Численные методы решения обратных задач

Тема 4. Градиентные, итерационные методы

Содержание дисциплины

1. Корректные и некорректные задачи
2. Обратные задачи математической физики
3. Метод регуляризации Тихонова
4. **Градиентные, итерационные методы**
5. Идентификация правой части
6. Эволюционные обратные задачи
7. Граничные обратные задачи
8. Коэффициентные обратные задачи

Решение некорректных задач

Основные подходы к приближенному решению некорректных задач связаны с тем или иным возмущением исходной задачи, переходом к некоторой *близкой, но уже корректной задаче*.

В частности, переход к корректной задаче может осуществляться за счет возмущения исходного уравнения, перехода к вариационной задаче и т.д.

Постановка задачи

Изложение методов численного решения некорректных задач обычно проводиться применительно к линейному операторному уравнению

$$Au = f. \tag{1}$$

Правая часть и само решение принадлежат тем или иным метрическим пространствам.

Оператор

Ограничимся случаем линейного оператора A в предположениях, действующего в гильбертовом пространстве H:

$$u \in H, \quad f \in H, \text{ т.е. } A : H \to H.$$

В H введено скалярное произведение (u, v) и норма $\|u\|$ для элементов $u, v \in H$.

Предположим, что оператор A самосопряжен, положителен и неограничен, а его область определения $D(A)$ плотна в H.

Оператор

Будем, для простоты, считать, что спектр оператора A дискретный и состоит из собственных значений λ_k, стремящихся к нулю при $k \to \infty$

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k \geq \cdots \geq 0.$$

а соответствующая система собственных функций $\{w_k\}$, $w_k \in D(A)$, $k = 1, 2, \ldots$ ортонормирована и полна в H.

Поэтому для каждого $v \in H$ справедливо

$$v = \sum_{k=1}^{\infty} v_k w_k, \quad v_k = (v, w_k).$$

Входные данные с погрешностью

В прикладных исследованиях обычно входные данные задаются с погрешностью, т.е. правая часть уравнения (1) задана с погрешностью δ.

Вместо f нам известно f_δ, такое что

$$\|f_\delta - f\| \le \delta. \tag{2}$$

Необходимо найти приближенное решение уравнения (1) с приближенно заданной правой частью f_δ.

Это приближенное решение обозначается u_α, причем параметр α связан с δ, т.е.

$$\alpha = \alpha(\delta).$$

Устойчивые методы

Основная идея методов решения некорректных задач базируется на использовании *априорной информации о неточности входных данных.*

Так как правая часть задана с погрешностью, не нужно пытаться точно решить уравнение

$$Au_\alpha = f_\delta. \tag{3}$$

Например, можно перейти к некоторой другой, но уже корректной задаче

$$A_\delta u_\alpha = f_\delta.$$

где A_δ обладает лучшими свойствами, чем A.

Вариационный метод

В вариационных методах вместо решения уравнения (3) минимизируется норма невязки $r = Au - f_\delta$, т.е. минимизируется **функционал невязки**

$$J(u) = \|Au - f_\delta\|^2.$$

Существует много решений такой вариационной задачи, которые с точностью δ удовлетворяют уравнению (3).

Необходимо разумно распорядиться информацией о погрешности с тем, чтобы выделить наиболее приемлемое решение.

Метод регуляризации Тихонова

В **методе регуляризации А.Н. Тихонова** вводится **сглаживающий функционал**

$$J_\alpha(u) = \|Au - f_\delta\|^2 + \alpha\|u\|^2, \tag{4}$$

в которую для выделения ограниченного решения добавлен стабилизирующий функционал $\alpha\|u\|^2$, где $\alpha > 0$ – **параметр регуляризации**, величина которого согласуется с погрешностью δ.

Приближенным решением исходной задачи (1), (2) является экстремаль этого функционала:

$$J_\alpha(u_\alpha) = \min_{u \in H} J_\alpha(u). \tag{5}$$

Метод регуляризации Тихонова

Основной вопрос теоретического исследования приближенных алгритмов связан с доказательством сходимости приближенного решения к точному.

Необходимо указать при каких условиях приближенное решение u_α, определяемое из (4), (5), сходиться к точному решению задачи (1).

В идеале, необходимо не только установить факт сходимости, но и указать скорость сходимости.

