

УДК 517.9:519.6
doi:10.18720/SPBPU/2/id23-468

*Лэ Ван Хуен*¹,
аспирант;
*Нгуен Тхи Тху Зунг*²,
аспирант;
*Черненко Людмила Васильевна*³,
профессор, д-р техн. наук, ст. науч. сотр.

ВЫБОР КВАЗИОПТИМАЛЬНЫХ ЗНАЧЕНИЙ ПАРАМЕТРА РЕГУЛЯРИЗАЦИИ ПРИ РЕШЕНИИ ОБРАТНОЙ ЗАДАЧИ

^{1, 2, 3} Россия, Санкт-Петербург, Санкт-Петербургский политехнический университет Петра Великого, ¹ huyenlevan120193@gmail.com, ² thudung.mta.tb@gmail.com, ³ ludmila@qmd.spbstu.ru

Аннотация. Данная работа посвящена определению квазиоптимального параметра регуляризации при решении обратных задач методом регуляризации Тихонова. Целью данной работы — построение процедуры определения значения параметра регуляризации таким образом, чтобы ошибка между регуляризованным решением и точным решением обратной задачи была приблизительно равна нулю. Для этого, сначала будет рассмотрена математическая модель, описывающая в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Далее, будет сформирована обратная задача в рамках этой математической модели. Затем, методы конечной разности, метод кубического сплайна и метод регуляризации Тихонова будут

использованы для преобразования обратной задачи в задачу минимизации функционала. Наконец, будут описаны метод выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации и построен процесс его нахождения. В результате данной работы будет найден квазиоптимальное значение параметра регуляризации, а также регуляризованное решение обратной задачи. В будущем наша работа может помочь решать обратные задачи на практике, не зная заранее погрешности исходных данных.

Ключевые слова: параметр регуляризации, регуляризация Тихонова, регуляризованное решение, обратная задача, математическая модель.

*Le Van Huyen*¹,
Postgraduate;
*Nguyen Thi Thu Dung*²,
Postgraduate;
*Liudmila V. Chernenkaya*³,
Doctor of Technical Science, Professor

CHOICE OF QUASI-OPTIMAL VALUES OF THE REGULARIZATION PARAMETER IN SOLVING THE INVERSE PROBLEM

^{1, 2, 3} Peter the Great St. Petersburg Polytechnic University,
St. Petersburg, Russia, ¹ huyenlevan120193@gmail.com,
² thudung.mta.tb@gmail.com, ³ ludmila@qmd.spbstu.ru

Abstract. This work is devoted to determining the quasi-optimal regularization parameter in solving inverse problems by the Tikhonov regularization method. The purpose of this work is to construct a procedure for determining the value of the regularization parameter in such a way that the error between the regularized solution and the exact solution of the inverse problem is approximately equal to zero. To do this, we will first consider a mathematical model that describes in the form of a system of ordinary differential equations. Further, the inverse problem will be formed within the framework of this mathematical model. Then, the finite difference methods, the cubic spline method and the Tikhonov regularization method will be used to transform the inverse problem into a functional minimization problem. Finally, a method for choosing a quasi-optimal value of the regularization parameter will be described and a process for finding it will be constructed. As a result of this work, a quasi-optimal value of the regularization parameter will be found, as well as a regularized solution of the inverse problem. In the future, our work may help to solve inverse problems in practice, without knowing in advance the errors of the initial data.

Keywords: regularization parameter, Tikhonov regularization, regularized solution, inverse problem, mathematical model.

Введение

В середине XX века первые исследования о обратной задаче появились в физике, геофизике и других областях естествознания. Под обратной задачей понимается процесс идентификации неизвестных параметров прямой задачи на основе информации, полученной из ряда наблюдений. В последние десятилетия обратная задача превращается

в междисциплинарную науку, развивается как новое перспективное направление исследований. Она широко используется в идентификации систем, оптике, радарах, акустике, теории связи, обработке сигналов, медицинской визуализации, геофизике, океанографии, астрономии, дистанционном зондировании, обработке естественных языков, машинном обучении и многие другие области [1–8]. В 1902 г. определение корректности задач впервые было дано французским математиком Ж. Адамаром для уравнений в частных производных в статье [9]. Большинство обратных задач являются некорректными. Нахождение решения обратных задач часто сталкивается с наибольшей трудностью, которая заключается в неустойчивости решения по отношению к малым ошибкам измерений данных. Советский математик А. Н. Тихонов в 1943 г. установил возможность нахождения устойчивых решений некорректных задач [10].

