DOI:10.16515/j.cnki.32-1722/n.2019.04.014

基于拟解的正则化参数选取法

胡宇清

(金陵科技学院理学院,江苏　南京　211169)

摘　要:线性不适定问题中 Tikhonov 正则化参数的有效选取一直是反问题领域研究的重要问题。在模型函数框架下,考虑了用显式迭代法求解一类拟解的近似方程,从而得到了 Tikhonov 正则化参数的近似选取。对于这种近似选取,在传统模型函数下基于拟解方程提出了选取正则化参数的新算法,并得到该算法的局部收敛性。最后,给出了求解不适定问题的数值实现,说明了算法的有效性。

关键词:Tikhonov 正则化;拟解;模型函数;迭代法;数值解

中图分类号:O241　　**文献标识码**:A　　**文章编号**:1672－755X(2019)04－0061－05

A Method for Choosing the Regularization Parameters Based on the Quasi-solution

HU Yu-qing

(Jinling Institute of Technology, Nanjing 211169, China)

Abstract: Research on choosing Tikhonov regularization parameters in linear ill-posed problems is an important field in inverse problem. Consider an approximation of the Tikhonov regularization parameters under the model function framework, which solves an approximate quasi-solution equation with an explicit expression iteratively. For this approximation, a new algorithm for determining regularization parameters based on the traditional model function and quasi-solution equation is proposed, which is proven to be local convergent. Numerical implementations for ill-posed problems are presented to illustrate the validity of the proposed algorithm.

Key words: Tikhonov regularization; quasi-solution; model functions; iterative solution; numerics

20 世纪以来,随着科学技术的不断发展,数学物理反问题引起了许多学者的广泛重视及深入研究。从数学角度来看,一些经典的反问题有:声波逆散射问题、第一类积分方程的求解、逆时热传导问题、椭圆方程 Cauchy 问题等[1-5]。在实际问题中反问题大量出现于医学图像重建与处理、地质探测、非损伤性探测等领域,它对应于由介质外部(或内部)可测得的相关数据来确定介质内部(或外部)的结构问题,甚至还可以确定介质的边界条件等信息。反问题得以飞速发展,与学者们不断提出的高效稳定的反问题算法[6-8]有着密切的联系。

反问题往往是不适定的,需要用正则化方法进行求解,因此正则化参数的选取非常重要,这将直接影响正则解与精确解之间的误差。文献[9]提出了基于吸收 Morozov 偏差原理,用模型函数的方法求解正

收稿日期:2019－09－02

基金项目:金陵科技学院博士科研启动基金(jit-b-201524);金陵科技学院校级科研孵化项目(jit-fhxm-201809)

作者简介:胡宇清(1984—),女,江苏扬州人,讲师,博士,主要从事声学和电磁学散射、逆散射理论研究与数值模拟。

则化参数。文献[10－11]对模型函数法加以改进，得到了基于吸收 Morozov 偏差原理且全局收敛的一些新模型函数算法。本文借助于由 Tikhonov 正则化方法提出的拟解概念，引入一个含待定参数且具有解析表达式的函数来构造拟解方程的局部逼近形式，从而求解得拟解方程的近似零点。这是一种迭代算法，在迭代过程中，模型函数的待定参数是不断更新的，并且得到了算法的收敛性。文中的数值算例验证了所提算法的可行性。

1 问题的叙述

考虑如下形式的反问题：

$$Kx=y \tag{1}$$

其中 K 是从希尔伯特空间 X 到 Y 的线性紧算子，故 K^{-1} 存在。假设算子 K 为单射，当右端项 $y\in K(X)$ 时，算子方程(1)有唯一的解。但在实际应用中，输入数据 y 经常被一些微小误差所影响，记 y^δ 为 y 的误差水平为 δ 的扰动数据，因此在有误差的右端数据 y^δ 满足 $\|y^\delta-y\|_Y\leqslant\delta$ 的条件下，考虑算子方程(1)的等价形式

