ДОКЛАДЫ РОССИЙСКОЙ АКАДЕМИИ НАУК. МАТЕМАТИКА, ИНФОРМАТИКА, ПРОЦЕССЫ УПРАВЛЕНИЯ, 2020, том 494, с. 17–20

МАТЕМАТИКА

УДК 517.988.68

ДВУХЭТАПНЫЙ МЕТОД РЕШЕНИЯ СИСТЕМ НЕЛИНЕЙНЫХ УРАВНЕНИЙ И ЕГО ПРИЛОЖЕНИЕ К ОБРАТНОЙ ЗАДАЧЕ ЗОНДИРОВАНИЯ АТМОСФЕРЫ

 Член-корреспондент РАН В. В. Васин[1,2,*], Г. Г. Скорик[1,2,]**

Поступило 04.06.2020 г.
После доработки 04.06.2020 г.
Принято к публикации 16.07.2020 г.

Для переопределенной системы нелинейных уравнений предлагается двухэтапный метод построения устойчивого к ошибкам приближенного решения. Первый этап состоит в построении регуляризованного семейства приближенных решений для нахождения нормальных квазирешений исходной системы. На втором этапе для аппроксимации регуляризованных квазирешений строится итерационный процесс, основанный на квадратичной аппроксимации тихоновского типа функционала и привлечении prox-метода. Для сформированного процесса ньютоновского типа доказывается теорема сходимости и устанавливается свойство фейеровости итераций. Обсуждается приложение двухэтапного метода к решению обратной задачи по восстановления относительного содержания тяжелой воды (HDO) в атмосфере по инфракрасным спектрам пропускания солнечного света через атмосферу.

Ключевые слова: нелинейная система, регуляризация, итерационный процесс, инфракрасный спектр, зондирование атмосферы, восстановление HDO

DOI: 10.31857/S2686954320050458

ВВЕДЕНИЕ

Обратные задачи теплового зондирования атмосферы, связанные с определением концентрации изотопомеров парниковых газов и водяного пара по спектрам инфракрасного излучения, измеренным сенсорами спутникового или наземного базирования, как правило, сводятся к решению системы нелинейных уравнений

$$P(z) = f, \quad z \in \mathbb{R}^n, \quad f \in \mathbb{R}^m. \tag{1}$$

При этом размерность m существенно больше, чем n, что приводит к переопределенности системы (1). В работе [1] был предложен метод решения системы нелинейных уравнений (1), в котором можно выделить следующие этапы построения приближенного решения:

тихоновская регуляризация системы (1)

$$\inf\left\{\|P(z) - f_\delta\|^2 + \alpha\left\langle B(z - \bar{z}), z - \bar{z}\right\rangle : z \in \mathbb{R}^n\right\}, \tag{2}$$

где B — симметричная положительно определенная матрица, $\bar{z}$ — некоторый фиксированный вектор пространства $\mathbb{R}^n$, $\|f - f_\delta\| \le \delta$;

в предположении, что оператор P дважды непрерывно дифференцируем, квадратичная аппроксимация целевой функции $\Psi(z)$ в задаче (2) и привлечение итерационного prox-метода для решения задачи минимизации с полученной квадратичной функцией, т.е.

$$z^{k+1} = \arg\min\left\{\Psi(z^k) + \Psi'(z^k)(z - z^k) + \right.$$
$$\left. + \frac{1}{2}\langle \Psi''(z^k)(z - z^k), z - z^k\rangle + \frac{1}{2}\beta\|z - z^k\|^2 : z \in \mathbb{R}^n\right\}. \tag{3}$$

Для численного нахождения очередного приближения в (3) привлекался метод наискорейшего спуска.

Как показано в [2], при условии разрешимости задачи в смысле наименьших квадратов

$$\inf\{\|P(z) - f\|^2 : z \in \mathbb{R}^n\} \tag{4}$$

регуляризованная задача (2) имеет решение z_α и при $\alpha(\delta) \to 0$, $\delta^2/\alpha(\delta) \to 0$, $\delta \to 0$ все предельные точки последовательности $\{z_{\alpha(\delta)}\}$ являются решениями задачи (4), ближайшими к вектору $\bar{z}$, т.е. $\bar{z}$-нормальными квазирешениями. Кроме того, была установлена сходимость процесса (3) к не-

[1] *Институт математики и механики им. Н.Н. Красовского, Екатеринбург, Россия*
[2] *Уральский федеральный университет им. Б.Н. Ельцина, Екатеринбург, Россия*
**E-mail: vasin@imm.uran.ru*
***E-mail: skorik@imm.uran.ru*

которому регуляризованному решению u_α и его $\{z_\alpha\}$-фейеровость.

