

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA
CURSO DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Um Problema Inverso em
Condução do Calor utilizando
Métodos de Regularização**

por

Wagner Barbosa Muniz

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Julio Cesar Ruiz Claeysen
Orientador

Porto Alegre, 13 de janeiro de 1999.

UFRGS
SISTEMA DE BIBLIOTECAS
BIBLIOTECA SETORIAL DE MATEMÁTICA

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Muniz, Wagner Barbosa

Um Problema Inverso em Condução do Calor utilizando Métodos de Regularização / Wagner Barbosa Muniz. – Porto Alegre: CPGMAp da UFRGS, 1999.

79 p.: il.

Dissertação (Mestrado)—Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 1999. Claeyssen, Julio Cesar Ruiz, Orient.

1.Problemas Inversos em Condução do Calor. 2.Problemas Mal-postos. 3.Métodos de Regularização. I. Título.

UFRGS
SISTEMAS DE BIBLIOTECAS
BIBLIOTECA SETORIAL DE MATEMÁTICAS

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

Reitor: Profa. Wrana Panizzi

Pró-Reitor de Pesquisa e Pós-Graduação: Prof. José Carlos Ferraz Hennemann

Diretor do Instituto de Matemática: Prof. Aron Teiteibam

Coordenador do CPGMAp: Prof. Rudnei Dias da Cunha

Bibliotecária-Chefe do Instituto de Matemática: Carlos Brandão Schwab

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao meu orientador Prof. Dr. Julio Claeysen pela competente orientação e apoio, apresentando-me constantemente novos horizontes para meu trabalho e formação.

Agradeço ao Prof. Dr. Haroldo Fraga de Campos Velho e ao Prof. Dr. Fernando Manuel Ramos pelo interesse para com meu trabalho, pelas excelentes sugestões e pela oportunidade de ter acesso aos seus trabalhos de pesquisa.

Agradeço ao Prof. Dr. Vilmar Trevisan pelo apoio na minha formação acadêmica.

Agradeço aos colegas do CPGMAp, aos funcionários e professores do Instituto de Matemática da UFRGS pelo companheirismo, disponibilidade e apoio. E em especial ao colega Rodrigo Platte pela amizade.

Agradeço ao Laboratório Associado de Computação e Matemática Aplicada (LAC) do Instituto Nacional de Pesquisas Espaciais (INPE) pela oportunidade do estágio de pesquisa. E, particularmente, aos pesquisadores do grupo de Computação Científica deste Laboratório pelo acompanhamento e discussões em torno do meu trabalho.

Agradeço ao suporte financeiro dado pelo CNPq – Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico.

Dedico todos os meus esforços neste trabalho a meus pais.

Conteúdo

LISTA DE FIGURAS	vi
LISTA DE TABELAS	vii
RESUMO	viii
ABSTRACT	ix
1 INTRODUÇÃO	1
2 PROBLEMA INVERSO	8
2.1 Problemas Mal-Condicionados e Problemas Mal-Postos	9
2.2 Exemplos de Problemas Mal-Postos	12
3 A REGULARIZAÇÃO	25
3.1 Operadores de Regularização	26
3.2 Determinação do Parâmetro de Regularização	28
3.3 A Regularização de Tikhonov	31
3.4 O Princípio da Máxima Entropia	35
4 MÉTODOS LINEARES DE INVERSÃO	40
4.1 Quadratura - Redução de Equações Integrais a Sistemas Lineares	40
5 UM PROBLEMA INVERSO EM CONDUÇÃO DO CALOR: DETERMINAÇÃO DA CONDIÇÃO INICIAL	44
5.1 Transformação para Forma Adimensional	44
5.2 Formulação Matemática do Problema Direto	46
5.3 "Solução" do Problema Inverso	48
5.4 Unicidade do Problema Inverso	50
5.5 O Mal-Condicionamento do Problema Inverso de Determinação de Condição Inicial	50
5.6 Formulação Discreta do Problema	53

6	ABORDAGENS PRELIMINARES PARA A INVERSÃO	55
6.1	A Inversão Direta	55
6.2	A Técnica Sequencial	56
6.3	Mínimos Quadrados	57
7	RESULTADOS NUMÉRICOS E COMENTÁRIOS FINAIS	58
7.1	Resultados das Inversões sem Regularização	58
7.2	Resultados com Regularização	59
7.3	Comentários finais	69
	BIBLIOGRAFIA	74