$$Kx^\delta=y^\delta \tag{2}$$

但是因为：①若 $y^\delta\notin K(x)$，则式(2)无解；②若 $y^\delta\in K(x)$，当 $\delta\to0$ 时，算子 K^{-1} 无界，则式(2)的解 x^δ 可能不收敛到方程的精确解 x，所以我们无法从式(2)中直接解出 x 的近似值 x^δ。因而，解形如式(1)的线性不适定反问题，常用的方法是 Tikhonov 正则化，其基本思想为求泛函

$$J_\alpha(x)=\|Kx-y^\delta\|_Y^2+\alpha\|x\|_X^2 \tag{3}$$

的极小元 $x^{\alpha(\delta),\delta}$，从而得到式(1)的稳定近似解，其中 $\alpha=\alpha(\delta)>0$ 为正则化参数，应适当选取，使得泛函式(3)的极小元 $x^{\alpha(\delta),\delta}$满足当$\delta\to0$ 时 $x^{\alpha(\delta),\delta}\to x$。该正则化解一方面可使 $\|Kx-y^\delta\|_Y^2$ 较小，另一方面通过罚项 $\alpha\|x\|_X^2$ 保证解的稳定性。

在正则化方法中，正则化参数的选取起着至关重要的作用，其选取的结果直接影响正则化解与精确解的近似程度。因此正则化参数的有效选取一直是不适定问题研究中的一个重要课题。本文在 Tikhonov 正则化下，基于拟解方程给出正则化参数的模型函数选取方法。首先由 Tikhonov 正则化的相关结论给出拟解方程。

2 拟解方程

引理 1[1-2]：设 $y\in Y$，$\alpha>0$，且 $x^{\alpha(\delta),\delta}$是方程

$$\alpha x^{\alpha(\delta),\delta}+K^*Kx^{\alpha(\delta),\delta}=K^*y \tag{4}$$

的唯一解，则有如下结论：①$x^{\alpha(\delta),\delta}$连续地依赖于$\alpha$，$y$；②映射 $\alpha\to\|x^{\alpha(\delta),\delta}\|_X$ 非单调增，且有 $\lim\limits_{\alpha\to+\infty}x^{\alpha(\delta),\delta}=0$；③映射 $\alpha\to\|Kx^{\alpha(\delta),\delta}-y\|_Y$ 非单调减，且有$\lim\limits_{\alpha\to0}Kx^{\alpha(\delta),\delta}=y$；④若 $K^*y\neq0$，则映射 $\alpha\to\|x^{\alpha(\delta),\delta}\|_X$ 为严格单调减，映射 $\alpha\to\|Kx^{\alpha(\delta),\delta}-y\|_Y$ 为严格单调增。

在精确解的相关先验信息下，从优化理论角度看，Tikhonov 正则化方法可以看成两个带约束的优化问题。

问题 1：假设 $\delta>0$，在约束条件 $\|Kx-y\|\leqslant\delta$ 下求 $\|x\|$ 的极小值(偏差原理)。

问题 2：假设 $\rho>0$，在约束条件 $\|x\|\leqslant\rho$ 下求 $\|Kx-y\|$ 的极小值 (拟解，Ivanov，1962)[12]。问题 2 的等价形式为

$$\|Kx^{\rho,\delta}-y\|=\inf\{\|Kx-y\|:\|x\|\leqslant\rho\},\qquad\rho>0$$

其中 $x^{\rho,\delta}:=x^{\alpha(\delta),\delta}$，既是泛函式(3)达到极小值时的极小元也是式(1)的解，称为算子方程(1)的具有模约束 ρ 的拟解。

定理 1：假设 K 为从希尔伯特空间 X 到 Y 有界的一一的线性算子，$K(X)$在 Y 中稠密，在 $\rho>0$ 下，$\forall y\in Y$，式(1)有唯一的具有模约束 ρ 的拟解。