Предположим, что множества решений задачи (2) и уравнения

$$\Phi(z) + \alpha B(z - \bar{z}) = 0, \tag{5}$$

где $\Phi(z) = P'(z)^{\mathrm{T}}(P(z) - f_\delta)$, совпадают при всех данных f_δ, $\|f - f_\delta\| \le \delta$, δ, α.

Запишем процесс (3) в эквивалентном виде

$$\begin{gathered} z^{k+1} = z^k - [\Phi'(z^k) + \alpha B + \beta I]^{-1} \times \\ \times [\Phi(z^k) + \alpha B(z - \bar{z})]. \end{gathered} \tag{6}$$

При построении итераций согласно (6) наиболее трудоемкой операцией является вычисление и обращение симметричной матрицы

$$\begin{gathered} A(z^k) = \Phi'(z^k) + \alpha B + \beta I = \frac{1}{2}(\|P(z^k) - f_\delta\|^2_{\mathbb{R}^n} + \\ + \alpha\langle B(z^k - \bar{z}), z^k - \bar{z}\rangle + \beta\|z^k - \bar{z}\|^2)'' \end{gathered}$$

в каждой итерационной точке z^k. Поэтому естественно рассмотреть модифицированный вариант метода (6)

$$\begin{gathered} z^{k+1} = z^k - \gamma[\Phi'(z^0) + \alpha B + \beta I]^{-1} \times \\ \times [\Phi(z^k) + \alpha B(z - \bar{z})], \end{gathered} \tag{7}$$

в котором матрица вторых производных $A(z)$ вычисляется один раз в точке z^0 в течение всего процесса итераций, а также дополнительно введен параметр шага γ. Считаем, что точка z^0, в которой вычисляется матрица $A(z)$, совпадает со стартовой точкой процесса (7).

Заметим, что при формировании как основного процесса (3), так и его модифицированного варианта (7) наряду с квадратичной аппроксимацией (см. например [3, гл. 5 §10]) применяется prox-метод, что позволяет не только получить сходимость итераций, но и оценить скорость сходимости.

1. ИССЛЕДОВАНИЕ СХОДИМОСТИ МОДИФИЦИРОВАННОГО МЕТОДА

Предположим, что при заданном уровне погрешности δ правой части уравнения (1) выбран параметр $\alpha(\delta)$, при котором $z_{\alpha(\delta)}$ аппроксимирует с приемлемой точностью некоторое $\bar{z}$-нормальное квазирешение $\hat{z}$ задачи (4). Введем обозначения:

$$\begin{gathered} \mathcal{D} = (\Phi'(z^0) + \alpha B + \beta I), \\ F(z) = \mathcal{D}^{-1}[\Phi(z) + \alpha B(z - \bar{z})], \\ \mathcal{D}_1 = (\Phi'(z^0) + \alpha B), \quad m = \inf_{\|z\|=1}\langle \mathcal{D}_1 z, z\rangle, \\ M = \sup_{\|z\|=1}\langle \mathcal{D}_1 z, z\rangle. \end{gathered}$$

Установим сильную фейеровость оператора шага T процесса (7) и погрешность аппроксимации регуляризованного решения $z_{\alpha(\delta)}$ итерационным процессом (7).

Теорема 1. *Пусть выполнены условия*

$$\begin{gathered} \|\Phi(z_1) - \Phi(z_2)\| \le N_1\|z_1 - z_2\|, \\ \|\Phi'(z_1) - \Phi'(z_2)\| \le N_2\|z_1 - z_2\| \end{gathered}$$

