Tomáš Oberhuber

Faculty of Nuclear Sciences and Physical Engineering
Czech Technical University in Prague

Optimalizace s PDR

- nyní si uvedeme podobnou metodu zobecněnou pro PDR
- ukážeme si ji na konkrétním příkladu rovnice vedení tepla

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial u(\vec{x},t)}{\partial t} - \Delta u(\vec{x},t) &= 0 \quad \text{na} \;\; \Omega \times (0,T), \\
u(\vec{x},0) &= u_0(\vec{x}) \quad \text{na} \;\; \Omega \times (0,T), \\
\frac{\partial u(\vec{x},t)}{\partial \vec{n}} &= 0 \quad \text{na} \;\; \partial\Omega \times (0,T),
\end{aligned}
\tag{1}
$$

kde Ω je výpočetní oblast, např. $\Omega \equiv [0,1] \times [0,1]$.

Rovnice vedení tepla

- budeme řešit následující optimalizační úlohu

$$\min_{\vec{p}} F(\vec{p}) = \min_{\vec{p}} \int_\Omega \frac{1}{2} \left(u(\vec{x}, T; \vec{p}) - u_T(\vec{x})\right)^2 \mathrm{d}\vec{x} \tag{2}$$

$$\text{pokud platí} \quad \frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial t} - \Delta u(\vec{x}, t; \vec{p}) = 0 \quad \text{na} \;\; \Omega \times (0, T),$$

$$u(\vec{x}, 0, \vec{p}) = u_0(\vec{x}, \vec{p}) \quad \text{na} \;\; \Omega \times (0, T),$$

$$\frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial \vec{n}} = 0 \quad \text{na} \;\; \partial\Omega \times (0, T).$$

- řešíme tedy úlohu, kdy máme daný finální stav funkce u_T a chceme najít příslušnou počáteční podmínku $u_0(\cdot, \vec{p})$
- aplikací je např. tzv *image debluring*

$$
\begin{aligned}
J(\vec{p}) = &\int_{\Omega} \frac{1}{2} \left(u(\vec{x}, T; \vec{p}) - u_T(\vec{x})\right)^2 \mathrm{d}\vec{x} \\
&+ \int_{\Omega} \int_0^T \lambda_1(\vec{x}, t) \left(\frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial t} - \Delta u(\vec{x}, t; \vec{p}) \right) \mathrm{d}\vec{x}\mathrm{d}t \\
&+ \int_{\Omega} \lambda_2(\vec{x}) \left(u(\vec{x}, 0, \vec{p}) - u_0(\vec{x}, \vec{p})\right) \mathrm{d}\vec{x} \\
&+ \int_{\partial\Omega} \int_0^T \lambda_3(\vec{x}, t) \left(\frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial \vec{n}} \right) \mathrm{d}S\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

Derivace podle parametrů $\vec{p}$ má tvar ...

$$\begin{aligned}
\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\vec{p}} = &\int_{\Omega} \left(u(\vec{x}, T; \vec{p}) - u_T(\vec{x})\right) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} u(\vec{x}, T; \vec{p}) + \lambda_2(\vec{x}) \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}} u(\vec{x}, 0, \vec{p}) - \frac{\partial}{\partial \vec{p}} u_0(\vec{x}, C) \right) \mathrm{d}\vec{x} \\
&+ \int_{\Omega} \int_0^T \lambda_1(\vec{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(\frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial t} \right) - \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(\Delta u(\vec{x}, t; \vec{p})\right) \right) \mathrm{d}\vec{x}\mathrm{d}t \\
&+ \int_{\partial\Omega} \int_0^T \lambda_3(\vec{x}, t) \left(\frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(\frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial \vec{n}} \right) \right) \mathrm{d}S\mathrm{d}t
\end{aligned}$$

Upravíme časovou derivaci pomocí per-partes...

$$\int_\Omega \int_0^T \lambda_1(\vec{x},t)\frac{\partial}{\partial \vec{p}}\left(\frac{\partial u(\vec{x},t;\vec{p})}{\partial t}\right) = \int_\Omega \left[\lambda_1(\vec{x},t)\left(\frac{\partial u(\vec{x},t;\vec{p})}{\partial \vec{p}}\right)\right]_0^T \mathrm{d}\vec{x} - \int_\Omega \int_0^T \frac{\partial \lambda_1(\vec{x},t)}{\partial t}\frac{\partial u(\vec{x},t;\vec{p})}{\partial \vec{p}}\mathrm{d}\vec{x}\mathrm{d}t$$