Метод регуляризации Тихонова

Представим приближенное решение в операторном виде

$$u_\alpha = R(\alpha) f_\delta. \tag{6}$$

Если это приближенное решение сходится к точному при стремлении к нулю погрешности правой части, то в этом случае говорят, что оператор $R(\alpha)$ является **регуляризирующим**.

При выбранной конструкции оператора $R(\alpha)$ необходимо указать и выбор параметра регуляризации α в зависимости от δ.

Сходимость метода регуляризации

При исследовании условно корректных задач необходимо выделить класс искомых решений, явно указать априорные ограничения на решение.

В задаче (1), (2) нас будут интересовать ограниченные решения, тем самым априорные ограничения на решение есть

$$\|u\| \leq M, \tag{7}$$

где $M = const > 0$.

Сходимость метода регуляризации

Основной результат формулируется в виде следующего утверждения.

Теорема

Пусть для погрешности правой части выполнена оценка (2). Тогда приближенное решение u_α, *определяемое как решение задачи (4), (5), при* $\alpha(\delta) \to 0$, $\dfrac{\delta^2}{\alpha(\delta)} \to 0$ *при* $\delta \to 0$ *сходится в* H *к ограниченному точному решению* u *при* $\delta \to 0$.

Сходимость метода регуляризации

Доказательство. При наших предположениях об A точное решение (1) представляется в виде

$$u = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k}(f, w_k)w_k. \tag{8}$$

Пусть

$$v = \sum_{k=1}^{\infty} c_k w_k, \quad c_k = (v, w_k),$$

тогда функционал $J_\alpha(v)$ принимает вид

$$J_\alpha(v) = \sum_{k=1}^{\infty} \left[\left(\lambda_k c_k - (f_\delta, w_k)\right)^2 + \alpha c_k^2 \right]$$

Сходимость метода регуляризации

$$J_\alpha(v) = \sum_{k=1}^{\infty} \left[(\lambda_k c_k - (f_\delta, w_k))^2 + \alpha c_k^2 \right]$$

Условие (5) эквивалентно

$$\frac{\partial J_\alpha}{\partial c_k} = 2\lambda_k \left(\lambda_k c_k - (f_\delta, w_k) \right) + 2\alpha c_k = 0, \quad k = 1, 2, \ldots .$$

Отсюда следует представление для решения задачи (4), (5)

$$u_\alpha = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k}{\lambda_k^2 + \alpha} (f_\delta, w_k) w_k. \tag{9}$$

Сходимость метода регуляризации

Для погрешности $z = u_\alpha - u$ используем представление

$$z = z_1 + z_2, \quad z_1 = u_\alpha - R(\alpha)f, \quad z_2 = R(\alpha)f - u, \quad (10)$$

где $R(\alpha)f$ – решение задачи минимизации сглаживающего функционала при точном задании правой части.

С учетом (8), (9) получим

$$\|z_1\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k^2}{(\lambda_k^2 + \alpha)^2} \left[(f_\delta, w_k) - (f, w_k)\right]^2 .$$

Сходимость метода регуляризации

Для неотрицательных x верно неравенство

$$\frac{x}{x^2+\alpha} = \frac{1}{\left(\sqrt{x}-\sqrt{\dfrac{\alpha}{x}}\right)^2 + 2\sqrt{\alpha}} \le \frac{1}{2\sqrt{\alpha}}$$

и поэтому при предположениях (2)

$$\|z_1\|^2 \le \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{4\alpha}\left[(f_\delta, w_k) - (f, w_k)\right]^2 \le \frac{\delta^2}{4\alpha}. \qquad (11)$$

Оценка (11) выражает устойчивость решения задачи (4), (5) по отношению к малым возмущениям правой части.

Сходимость метода регуляризации

Оценим z_2 в представлении (10) для погрешности приближенного решения.

В этом случае речь идет об условиях близости решений уравнения (1) и задачи минимизации сглаживающего функционала при одной и той же точной правой части.

