

УДК: 519.85

О модификации метода покомпонентного спуска для решения некоторых обратных задач математической физики

Н. В. Плетнев^а, В. В. Матюхин^б

Московский физико-технический институт (национальный исследовательский университет),
Россия, 141701, Московская обл., г. Долгопрудный, Институтский пер., 9

E-mail: ^а nikita_pletnev@list.ru, ^б vladmatyukh@gmail.com

Получено 15.02.2023.

Принято к публикации 23.02.2023.

Статья посвящена решению некорректно поставленных задач математической физики для эллиптических и параболических уравнений, а именно задачи Коши для уравнения Гельмгольца и ретроспективной задачи Коши для уравнения теплопроводности с постоянными коэффициентами. Эти задачи сводятся к задачам выпуклой оптимизации в гильбертовом пространстве. Градиенты соответствующих функционалов вычисляются приближенно с помощью решения двух корректных задач. Предлагается метод решения исследуемых задач оптимизации — покомпонентный спуск в базисе из собственных функций связанного с задачей самосопряженного оператора. Если бы было возможно точное вычисление градиента, то этот метод давал бы сколь угодно точное решение задачи в зависимости от количества рассматриваемых элементов базиса. В реальных случаях возникновение погрешностей при вычислениях приводит к нарушению монотонности, что требует применения рестартов и ограничивает достижимое качество. В работе приводятся результаты экспериментов, подтверждающие эффективность построенного метода. Определяется, что новый подход превосходит подходы, основанные на использовании градиентных методов оптимизации: он позволяет достичь лучшего качества решения при значительно меньшем расходе вычислительных ресурсов. Предполагается, что построенный метод может быть обобщен и на другие задачи.

Ключевые слова: обратные задачи, выпуклая оптимизация, оптимизация в гильбертовом пространстве, методы первого порядка, покомпонентный спуск, неточный оракул

Исследование выполнено за счет гранта Российского научного фонда (проект № 21-71-30005), <https://rscf.ru/project/21-71-30005/>.

UDC: 519.85

On the modification of the method of component descent for solving some inverse problems of mathematical physics

N. V. Pletnev^a, V. V. Matyukhin^b

Moscow Institute of Physics and Technology,
9 Institutskiy per., Dolgoprudny, Moscow region, 141701, Russia

E-mail: ^a nikita_pletnev@list.ru, ^b vladmatyukh@gmail.com

Received 15.02.2023.

Accepted for publication 23.02.2023.

The article is devoted to solving ill-posed problems of mathematical physics for elliptic and parabolic equations, such as the Cauchy problem for the Helmholtz equation and the retrospective Cauchy problem for the heat equation with constant coefficients. These problems are reduced to problems of convex optimization in Hilbert space. The gradients of the corresponding functionals are calculated approximately by solving two well-posed problems. A new method is proposed for solving the optimization problems under study, it is component-by-component descent in the basis of eigenfunctions of a self-adjoint operator associated with the problem. If it was possible to calculate the gradient exactly, this method would give an arbitrarily exact solution of the problem, depending on the number of considered elements of the basis. In real cases, the inaccuracy of calculations leads to a violation of monotonicity, which requires the use of restarts and limits the achievable quality. The paper presents the results of experiments confirming the effectiveness of the constructed method. It is determined that the new approach is superior to approaches based on the use of gradient optimization methods: it allows to achieve better quality of solution with significantly less computational resources. It is assumed that the constructed method can be generalized to other problems.

Keywords: inverse problems, convex optimization, optimization in a Hilbert space, first order methods, component descent, imprecise oracle

Citation: *Computer Research and Modeling*, 2023, vol. 15, no. 2, pp. 301–316 (Russian).

The research was supported by Russian Science Foundation (project No. 21-71-30005), <https://rscf.ru/en/project/21-71-30005/>.

1. Введение

Теория обратных и некорректных задач — обширная и бурно развивающаяся область математики, имеющая многообразные приложения в физике, астрономии, геофизике. Если в прямых задачах ищут описание явлений по начальным условиям и параметрам среды, то в обратных — наоборот. Часто такие задачи оказываются некорректно поставленными и поэтому не могут быть решены обычными методами.

В монографии [Kabanikhin, 2012] предпринята попытка описать все известные на данный момент задачи такого рода. Например, некорректно поставленными являются задача Коши для уравнения Гельмгольца и ретроспективные задачи Коши для уравнения теплопроводности, что будет доказано в § 3.

Настоящая работа посвящена их решению путем сведения к задачам оптимизации в гильбертовых пространствах с дальнейшим применением методов оптимизации первого порядка, то есть методам, использующим лишь значения функции и ее градиента.

Эллиптические уравнения, к которым относится и уравнение Гельмгольца, имеют многообразные применения в физических исследованиях. Однако задача Коши для уравнений данного класса некорректна, то есть ее решение не является непрерывно зависящим от начальных условий (доказано в § 3). Поэтому применение для ее решения численных методов затруднено. Точно такие же проблемы свойственны ретроспективным задачам Коши для уравнения теплопроводности.

Однако существуют достаточно точные методы решения краевых задач для уравнения Гельмгольца и прямых задач Коши для уравнения теплопроводности. Для получения подобной задачи, имеющей то же решение, что и исходная задача Коши, необходимо решить операторное уравнение. Это, в свою очередь, делается путем решения соответствующей оптимизационной задачи. Такой подход описывается, например, в статье [Kabanikhin et al., 2014]. Его развитие осуществлено в работе [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022].

Поскольку решение данных задач в любом случае требует применения численных методов, при вычислении градиента возникают погрешности, зависящие от выбора шага сетки. Соответственно, требуется баланс между точностью вычисления градиента и скоростью сходимости градиентного метода.

Существуют два основных подхода к описанию шума в градиенте, введенных в работе [Polyak, 1987]:

$$\begin{aligned} \|\tilde{\nabla}J(q) - \nabla J(q)\| &\leq \delta \quad \forall q \in Q \text{ — аддитивный шум;} \\ \|\tilde{\nabla}J(q) - \nabla J(q)\| &\leq \alpha \|\nabla J(q)\| \quad \forall q \in Q, \alpha \in [0; 1), \text{ — относительный шум.} \end{aligned} \quad (1)$$

Если коэффициенты рассматриваемых уравнений постоянны, то спектр соответствующих задачам операторов может быть вычислен аналитически. Это позволяет применять покомпонентный спуск в базисе из их собственных векторов. Качество решения задач с его помощью оказывается значительно лучше, а вычислительная сложность значительно ниже, чем при использовании градиентных методов.

