

СИБИРСКИЕ ЭЛЕКТРОННЫЕ
МАТЕМАТИЧЕСКИЕ ИЗВЕСТИЯ

Siberian Electronic Mathematical Reports

<http://semr.math.nsc.ru>

Том 5, стр. 609–619 (2008)

УДК 517.958

MSC 35R30

КОРРЕКТНАЯ СХЕМА ДЕЙСТВИЙ
ПРИ ЧИСЛЕННОМ РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ
ОПТИМИЗАЦИОННЫМ МЕТОДОМ

А. Л. КАРЧЕВСКИЙ

ABSTRACT. The two flow charts for solving of the same inverse problem by the optimization method are presented. On the numerical examples it is shown that the first flow chart often used researchers requires much more time for calculations than the second one. It is caused by necessity of use of finer net and by increase in quantity of minimization iterations of the residual functional for its decrease up to the certain value.

Keywords: inverse problem, optimization method, residual functional, conjugate problem

ВВЕДЕНИЕ

Суть проблемы, которая рассматривается в данном параграфе, заключается в правильном выборе схемы действий при численном решении обратной задачи. Очень часто исследователи выбирают следующую схему действий: для восстановления, например, неизвестного коэффициента $q(x)$ в дифференциальном уравнении исследователи

- имеют постановку прямой задачи $L_q u = 0$ (L — оператор прямой задачи) и дополнительную информацию о решении прямой задачи u ;
- выписывают функционал невязки $J[q]$;

KARCHEVSKY, A.L., THE CORRECT FLOW CHART FOR NUMERICAL SOLVING OF AN INVERSE PROBLEM BY THE OPTIMIZATION METHOD.

© 2008 Карчевский А.Л.

Итоговый научный отчет по междисциплинарному интеграционному проекту СО РАН: «Разработка теории и вычислительной технологии решения обратных и экстремальных задач с приложением в математической физике и гравимагниторазведке».

Работа поддержана междисциплинарным интеграционным проектом СО РАН № 48.

Поступила 1 сентября 2008 г., опубликована 27 ноября 2008 г.

- получают постановку сопряженной задачи $L_q^* \psi = 0$;
- при помощи решений u прямой и ψ сопряженной задач получают градиент функционала невязки $J'[q] = A(u, \psi)$ (A — некоторый оператор, действующий на функции u и ψ);

после чего для численного решения обратной задачи исследователи

- от постановки прямой задачи $L_q u = 0$ переходят к задаче $\Lambda_p v = 0$, которую будут решать численно на компьютере (Λ_p — оператор численного решения прямой задачи, функции v и p являются некоторыми приближениями функций u и q соответственно);
- выписывают функционал невязки $\Phi[p]$, который аппроксимирует функционал невязки $J[q]$;
- от постановки сопряженной задачи $L_q^* \psi = 0$ переходят к задаче $\tilde{\Lambda}_p \phi = 0$, где $\tilde{\Lambda}_p$ — оператор численного решения сопряженной задачи, а функция ϕ является приближением функции ψ ;
- получают соотношение $B(v, \phi)$, которое аппроксимирует выражение градиента функционала невязки $J'[q] = A(u, \psi)$;

и далее для производства минимизационной последовательности используется какой-нибудь градиентный метод, например, метод сопряженных градиентов.

В чем, на наш взгляд, ошибочность выше перечисленных действий? Во-первых, необязательно должно выполняться равенство $\tilde{\Lambda}_p v = \Lambda_p^* v$, во-вторых, выражение $B(v, \phi)$ может не быть градиентом функционала невязки $\Phi[p]$.

На наш взгляд правильной схемой действий при численном решении обратной задачи должна быть следующая схема: для поиска неизвестного коэффициента q исследователю необходимо

- от постановки прямой задачи $L_q u = 0$ перейти к задаче $\Lambda_p v = 0$, которую он будет реализовывать на компьютере;
- выписать функционал невязки $\Phi[p]$;
- получить постановку сопряженной задачи $\Lambda_p^* \phi = 0$;
- при помощи решений v прямой и ϕ сопряженной задач получить градиент функционала невязки $\Phi'[p]$;

после чего исследователь может решать задачу минимизации.