根据拟解的定义,具有模约束 ρ 的拟解可以看成是 Tikhonov 正则化方法中 α 的选取使得 $x^{\alpha(\delta),\delta}=(\alpha I+K^*K)^{-1}K^*y$[2]满足 $\|x^{\rho,\delta}\|=\rho$ 的正则化解。因此提出拟解方程

$$\|x^{\rho,\delta}\|=\rho \tag{5}$$

这是一个关于正则化参数 α 的非线性方程。如何有效求解式(5),成为正则化选取的关键。文献[2]中用牛顿迭代法求解了拟解式(5),但迭代初值 α 的选取有限制条件 $\alpha\rho\leqslant\|K\|\delta$。基于 Morozov 偏差原理,文献[9]中用牛顿迭代法及拟牛顿法解了偏差方程,但需要正则化参数 α 的一个非常好的初始猜测值,这在实际应用时是不合适的。在文献[10-11]中提出了用模型函数法求解偏差方程,并得到了全局收敛性,故本文在拟解式(5)的基础上构造模型函数,进而用迭代法求解正则化参数。

3　拟解方程的改进形式

由于 Tikhonov 正则化解 $x^{\alpha(\delta),\delta}$ 依赖于 α,故在下文中将正则化解简记为 $x(\alpha)$,即 $x(\alpha):=x^{\alpha(\delta),\delta}$,$x'(\alpha)$,$x''(\alpha)$分别表示 $x^{\alpha(\delta),\delta}$关于 α 的一阶、二阶导数。

取定 $\alpha>0$,记函数 $F(\alpha)$为泛函式(3)的极小值,即

$$F(\alpha):=\frac{1}{2}\min_{x\in X}J_\alpha(x)=\frac{1}{2}\|Kx(\alpha)-y^\delta\|_Y^2+\frac{\alpha}{2}\|x(\alpha)\|_X^2$$

$F(\alpha)$和 $x(\alpha)$都是关于 α 的无穷次可微函数,$x(\alpha)$和 $x'(\alpha)$分别满足如下 2 个等式:

$$\alpha x(\alpha)+K^*Kx(\alpha)=K^*y^\delta,\quad \alpha x'(\alpha)+K^*Kx'(\alpha)=-x(\alpha)$$

对任意的 $\alpha>0$,通过计算可得

$$F'(\alpha)=\frac{1}{2}\|x(\alpha)\|^2,\quad F''(\alpha)=-(\alpha\|x'(\alpha)\|^2+\|Kx'(\alpha)\|^2)$$

当且仅当 $y^\delta\in\ker K^*$ 时 $x(\alpha)=0$,因此在下面的讨论中都假设 $y^\delta\notin\ker K^*$,从而由 $x(\alpha)\neq0$,得 $x'(\alpha)\neq0$,最终推得:$F'(\alpha)>0$,$F''(\alpha)<0$。

根据 $F(\alpha)$的定义,可得

$$2F(\alpha)+2\alpha F'(\alpha)+\|Kx(\alpha)\|^2=\|y^\delta\|^2 \tag{6}$$

由 $F'(\alpha)$的表达式,拟解式(5)可改写为

$$N(\alpha):=F'(\alpha)-\frac{1}{2}\rho^2=0 \tag{7}$$

从而 $N'(\alpha)=F''(\alpha)<0$。由 $F(\alpha)$的性质,可得拟解式(7)一定有解。

定理 2:假设 K 为从希尔伯特空间 X 到 Y 的有界的一一的线性算子,$K(X)$在 Y 中稠密,则拟解式(7)存在唯一解。

证明:由式(7)得 $N'(\alpha)=F''(\alpha)<0$,$N(\alpha)$为关于 α 的单调减函数。根据引理 1 中结论①、②知,$N(\alpha)$是 α 的连续函数,且 $\lim\limits_{\alpha\to\infty}N(\alpha)=-\frac{1}{2}\rho^2<0$。另一方面,由 $K(X)$在 Y 中稠密及引理 1 中结论③知,一定存在充分小的 $\alpha>0$,使得 $N(\alpha)>0$,从而 $N(\alpha)$有唯一的零点。