Основным содержанием работы являются реализация описанных идей решения некорректной задачи, а также их экспериментальная проверка: проверка применимости к решению покомпонентного спуска в базисе из собственных векторов соответствующего задаче самосопряженного оператора, сравнение данного подхода с градиентными методами.

Структура работы: в § 2 приводится постановка задач и описывается, как они сводятся к задачам оптимизации; § 3 обосновывает некорректность исходных задач. В § 4 исследуются

свойства оптимизируемых функций и их градиентов. § 5 посвящен изучению спектров самосопряженных операторов, соответствующих задачам. В § 6 вводится метод покомпонентного спуска, исследование которого и представляет собой основное содержание работы. § 7 содержит описание метода вычисления градиента с помощью разностных схем. В § 8 приводятся результаты экспериментов. § 9 заключительный, в нем собраны ключевые выводы.

2. Постановка задач оптимизации

2.1. Задача Коши для уравнения Гельмгольца

Аналогично статье [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022] рассматривается задача

$$\begin{cases} \Delta u + \kappa^2 u = 0, & (x, y) \in \Omega = (0, 1) \times (0, 1), \\ u|_{x=0} = f(y), & y \in [0, 1], \\ u_x|_{x=0} = g(y), & y \in [0, 1], \\ u|_{y=0} = u|_{y=1} = 0, & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (2)$$

Соответствующая краевая (корректная) задача:

$$\begin{cases} \Delta u + \kappa^2 u = 0, & (x, y) \in \Omega = (0, 1) \times (0, 1), \\ u_x|_{x=0} = g(y), & y \in [0, 1], \\ u|_{y=0} = u|_{y=1} = 0, & x \in [0, 1], \\ u|_{x=1} = q(y), & y \in [0, 1]. \end{cases} \quad (3)$$

На гильбертовом пространстве со стандартным скалярным произведением

$$H = \{q \in C^1[0, 1] \cap L^2[0, 1]: q(0) = q(1) = 0\},$$

которому принадлежит решение обратной задачи, определяется оператор $A: H \rightarrow H$ следующим образом:

$$(Aq)(y) = u(0, y) \quad \forall y \in (0, 1),$$

где u — решение краевой задачи (3).

Тогда исследуемая задача принимает вид

$$Aq = f,$$

или

$$J(q) = \frac{1}{2} \|Aq - f\|_2^2 \rightarrow \min_{q \in H}.$$

2.2. Ретроспективные задачи Коши для уравнения теплопроводности

Задача Коши для уравнения теплопроводности может иметь разные постановки в зависимости от граничных условий. Например, задача с бесконечным стержнем накладывает лишь условие ограниченности решения. Задача с конечным стержнем может иметь граничные условия на значение функции (физический смысл: известна температура на концах) или на частные производные по пространственным координатам (физический смысл: известна скорость теплообмена). Важный случай последнего — нулевые частные производные, то есть концы стержня теплоизолированы.

2.2.1. Задача с граничными условиями на значение функции

Рассматривается задача, сформулированная в монографии [Kabanikhin, 2012]:

$$\begin{cases} u_t - \kappa^2 u_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ u|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{t=1} = f(x), & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (4)$$

Соответствующая корректная задача Коши:

$$\begin{cases} u_t - \kappa^2 u_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ u|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{t=0} = q(x), & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (5)$$

На гильбертовом пространстве со стандартным скалярным произведением

$$H = \{q \in C^1[0, 1] \cap L^2[0, 1]\},$$

которому принадлежит решение обратной задачи, определяется оператор $A: H \rightarrow H$ следующим образом:

$$(Aq)(x) = u(x, 1) \quad \forall x \in (0, 1),$$

где u — решение корректной задачи (5).

Тогда исследуемая задача принимает вид

$$Aq = f,$$

или

$$J(q) = \frac{1}{2} \|Aq - f\|_2^2 = \frac{1}{2} \int_0^1 |u(x, 1) - f(x)|^2 dx \rightarrow \min_{q \in H}$$

при условиях $u(x, 0) = q(x)$, $u(0, t) = a(t)$, $u(1, t) = b(t)$, $u_t(x, t) - \kappa^2 u_{xx}(x, t) = 0$.

2.2.2. Задача с граничными условиями на производную по пространственной координате

Рассматривается задача, сформулированная в монографии [Kabanikhin, 2012]:

$$\begin{cases} u_t - \kappa^2 u_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ u_x|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ u_x|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{t=1} = f(x), & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (6)$$

Соответствующая корректная задача Коши:

$$\begin{cases} u_t - \kappa^2 u_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ u_x|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ u_x|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{t=0} = q(x), & x \in [0, 1]. \end{cases} \quad (7)$$

На гильбертовом пространстве со стандартным скалярным произведением

$$H = \{q \in C^1[0, 1] \cap L^2[0, 1]\},$$

которому принадлежит решение обратной задачи, определяется оператор $A: H \rightarrow H$ следующим образом:

$$(Aq)(x) = u(x, 1) \quad \forall x \in (0, 1),$$

где u — решение корректной задачи (7).

Тогда исследуемая задача принимает вид

$$Aq = f,$$

или

$$J(q) = \frac{1}{2} \|Aq - f\|_2^2 = \frac{1}{2} \int_0^1 |u(x, 1) - f(x)|^2 dx \rightarrow \min_{q \in H}$$

при условиях $u(x, 0) = q(x)$, $u_x(0, t) = a(t)$, $u_x(1, t) = b(t)$, $u_t(x, t) - \kappa^2 u_{xx}(x, t) = 0$.

3. Некорректность поставленных задач Коши

Некорректность задачи Коши для уравнения Гельмгольца была показана в статье [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022]. Аналогично доказывается некорректность ретроспективных задач Коши для уравнения теплопроводности.

Определение непрерывности решения по начальным условиям при фиксированных граничных условиях согласно учебному пособию [Тихонов, Самарский, 1999]:

$$\forall \varepsilon > 0 \exists \delta > 0: \forall f \in C^1[0, 1] \cap L^2[0, 1] \text{ т. ч. } \|f\|_2 < \delta \Leftrightarrow \|q\|_2 < \varepsilon,$$

где $q(y) = u(x, 0)$, а u — решение соответствующей задачи Коши (4) или (6).