В общем, это вполне очевидное противопоставление двух схем действий. Почему же исследователи часто выбирают первую схему действий? По всей видимости, оправданием этому служат следующие соображения. Прежде всего, первая схема действий проще: как правило, нетрудно получить постановку сопряженной задачи $\Lambda_q^* \psi = 0$ и выражение для градиента функционала невязки $J'[q]$ в непрерывной области изменения временной и пространственных переменных. А затем, по всей видимости, исследователи рассуждают следующим образом: операторы $\tilde{\Lambda}_p$ и B аппроксимируют соответствующие операторы L и A с некоторой точностью; при численном решении обратной задачи в дополнительной информации всегда присутствует ошибка измерений и вычислений; вследствие чего ожидается, что ошибки при решении сопряженной задачи и вычислении функционала по первой схеме действий мало скажутся на процессе минимизации функционала невязки.

Данной работой мы хотели бы показать, что данные аргументы является малообоснованными, и, по всей видимости, нет оснований отдавать предпочтение первой схеме действий вместо второй.

Покажем это на примере численного решения обратной задачи по определению неизвестного коэффициента $q(x)$ из следующих условий:

$$\begin{aligned} (1) \quad & u_{tt}(x, t) = u_{xx}(x, t) - q(x)u(x, t), \quad (x, t) \in D = \{x \in (0, T), t \in (x, 2T - x)\}, \\ (2) \quad & u_x(0, t) + ru(0, t) = 0, \quad t \in [0, 2T], \\ (3) \quad & u(x, x) = -1, \quad x \in [0, T] \\ (4) \quad & u(0, t) = g(t), \quad t \in [0, 2T]. \end{aligned}$$

Соотношения (1)-(3) являются прямой задачей, равенство (4) — дополнительная информация о решении прямой задачи. Цель обратной задачи (1)-(4) — восстановление неизвестного коэффициента $q(x)$.

В соответствие обратной задаче (1)-(3) может быть поставлен функционал невязки следующего вида:

$$(5) \quad J[q] = \int_0^{2T} [u(0, t) - g(t)]^2 dt$$

Здесь специально выбрана достаточно простая постановка обратной коэффициентной задачи, которая, тем не менее, может служить лакмусовой бумажкой для многих постановок обратных задач [2].

Для численного решения прямой задачи выбран конечно-разностный метод.

В § 2 будут приведены конечно-разностная задача и функционал невязки, соответствующие дифференциальной задаче (1)-(3) и функционалу невязки (5). Эти шаги являются общими для обеих схем действий. В § 3 будут приведены основные соотношения для реализации первой схемы действий, в § 4 — второй. Поскольку техника получения постановки сопряженной задачи и градиента функционала невязки является достаточно известной (см., например, [1]), будут приведены только результирующие выражения. В § 5 будут приведены результаты численных экспериментов по восстановлению функции $q(x)$ по первой и второй схемам действий.

2. КОНЕЧНО-РАЗНОСТНАЯ ЗАДАЧА И ФУНКЦИОНАЛ НЕВЯЗКИ В СЕТОЧНОЙ ОБЛАСТИ

Для области D введем сеточную область D_τ (см. Рис. 1), выбрав постоянный шаг разбиения $\tau = T/N$ (N — количество точек). Введем сеточные функции v_i^k ($i = \overline{0, N}$, $k = \overline{i, 2N-i}$) и p_i ($i = \overline{1, N-1}$) для функций $u(x, t)$ и $q(x)$ соответственно.