Одним из наиболее часто используемых методов решения обратных задач является метод регуляризации Тихонова, который позволяет находить приближенное решение некорректно поставленных задач. Определение значения параметра регуляризации играет важную роль при применении метод регуляризации Тихонова. Существуют несколько методов выбора параметра регуляризации α [1–8]. Каждый метод имеет свои преимущества и недостатки и подходит для решения различных конкретных задач. В данной работе мы будем рассматривать алгоритм выбора квазиоптимальных значений параметра регуляризации, предложенный А. Н. Тихоновым и В. Б. Гласко.

1. Метод выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации

Рассмотрим математическую модель, описывающую в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений:

$$\frac{d\mathbf{X}(t)}{dt} = \mathbf{A}\mathbf{X}(t), \quad \mathbf{X}(t)_{t=0} = \mathbf{X}(0), \quad (1)$$

где \mathbf{A} — матрица с постоянными коэффициентами a_{ij} , $i, j = 1, 2, \dots, n$;

$$\mathbf{X}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T.$$

Рассмотрим следующие две задачи, построенные в рамках математической модели (1).

Задача 1. По заданным коэффициентам $a_{ij} = a_{ij}^0$, где $i, j = 1, \dots, n$ и начальным условиям $\mathbf{X}(0) = (x_1(0), x_2(0), \dots, x_n(0))^T$ в начальный момент времени $t = 0$, определить $\mathbf{X}(t) = (x_1(t), x_2(t), \dots, x_n(t))^T$.

Задача 2. По заданным значениям $\mathbf{X}(t_k) = (x_1(t_k), x_2(t_k), \dots, x_n(t_k))^T$ в моменты времени t_k , $k = 1, 2, \dots, n$, определить коэффициенты $a_{ij} = a_{ij}^0$, где $i, j = 1, \dots, n$.

Задачу 1 будем называть прямой задачей, а задачу 2 — обратной задачей по отношению к задаче 1. Решение задачи 2 обозначаем вектором $\mathbf{K}^0 = (a_{11}^0, \dots, a_{1n}^0, \dots, a_{n1}^0, \dots, a_{nn}^0)^T$.

Применив метод конечной разности, будем преобразовать (1) в систему алгебраических уравнений $\mathbf{X}\mathbf{K} = \mathbf{V}$ относительно a_{ij} , где $i, j = 1, \dots, n$. Здесь, \mathbf{X} — матрица с элементами $x_1(t_k), x_2(t_k), \dots, x_n(t_k)$; \mathbf{K} — вектор неизвестных, $\mathbf{K} = (a_{11}, \dots, a_{1n}, \dots, a_{n1}, \dots, a_{nn})^T$; \mathbf{V} — вектор правой части. Решение системы $\mathbf{X}\mathbf{K} = \mathbf{V}$ также является решением \mathbf{K}^0 задачи 2.

Элементы вектора \mathbf{V} будут определены методом кубического сплайна. Отметим, что $x_1(t_k), x_2(t_k), \dots, x_n(t_k)$ могут содержать ошибки измерения и округления, а элементы вектора \mathbf{V} содержат ошибки интерполяции. Поэтому система $\mathbf{X}\mathbf{K} = \mathbf{V}$ будет преобразовано в систему $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{V}_\delta$, где \mathbf{X}_η — приближение к матрице \mathbf{X} ; \mathbf{V}_δ — приближение к вектору \mathbf{V} .

Для решения системы $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{V}_\delta$, будем использовать метод регуляризации Тихонова [1–8]. Именно, будет найдено приближение к \mathbf{K}^0 по следующему условию:

$$\|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{V}_\delta\|^2 + \alpha \|\mathbf{K}\|^2 \rightarrow \min_{\alpha} \min_{\|\mathbf{K}\|}, \quad (2)$$

где $\alpha = \text{const} > 0$ — параметр регуляризации. Из (2) вытекает система уравнений:

$$\mathbf{X}_\eta^* \mathbf{X}_\eta \mathbf{K} + \alpha \mathbf{K} = \mathbf{X}_\eta^* \mathbf{V}_\delta, \quad (3)$$

где \mathbf{X}_η^* — сопряженный к матрице \mathbf{X}_η . Решение системы (3), обозначенное \mathbf{K}^α , является регуляризованным решением системы $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{V}_\delta$ [1–8]. Будет найден параметр регуляризации α так, чтобы $\mathbf{K}^\alpha \rightarrow \mathbf{K}^0$. В связи с тем, что оценки погрешности при задании входных данных часто неизвестны и плохо контролируются, поэтому в вычислительной практике широко используются метод выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации [11–13].