При $\varepsilon = 1$ и фиксированном $\delta > 0$ рассматриваются задачи с однородными граничными условиями $a(t) = b(t) = 0$ и зависящими от натурального параметра (его значение будет выбрано позднее) начальными условиями $f_{1n}(x) = \delta \sin \pi n x$ для задачи (4) и $f_{2n}(x) = \delta \cos \pi n x$ для задачи (6).

При $i = 1, 2$ $\|f_{in}\|_2 = \frac{\delta}{\sqrt{2}} < \delta$. Решение ретроспективной задачи Коши имеет вид $u(x, t) = e^{\kappa^2 \pi^2 n^2 (1-t)} f_{in}(x)$. Тогда $q(x) = e^{\kappa^2 \pi^2 n^2} f_{in}(x)$ и $\|q\|_2 = e^{\kappa^2 \pi^2 n^2} \|f_{in}\|_2 = e^{\kappa^2 \pi^2 n^2} \frac{\delta}{\sqrt{2}}$.

Поскольку с ростом n данная величина стремится к бесконечности, при любом положительном δ существует n , при котором она превосходит ε . Соответственно, некорректность обеих ретроспективных задач Коши для уравнения теплопроводности доказана.

4. Вычисление градиентов функционалов

Градиент функционала, возникающего при решении задачи Коши для уравнения Гельмгольца (2), был вычислен в статье [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022]. Аналогично находятся градиенты функционалов для задач (4) и (6).

Градиент функционала для (4) вычисляется с помощью решения двух корректных задач:

$$\begin{cases} u_t - \kappa^2 u_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ u|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{t=0} = q(x), & x \in [0, 1], \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_t + \kappa^2 \psi_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ \psi|_{x=0} = \psi|_{x=1} = 0, & t \in [0, 1], \\ \psi|_{t=1} = u(x, 1) - f(x), & x \in [0, 1], \end{cases}$$

$$\nabla J(q)(x) = \psi(x, 0).$$

Замена $\psi(x, t) = \phi(x, 1 - t)$ приводит вторую задачу к тому же виду, что и первая. В таком случае

$$\nabla J(q)(x) = \phi(x, 1).$$

$\Gamma_1[a(t), b(t)](q(x))$ определяется как $v(x, 1)$, где v – решение корректной задачи

$$\begin{cases} v_t - \kappa^2 v_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ v|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ v|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ v|_{t=0} = q(x), & x \in [0, 1]. \end{cases}$$

Тогда градиент вычисляется с помощью решения двух задач Γ_1 :

$$\nabla J(q)(x) = \Gamma_1[0, 0](\Gamma_1[a(t), b(t)](q(x)) - f(x)).$$

Градиент функционала для (6) также вычисляется с помощью решения двух корректных задач:

$$\begin{cases} u_t - \kappa^2 u_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ u_x|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ u_x|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ u|_{t=0} = q(x), & x \in [0, 1] \end{cases}$$

$$\begin{cases} \psi_t + \kappa^2 \psi_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ \psi_x|_{x=0} = \psi_x|_{x=1} = 0, & t \in [0, 1], \\ \psi|_{t=1} = u(x, 1) - f(x), & x \in [0, 1], \end{cases}$$

$$\nabla J(q)(x) = \psi(x, 0).$$

Замена $\psi(x, t) = \phi(x, 1 - t)$ приводит вторую задачу к тому же виду, что и первая. В таком случае

$$\nabla J(q)(x) = \phi(x, 1).$$

$\Gamma_2[a(t), b(t)](q(x))$ определяется как $v(x, 1)$, где v – решение корректной задачи

$$\begin{cases} v_t - \kappa^2 v_{xx} = 0, & (x, t) \in \Omega = (0, 1) \times [0, 1), \\ v_x|_{x=0} = a(t), & t \in [0, 1], \\ v_x|_{x=1} = b(t), & t \in [0, 1], \\ v|_{t=0} = q(x), & x \in [0, 1]. \end{cases}$$

Тогда градиент вычисляется с помощью решения двух задач Γ_2 :

$$\nabla J(q)(x) = \Gamma_2[0, 0](\Gamma_2[a(t), b(t)](q(x)) - f(x)).$$

Результат аналогичен задаче (4).

5. Спектры операторов

Пусть A — оператор, введенный при постановке задачи оптимизации для некорректной задачи Коши (2), (4) или (6). Он является линейным лишь при нулевых граничных условиях $g(y) \equiv 0$ (для уравнения Гельмгольца) или $a(t) = b(t) \equiv 0$ (для уравнения теплопроводности). Обозначим такой линейный оператор A_0 .

$$\begin{aligned} \|\nabla J(q_1) - \nabla J(q_2)\|_2 &= \|A^*(Aq_1 - f) - A^*(Aq_2 - f)\|_2 = \|A^*(Aq_1 - Aq_2)\|_2 = \\ &= \|A^*A_0(q_1 - q_2)\|_2 \leq L\|q_1 - q_2\|_2, \end{aligned}$$

где L — наибольшее собственное число оператора A^*A_0 (поскольку он самосопряженный и неотрицательно определенный, все собственные числа — вещественные и неотрицательные, а наибольшее из них является константой Липшица градиента). Соответственно, градиент липшицев.

Собственные значения оператора A^*A_0 для задачи (2) были найдены в статье [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022]. При $\kappa \leq \pi$ $\lambda_m = \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \sqrt{\pi^2 m^2 - \kappa^2}}$.

5.1. Собственные значения оператора A^*A_0 для задачи (4)

Всякая непрерывно дифференцируемая функция $q(x)$, принимающая на концах отрезка $[0, 1]$ нулевые значения, раскладывается в ряд по системе функций $\{u_m(x)\}_{m=1}^{\infty}$, где $u_m(x) = \sin \pi m x$.

$$\Gamma_1[0, 0](u_m(x)) = e^{-\kappa^2 \pi^2 m^2} u_m(x) \Rightarrow \lambda_m(A^*A_0) = e^{-2\kappa^2 \pi^2 m^2}.$$

Соответственно, $L = \lambda_1(A^*A_0) = e^{-2\kappa^2 \pi^2}$.