Выпишем конечно-разностную схему для дифференциального уравнения (1)

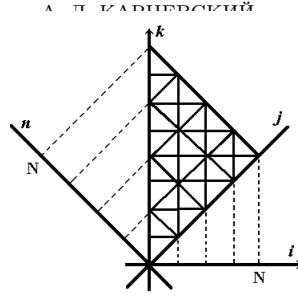
$$\frac{v_i^{k+1} - 2v_i^k + v_i^{k-1}}{\tau^2} = \frac{v_{i+1}^k - 2v_i^k + v_{i-1}^k}{\tau^2} - p_i \frac{v_{i+1}^k + v_{i-1}^k}{2}$$

или

$$(6) \quad v_i^{k+1} + v_i^{k-1} = Q_i (v_{i+1}^k + v_{i-1}^k), \quad Q_i = 1 - \frac{\tau^2}{2} p_i$$

Из краевого условия (2) с точностью до $O(\tau^2)$ может быть получено соотношение

$$(7) \quad v_0^{k+1} + v_0^{k-1} = R v_1^k, \quad R = 2(1 + \tau r)$$

Рис. 1. Сеточная область D_τ .

Из условия (3) следует

$$(8) \quad v_i^i = -1.$$

Поскольку для конечно-разностного уравнения (6) была использована схема “ромб”, то удобно перейти к индексам n и j (см. Рис. 1). Постановка конечно-разностной задачи переписывается следующим образом:

$$(9) \quad \begin{aligned} v_j^n + v_{j-1}^{n-1} &= Q_{j-n} (v_j^{n-1} + v_{j-1}^n), & j = \overline{2, N}, \quad n = \overline{0, j-1}, \\ v_j^j + v_{j-1}^{j-1} &= R v_j^{j-1}, & j = \overline{1, N}, \\ v_j^0 &= -1, & j = \overline{0, N}. \end{aligned}$$

Дополнительная информация

$$(10) \quad v_j^j = g^j, \quad j = \overline{0, N}.$$

Функционал невязки для решения обратной задачи (1)-(4) запишем в следующем виде:

$$(11) \quad \Phi[p] = 2\tau \sum_{j=1}^N (v_j^j - g^j)^2.$$

3. РЕАЛИЗАЦИЯ ПЕРВОЙ СХЕМЫ ДЕЙСТВИЙ

Для прямой задачи (1)-(3) при помощи хорошо известной техники может быть получена постановка сопряженной задачи

$$(12) \quad \begin{aligned} \psi_{tt}(x, t) &= \psi_{xx}(x, t) - q(x)\psi(x, t), & (x, t) \in D \\ \psi_x(0, t) + r\psi(0, t) &= 2[u(0, t) - g(t)], & t \in [0, 2T], \\ \psi(x, 2T - x) &= 0, & x \in [0, T]. \end{aligned}$$

и градиент

$$(13) \quad J'[q](x) = \int_x^{2T-x} u(x, t)\psi(x, t)dt$$

для функционала невязки (5).

Постановка сопряженной задачи (12) подобна постановке прямой задачи (1)-(3), поэтому для нее вполне естественно выбрать ту же самую схему “ромб”

и конечно-разностные аппроксимации производных. В индексах (j, n) имеем следующие соотношения:

$$(14) \quad \begin{aligned} \phi_j^n + \phi_{j+1}^{n+1} &= Q_{j-n}(\phi_j^{n+1} + \phi_{j+1}^n), & j = \overline{N-1, 1}, \quad n = \overline{j-1, 0}, \\ \phi_j^j &= R(u_{j+1}^j - [v_j^j - g^j + v_{j+1}^{j+1} - g^{j+1}]) - \phi_{j+1}^{j+1}, & j = \overline{N-1, 0}, \\ \phi_N^n &= 0, & n = \overline{N, 0}. \end{aligned}$$

Градиент функционала невязки (13) естественным образом может быть аппроксимирован с точностью до $O(\tau^2)$ в точках середин “ромбов” следующими соотношениями:

$$(15) \quad \tilde{\Phi}_j[q] = \frac{\tau}{4} \sum_{k=1}^{N-j} (v_{j+k-1}^k + v_{j+k}^{k-1})(\phi_{j+k}^k + \phi_{j+k-1}^{k-1}), \quad j = \overline{1, N-1},$$

или

$$(16) \quad \tilde{\Phi}_j[q] = \frac{\tau}{4} \sum_{k=1}^{N-j} (v_{j+k-1}^k + v_{j+k}^{k-1})(\phi_{j+k-1}^k + \phi_{j+k}^{k-1}), \quad j = \overline{1, N-1}.$$

В численном эксперименте, описанном ниже, использовалось выражение (15).