Рассмотрим (2). Пусть, при $\alpha = \alpha_1$ имеем, что \mathbf{K}_1^α является регуляризованным решением системы $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{B}_\delta$, т. е. $\mathbf{K}_1^\alpha \rightarrow \mathbf{K}^0$.

Отметим, что в случае, когда нам известна информация о решении (точное решение \mathbf{K}^0), метод регуляризации Тихонова основан на переходе от исходного уравнения первого рода $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{B}_\delta$ к задаче минимизации функционала $\|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{B}_\delta\|^2$ с дополнительным стабилизирующим слагаемым $\alpha \|\mathbf{K} - \mathbf{K}^0\|^2$ следующим образом [5]:

$$\|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{B}_\delta\|^2 + \alpha \|\mathbf{K} - \mathbf{K}^0\|^2 \rightarrow \min_{\alpha} \min_{\|\mathbf{K}\|}. \quad (4)$$

Если информации о решении нет, то можно положить $\mathbf{K}^0 = 0$. В случае $\mathbf{K}^0 = 0$ очевидно, что (4) становится (2).

Рассмотрим (4). Пусть, при $\alpha = \alpha_2$ имеем, что \mathbf{K}_2^α является регуляризованным решением системы уравнений $\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} = \mathbf{B}_\delta$, т. е. $\mathbf{K}_2^\alpha \rightarrow \mathbf{K}^0$.

Идея метода выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации состоит в том, что будет найден такое значение α , что

$\alpha = \alpha_1 = \alpha_2$. Имеется $\|\mathbf{K}_2^\alpha - \mathbf{K}_1^\alpha\| = \left\| -\alpha \frac{d\mathbf{K}_1^\alpha}{d\alpha} \right\|$ [11–13]. Отсюда, будет

найден параметр α такой, что $\left\| -\alpha \frac{d\mathbf{K}_1^\alpha}{d\alpha} \right\| \rightarrow 0$. Будет рассмотрена гео-

метрическая последовательность с заданным начальным значением α_0 и знаменателем прогрессии $q \in (0, 1)$, удовлетворяющая следующим усло-

виям: $\alpha_{i+1} = q\alpha_i$, $i = 1, 2, \dots, N$. На основе последовательности $\{\alpha_i\}$

строится последовательность $\{\mathbf{K}_1^{\alpha_i}\}$ с соответствующим значением па-

раметра регуляризации α_i . В последовательности $\{\alpha_i\}$ оптимальным

значением параметра регуляризации считаем такой элемент α_i , для ко-

торого достигается $\|\mathbf{K}_{i+1}^\alpha - \mathbf{K}_i^\alpha\| \rightarrow \min_i$. На практике мы часто будем вы-

бирать значение α_i так, чтобы $\|\mathbf{K}_{i+1}^\alpha - \mathbf{K}_i^\alpha\| \rightarrow 0$.

2. Численный пример

Будет рассмотрен простой процесс нефтепереработки [14]. Пусть, исходная смесь состоит из одного тяжелого углеводорода C . Под действием температуры и соударений углеводород C распадается на углеводороды B и также превращается в изомер D с тем же количеством атомов углерода, что и в исходной молекуле. Вещество D также распадается на A и B , либо обратно превращается в C . Пусть, продукты реакции A , B — это более легкие углеводороды, и с ними никаких превращений далее не происходит.