Lista de Figuras

Figura 2.1	Problema inverso versus problema direto: $(Kx = y) \times (x = K^{-1}y)$. . .	12
Figura 2.2	Exemplo de reentrada de um veículo espacial para o qual a determinação do fluxo de calor na superfície é necessária.	23
Figura 3.1	Seleção do parâmetro de regularização com o princípio da discrepância	31
Figura 7.1	Inversão direta sem ruído: $\tau = 10^{-4}$	61
Figura 7.2	Inversão direta sem ruído: $\tau = 0.008$	61
Figura 7.3	Inversão direta: $\tau = 10^{-4}$, $\sigma = 0.05$	62
Figura 7.4	Inversão direta com $\tau = 0.008$, $\sigma = 0.05$	62
Figura 7.5	Inversão via técnica sequencial: $\tau = 10^{-4}$ e sem ruído.	63
Figura 7.6	Inversão via técnica sequencial: $\tau = 0.008$ e sem ruído.	63
Figura 7.7	Inversão via técnica sequencial: $\tau = 10^{-4}$, $\sigma = 0.05$	64
Figura 7.8	Inversão via técnica sequencial: $\tau = 0.008$, $\sigma = 0.05$	64
Figura 7.9	Inversão via técnica sequencial: $\tau = 0.008$, $\sigma = 10^{-4}$	65
Figura 7.10	Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 10^{-4}$ e sem ruído.	65
Figura 7.11	Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 0.008$ e sem ruído.	66
Figura 7.12	Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 10^{-4}$, $\sigma = 0.05$	66
Figura 7.13	Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 0.008$, $\sigma = 0.05$	67
Figura 7.14	Solução regularizada pelo princípio da máxima entropia	68
Figura 7.15	Solução regularizada via Tikhonov de ordem zero	68
Figura 7.16	Solução regularizada via Tikhonov de ordem um	69
Figura 7.17	Soluções regularizadas para a função-teste coseno	70
Figura 7.18	Soluções regularizadas para a função-teste triangular	70

Lista de Tabelas

Tabela 7.1	Valores de mínimos quadrados obtidos em $\tau = 0.008$ para diversos parâmetros de regularização utilizando Tikhonov de ordem zero, de ordem um e princípio da máxima entropia.	67
Tabela 7.2	Número de condicionamento associado à aproximação linear e à regra do trapézio.	71
Tabela 7.3	Erro entre a solução exata $f(x) = 1 + \cos(\pi x)$ e a solução aproximada f_i em $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, para um tempo $\tau = 0.1$	71

RESUMO

Neste trabalho apresenta-se uma discussão geral sobre problemas inversos, problemas mal-postos e técnicas de regularização, visando sua aplicabilidade em problemas térmicos. Métodos numéricos especiais são discutidos para a solução de problemas que apresentam instabilidade em relação aos dados. Tais métodos baseiam-se na utilização de restrições ou informações adicionais sobre a solução procurada. O problema de determinação da condição inicial da equação do calor é resolvido numericamente através destas técnicas, particularmente a regularização de Tikhonov e o princípio da máxima entropia conectados ao princípio da discrepância de Morozov são utilizados.

PALAVRAS-CHAVE: Problemas Inversos em Condução do Calor, Problemas Mal-postos, Métodos de Regularização.

ABSTRACT

In this work we present a general discussion on inverse problems, ill-posed problems and regularization techniques, applying these techniques to thermal problems. Special numerical methods are discussed in order to solve problems for which the solution is unstable under data perturbations. Such methods are based on the utilization of restrictions or additional information on the solution. The problem of determining the initial condition of the heat equation is numerically solved beyond these techniques, particularly the Tikhonov regularization and the maximum entropy principle connected to the Morozov's discrepancy principle are used.

KEYWORDS: Inverse Heat Conduction Problems, Ill-posed Problems, Regularization Methods.

1 INTRODUÇÃO

Segundo Keller [Kel76] chama-se dois problemas *inversos um ao outro* se a formulação de cada um deles requer um conhecimento parcial ou total do outro. Através desta definição, é obviamente arbitrário qual dos dois problemas chamamos de problema direto e qual chamamos de problema inverso. Mas em geral, um dos problemas foi estudado mais cedo e, talvez, em mais detalhe. Este é geralmente chamado de *problema direto*, e o outro é o *problema inverso*.