5.2. Собственные значения оператора A^*A_0 для задачи (6)

Всякая непрерывно дифференцируемая функция $q(x)$, производная которой принимает на концах отрезка $[0, 1]$ нулевые значения, раскладывается в ряд по системе функций $\{v_m(x)\}_{m=0}^{\infty}$, где $v_m(x) = \cos \pi m x$ при $m \in \mathbb{N}$, $v_0(x) = 1$.

$$\begin{aligned} \Gamma_2[0, 0](v_m(x)) &= e^{-\kappa^2 \pi^2 m^2} v_m(x) \Rightarrow \lambda_m(A^*A_0) = e^{-2\kappa^2 \pi^2 m^2} \quad \text{при } m > 0; \\ \Gamma_2[0, 0](v_0(x)) &= v_0(x) \Rightarrow \lambda_0 = 1. \end{aligned}$$

Соответственно, $L = \lambda_0(A^*A_0) = 1$.

5.3. Следствия

Для обоих операторов, связанных с уравнением теплопроводности, $\lambda_m = e^{-2\kappa^2 \pi^2 m^2}$. Следовательно, даже отношение соседних собственных значений очень велико и неограниченно растет (в отличие от уравнения Гельмгольца, для которого они образовывали приблизительно геометрическую прогрессию).

Такой характер спектра приводит к очень медленной сходимости градиентных методов, что будет объяснено ниже.

Предполагая, что решение задачи существует и равно q^* , преобразуем функционал:

$$J(q) = \frac{1}{2} \|Aq - f\|_2^2 = \frac{1}{2} \|Aq - Aq^*\|_2^2 = \frac{1}{2} \|A_0(q - q^*)\|_2^2 = \frac{1}{2} \langle q - q^*, A^*A_0(q - q^*) \rangle.$$

Пусть $\{w_m\}_{m=0}^{\infty}$ — система нормированных собственных функций оператора A^*A_0 (для задачи (2), (4) или (6)), $\{\lambda_m\}_{m=0}^{\infty}$ — соответствующая последовательность собственных значений A^*A_0 . Разложим $q - q^*$ по базису $\{w_m\}_{m=0}^{\infty}$:

$$q - q^* = \sum_{m=0}^{\infty} \alpha_m w_m.$$

Тогда преобразование функционала можно продолжить:

$$J(q) = \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \lambda_m \alpha_m^2, \quad \nabla J(q) = \sum_{m=0}^{\infty} \lambda_m \alpha_m w_m.$$

Соответственно, при использовании градиентного спуска

$$q^{(k+1)} = q^{(k)} - \frac{1}{\lambda_0} \nabla J(q^{(k)})$$

коэффициенты разложения меняются по правилу

$$\begin{aligned} \alpha_m^{(k+1)} &= \alpha_m^{(k)} \cdot \left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_0}\right), \\ J(q^{(k)}) &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \lambda_m \alpha_m^{(0)2} \cdot \left(1 - \frac{\lambda_m}{\lambda_0}\right)^{2k}, \\ J(q^{(k)}) - J(q^{(k+1)}) &= \frac{1}{2} \sum_{m=0}^{\infty} \lambda_m \alpha_m^{(k)2} \left(2 \frac{\lambda_m}{\lambda_0} - \left(\frac{\lambda_m}{\lambda_0}\right)^2\right). \end{aligned}$$

То есть вклад слагаемого в убывание функционала быстро убывает с ростом номера этого слагаемого. Однако сами слагаемые могут быть большими. Это приводит к замедлению сходимости градиентных методов.

Действительно, при одном применении градиентного спуска с длиной шага γ слагаемое $\frac{1}{2} \lambda_m \alpha_m^2$ заменяется на $\frac{1}{2} \lambda_m \alpha_m^2 (1 - \gamma \lambda_m)^2$. Если $\alpha_m \neq 0$, то при $\gamma > \frac{2}{\lambda_m}$ оно растёт. Поскольку нет оснований априори считать слагаемые с небольшими номерами нулевыми, возникает ограничение на длину шага: она не может значительно превосходить $\frac{2}{\lambda_0} = \frac{2}{L}$.

С другой стороны, если слагаемое с достаточно большим номером отклоняется от 0, итерация градиентного спуска с длиной шага γ не приводит к его заметному уменьшению.

Соответственно, если градиентный метод сходится для рассматриваемой задачи при произвольных граничных условиях и начальной точке (в общем случае с ненулевыми коэффициентами), то он сходится медленно.

Предполагается, что применение покомпонентного спуска в базисе из собственных функций оператора A^*A_0 позволит достичь лучшей сходимости.

6. Покомпонентный спуск с коэффициентами, зависящими от спектра

Как уже замечено, при спектре, характерном для уравнения теплопроводности, градиентный спуск с малым шагом сходится очень медленно. Градиентный спуск с большим шагом вообще не сходится, так как в данном случае входящие в функционал слагаемые с малыми номерами растут.

Использование ускоренных методов не может радикально изменить ситуацию, так как длина шага не увеличивается значительно. Соответственно, скорость убывания отдельных компонент остается малой.

Однако увеличение длины шага возможно, если в качестве направления спуска использовать не антиградиент, а собственные функции самосопряженного оператора A^*A_0 .

Коэффициенты α_m , конечно же, не могут быть вычислены непосредственно. Для этого было бы необходимо знать точное решение задачи. Однако если вычислен градиент в некоторой точке, то коэффициенты можно найти, используя скалярное произведение.

Из этих соображений получается следующий простой метод оптимизации:

$$q^{(k+1)} = q^{(k)} - \frac{\langle \nabla J(q^{(0)}), w_k \rangle}{\lambda_k} w_k. \quad (8)$$

В предположении, что все вычисления выполняются точно, каждый шаг данного метода обнуляет одно следующее слагаемое в бесконечном ряде, выражающем функционал.

Поскольку реальные вычисления содержат погрешности (краевые задачи, необходимые для вычисления градиента, решаются приближенно на сетке), решение задачи с использованием значения градиента лишь в одной точке невозможно. Требуется контроль убывания функционала на каждом шаге и перезапуски при нарушении монотонности.

Algorithm 1. Restarted coordinate descent

Input: $q^{(start)} \in Q, \{\lambda_m\}_{m=0}^{\infty}, \{w_m\}_{m=0}^{\infty}, N_{steps}, N_{restarts}$.