Математическая модель кинетики реакции каталитического крекинга представляет собой систему дифференциальных уравнений [14–16]:

$$\begin{cases} \frac{dy_1(t)}{dt} = k_5 y_2(t) + k_1 y_3(t) + k_4 y_4(t); \\ \frac{dy_2(t)}{dt} = -k_5 y_2(t) + k_1 y_3(t) + k_4 y_4(t); \\ \frac{dy_3(t)}{dt} = -(k_1 + k_2) y_3(t) + k_3 y_4(t); \\ \frac{dy_4(t)}{dt} = k_2 y_3(t) - (k_2 + k_4) y_4(t), \end{cases} \quad (5)$$

где k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 — константы скорости реакций, c^{-1} [17]; $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$ — концентрация веществ A, B, C, D в момент времени $t, \frac{\text{моль}}{\text{л}}$. Предположим, что в начальный момент времени $t = 0$ концентрация веществ A, B, C, D равна $y_1(0), y_2(0), y_3(0), y_4(0)$.

Прямая задача. По заданным константам скорости реакций $k_1 = k_1^0, k_2 = k_2^0, k_3 = k_3^0, k_4 = k_4^0, k_5 = k_5^0$ и концентрациям исходного вещества, продуктов A, B, C, D в начальный момент времени $t = 0$, определить $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$.

Обратная задача. По заданным концентрациям исходного вещества и продуктов A, B, C, D в моменты времени $t_i, i = 1, 2, \dots$, определить k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 (т. е. $k_1^0, k_2^0, k_3^0, k_4^0, k_5^0$).

Пусть, нам известны концентрации веществ A, B, C, D в разные моменты времени, т. е. $y_1(t), y_2(t), y_3(t), y_4(t)$ (см. табл. 1).

Таблица 1

Измеренные концентрации веществ A, B, C, D

$t(c)$	$y_1(t)$	$y_2(t)$	$y_3(t)$	$y_4(t)$
0	0	0	90	10
30	77.76206	12.47561	48.11464	6.76653
60	132.29327	7.46789	25.74512	4.37430
90	162.81084	4.12939	13.78771	2.74217
120	179.58861	2.26780	7.39035	1.68145
150	188.79792	1.24467	3.96468	1.01403
180	193.85216	0.68309	2.12871	0.60366
210	196.62600	0.37489	1.14389	0.35567
240	198.14831	0.20574	0.61518	0.20779
270	198.98377	0.11291	0.33111	0.12055

Применив метод конечных разностей и метод кубического сплайна, будем преобразовывать (5) в систему алгебраических уравнений

$$\left\{ \begin{array}{l} y_3(t_1)k_1 + y_4(t_1)k_4 + y_2(t_1)k_5 = \frac{y_1(t_1+h) - y_1(t_1-h)}{2h}, \\ y_3(t_1)k_1 + y_4(t_1)k_4 - y_2(t_1)k_5 = \frac{y_2(t_1+h) - y_2(t_1-h)}{2h}, \\ -y_3(t_1)k_1 - y_3(t_1)k_2 + y_4(t_1)k_3 = \frac{y_3(t_1+h) - y_3(t_1-h)}{2h}, \\ [y_3(t_1) - y_4(t_1)]k_2 - y_4(t_1)k_4 = \frac{y_4(t_1+h) - y_4(t_1-h)}{2h}, \\ y_3(t_2)k_1 + y_4(t_2)k_4 + y_2(t_2)k_5 = \frac{y_1(t_2+h) - y_1(t_2-h)}{2h}. \end{array} \right. \quad (6)$$

относительно k_1, k_2, k_3, k_4, k_5 . Здесь, шаг $h = 0.001$. Будет переписано (6) в матрично-векторном виде $\mathbf{X}_h \mathbf{K} = \mathbf{V}_\delta$. Регуляризованное решение имеет вид $\mathbf{K}^\alpha = (\mathbf{X}_\eta^* \mathbf{X}_\eta + \alpha \mathbf{E})^{-1} \mathbf{X}_\eta^* \mathbf{V}_\delta$, где \mathbf{X}_η^* — сопряженный к матрице \mathbf{X}_η .

Задав некоторое «подходящее» значение параметра $\alpha_1 = 1$, вычислим $\mathbf{K}_1^{\alpha_1} = 0.081532$. Построив в его окрестности геометрическую сетку по α_1 такую, что $\alpha_{i+1} = 0.1\alpha_i$, $i = 1, 2, \dots, 10$, вычислим $\mathbf{K}_1^{\alpha_{i+1}}$ и построим последовательности $\{\mathbf{K}_1^{\alpha_i}\}$.