в шаре $S(z^0, d)$, содержащем $z_{\alpha(\delta)}$, $\hat{z}$, а также

$$\|z_{\alpha(\delta)} - z^0\| \le r^0, \quad r^0 = m/5N_2, \quad m > 0.$$

Тогда при $\gamma < m(m + \beta)/(N_1 + \alpha\|B\|)^2$ оператор T есть сильно $\{z_{\alpha(\delta)}\}$-фейеровский в шаре $S(z^0, r^0)$ и z^k сходится к $z_{\alpha(\delta)}$, а при $\gamma = m(m + \beta)/(2(N_1 + \alpha\|B\|)^2)$ справедлива оценка

$$\begin{gathered} \|z^k_{\alpha(\delta)} - z_{\alpha(\delta)}\| \le q^k\|z^0 - z_{\alpha(\delta)}\|, \\ q = \sqrt{1 - m^2/(N_1 + \alpha\|B\|)^2}, \end{gathered} \tag{8}$$

где z^0 — начальная точка в методе (7).

Доказательство. *Используя введенные обозначения, условия теоремы и самосопряженность оператора $\mathcal{D}_1$, имеем для $z \in S(z_{\alpha(\delta)}, r_0)$ соотношения*

$$\begin{gathered} \langle F(z), z - z_\alpha\rangle = \langle F(z), z - z_\alpha\rangle - \langle F(z_\alpha), z - z_\alpha\rangle = \\ = \left\langle \mathcal{D}^{-1}[\Phi(z) - \Phi(z_\alpha) + \alpha B(z - z_\alpha)], z - z_\alpha\right\rangle = \\ = \left\langle \mathcal{D}^{-1}[\Phi(z) - (\Phi(z) + \Phi'(z)(z_\alpha - z) + \xi) + \right. \\ \left. + \alpha B(z - z_\alpha)], z - z_\alpha\right\rangle = \\ = \left\langle \mathcal{D}^{-1}[\Phi'(z)(z - z_\alpha) + \alpha B(z - z_\alpha) + \right. \\ \left. + (\Phi'(z^0)(z - z_\alpha) - \Phi'(z)(z - z_\alpha)) - \xi], z - z_\alpha\right\rangle \ge \\ \ge \frac{m}{m + \beta}\|z - z_\alpha\|^2 - \frac{1}{m + \beta} \times \\ \times\left[N_2\|z - z_\alpha\|^2\|z - z^0\| + \frac{1}{2}N_2\|z - z_\alpha\|^3\right] \ge \\ \ge \frac{m}{m + \beta}\|z - z_\alpha\|^2 - \frac{1}{m + \beta}N_2 \times \\ \times\left(\|z - z_\alpha\| + \|z_\alpha - z^0\| + \frac{1}{2}\|z - z_\alpha\|\right)\|z - z_\alpha\|^2. \end{gathered}$$

Подставляя в соотношения $z_\alpha = z_{\alpha(\delta)}$ и учитывая в правой части последнего неравенства $z \in S(z_{\alpha(\delta)}, r^0)$, $\|z - z^0\| \le \|z - z_{\alpha(\delta)}\| + \|z_{\alpha(\delta)} - z^0\| \le 2r$, $r = m/5N_2$, окончательно получаем оценку снизу:

$$\langle F(z), z - z_{\alpha(\delta)}\rangle \ge \frac{m}{2(m + \beta)}\|z - z_{\alpha(\delta)}\|^2. \tag{9}$$

В силу условия Липшица для $\Phi(z)$, справедлива оценка сверху для $\|F(z)\|^2$:

$$\|F(z)\|^2 = \|F(z) - F(z_{\alpha(\delta)})\|^2 =$$
$$= \left\|\mathcal{D}^{-1}\left[\Phi(z) - \Phi(z_{\alpha(\delta)}) + \alpha B(z - z_\alpha)\right]\right\|^2 \le$$
$$\le \frac{1}{(m+\beta)^2}(N_1 + \alpha\|B\|)^2\|z - z_{\alpha(\delta)}\|^2. \quad (10)$$

Объединяя (9) и (10), приходим к оценке

$$\|F(z)\|^2 \le \frac{2(N_1 + \alpha\|B\|)^2}{m(m+\beta)}\langle F(z), z - z_\alpha(\delta)\rangle. \quad (11)$$

Сильная $\{u_\alpha\}$-фейеровость оператора шага T в процессе (7) означает выполнение неравенства (см. определение 1.5 в [4])

$$\|T(z) - z_{\alpha(\delta)}\|^2 - \|z - z_{\alpha(\delta)}\|^2 + \nu\|T(z) - z\|^2 \le 0 \quad (12)$$

для некоторого $\nu > 0$, что эквивалентно неравенству

$$\|F(z)\|^2 \le \frac{2}{\gamma(1+\nu)}\langle F(z), z - z_{\alpha(\delta)}\rangle. \quad (13)$$

Сравнивая неравенства (11) и (13), убеждаемся, что при $\gamma < m(m+\beta)/(N_1 + \alpha\|B\|)^2$ оператор T является сильно $\{z_{\alpha(\delta)}\}$-фейеровским, что влечет сходимость z^k к $z_{\alpha(\delta)}$ [4].