4　基于拟解方程的模型函数及其算法

虽然 $F(\alpha)$有较好的性质,但其具体形式未知,所以直接求解拟解式(7)的数值实现较难,计算量较大,故考虑用模型函数法求解。引进函数 $F(\alpha)$的具有明确表达式的且含有待定参数的近似函数 $m(\alpha)$,进而拟解式(7)可以近似为

$$m'(\alpha)-\frac{1}{2}\rho^2=0 \tag{8}$$

通过不断更新模型函数 $m(\alpha)$中的待定参数使其更好地逼近无明确表达式的函数 $F(\alpha)$,从而求解近似式(8)可得求解拟解方程的迭代算法。

因为 $\|Kx(\alpha)\|^2$ 与函数 $F(\alpha)$的关系未知,故文献[10]中考虑的传统模型函数是将式(6)中的 $\|Kx(\alpha)\|^2$

局部近似于 $T\|x(\alpha)\|^2=2TF'(\alpha)$，其中 T 为常数。记 $F(\alpha)$ 的模型函数为 $m(\alpha)$，将 $F(\alpha)$ 的模型函数 $m(\alpha)$ 代入式(6)得 $m(\alpha)+\alpha m'(\alpha)+Tm'(\alpha)=\frac{1}{2}\|y^\delta\|^2$，解出该微分方程 $m(\alpha)=\frac{1}{2}\|y^\delta\|^2+\frac{C}{T+\alpha}$，其中 C 和 T 为需要迭代得到的两个常数，从而新的正则化参数的近似值由拟解的近似式(8)得到。

算法步骤：1)给定初始值 $k=0$，拟解的近似式(8)的零点 α_0，迭代误差 $\varepsilon>0$ 和模约束 ρ；

2)解正则化式(4)得到 $x(\alpha_k)$，并计算 $F(\alpha_k)$，$F'(\alpha_k)$；

3)从关系式 $\begin{cases} F(\alpha_k)=m_k(\alpha_k)=\frac{1}{2}\|y^\delta\|^2+\frac{C_k}{T_k+\alpha_k} \\ F'(\alpha_k)=m'_k(\alpha_k)=-\frac{C_k}{(T_k+\alpha_k)^2} \end{cases}$ 中解出 C_k 和 T_k：

$$\begin{cases} C_k=-\frac{(\|Kx(\alpha_k)\|^2+\alpha_k\|x(\alpha_k)\|^2)^2}{2\|x(\alpha_k)\|^2} \\ T_k=\frac{\|Kx(\alpha_k)\|^2}{\|x(\alpha_k)\|^2} \end{cases} \tag{9}$$

4)得到第 k 步的模型函数 $m_k(\alpha)=\frac{1}{2}\|y^\delta\|^2+\frac{C_k}{T_k+\alpha}$；

5)求解拟解的近似方程 $N_k(\alpha)=m'_k(\alpha)-\frac{1}{2}\rho^2=0$ 得其零点 α_{k+1}；

6)当 $|\alpha_{k+1}-\alpha_k|\leqslant\varepsilon$ 时迭代停止，否则令 $k:=k+1$，返回第1步。

式(9)中迭代更新参数 T 时 T_k 的表达式正是引进模型函数时的近似关系 $\|Kx(\alpha)\|^2\approx T\|x(\alpha)\|^2$。因此迭代更新参数 T，C 最终得到的 $m(\alpha)$ 是 $F(\alpha)$ 的一个有效近似。

定理3：若 $N_k(\alpha_k)<0$ 且 α_k 充分小，则拟解的近似方程 $N(\alpha)=0$ 有唯一解，这种方法得到的解是局部收敛的。

5 基于拟解方程的模型函数法数值算例

考虑第一类积分方程

$$\int_0^1 e^{ts}x(s)\mathrm{d}s=\frac{e^{t+1}-1}{t+1},\qquad 0\leqslant t\leqslant 1$$

可知方程有唯一的精确解 $x(t)=e^t$。对观测数据 $u=\frac{e^{t+1}-1}{t+1}$ 增加很小的扰动得

$$u^\delta=u+\delta\sin t$$

此时积分方程的求解是不适定的，需要用正则化方法求解。我们取了初始值 $\alpha_0=0.001$，$\rho=2$，经过24次迭代以后得到正则化参数 $\alpha=8.294\times10^{-5}$，进一步得该积分方程的正则化解，见图1。