4. РЕАЛИЗАЦИЯ ВТОРОЙ СХЕМЫ ДЕЙСТВИЙ

Для прямой задачи (9) может быть получена постановка сопряженной задачи

$$(17) \quad \begin{aligned} \phi_j^n + \phi_{j+1}^{n+1} &= Q_{j-n-1}\phi_j^{n+1} + Q_{j-n+1}\phi_{j+1}^n, & j = \overline{N-1, 3}, \quad n = \overline{j-2, 1}, \\ \phi_j^{j-1} + \phi_{j+1}^j &= R\phi_j^j + Q_2\phi_{j+1}^{j-1}, & j = \overline{N-1, 2}, \\ \phi_j^j &= Q_1\phi_{j+1}^j - 4\tau[v_j^j - g^j] - \phi_{j+1}^{j+1}, & j = \overline{N-1, 1}, \\ \phi_N^N &= -4\tau[u_N^N - g^N], \quad \phi_N^{N-1} = K\phi_N^N, \\ \phi_N^n &= Q_{N-n-1}\phi_N^{n+1}, & n = \overline{N-2, 1}, \end{aligned}$$

и градиент

$$(18) \quad \Phi_j'[p] = \frac{\tau}{2} \sum_{k=1}^{N-j} (u_{j+k-1}^k + u_{j+k}^{k-1})\phi_{j+k}^k, \quad j = \overline{1, N-1}.$$

для функционала невязки (11).

Замечание 1. Предлагаем читателю обратить внимание на различия в постановках задач (14) и (17) и в выражениях (15) и (18). Если бы дифференциальный оператор прямой задачи и выражение для градиента функционала невязки имели бы более сложный вид, то естественно ожидать, что различия в постановках конечно-разностных задач и в выражениях для градиента функционала невязки были бы еще более заметны.

Замечание 2. Если рассмотреть функционал невязки в виде

$$\Phi[p_i] = 2\tau \sum_{j=1}^{N-1} (u_j^j - g^j)^2,$$

то получим краевое условие $\phi_N^n = 0$ ($n = \overline{N, 1}$). Это будет соответствовать краевому условию в (14). Однако вместо выражения для градиента

функционала невязки (18) будет получено другое выражение, определенное в точках $j = \overline{1, N-2}$. Получим ситуацию: значение q_{N-1} должно быть использовано при решении прямой задачи, однако при численном решении обратной задачи определено быть не может.

5. ЧИСЛЕННЫЙ ЭКСПЕРИМЕНТ

В данном параграфе приведены результаты численного эксперимента по реализации двух схем действий. Приведены результаты восстановлений по точным данным для обратной задачи и по данным с 20-ти процентной ошибкой. Данные обратной задачи были начитаны при помощи решения прямой задачи (6)-(8). Данные обратной задачи с ошибкой были получены следующим образом:

$$\hat{f}_j = f_j \left(1 + \xi_j'' \frac{p}{100} \right), \quad j = \overline{1, N},$$

где p — процент ошибки. Поскольку оценка условной устойчивости решения обратной задачи (1)-(4) получена через H_2 -норму данных обратной задачи $f(t)$ [2], то

$$\xi_j'' = \tau \sum_{n=0}^{j-1} \xi_n', \quad \xi_j' = \tau \sum_{n=0}^{j-1} \xi_n, \quad k = \overline{1, N}, \quad \xi_0'' = \xi_0' = 0,$$

и ξ_j — случайная величина, нормально распределенная на интервале $[-1, 1]$.

Численный эксперимент проводился для трех различных разбиений интервала $[0, T]$: $T = 2$, $N = 50$, $N = 100$ и $N = 500$. Начальное приближение во всех случаях было выбрано $p_j^{\{0\}} = p_0$ ($j = \overline{1, N-1}$).