Если теперь подставить оценки (8) и (9) в соотношение

$$\begin{gathered}\|T(z) - z_\alpha\|^2 = \\ = \|z - z_\alpha\|^2 - 2\gamma\langle F(z), z - z_\alpha\rangle + \gamma^2\|F(z)\|^2\end{gathered} \quad (14)$$

и проминимизировать правую часть полученного неравенства по γ, то получим значение $\gamma = m(m+\beta)/2(N_1 + \alpha\|B\|)^2$, при котором при $z = z^k$ (14) перейдет в оценку (8).

Замечание 1. В работе [2] для основного процесса (6) доказана сходимость итераций к регуляризованному решению и свойство фейеровости оператора шага. Переход к модифицированному варианту (7), введение дополнительного параметра γ и использование иной схемы доказательства позволили установить сильную фейеровость оператора T, что влечет не только сходимость, но и оценку скорости сходимости итераций.

2. ОБРАТНАЯ ЗАДАЧА ЗОНДИРОВАНИЯ АТМОСФЕРЫ

В качестве примера реализации представленного метода выбрана задача восстановления высотных профилей $\delta D_{HDO}(h)$ относительной концентрации молекул HDO в водяном паре по инфракрасным спектрам пропускания солнечного света. Количественные данные об относительной концентрации тяжелой воды являются важным маркером скрытых трендов в гидрологических процессах, происходящих в атмосфере.

Относительная концентрация δD_{HDO} определяется формулой

$$\delta D_{HDO} = \left(\frac{R}{R_0} - 1\right) \times 1000‰, \quad R = \frac{N_{HDO}}{N_{H_2O}},$$

где N_{HDO} и N_{H_2O} – соответственно число молекул HDO и H_2O в единице объема; $R_0 = 3.1069 \times 10^{-4}$ – среднее значение R в океанической воде. Величина δD_{HDO} в атмосфере лежит в пределах – 1000–0‰.

Исследуемая задача сводится к решению переопределенной системы нелинейных уравнений

$$P(z) = \overline{P}_\delta, \quad (15)$$

где $\overline{P}_\delta$ – измеренный с ошибкой δ вектор значений ИК-спектра солнечного света, на сетке частот из микроокон, содержащих выбранные спектральные линии HDO/H_2O. Спектр измерялся фурье-интерферометром FTIR (Fourier Transform InfraRed “Bruker” IFS 125M), установленным на Уральской атмосферной станции, расположенной на территории Коуровской астрономической обсерватории УрФУ, находящейся в окрестности Екатеринбурга. Вектор z составлен из значений $\ln N_{H_2O}(h_i)$ и $\delta D_{HDO}(h_i)$ на заданной сетке высот $\{h_i\}$, P – нелинейный оператор, вычисляющий модельный спектр по заданному z. Оператор P строится на основе данных, полученных в результате работы программы FIRE-ARMS, описание которой содержится в работе [5], решающей прямую задачу вычисления модельного спектра по известным профилям концентрации газов, давления и температуры, полученных из реанализа метеоданных на момент измерения спектра. Построение нелинейного оператора $P(z)$ подробно описано в [2].

Решение задачи (15) сильно чувствительно к ошибкам измерения спектра, поэтому вначале применяется тихоновская регуляризация со стабилизатором, полученным на основе метода максимального правдоподобия,

$$\min\left\{\|P(z) - \overline{P}_\delta\|^2 + \alpha\langle C^{-1}(z - \overline{z}), z - \overline{z}\rangle : z \in R^n\right\}, \quad (16)$$

где $C = (K + \varepsilon I)$, $\overline{z}$ и K – среднее значение и ковариационная матрица априорного распределения вектора z, ε – малый положительный параметр, выбираемый из условия положительной определенности матрицы C.