No entanto, há muitas vezes uma outra diferença mais importante entre estes dois problemas. No início do século, Hadamard [Had02, Had23] introduziu o conceito de um problema *bem-posto* baseado na proposição de que o modelo matemático de um problema físico tem que satisfazer as propriedades de existência e unicidade de solução e estabilidade da solução em relação aos dados. Se uma das propriedades não é satisfeita, Hadamard chamou o problema de *mal-posto*.

Muitos problemas inversos interessantes e importantes para a ciência tratam tipicamente com modelos matemáticos que são mal-postos, enquanto que os correspondentes problemas diretos são bem-postos. Muitas vezes, existência e unicidade podem ser forçadas através da ampliação ou redução do espaço solução (espaço do "modelo"). No entanto, as soluções ainda mantêm-se instáveis sob perturbações nos dados, e a restauração dessa estabilidade em muitos casos é impossível devido justamente à presença de erros de medida nesses dados, característica inerente em problemas *reais*.

Num primeiro momento, parece ser impossível computar a solução de um problema numericamente se a solução do problema não depende continuamente dos dados, isto é, para o caso de problemas mal-postos. No entanto, com informações adicionais (a priori) sobre a solução, tal como suavidade, é possível restaurar a estabilidade e construir algoritmos numéricos eficientes – métodos de regularização.

Este trabalho pretende cobrir alguns tópicos sobre a teoria de problemas inversos, apresentando alguns algoritmos clássicos utilizados nessa área. Primeiramente,

introduz-se as noções básicas e dificuldades encontradas em problemas mal-postos, estudando-se então as propriedades básicas de métodos de regularização. Alguns dos esquemas mais importantes serão estudados. Após isto, um problema inverso em condução do calor será apresentado, o problema de determinação de condição inicial da equação do calor unidimensional – *the backward heat equation*.

Este trabalho está organizado da seguinte maneira: no capítulo 2, apresenta-se uma lista de pares de problemas diretos e inversos, muitos dos quais têm um caráter mais matemático e outros são problemas com aplicações científicas e tecnológicas imediatas. Na seção 2.1 deste capítulo introduz-se as noções de problemas mal-postos e mal-condicionados segundo Hadamard.

No terceiro capítulo, estuda-se a teoria geral de regularização para equações mal-postas. Essa formulação geral é seguida na seção 3.3 que apresenta a regularização de Tikhonov. Numa seção posterior apresenta-se um esquema de regularização não linear, o princípio da máxima entropia. Na seção 3.2 estuda-se o princípio da discrepância de Morozov, que é uma regra de escolha do parâmetro de regularização, parâmetro este presente em grande parte dos esquemas de estabilização (ou regularização) para problemas mal-postos.

Grande parte do capítulo 2 trata com problemas mal-postos em espaços de dimensão infinita. Entretanto, em situações práticas, estes problemas são discretizados. A discretização de problemas lineares mal-postos leva a sistemas lineares finitos mal-condicionados. Por isso, no capítulo 5, estuda-se o problema inverso de determinação de condição inicial da equação do calor, que será muitas vezes referenciado como o problema de condição inicial, apresentando-o através de uma formulação com dimensão infinita e também de forma discretizada. A questão de unicidade deste problema inverso será verificada.

No capítulo 6 aplica-se algumas técnicas numéricas de reconstrução, descritas nos capítulos anteriores, para o problema inverso em condução do calor, apresentando-se resultados numéricos correspondentes. O capítulo final consiste na discussão de alguns aspectos gerais relevantes dos resultados numéricos obtidos.

Note-se que existe uma grande quantidade de literatura sobre diversos aspectos da teoria de inversão, desde conceitos abstratos de regularização até aplicações efetivamente concretas, dentre alguns dos trabalhos relevantes pode-se citar o trabalho iniciado por Ivanov, John, Tikhonov e Lavrentyev [Iva55, Joh55, Tik43, Tik63, Lav57, Lav59, Lav60].