- 1: $q := q^{(start)}$;
- 2: **for** $n = 1 \dots N_{restarts}$ **do**
- 3: $q^{(n,0)} := q$
- 4: $g := \nabla J(q)$
- 5: **for** $k = 0 \dots N_{steps} - 1$ **do**
- 6: $q^{(n,k+1)} := q^{(n,k)} - \frac{\langle g, w_k \rangle}{\lambda_k} w_k$;
- 7: **if** $J(q^{(n,k+1)}) > J(q^{(n,k)})$ **then**
- 8: $q := q^{(n,k)}$
- 9: **break**;
- 10: **else**
- 11: $q := q^{(n,k+1)}$
- 12: **end if**
- 13: **end for**
- 14: **end for**

Output: q .

При работе данного алгоритма требуется $N_{restarts}$ вычислений градиента и не более $N_{restarts} \cdot N_{steps}$ вычислений функционала.

7. Разностные схемы для решения задач

Схема для приближенного решения корректной краевой задачи для уравнения Гельмгольца была рассмотрена в статье [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022]. Там же показано, что при шаге сетки h решение одной задачи требует решения системы линейных уравнений размера h^{-2} , то есть порядка h^{-6} арифметических операций.

Для решения задач Коши для уравнения теплопроводности используются явные схемы, описанные ниже.

На $[0, 1] \times [0, 1]$ задается сетка с шагами h по пространству и τ по времени, то есть

$$\{x = ih, t = j\tau \mid 0 \leq i \leq P, 0 \leq j \leq T\} \quad (Ph = T\tau = 1).$$

Γ_1 и Γ_2 аппроксимируются с помощью разностных схем первого порядка по τ и второго порядка по h :

$$\begin{cases} \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\tau} - \kappa^2 \frac{v_{i+1,j} - 2v_{i,j} + v_{i-1,j}}{h^2} = 0, & 1 \leq i \leq P-1, 1 \leq j \leq T-1, \\ v_{0,j} = a_j, & 1 \leq j \leq T-1, \\ v_{M,j} = b_j, & 1 \leq j \leq T-1, \\ v_{i,0} = q_i, & 0 \leq i \leq P, \end{cases} \quad (9)$$

$$\begin{cases} \frac{v_{i,j+1} - v_{i,j}}{\tau} - \kappa^2 \frac{v_{i+1,j} - 2v_{i,j} + v_{i-1,j}}{h^2} = 0, & 1 \leq i \leq P-1, 1 \leq j \leq T-1, \\ \frac{v_{1,j} - v_{0,j}}{h} = a_j, & 1 \leq j \leq T-1, \\ \frac{v_{M,j} - v_{M-1,j}}{h} = b_j, & 1 \leq j \leq T-1, \\ v_{i,0} = q_i, & 0 \leq i \leq P. \end{cases} \quad (10)$$

Разностная задача (9) аппроксимирует задачу Коши для уравнения теплопроводности с граничными условиями на значение Γ_1 , а (10) — задачу Коши для уравнения теплопроводности с граничными условиями на производную по пространственной координате Γ_2 .

Условие сходимости (спектральный признак Неймана) для явных схем дает условие применимости $\tau \leq \frac{h^2}{2\kappa^2}$.

Соответственно, вычислительные алгоритмы имеет второй порядок сходимости по h . Количество арифметических операций для решения одной задачи — порядка $h^{-1}\tau^{-1} \sim h^{-3}$.

8. Эксперименты

8.1. Сравнение покомпонентного спуска и градиентного метода для уравнения Гельмгольца

Рассматривается модельная задача (2) с $\kappa = 1$, $f(x) = x - x^2$, $g(x) = x - x^3$. Графики построены в логарифмическом масштабе.

Метод покомпонентного спуска сравнивается с методом подобных треугольников, который применялся к той же задаче в [Плетнев, Двуреченский, Гасников, 2022].

Рис. 1 показывает, что при большом шаге сетки покомпонентный спуск останавливается после нескольких итераций, причем достигаемая невязка функционала на порядок выше, чем для ускоренного градиентного метода. Это может быть объяснено плохой аппроксимацией базисных тригонометрических функций кусочно-линейными.

Рис. 2 показывает, что при уменьшении шага сетки покомпонентный спуск делает больше шагов, что обусловлено ростом точности вычислений. При этом невязка функционала оказывается меньше, чем для ускоренного градиентного метода. Вычислительная сложность покомпонентного спуска намного ниже, поскольку стоимость одной итерации такая же, а количество итераций намного меньше, чем у градиентного метода.

На рис. 3 показано убывание функционала при использовании покомпонентного спуска с шагом сетки $h = 0,01$. Вычисление градиента при этом очень затратно по времени и памяти, поэтому применить градиентный метод не удастся.

Соответственно, покомпонентный спуск позволяет достичь лучшего качества решения задачи Коши для уравнения Гельмгольца, чем ускоренный градиентный метод. Уменьшение шага сетки приводит к росту качества. Эти результаты собраны в таблице 1.

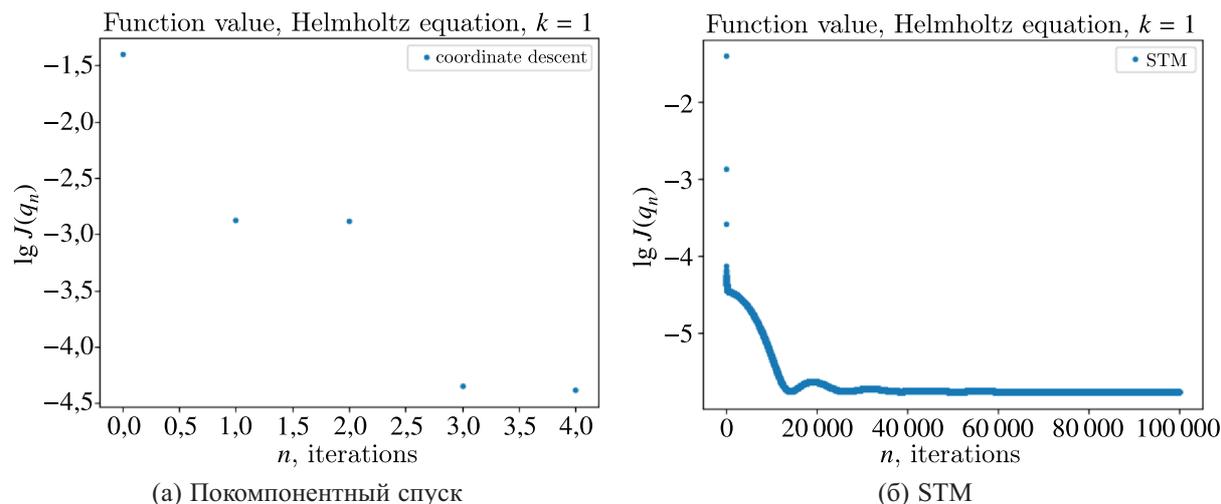


Рис. 1. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных методов при решении задачи (2) с использованием сетки с шагом $h = 0,05$