Из (8), (9) имеем

$$\|z_2\|^2 = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{\lambda_k^2}{\lambda_k^2(\lambda_k^2+\alpha)^2}(f, w_k)^2.$$

Сходимость метода регуляризации

Покажем, что для любого $\varepsilon > 0$ можно указать $\alpha(\varepsilon)$ такое, что $\|z_2\|^2 \leq \varepsilon$ для всех $0 < \alpha \leq \alpha(\varepsilon)$. Для функций из класса (7) ряд

$$\|u\| = \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k^2}(f, w_k)^2$$

сходится и поэтому найдется $n(\varepsilon)$ такое, что

$$\sum_{k=n(\varepsilon)+1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k^2}(f, w_k)^2 \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

Сходимость метода регуляризации

В этих условиях получим неравенство

$$\|z_2\|^2 \leq \sum_{k=1}^{n(\varepsilon)} \frac{\alpha^2}{\lambda_k^2(\lambda_k^2+\alpha)^2}(f,w_k)^2 + \sum_{k=n(\varepsilon)+1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_k^2}(f,w_k)^2$$

За счет выбора достаточно малого $\alpha(\varepsilon)$ для первого слагаемого получим

$$\sum_{k=1}^{n(\varepsilon)} \frac{\alpha^2}{\lambda_k^2(\lambda_k^2+\alpha)^2}(f,w_k)^2 \leq \frac{\varepsilon}{2}.$$

Это неравенство будет иметь место для всех $0 < \alpha \leq \alpha(\varepsilon)$.

Сходимость метода регуляризации

Тем самым

$$s(\alpha) = \|z_2\| \to 0, \text{ если } \alpha \to 0.$$

Подстановка в (10) дает

$$\|z\| \le \|z_1\| + \|z_2\| \le \frac{\delta}{2\sqrt{\alpha}} + s(\alpha). \tag{12}$$

В силу этого, если $\alpha(\delta) \to 0$, $\dfrac{\delta^2}{\alpha(\delta)} \to 0$ при $\delta \to 0$, то $\|z\| \to 0$. □

Уравнение Эйлера

Вместо экстремальной задачи (4), (5) можно решать *уравнение Эйлера*

$$A^* A u_\alpha + \alpha u_\alpha = A^* f_\delta. \tag{13}$$

Переход к корректной задаче (13) от некорректной (3) осуществляется за счет перехода к задаче с самосопряженным оператором A^*A, домножая (3) слева на A^*, и его возмущении оператором αE.

При $A = A^* \geq 0$ можно ограничиться:

$$A u_\alpha + \alpha u_\alpha = f_\delta. \tag{14}$$

Задача (14) соответствует использованию алгоритма *упрощенной регуляризация*.

Скорость сходимости

Мы рассмотрели метод регуляризации Тихонова в предположениях (7) о точном решении некорректной задачи (1), (2).

Для погрешности решения получена оценка (12), в которой $s(\alpha) \to 0$, если параметр $\alpha \to 0$.

Заметим, что сходимость устанавливается в той же норме, в которой формулируются априорные ограничения на решение.

Хотелось бы получить оценку, которая конкретизировала скорость сходимости приближенного решения при $\alpha(\delta) \to 0$ и $\delta \to 0$.

Скорость сходимости

Для того чтобы прояснить ситуацию рассмотрим задачу приближенного вычисления производной.

Будем использовать разностное отношение

$$u_x = \frac{u(x+h) - u(x-h)}{2h}, \tag{15}$$

предполагая, что функция $u(x)$ дифференцируема для всех x.

Нас интересует вопрос о том, как хорошо разностная производная приближает du/dx в точке x.

Скорость сходимости

Для доказательства сходимости, получения оценок скорости сходимости разностной производной (15) к du/dx сформулируем более жесткие ограничения на функцию $u(x)$.

Если функция $u(x)$ дважды дифференцируемая, то

$$u_x = \frac{du}{dx} + O(h),$$

для трижды дифференцируемой функции

$$u_x = \frac{du}{dx} + O(h^2).$$

При для понижении гладкости дифференцируемых функций погрешность аппроксимации падает.

Скорость сходимости

Аналогичная ситуация имеет место и при исследовании скорости сходимости метода регуляризации.

Вместо (7) сформулируем более сильные ограничения на точное решение задачи (1).

Требования повышенной гладкости точного решения естественно связать с оператором A.

Будем считать, что точное решение принадлежит классу

$$\|A^{-1}u\| \le M. \tag{16}$$

Скорость сходимости

В рассматриваемом случае самосопряженного и положительного оператора A промежуточное (между (7) и (16)) положение занимает класс априорных ограничений на решение типа

$$\|u\|_{A^{-1}} \leq M. \tag{17}$$

В условиях (16), (17) можно попытаться конкретизировать зависимость $s(\alpha)$ в оценке погрешности типа (12) для метода регуляризации.