В таблице 2 представляется оценка нормы разности приближенных решений на двух соседних итерациях $\|\mathbf{K}_{i+1} - \mathbf{K}_i\|$ и норма приближенных решений $\|\mathbf{K}_i\|$. Из таблицы 2 очевидно, что при $i = 4, 5, 6, \dots, 10$ выполняется условие $\|\mathbf{K}_{i+1} - \mathbf{K}_i\| \rightarrow 0$.

Оценка нормы разности приближенных решений на двух соседних итерациях и норма приближенных решений

i	α_i	$\ \mathbf{K}_{i+1} - \mathbf{K}_i\ $	$\ \mathbf{K}_i\ $
1	1	0.019227	0.081532
2	0.1	0.004383	0.099918
3	0.01	0.011736	0.102388
4	0.001	0.006480	0.103759
5	0.0001	0.000954	0.104963
6	0.00001	9.99E-05	0.105172
7	0.000001	1.00E-05	0.105194
8	1E-07	1.00E-06	0.105196
9	1E-08	1.00E-07	0.105197
10	1E-09	1.00E-08	0.105197

Проанализируем (2). С увеличением значения параметра α регуляризованное решение \mathbf{K}^α становится глаже и устойчивей, т. е. уменьшается норма решения $\|\mathbf{K}_\alpha\|^2$, но увеличивается невязка $\|\mathbf{X}_\eta \mathbf{K} - \mathbf{B}_\delta\|^2$. Отсюда, из всех значений параметра α_i , удовлетворяющих условию $\|\mathbf{K}_{i+1} - \mathbf{K}_i\| \rightarrow 0$, выберем минимальное значение α , такое, чтобы $\|\mathbf{K}_\alpha\|^2$ было как можно меньше.

Рассмотрим рисунок 1. Кривая с оранжевым цветом показывает, как изменяется значение параметра регуляризации α_i , где $i = 1, 2, \dots, 10$. Кривая с синим цветом показывает, как изменяется норма регуляризованного решения $\|\mathbf{K}_{\alpha_i}\|$, где $i = 1, 2, \dots, 10$.

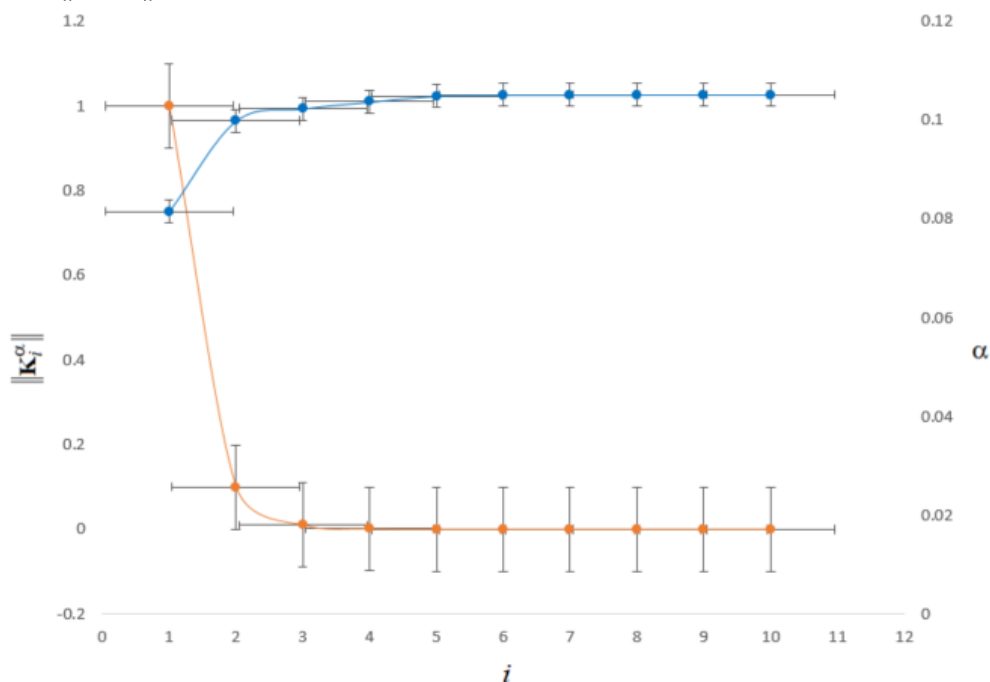


Рис. 1. Изменение значений параметра регуляризации и нормы регуляризованного решения

На рисунке 1 нетрудно видеть, что, когда α_i уменьшается, $\|\mathbf{K}_{\alpha_i}\|$ увеличивается. Кроме этого, значения параметра регуляризации α_i , $i = 4, 5, \dots, 10$ примерно равны. Итак, будет выбран параметр регуляризации $\alpha = \alpha_4 = 0.001$.

