \subseteq \mathbb{R}^L$. Следовательно, зашумленный вектор данных \mathbf{y} не гарантируется принадлежность к $\mathcal{R}(\mathbf{G})$.
- **Может существовать более одного решения.** Если $L < N$ действительно (или, в более общем смысле, если \mathbf{G} не инъективен), $\mathcal{N}(\mathbf{G}) \neq \{\mathbf{0}\}$. Следовательно, если α^* является решением (3), тогда $\alpha^* + \beta$ также является решением $\forall \beta \in \mathcal{N}(\mathbf{G})$:

$$\mathbf{G}(\alpha^* + \beta) = \mathbf{G}\alpha^* + \mathbf{G}\beta = \mathbf{G}\alpha^* = \mathbf{y}$$

- **Решения могут быть численно неустойчивыми.** Если \mathbf{G} например, сюръективно, то $\mathbf{G}^\dagger = \mathbf{G}^T(\mathbf{G}\mathbf{G}^T)^{-1}$ является правой инверсией \mathbf{G} , а также $\alpha^*(\mathbf{y}) = \mathbf{G}^T(\mathbf{G}\mathbf{G}^T)^{-1}\mathbf{y}$ является решением (3). У нас есть тогда

$$\|\alpha^*(\mathbf{y})\| \leq \|\mathbf{G}\|_2 \|(\mathbf{G}^T\mathbf{G})^{-1}\|_2 \|\mathbf{y}\|_2 = \underbrace{\frac{\sqrt{\lambda_{\max}(\mathbf{G}^T\mathbf{G})}}{\lambda_{\min}(\mathbf{G}^T\mathbf{G})}}_{\text{может быть очень большим}} \|\mathbf{y}\|_2, \quad \forall \mathbf{y} \in \mathbb{R}^L.$$

1.4 Регуляризация обратных задач

Линейная система (3) не только некорректна, но и бессмысленна: точное совпадение измерений нежелательно, так как последние на практике искажаются инструментальными шумами.

Вместо этого более разумный подход состоит в решении обратной задачи с помощью штрафной задачи оптимизации, сопоставляя физические данные с априорными представлениями аналитика о решении (например, гладкость, разреженность) с помощью терминов точности данных и регуляризации соответственно:

$$\min_{\alpha \in \mathbb{R}^N} F(\mathbf{y}, \mathbf{G}\alpha) + \lambda \mathcal{R}(\alpha)$$

Различные величины, участвующие в приведенном выше уравнении, можно интерпретировать следующим образом:

- $F : \mathbb{R}^L \times \mathbb{R}^L \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$ представляет собой функционал стоимости/верности данных/потери, измеряющий несоответствие между наблюдаемыми и прогнозируемыми измерениями \mathbf{y} , а также $\mathbf{G}\alpha$ соответственно.
- $\mathcal{R} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}_+ \cup \{+\infty\}$ является функционалом регуляризации/штрафа, отдающим предпочтение простым и хорошим решениям (обычно с конечным числом степеней свободы).
- $\lambda > 0$ является параметром регуляризации/штрафа, который контролирует степень регуляризации, помещая функционал регуляризации и функционал стоимости в одинаковую шкалу.

1.5 Выбор функционала потерь

Функционал потерь можно выбрать как отрицательное логарифмическое правдоподобие данных \mathbf{y} :

$$F(\mathbf{y}, \mathbf{G}\alpha) = -\ell(\alpha|\mathbf{y}) = -\log p_{Y_1, \dots, Y_L}(y_1, \dots, y_L|\alpha).$$

Когда распределение шума не известно полностью или вероятность слишком сложна, можно также использовать общие ℓ_p функционалы стоимости:

$$F(\mathbf{y}, \mathbf{G}\alpha) = \|\mathbf{y} - \mathbf{G}\alpha\|_p^p = \sum_{i=1}^L \left| y_i - \sum_{n=1}^N G_{in}\alpha_n \right|^p.$$

где $p \in [1, +\infty]$ обычно выбирается в соответствие с поведением хвоста распределения шума.

1.6 Проксимальные алгоритмы

Большинство задач оптимизации, используемых на практике для решения обратных задач, имеют вид:

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \mathcal{G}(\mathbf{x}) + \mathcal{H}(\mathbf{K}\mathbf{x}) \quad (4)$$

где:

* $\mathcal{F} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}$ выпукла и дифференцируема, с β -Липшицевым непрерывный градиентом,

* $\mathcal{G} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ и $\mathcal{H} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R} \cup \{+\infty\}$ две собственные полунепрерывные снизу и выпуклые функции с простыми проксимальными операторами.

- $\mathbf{K} : \mathbb{R}^N \rightarrow \mathbb{R}^M$ является линейным оператором.

Задачи вида (4) могут быть решены с помощью итерационных **проксимальных алгоритмов**:

- **Primal-dual splitting**: решает проблемы вида

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \mathcal{G}(\mathbf{x}) + \mathcal{H}(\mathbf{K}\mathbf{x})$$

- **Chambolle Pock splitting**: решает проблемы вида

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \mathcal{H}(\mathbf{K}\mathbf{x})$$

- **Douglas Rachford splitting/ADMM**: решает проблемы вида

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \mathcal{H}(\mathbf{x})$$

- **Forward-Backward splitting/APGD**: решает проблемы вида

$$\min_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^N} \mathcal{F}(\mathbf{x}) + \mathcal{G}(\mathbf{x})$$

2 Расчёты