Скорость сходимости

Оценки для погрешности метода регуляризации Тихонова мы получим на основе априорных оценок для операторного уравнения (13), которое с учетом $A = A^* > 0$ принимает вид

$$A^2 u_\alpha + \alpha u_\alpha = A f_\delta. \tag{18}$$

Скорость сходимости

Теорема

Для погрешности приближенного решения задачи (1), (2), определяемого из (12), справедлива априорная оценка

$$\|z\|^2 \le \frac{\delta^2}{2\alpha} + \frac{\alpha}{2} M^2, \tag{19}$$

для точных решений из класса (16) и

$$\|z\|^2 \le \frac{\delta^2}{\alpha} + \frac{\sqrt{\alpha}}{2} M^2, \tag{20}$$

для решений из (17).

Доказательство

Доказательство. Вычитая из (18) уравнение

$$A^2 u = Af.$$

получим следующее уравнение для погрешности $z = u_\alpha - u$ уравнение

$$A^2 z + \alpha z = A(f_\delta - f) - \alpha u.$$

Скалярно домножим его на z, что дает

$$\|Az\|^2 + \alpha\|z\|^2 = ((f_\delta - f), Az) - \alpha(u, z).$$

Доказательство

Подстановка неравенства

$$((f_\delta - f), Az) \le \frac{1}{2}\|Az\|^2 + \frac{1}{2}\|f_\delta - f\|^2$$

дает

$$\frac{1}{2}\|Az\|^2 + \alpha\|z\|^2 \le \frac{1}{2}\|f_\delta - f\|^2 - \alpha(u, z). \tag{21}$$

Доказательство

Рассмотрим вначале случай априорных ограничений (16). Использование неравенства с в (21) приводит нас к оценке

$$\alpha\|z\|^2 \le \frac{1}{2}\|f_\delta - f\|^2 + \frac{\alpha^2}{2}\|A^{-1}u\|^2.$$

С учетом (2) и (16) приходим к доказываемой оценке (19).

$$\|z\|^2 \le \frac{\delta^2}{2\alpha} + \frac{\alpha}{2}M^2.$$

Доказательство

В случае (17) последнее слагаемое в правой части (21) оцениваем следующим образом:

$$-\alpha(u, z) = -\alpha(A^{-1/2}u, A^{1/2}z) \le \sqrt{\alpha}\|A^{1/2}z\|^2 + \frac{\alpha\sqrt{\alpha}}{4}\|A^{1/2}u\|^2$$

Принимая во внимание, что

$$\frac{1}{2}\|Az\|^2 + \alpha\|z\|^2 - \sqrt{\alpha}\|A^{1/2}z\|^2 = \left\|\frac{1}{\sqrt{2}}Az - \frac{\sqrt{\alpha}}{\sqrt{2}}z\right\|^2 + \frac{\alpha}{2}\|z\|^2,$$

получим

$$\frac{\alpha}{2}\|z\|^2 \le \frac{1}{2}\|f_\delta - f\|^2 + \frac{\alpha\sqrt{\alpha}}{4}\|A^{1/2}u\|^2.$$

Скорость сходимости

С учетом (2), (17) имеем оценку (20)

$$\|z\|^2 \leq \frac{\delta^2}{\alpha} + \frac{\sqrt{\alpha}}{2} M^2.$$

$\square$

Повышение требований по гладкости точного решения приводит к повышению скорости сходимости приближенного решения к точному (см. оценки (19), (20)).

Выбор параметра регуляризации

В теории методов приближенного решения некорректных задач вопросу выбора параметра регуляризации уделяется значительное внимание.

Наибольшее распространение получили:

- выбор по невязке,
- выбор по обобщенной невязке (при учете погрешности в задании не только правой части, но и оператора A),
- квазиоптимальный выбор и т.д.

Выбор оптимального значения параметра регуляризации во многом определяет работоспособность вычислительного алгоритма.

Выбор параметра регуляризации

Параметр регуляризации α согласовывается с погрешностью входных данных, и чем меньше погрешность, тем меньше параметр регуляризации берется, т.е. $\alpha = \alpha(\delta)$.

В соответствии со структурой погрешности (12), (19), (20) мы не можем брать слишком малый параметр регуляризации, потому что при уменьшении параметра регуляризации растет погрешность и проявляется некорректность задачи.

Тем самым, имеется некоторый оптимум для параметра регуляризации при котором погрешность приближенного решения минимальна.

Выбор параметра регуляризации

Оптимальный параметр регуляризации зависит не только от величины погрешности в задании правой части, но и от класса априорных ограничений на точное решение.