В качестве восстанавливаемого коэффициента была выбрана функция, которая в точках разбиения интервала $[0, T]$ принимала следующие значения:

$$q(x) = 1 + e^{-x/2} \left(1 + \frac{1}{2} \sin 10x - \frac{1}{7} \sin 57x + \frac{1}{17} \sin 111x \right).$$

Данная функция имеет плавную трендовую составляющую и достаточно много “мелких” отклонений от нее.

Остановка минимизационного процесса осуществлялась либо после того, как $\Phi(p) < 10^{-12}$, либо после того, как количество итераций минимизационного процесса превышала 2000.

На Рис. 2 приведены слева результаты восстановлений функции p_j и справа убывание величины $\log_{10} \Phi[p]$ во время процесса минимизации функционала невязки. Использовались точные данные обратной задачи. Аналогичные результаты восстановлений с ошибкой в данных обратной задачи приведены на Рис. 3.

Результаты восстановлений показывают

- Вторая схема действий дает точность восстановления функции p_j при решении обратной задачи (9), (10) значительно лучшую, чем первая схема действий (см. Рис. 2 и Рис. 3, на Рис. 2 сплошная и пунктирная линии, отвечающие точному решению и восстановленному решению по второй схеме действий соответственно, практически совпадают).
- Характер поведения процесса минимизации не меняется при использовании точных данных для обратной задачи и данных с шумом (сравните Рис. 2 и Рис. 3).

- Точность восстановления по второй схеме действий может быть удовлетворительной при любом разбиении интервала $[0, T]$ (см. Рис. 2 и Рис. 3).
- Точность восстановления по первой схеме действий может быть неудовлетворительной при недостаточно частом разбиении интервала $[0, T]$ (см. Рис. 2 А, В и Рис. 3 А, В);
- Точность восстановления по первой схеме действий повышается при увеличении количества точек разбиения интервала $[0, T]$ (см. Рис. 2 С и Рис. 3 С).
- Начиная с некоторого номера n_0 , количество итераций минимизационного процесса для уменьшения значения функционала невязки на определенную величину при использовании первой схемы действий начинает превышать количество итераций при использовании второй схемы действий более чем в два раза, и эта разница растет с уменьшением значения функционала невязки (см. Рис. 2, Рис. 3 и Таб. 1, которая была составлена на примере процесса восстановления, приведенного на Рис. 2 С);

ТАБЛИЦА 1. Количество итераций, необходимых для того, чтобы величина $\log_{10} \Phi[p]$ стала меньше определенного значения

Значение $\log_{10} \Phi[p]$	Вторая схема действий	Первая схема действий
$< -7,5$	после 73 итерации	после 111 итерации
$< -8,0$	после 120 итерации	после 387 итерации
$< -8,5$	после 220 итерации	после 1302 итерации
$< -9,0$	после 313 итерации	после 4003 итерации

- Существует такой номер n_1 (Рис. 2 и 3), когда количество итераций минимизационного процесса при использовании первой схемы действий не превышает количества итераций при использовании второй схемы действий более чем 1,5 раза: для Рис. 2 А количество итераций $n_1 = 8$, для Рис. 2 В — $n_1 = 15$, для Рис. 2 С — $n_1 = 20$. Результаты восстановлений функции p_j после n_1 итераций приведены на Рис. 4: построенное приближение $p_j^{\{n_1\}}$ улавливает только основной характер поведения функции, и не может считаться хорошим приближением для точного значения функции p_j , т.е. для численного решения обратной задачи по восстановлению функции p_j требуется большее количество итераций, чем n_1 .

Восстановление может не является удовлетворительным для нескольких последних значений функции p_j (см., например, Рис. 2 С и Рис. 3 С). Этот эффект естественно проявляется все более отчетливо с увеличением количества точек разбиения интервала $[0, T]$. Причиной является свойство функционала невязки (5) (см., например, [3]): чем ближе точка x к концу интервала $[0, T]$, тем слабее чувствительность функционала невязки $J[q]$ к изменениям функции $q(x)$ в этой точке.