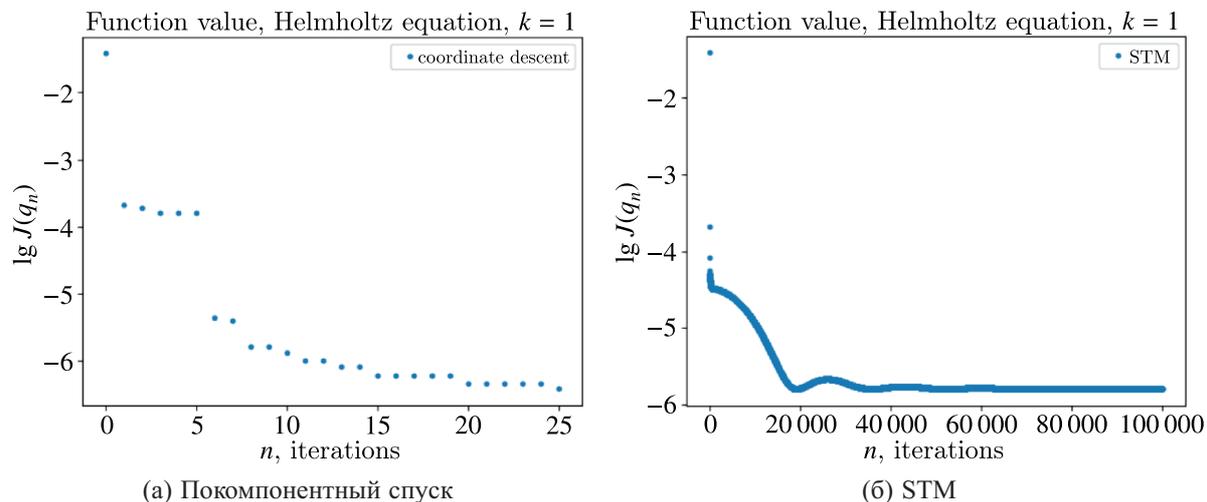


Рис. 2. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных методов при решении задачи (2) с использованием сетки с шагом $h = 0,02$

Таблица 1. Результаты работы методов с разным шагом сетки: минимальные достигнутые значения функционала. Начальное значение функционала $J(q_{(start)}) = 3,9 \cdot 10^{-2}$

h	0,05	0,02	0,01
Покомпонентный спуск	$4,12 \cdot 10^{-5}$	$3,72 \cdot 10^{-7}$	$5,32 \cdot 10^{-8}$
STM, 100 000 итераций	$1,68 \cdot 10^{-6}$	$1,60 \cdot 10^{-6}$	—

8.2. Сравнение покомпонентного спуска и градиентного метода для уравнения теплопроводности

Рассматривается модельная задача (4) с $\kappa = 0,1$, $f(x) = x - x^2$, $a(t) = t - t^2$, $b(t) = \sin \pi t$. Графики построены в логарифмическом масштабе.

Метод покомпонентного спуска сравнивается с методом подобных треугольников и простым градиентным спуском.

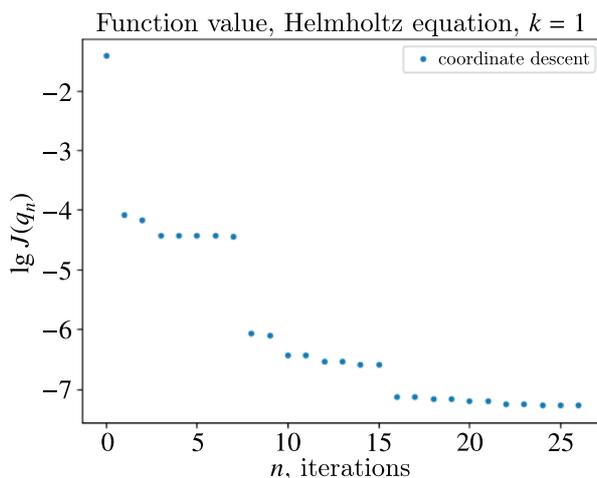


Рис. 3. Функционал в зависимости от количества итераций n для покомпонентного спуска при решении задачи (2) с использованием сетки с шагом $h = 0,01$

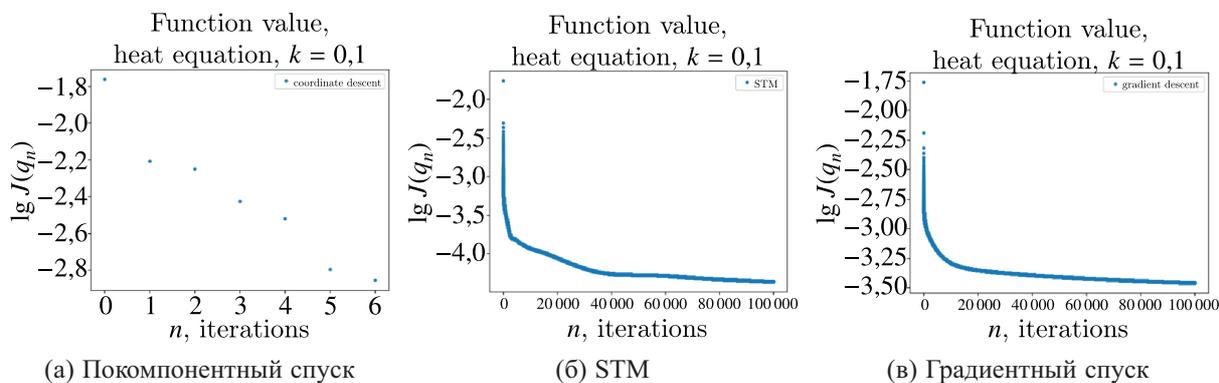


Рис. 4. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных методов при решении задачи (4) с использованием сетки с шагом $h = 0,05$