Так например, для ограниченных решений (7) полученная выше оценка (12) для погрешности приближенного решения в методе А.Н. Тихонова не позволяет явно указать оптимальное значение параметра регуляризации.

Выбор параметра регуляризации

При сужении класса точных решений мы имеем возможность конкретизировать выбор параметра регуляризации.

В классе точных решений (16) для погрешности имеет место априорная оценка (19) и для оптимального значения параметра регуляризации получим выражение

$$\alpha_{opt} = \frac{\delta}{M}, \quad \|A^{-1}u\| \le M. \tag{22}$$

При этом достигается скорость сходимости

$$\|z\| \le \sqrt{M\delta}.$$

Выбор параметра регуляризации

Аналогичное рассмотрение выбора параметра регуляризации в классе априорных ограничений на точное решение (17) приводит нас к

$$\alpha_{opt} = \left(4\frac{\delta^2}{M^2}\right)^{2/3}, \quad \|u\|_{A^{-1}} \leq M. \tag{23}$$

при этом

$$\|z\| \leq \sqrt{3}\sqrt[3]{\frac{M^2\delta}{4}}.$$

Выбор параметра регуляризации

Теорема

При выборе оптимального значения параметра регуляризации по правилу (22) в классе точных решений (16) и по правилу (23) в классе (17) для погрешности приближенного решения имеем

$$\|z\| = O(\delta^\beta), \quad \beta = \begin{cases} \dfrac{1}{2}, & \|A^{-1}u\| \le M, \\ \dfrac{1}{3}, & \|u\|_{A^{-1}} \le M. \end{cases} \tag{24}$$

Выбор параметра регуляризации

Оптимальный выбор параметра регуляризации проводиться при условии, что известен уровень погрешности в задании правой части и класс априорных ограничений на точное решение.

При решении практических задач такая априорная информация частично или же даже полностью отсутствует.

Поэтому приходиться ориентироваться и на другие способы выбора регуляризации.

Метод невязки

При **выборе параметра регуляризации по невязке** в качестве определяющего уравнения выступает равенство

$$\|Au_\alpha - f_\delta\| = \delta. \tag{25}$$

Обоснование такого выбора параметра регуляризации, т.е. сходимость приближенного решения u_α с $\alpha = \alpha(\delta)$ при $\delta \to$ к точному решению уравнения (1), дано для многих классов задач.

Мы отметим лишь особенности вычислительной реализации такого способа определения параметра регуляризации.

Метод невязки

Невязка зависит некоторым образом от параметра регуляризации α. Обозначим

$$\varphi(\alpha) = \|Au_\alpha - f_\delta\|$$

тогда нахождение параметра регуляризации состоит в соответствии с принципом невязки (25) в решении уравнения

$$\varphi(\alpha) = \delta. \tag{26}$$

В достаточно общих условиях функция $\varphi(\alpha)$ является неубывающей и уравнение (26) имеет решение.

Метод невязки

Для приближенного решения уравнения (26) применяются различные методы. Например, используется последовательность

$$\alpha_k = \alpha_0 q^k, \quad q > 0 \tag{27}$$

и вычисления проводятся начиная с $k = 0$ до некоторого $k = K$, при котором равенство (26) выполняется с приемлемой точностью.

При этом требуется $K + 1$ вычислений невязки (решений вариационных задач типа (4), (5)).

Для решения (26) можно использовать и более быстросходящиеся итерационные методы.

Квазиоптимальный выбор

Выбор **квазиоптимального значения параметра регуляризации** напрямую не связан с уровнем погрешностей δ. Выбирается значение $\alpha > 0$, которое минимизирует

$$\chi(\alpha) = \|\alpha du_\alpha / d\alpha\| . \qquad (28)$$

Для нахождения квазиоптимального значения чаще всего используется последовательность (27).

Минимизация (28) на таких значениях параметра регуляризации соответствует поиску минимума

$$\tilde{\chi} = \|u_{\alpha^{k+1}} - u_{\alpha_k}\|.$$

Выбор параметра регуляризации

Выбор параметра регуляризации приводит к существенному увеличению вычислительной работы и носит в той или иной степени итерационный характер.

При каждом значении итерационного параметра решается задача (4), (5)).

Понятное дело, что при промежуточных значениях параметра регуляризации нет большого смысла в очень точном решении таких задач.

Поэтому можно комбинировать нахождение решения задачи (4), (5)) с выбором параметра регуляризации.