Pro podobnou úpravu prostorových derivací použijeme Greenovu větu:

Theorem 1

Nechť Ω je oblast v $\mathbb{R}^n$ a funkce $u, v \in C^1(\Omega)$. Potom platí

$$\int_\Omega \frac{\partial u}{\partial x_i} v \, d\vec{x} = -\int_\Omega u \frac{\partial v}{\partial x_i} d\vec{x} + \int_{\partial\Omega} u v \vec{n}_i dS \text{ pro } i = 1, \dots, n,$$

kde $\vec{n}$ je vnější normovaná normála hranice oblasti Ω.

$$
\begin{aligned}
&-\int_{\Omega}\int_0^T \lambda_1(\vec{x},t)\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\left(\Delta u(\vec{x},t;\vec{p})\right)\mathrm{d}\vec{x}\mathrm{d}t = \\
&-\int_{\Omega}\int_0^T \lambda_1(\vec{x},t)\left(\Delta\frac{\partial}{\partial\vec{p}}u(\vec{x},t;\vec{p})\right)\mathrm{d}\vec{x}\mathrm{d}t = \\
&-\int_{\Omega}\int_0^T \Delta\lambda_1(\vec{x},t)\frac{\partial}{\partial\vec{p}}u(\vec{x},t;\vec{p})\mathrm{d}\vec{x}\mathrm{d}t \\
&+\int_{\partial\Omega}\int_0^T \lambda_1(\vec{x},t)\frac{\partial}{\partial\vec{p}}\frac{\partial}{\partial\vec{n}}u(\vec{x},t;\vec{p}) - \frac{\partial}{\partial\vec{p}}u(\vec{x},t;\vec{p})\frac{\partial\lambda_1(\vec{x},t)}{\partial\vec{n}}\mathrm{d}S\mathrm{d}t
\end{aligned}
$$

Rovnice vedení tepla

Tyto úpravy umožní vyjádřit gradient J ve tvaru:

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\vec{p}} = \int_\Omega \left(u(\vec{x}, T; \vec{p}) - u_T(\vec{x}) + \lambda_1(\vec{x}, T)\right) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} u(\vec{x}, T; \vec{p}) \tag{3}$$

$$+ \left(\lambda_2(\vec{x}) - \lambda_1(\vec{x}, 0)\right) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} u(\vec{x}, 0, \vec{p}) - \lambda_2(\vec{x}) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} u_0(\vec{x}, \vec{p}) \mathrm{d}\vec{x} \tag{4}$$

$$- \int_\Omega \int_0^T \left(\frac{\partial \lambda_1(\vec{x}, t)}{\partial t} + \Delta \lambda_1(\vec{x}, t) \right) \frac{\partial u}{\partial \vec{p}} \mathrm{d}\vec{x} \mathrm{d}t \tag{5}$$

$$+ \int_{\partial\Omega} \int_0^T \left(\lambda_3(\vec{x}, t) + \lambda_1(\vec{x}, t)\right) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} \left(\frac{\partial u(\vec{x}, t; \vec{p})}{\partial \vec{n}} \right) + \frac{\partial}{\partial \vec{p}} u(\vec{x}, t; \vec{p}) \frac{\partial \lambda_1(\vec{x}, t)}{\partial \vec{n}} \mathrm{d}S \mathrm{d}t \tag{6}$$

Rovnice vedení tepla

Všechny derivace $u(\vec{x}, t; \vec{p})$ podle parametrů $\vec{p}$ mohou být eliminovány za pomoci následujících rovnic:

$$
\begin{aligned}
u(\vec{x}, T; \vec{p}) - u_T(\vec{x}) + \lambda_1(\vec{x}, T) &= 0 \quad \text{on } \Omega, \\
\lambda_2(\vec{x}) - \lambda_1(\vec{x}, 0) &= 0 \quad \text{on } \Omega, \\
\frac{\partial \lambda_1}{\partial t} + \Delta \lambda_1 &= 0 \quad \text{on } \Omega \times (0, T), \\
\lambda_3(\vec{x}, t) + \lambda_1(\vec{x}, t) &= 0 \quad \text{on } \partial\Omega \times (0, T), \\
\frac{\partial \lambda_1}{\partial \vec{n}} &= 0 \text{ on } \partial\Omega \times (0, T).
\end{aligned}
$$

Gradient J lze pak vyjádřit ve zjednodušené podobě:

$$\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\vec{p}} = -\int_{\Omega} \lambda_1(\vec{x}, 0) \frac{\partial}{\partial \vec{p}} I_0(\vec{x}, \vec{p}) \mathrm{d}\vec{x}, \tag{7}$$

a jak víme, platí $\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\vec{p}} = \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\vec{p}}$.