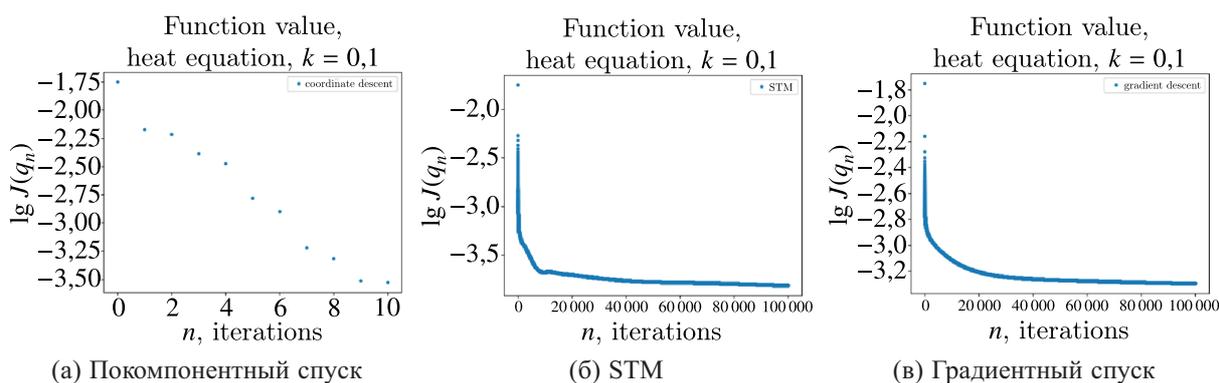


Рис. 5. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных методов при решении задачи (4) с использованием сетки с шагом $h = 0,02$

В таблице 2 собраны результаты. Они показывают, что для задачи (4) наблюдаются те же закономерности, что и для задачи (2): покомпонентный спуск превосходит градиентные методы при достаточно малой длине шага сетки; ускоренный градиентный метод превосходит обычный.

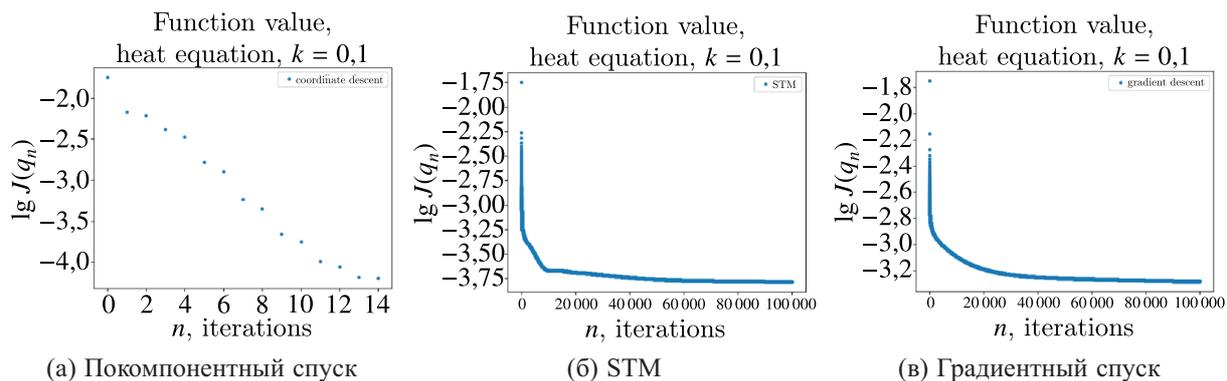


Рис. 6. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных методов при решении задачи (4) с использованием сетки с шагом $h = 0,01$

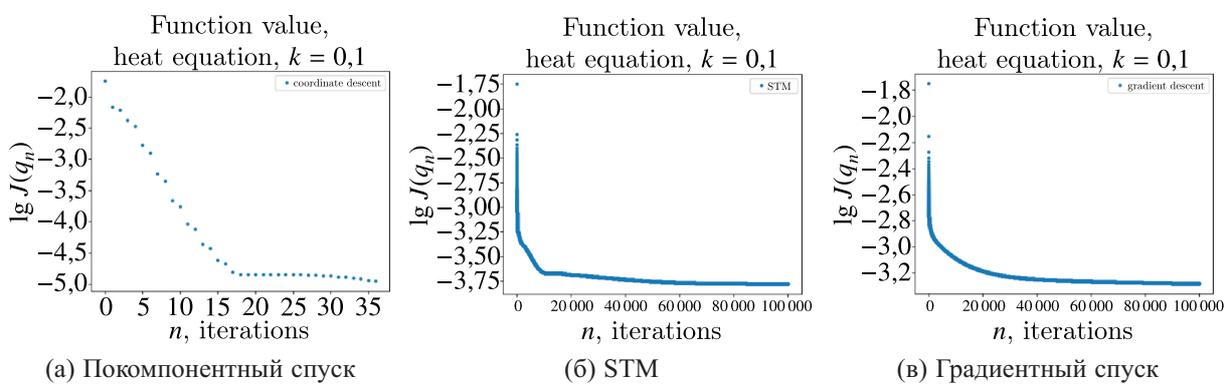


Рис. 7. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных методов при решении задачи (4) с использованием сетки с шагом $h = 0,005$

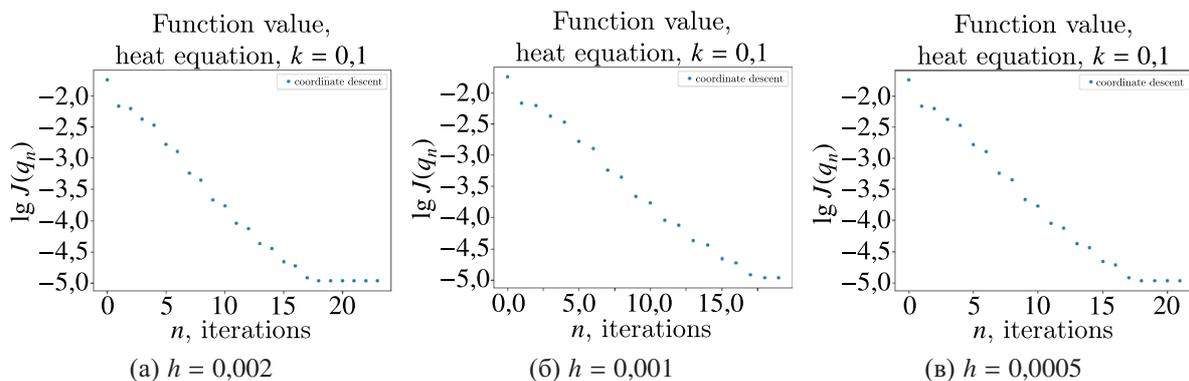


Рис. 8. Функционал в зависимости от количества итераций n для разных малых шагов сетки при решении задачи (4) методом покомпонентного спуска

Более того, для градиентных методов уменьшение длины шага увеличивает вычислительную сложность, но не повышает качество решения.