При $\alpha = \alpha_4 = 0.001$ имеем, что $k_1^\alpha = 0.01934$, $k_2^\alpha = 0.00191$, $k_3^\alpha = 0.00198$, $k_4^\alpha = 0.02264$, $k_5^\alpha = 0.09936$.

Решая прямую задачу 1, получаем функции $y_1(t)$, $y_2(t)$, $y_3(t)$, $y_4(t)$, описывающие зависимость концентрации веществ A, B, C, D от времени.

Рисунок 2 показывает, как меняется концентрация веществ A, B, C, D с течением времени. На рисунке 2 звездочками обозначены измеренные концентрации A, B, C, D (т. е. исходные данные).

Кривые $y_1(t)$, $y_2(t)$, $y_3(t)$, $y_4(t)$ выражают изменение расчетной концентрации вещества A, B, C, D с течением времени. Видно, что измеренные значения очень близки к кривым.

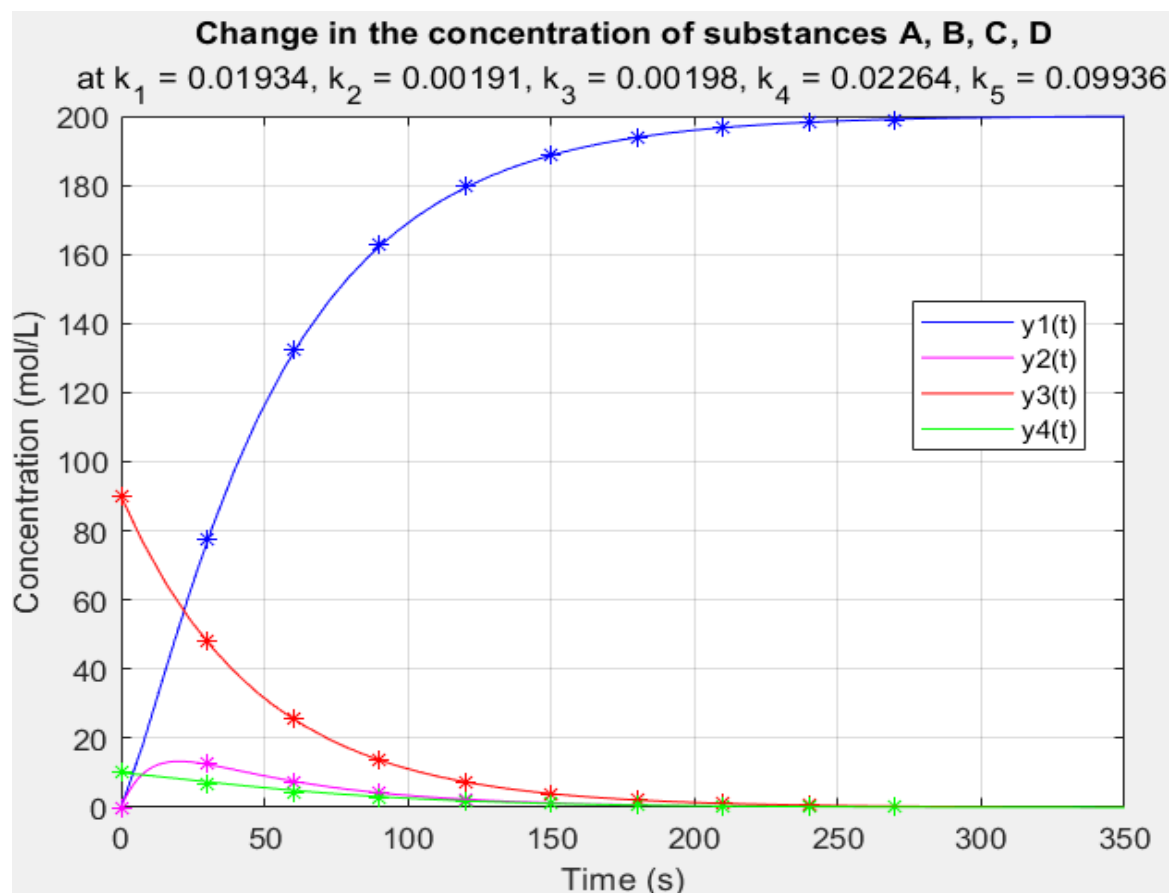


Рис. 2. Изменение расчетной концентрации вещества A, B, C, D с течением времени

Заключение

В данной работе была сформирована обратная задача в рамках математической модели, описывающей в виде системы обыкновенных дифференциальных уравнений. Для решения этой задачи были использованы методы конечной разностей, метод кубического сплайна и метод регуляризации Тихонова. Был рассмотрен и представлен метод выбора квазиоптимального значения параметра регуляризации. По найденному значению параметра регуляризации можно определить значение регуляризованного решения так, чтобы оно аппроксимировало решение обратной задачи, единственное и непрерывное в зависимости от исходных данных. Был приведен простой пример, относящийся к математической модели кинетики процесса нефтепереработки. Поставленная обратная задача заключается в определении констант скорости реакции на основе измеренных концентраций веществ в некоторый момент времени. Результаты расчетов показали применимость метода 1 для решения обратных задач.

Список литературы

1. Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи (о первой международной молодежной научной школе-конференции «Теория и численные методы решения обратных и некорректных задач») // Сиб. электрон. матем. изв. – 2010. – Т. 7. – С. 380–394.