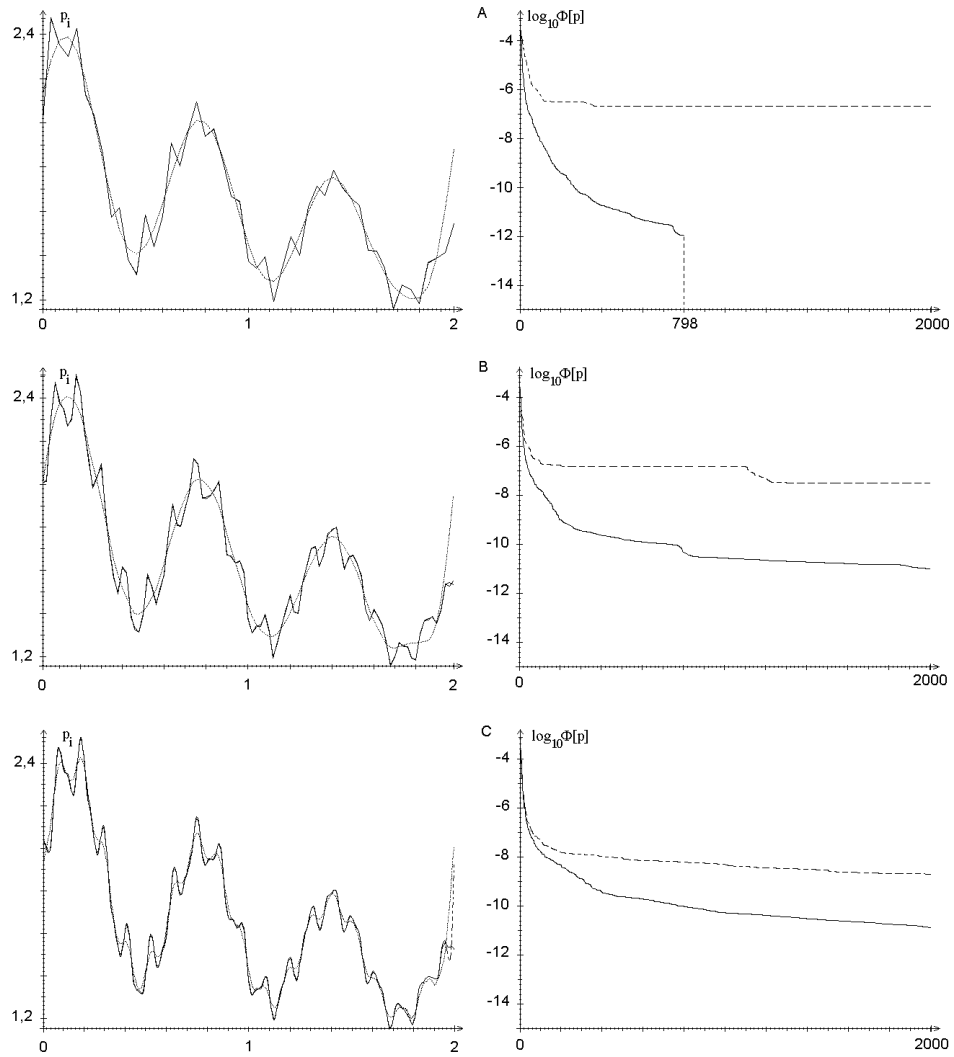


Рис. 2. Результат восстановления функции p_j и убывание величины $\log_{10} \Phi[p]$ во время процесса минимизации функционала невязки. На рисунке А функция p_i определена в точках $i = \overline{1, N-1}$, когда $N = 50$; В — $N = 100$; С — $N = 500$. Восстановление проведено с использованием данных для обратной задачи с 20-ти процентной ошибкой. Точное значение функции p_j дано сплошной линией, восстановленное значение при помощи первой схемы действий — точечной линией, восстановленное значение при помощи второй схемы действий — пунктирной линией. Значение величины $\log_{10} \Phi[p]$, полученное при минимизации по первой схеме действий, дано пунктирной линией, полученное при минимизации по второй схеме действий, — сплошной линией.