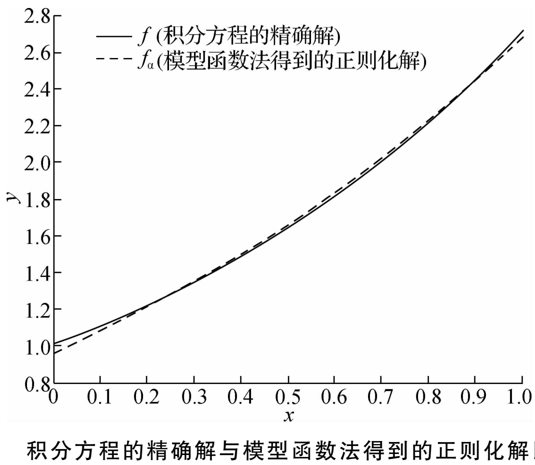

图1 积分方程的精确解与模型函数法得到的正则化解比较

选取了不同的初始值 α_0 和 ρ,对数值结果进行了比较(表 1)。从表 1 可以发现,模约束 ρ 的取值不宜过小,太小的话迭代步数比较多。

从图 1 和表 1 可以看出本文所提算法是可行的。

表 1　选取不同初始值对应结果比较

ρ	初始值 α_0	正则化参数 α	迭代步数
1.8	3	3.579 3e−3	348
	1	3.577 3e−3	347
	0.1	3.581 3e−3	331
	0.01	3.576 9e−3	212
2	3	9.138 2e−5	71
	1	9.114 5e−5	70
	0.1	9.034 0e−5	62
	0.01	8.513 1e−5	45
3	3	1.261 5e−5	21
	1	9.087 7e−6	21
	0.1	1.470 0e−5	17
	0.01	1.302 7e−5	13

6　结　语

本文考虑了 Tikhonov 正则化过程中正则化参数的选取,构造了拟解的近似方程。由于函数 $F(\alpha)$的具体形式未知,故提出含待定参数且有解析表达式的模型函数 $m(\alpha)$近似 $F(\alpha)$,通过对拟解近似方程的逐步迭代,得到其近似零点,该零点即为正则化参数。从数值算例可以看出,基于拟解方程的模型函数法是有效的。

参考文献:

[1] Kirsh A. An introduction to the mathematical theory of inverse problems[M]. New York:Springer-Verlag,1996
[2] 刘继军. 不适定问题的正则化方法及应用[M]. 北京:科学出版社,2005
[3] Klibanov M V. A phaseless inverse scattering problem for the 3-D Helmholtz equation[J]. Inverse Probl. Imaging,2017,11:263 − 276
[4] Shin J. Inverse obstacle backscattering problems with phaseless data[J]. Euro. J. Appl. Math,2016,27:111 − 130
[5] Cakoni F,Colton D,Haddar H. Inverse scattering theory and transmission eigenvalues[M]. Philadelphia:SIAM,2016
[6] Vogel C R. Computational methods for inverse problems[M]. Philadelphia:SIAM,2002
[7] Cakoni F,Teresa I D,Monk P. Nondestructive testing of delaminated interfaces between two materials using electromagnetic interrogation[J]. Inverse Problems,2018,34,065005
[8] Monk P,Selgas V,Yang F. Near-field linear sampling method for an inverse problem in an electromagnetic waveguide[J]. Inverse Problems,2019,35,065001
[9] Kunisch K,Zou J. Iterative choices of regularization parameters in linear inverse problems[J]. Inverse Problems,1998,14:1247 − 1264
[10] Xie J L,Zou J. An improved model function method for choosing regularization parameters in linear inverse problems[J]. Inverse Problems,2002,18:631 − 643
[11] Liu J J,Ni M. A model function method for determining the regularization parameters in potential approach for the recovery of scattered wave[J]. Applied Numerical Mathematics,2008,58:1113 − 1128
[12] Morozov V A. Methods for solving incorrectly posed problems[M]. New York:Springer-Verlag,1984

(责任编辑:湛　江)