Rovnice vedení tepla

Rovnice pro λ_1 mají tvar zpětné rovnice vedení tepla:

$$
\begin{aligned}
\frac{\partial \lambda_1(\vec{x}, t)}{\partial t} &= -\Delta \lambda_1(\vec{x}, t) \quad \text{on } \Omega \times (0, T), \\
\lambda_1(\vec{x}, T) &= B(\vec{x}) - u(\vec{x}, T; \vec{p}) \quad \text{on } \Omega, \\
\frac{\partial \lambda_1(\vec{x}, t)}{\partial \vec{n}} &= 0 \text{ on } \partial\Omega \times (0, T).
\end{aligned}
$$

Rovnice vedení tepla

- tato rovnice se řeší zpětně v čase, protože známe stav λ_1 v čase T
- provedeme transformaci $\lambda^*(\vec{x}, \tau; \vec{p}) = \lambda(\vec{x}, T - t; \vec{p})$ čímž dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{\partial \lambda_1^*(\vec{x}, \tau)}{\partial \tau} &= \Delta \lambda_1(\vec{x}, \tau) \quad \text{on } \Omega \times (0, T), \\ \lambda_1^*(\vec{x}, 0) &= u_T(\vec{x}) - u(\vec{x}, T; \vec{p}) \quad \text{on } \Omega, \\ \frac{\partial \lambda_1^*(\vec{x}, \tau)}{\partial \vec{n}} &= 0 \text{ on } \partial\Omega \times (0, T). \end{aligned} \tag{8}$$

- je zde vidět podobnost s aktivací a backpropagation u NN

Výsledný algoritmus se skládá z těchto kroků:

1. pro dané parametry $\vec{p}$, řeš primární rovnici (1)
2. spočítej $u_T(\vec{x}) - u(\vec{x}, T; \vec{p})$ a řeš zpětnou adjungovanou rovnici (8) pro $\lambda_1^*(\vec{x}, \tau)$
3. pomocí $\lambda_1(\vec{x}, t = 0) = \lambda_1^*(\vec{x}, \tau = T)$ vypočítej gradient $\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}\vec{p}} = \frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\vec{p}}$ daný vztahem (7)
4. pomocí gradientu $\frac{\mathrm{d}J}{\mathrm{d}\vec{p}}$ napočítej nový odhad $\vec{p}$ a jdi na krok 1.

Rovnice vedení tepla

Figure: Původní obrázek a dva rozmazané obrázky generované jako řešení rovnice vedení tepla. Difuzní koeficienty jsou $d_1 = 0.5$ a $d_2 = 0.75$.

Figure: Rekonstrukce obrázku z $B_1(\vec{x})$, $d = 0.5$. Byly použity dva různé odhady difuzního koeficientu. Odhad $d_{init} = 0.25$ vedl na $d_{final} = 0.341$, odhad $d_{init} = 0.75$ vedl na $d_{final} = 0.546$.

Rovnice vedení tepla

Figure: Rekonstrukce obrázku $B_2(\vec{x})$. Byly použity dva různé odhady difuzního koeficientu. Odhad $d_{init} = 0.5$ vedl na hodnotu $d_{final} = 0.575$, odhad $d_{init} = 1.0$ vedl na hodnotu $d_{final} = 0.822$.

Rovnice vedení tepla

Figure: Původní obrázek a obrázky rozmazané se šumem. Difuzní koeficienty jsou $d_1 = 0.5$ pro $B_1(\vec{x})$ a $d_2 = 0.75$ pro $B_2(\vec{x})$.

Rovnice vedení tepla

Figure: Rekonstrukce obrázků se šumem. Odhad difuzního koeficientu u prvního obrázku $d_{init} = 0.25$ vedl na hodnotu $d_{final} = 0.464$. Odhad $d_{init} = 0.5$ u druhého obrázku vedl na hodnotu $d_{final} = 0.796$.

Figure: Detail rekonstrukce obrázků se šumem.