9. Заключение

Работа посвящена решению некоторых некорректных задач математической физики для эллиптических и параболических уравнений.

Таблица 2. Результаты работы методов с разным шагом сетки: минимальные достигнутые значения функционала. Начальное значение функционала $J(q_{(start)}) = 1,8 \cdot 10^{-2}$

h	0,05	0,02	0,01	0,005	0,002
Покомпонентный спуск	$1,4 \cdot 10^{-3}$	$2,9 \cdot 10^{-4}$	$6,35 \cdot 10^{-5}$	$1,11 \cdot 10^{-5}$	$1,09 \cdot 10^{-5}$
STM, 100 000 итераций	$4,33 \cdot 10^{-5}$	$1,53 \cdot 10^{-4}$	$1,63 \cdot 10^{-4}$	$1,65 \cdot 10^{-4}$	—
Градиентный спуск	$3,47 \cdot 10^{-4}$	$5,05 \cdot 10^{-4}$	$5,18 \cdot 10^{-4}$	$5,21 \cdot 10^{-4}$	—

Предложен новый метод оптимизации соответствующих функционалов, который использует спектр и собственные функции возникающих в задачах операторов, — покомпонентный спуск.

Проведены эксперименты, показывающие эффективность полученного метода. Выяснено, что при значительно меньшем расходе вычислительных ресурсов достигается намного лучшее качество решения, чем при использовании градиентных методов оптимизации.

Строгое математическое обоснование полученных результатов будет темой следующего исследования. Также планируется расширение применения нового метода на другие задачи.

Список литературы (References)

- Васильев Ф. П.* Методы оптимизации. Часть вторая: Оптимизация в функциональных пространствах. Регуляризация. Аппроксимация. — М.: МЦНМО, 2011.
Vasilyev F. P. Metody optimizatsii. Chast' vtoraya: Optimizatsiya v funktsional'nykh prostranstvakh. Regularizatsiya. Approksimatsiya [Optimization methods, part two: Optimization in function spaces. Regularization. Approximation]. — Moscow: MCCME, 2011 (in Russian).
- Гасников А. В.* Современные численные методы оптимизации. Метод универсального градиентного спуска: учебное пособие. — 2-е изд., испр. — М.: МЦНМО, 2021. — 272 с.
Gasnikov A. V. Sovremennye chislennyye metody optimizatsii. Metod universal'nogo gradientnogo spуска: uchebnoe posobie [Modern numerical optimization methods. Universal Gradient Descent Method: A Tutorial]. — Moscow: MCCME, 2021. — 272 p. (in Russian).
- Демянков В. Ф.* Минимакс: дифференцируемость по направлениям. — Л.: Изд-во Ленингр. ун-та, 1974.
Demyanov V. F. Minimax: differentsiruemost' po napravleniyam [Minimax: differentiability in directions]. — Leningrad: Isd-vo Leningr. un-ta, 1974 (in Russian).
- Плетнев Н. В., Двуреченский П. Е., Гасников А. В.* Применение градиентных методов оптимизации для решения задачи Коши для уравнения Гельмгольца // Компьютерные исследования и моделирование. — 2022. — Т. 14, № 2. — С. 417–444.
Pletnev N. V., Dvurechensky P. E., Gasnikov A. V. Primenenie gradientnykh metodov optimizatsii dlya resheniya zadachi Koshi dlya uravneniya Gel'mgol'tsa [Application of gradient optimization methods to solve the Cauchy problem for the Helmholtz equation] // Computer Research and Modeling. — 2022. — Vol. 14, No. 2. — P. 417–444 (in Russian).
- Рябенский В. С.* Введение в вычислительную математику: учебное пособие. — 2-е изд., испр. — М.: ФИЗМАТЛИТ, 2000. — 296 с.
Ryabenkiy V. S. Vvedenie v vychislitel'nyuyu matematiku: uchebnoe posobie [Introduction to Computational Mathematics: Textbook]. — Moscow: FIZMATLIT, 2000. — 296 p. (in Russian).
- Тихонов А. Н., Самарский А. А.* Уравнения математической физики: учебное пособие. — 6-е изд., испр. и доп. — М.: Изд-во МГУ, 1999.
Tikhonov A. N., Samarskiy A. A. Uravneniya matematicheskoi fiziki: uchebnoe posobie [Equations of mathematical physics: textbook]. — Moscow: izd-vo MGU, 1999 (in Russian).
- Danskin J. M.* The theory of Max Min. — Berlin: Springer, 1967.
- Gasnikov A., Kabanikhin S., Mohammed A., Shishlenin M.* Convex optimization in Hilbert space with applications to inverse problems // e-print, 2017. — URL: <https://arxiv.org/abs/1703.00267>

- Kabanikhin S., Shishlenin M. et al.* Comparative analysis of methods for regularizing an initial boundary value problem for the Helmholtz equation // *Journal of Applied Mathematics*. — 2014. — Vol. 2014, Article ID 786326. — 7 p. — URL: <https://arxiv.org/abs/1703.00267>
- Kabanikhin S. I.* Inverse and ill-posed problems: theory and applications. — Berlin: Walter de Gruyter GmbH & Co, 2012. — 459 p.
- Polyak B. T.* Introduction to optimization. — New York: Optimization Software, 1987.
- Polyak B. T.* Iterative algorithms for singular minimization problems // *Nonlinear Programming*. — Elsevier, 1981. — Vol. 4. — P. 147–166.