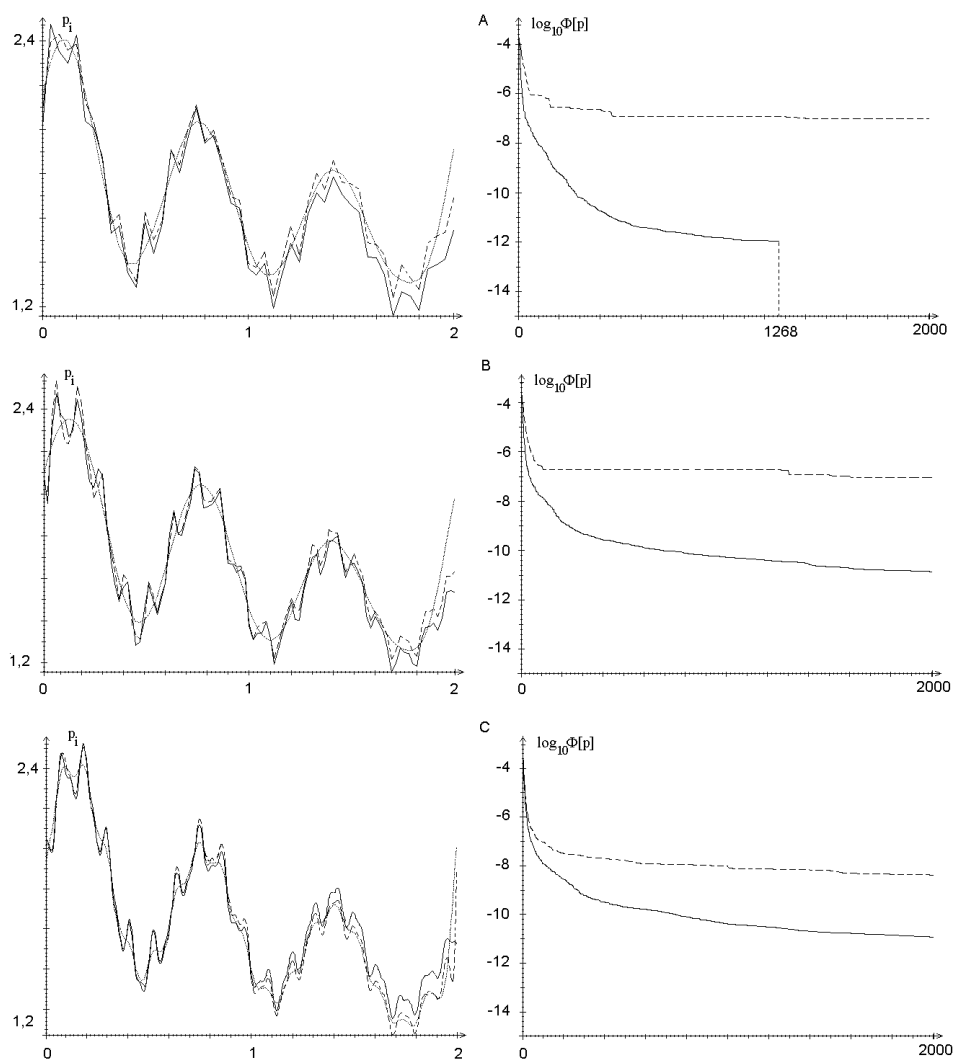


Рис. 3. Результат восстановления функции p_i и убывание величины $\log_{10}\Phi[p]$ во время процесса минимизации функционала невязки. На рисунке А функция p_i определена в точках $i = \overline{1, N-1}$, когда $N = 50$; В — $N = 100$; С — $N = 500$. Восстановление проведено с использованием данных для обратной задачи с 20-ти процентной ошибкой. Точное значение функции p_j дано сплошной линией, восстановленное значение при помощи первой схемы действий — точечной линией, восстановленное значение при помощи второй схемы действий — пунктирной линией. Значение величины $\log_{10}\Phi[p]$, полученное при минимизации по первой схеме действий, дано пунктирной линией, полученное при минимизации по второй схеме действий, — сплошной линией.