Для аппроксимации решения z_α задачи (16) использовался итерационный процесс (7) с $\gamma = 1$ и несколько видоизмененный, что позволило исключить обращение матрицы C,

$$z^{k+1} = z^k - [C\Phi'(z^0) + \alpha I + \beta C]^{-1} \times \times (C\Phi(z^k) + \alpha(z^k - \bar{z})), \tag{17}$$

где $\Phi(z) = P'(z)^{\mathrm{T}}(P(z) - \bar{P}_\delta)$, β — параметр prox-метода.

Для сравнения, задача минимизации (16) решалась также с помощью немодифицированного итерационного процесса с вычислением матрицы вторых производных на каждом шаге итерации

$$z^{k+1} = z^k - [C\Phi'(z^k) + \alpha I + \beta C]^{-1} \times \times (C\Phi(z^k) + \alpha(z^k - \bar{z})). \tag{18}$$

Метод (17) был протестирован на множестве наборов (около 260) измеренных спектральных данных, описание которых содержится в [6]. Также было произведено сравнение времени обработки спектров методами (17) и (18). Для данной задачи новый метод дает прирост производительности на несколько процентов.

Замечание 2. Незначительная разница по затратам машинного времени при использовании модифицированного (17) и немодифицированного (18) процессов в описанном эксперименте обусловлена невысокой размерностью задачи ($\dim(z) = 100$). Однако в задачах высокой размерности преимущество модифицированных методов по времени является существенным (см. [7]).

БЛАГОДАРНОСТИ

Авторы благодарны К.Г. Грибанову за помощь при реализации программы FIRE-ARMS, разработанной для вычисления модельных ИК-спектров, а также признательны Н.В. Рокотяну за предоставленные ИК-спектры, измеренные спектрометром FTIR в Коуровской обсерватории.

ИСТОЧНИКИ ФИНАНСИРОВАНИЯ

Исследование В.В. Васина поддержано Российским научным фондом (код проекта 18–11–00024).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Skorik G.G.* // Evrasian Journal Mathematical and Computer Applications. 2018. V. 6. Iss. 1. P. 56–64.
2. *Skorik G.G., Vasin V.V.* // Evrasian J. Math. and Comp. Appl. 2019. V. 7. Iss. 2. P. 79–88.
3. *Васильев Ф.П.* Методы оптимизации. Кн. 1 М.: МЦНМО, 2011. 619 с.
4. *Vasin V.V., Eremin I.I.* Operators and Iterative Processes of Fejér Type. Theory and Application. B., N.Y.: Walter de Gruyter, 2009. 155 p.
5. *Gribanov K.G., Zakharov V.I., Tashkun S.A. et al.* // Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer. 2001. V. 68. Iss. 4. P. 435–451.
6. *Skorik G.G., Vasin V.V., Gribanov K.G. et al.* // Doklady Earth Sciences. 2014. V. 454. Iss. 2. P. 208–212.
7. *Васин В.В., Скурыдина А.Ф.* // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2019. Т. 23. № 1. С. 57–74.

TWO-STAGE METHOD FOR SOLVING SYSTEM OF NONLINEAR EQUATIONS AND ITS APPLICATIONS TO THE INVERSE ATMOSPHERE SOUNDING PROBLEM

Corresponding Member of the RAS V. V Vasin[a,b] and G.G. Skorik[a,b]

[a] *Krasovskii Institute of Mathematics and Mechanics, Ural Branch of the Russian Academy of Sciences, Yekaterinburg, Russian Federation*

[b] *Ural Federal University, Yekaterinburg, Russian Federation*

For an over determined system of nonlinear equations two-stage method is suggested. The first stage, consists in constructing regularized set of approximate solutions for finding normal quasi-solutions of original system. On the second stage, for approximation of the regularized quasi-solutions an iterative process is proposed. It is based on square approximation of the Tikhonov functional and use of prox-method. For this Newton type method the convergence theorem is proved and the Fejer property of iterations is ascertained. Also, two-stage method is applied to solving the inverse problem of reconstruction of the heavy water (HDO) in the atmosphere by IR-spectra of the solar light transmission.

Keywords: nonlinear system, regularization, iterative process, infrared spectrum, atmosphere remote sensing, HDO retrieval