2. Тихонов А.Н. О некорректных задачах линейной алгебры и устойчивом методе их решения // Докл. АН СССР. – 1965. – Т. 163, № 3. – С. 591–594.
3. Тихонов А.Н., Арсенин В.Я. Методы решения некорректных задач. 2-е изд. – М.: Наука, Главная редакция физико-математической литературы, 1979. – 285 с.
4. Денисов А.М. Введение в теорию обратных задач. – М.: Изд-во МГУ, 1994. – 208 с.
5. Кабанихин С.И. Обратные и некорректные задачи. – Новосибирск: Сибирский федеральный университет, 2009. – 457 с.
6. Ольховой А. Введение в теорию обратных и некорректных задач. – LAP Lambert Academic Publishing, 2012. – 124 с.
7. Сумин М.М. Метод регуляризации А. Н. Тихонова для решения операторных уравнений первого рода. – Нижний Новгород: Нижегородский госуниверситет, 2016. – 56 с.
8. Иванов В.К., Васин В.В., Танана В.П. Теория линейных некорректных задач и её приложения. – М.: Наука, 1978. – 206 с.
9. Hadamard J. Sur les problèmes aux dérivés partielles et leur signification physique // Princet. Univ. Bull. – 1902. – Vol. 13. – Pp. 45–52.
10. Тихонов А.Н. Об устойчивости обратных задач // Докл. АН СССР. – 1943. – Т. 39, № 5. – С. 195–198.
11. Морозов В.А. Методы регуляризации неустойчивых задач. – М.: Изд-во МГУ, 1987. – 216 с.
12. Морозов В.А. Алгоритмические основы методов решения некорректно поставленных задач // Выч. мет. программирование. – 2003. – Т. 4, № 1. – С. 130–141.
13. Самарский А.А., Вабищевич П.Н. Численные методы решения обратных задач математической физики. – 3-е изд. – М.: Издательство ЛКИ, 2009. – 480 с.
14. Лысенкова С.А. О математическом моделировании каталитического крекинга // Вестник кибернетики. – 2018. – № 4. – С. 107–110.

15. Микшина В.С. и др. О математическом моделировании каталитического крекинга: монография. – СПб.: Научно-технологические технологии, 2021. – С. 120.
16. Заикин П.В., Лысенкова С.А., Микшина В.С. Аналитическое решение системы дифференциальных уравнений математической модели кинетики процесса нефтепереработки // Вестник кибернетики. – 2018. – № 2. – С. 120–126.
17. Колинко П.А., Козлов Д.В. Химическая кинетика в курсе физической химии. – Новосибирск, 2013. – 99 с.