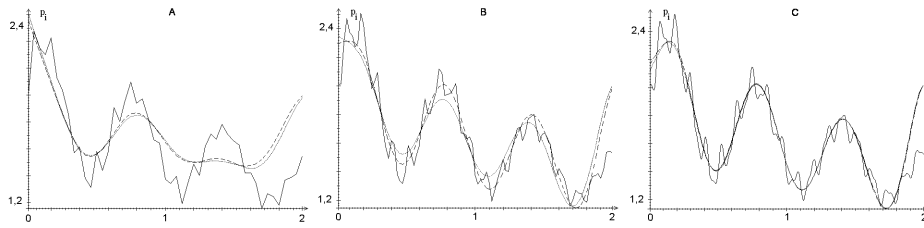


Рис. 4. Пример восстановления функции p_j . Количество итераций минимизационного процесса равно n_1 , для А: $n_1 = 8$, В: $n_1 = 15$ и С: $n_1 = 20$. Точное значение функции p_j дано сплошной линией, восстановленное значение при помощи первой схемы действий — точечной линией, восстановленное значение при помощи второй схемы действий — пунктирной линией.

Выводы

Результаты численных расчетов показывают, для того чтобы значение минимизируемого функционала невязки стало меньше некоторого значения, численное решение обратной задачи при использовании первой схемы действий требуют значительно большего числа итераций минимизационного процесса, чем численное решение обратной задачи при использовании второй схемы действий. Чтобы повысить точность решения обратной задачи по первой схеме действий потребуется использование более мелкой сети разбиения области изменения временной и пространственных переменных. Это повлечет за собой увеличение времени счета прямой задачи, и, следовательно, увеличение времени счета обратной задачи оптимизационным методом, поскольку, как хорошо известно, решение обратной задачи оптимизационным методом — это многократное решение прямой задачи.

Таким образом, если исследователь при решении обратной задачи оптимизационным методом выбирает первую схему действий, то за такой выбор он должен “заплатить” существенным увеличением времени счета.

В практических задачах количество точек разбиения области изменения временной и пространственных переменных и количество итераций минимизационного процесса, во многом зависит от возможностей используемой вычислительной техники: объем оперативной памяти и скорость счета. То есть, возможности вычислительной техники могут не позволить использование слишком частой сети разбиения, и время вычислений каждой итерации минимизационного процесса и скорость убывания функционала невязки могут не позволить использовать программу на практике. При практических же ограничениях на шаг разбиения и время счета обратная задача оптимизационным методом может быть решена с неудовлетворительной точностью, и это будет обусловлено не ошибками в данных обратной задачи, а неправильным выбором схемы действий.

Еще один частный вывод, к которому можно прийти после результатов данной работы, это то, что обратные задачи для конечно-разностных уравнений являются самостоятельным объектом математического

исследования. Этот вывод может быть подтвержден сравнением результатов работ [4] и [5].

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Ф.П. Васильев, *Методы решения экстремальных задач*, Наука, Москва, 1981.
- [2] В.Г. Романов, *Обратные задачи математической физики*, Наука, Москва, 1984.
- [3] А.Л. Карчевский, *О поведении функционала невязки для одномерной гиперболической обратной задачи*, Сибирский журнал вычислительной математики, **2** (1999), 137–160.
- [4] A.L. Karchevsky, *Properties of the misfit functional for a nonlinear one-dimensional coefficient hyperbolic inverse problem*, Journal of Inverse and Ill-posed Problems, **5** (1997), 139–163.
- [5] A.L. Karchevsky, *Finite-difference coefficient inverse problem and properties of the misfit functional*, Journal of Inverse and Ill-Posed Problems, **6** (1998), 431–452.

КАРЧЕВСКИЙ АНДРЕЙ ЛЕОНИДОВИЧ
ИНСТИТУТ МАТЕМАТИКИ ИМ. С. Л. СОВОЛЕВА СО РАН,
ПР. АКАДЕМИКА КОПТЮГА 4,
630090, НОВОСИБИРСК, РОССИЯ
E-mail address: karchevs@math.nsc.ru