Um exemplo fundamental e bem conhecido que ilustra o problema matemático em questão é o da equação integral linear de Fredholm do primeiro tipo

$$y(t) = \int_a^b k(t, s)x(s)ds.$$

Considere $x(s)$ uma solução para $y(t)$ dado, e adicione-se a essa solução uma função $x_n(s) = C \sin(ns)$, onde C é uma constante arbitrária. Então com $\tilde{x}(s) = x(s) + x_n(s)$ tem-se

$$\int_a^b k(t, s)\tilde{x}(s)ds = y(t) + C \int_a^b k(t, s) \sin(ns)ds.$$

Contudo o lema de Riemann-Lebesgue [Wei95] assegura que o segundo termo do lado direito da equação anterior pode ser feito arbitrariamente pequeno através da escolha de n suficientemente grande. Assim, pequenas variações nos dados podem levar a grandes variações na solução. A discretização da equação de Fredholm leva a dificuldades similares. Este exemplo será estudado em mais detalhe posteriormente.

O estudo inicial de problemas matemáticos instáveis do tipo descrito acima é geralmente atribuído a Hadamard, que chamou-os de *problemas mal-postos*. Somente nos últimos 40 anos eles têm sido pensados como tendo importância física. A principal ferramenta matemática desenvolvida para o tratamento dessas instabilidades é a *regularização*, que efetivamente restringe a classe de soluções admissíveis para a equação de Fredholm de primeiro tipo, digamos. Isto é, quando $y(t)$ não é especificado com completa certeza, a equação admite uma classe mais ampla de soluções do que do outro modo, e uma medida desse crescimento é a magnitude da incerteza em $y(t)$. O procedimento de regularização destina-se a trazer esta classe para um tamanho menor através da imposição de

mais restrições sobre o problema. Apesar da escolha das restrições ser de alguma maneira abstrata, de fato pode-se se guiar pelo uso de condições físicas sobre o problema como informação a priori. Pode-se ter uma cota superior realista sobre a energia de um sinal, por exemplo, que pode ser usada para impor uma cota global sobre as soluções; ou, condições de suavidade podem gerar cotas sobre as derivadas.

Os dados recebidos em qualquer dispositivo geralmente consistem de pontos isolados corrompidos por ruído, havendo um problema de continuidade e precisão. Todas essas limitações são vistas como diferentes aspectos do mesmo problema: **informação incompleta**. Por outro lado, a idéia de regularização contém as origens da solução através do reconhecimento da necessidade de utilizar todo conhecimento a priori disponível sobre o problema físico. Essas análises de instabilidades têm, no mínimo, contribuído muito para a compreensão de equações lineares de Fredholm do primeiro tipo e sistemas lineares.

Devido a necessidades oriundas de aplicações, tanto na ciência quanto na indústria, métodos numéricos especiais que podem tratar adequadamente este problema têm que ser desenvolvidos, são os chamados métodos de regularização. A teoria geral e métodos para solucionar problemas mal-postos foi reconhecidamente iniciada pelo trabalho do russo Andrey Tikhonov, que foi quem, pela primeira vez, de uma forma relativamente geral, estabeleceu um problema sobre a instabilidade de representações inversas apresentando suas soluções. Em 1944, estudando um problema de gravimetria, Tikhonov observou que a introdução de restrições poderia restaurar alguma estabilidade para o problema, e essa observação foi um dos pontos de partida para a teoria contemporânea de problemas mal-postos.

Nestas últimas três décadas tem sido intenso o desenvolvimento de teorias e métodos para a solução de problemas inversos. Muito do trabalho sobre técnicas de regularização teve como pioneiros Tikhonov e seus colaboradores [TA77, Tik43, Tik63]. A regularização e sua aplicação a problemas inversos foi recentemente revista em [EHN96]. Na verdade, uma "indústria" de regularização tem se desenvolvido [BG70, Han94, KSB88, Mur93, MM93, Lou96, LM90]. Métodos e algoritmos para a solução de problemas inversos vêm estabelecendo uma boa base para estudos de tecnologias aeroespaciais e nucleares. Esta metodologia também vem sendo utilizada na simulação e diagnóstico de processos

na medicina, engenharia de produção, engenharia de energia, metalurgia e geofísica; no estudo de propriedades óticas, mecânicas e térmicas de novos materiais e; no controle de meios de transporte, manipuladores de robôs e processos tecnológicos.

A metodologia de problemas inversos tem sido referenciada como o ramo da ciência moderna cujo desenvolvimento se dá mais dinamicamente, sendo considerado um campo multidisciplinar que caracteriza-se pelas variadas aplicações tecnológicas [Mor93, Sab85]. O rápido crescimento desta área da matemática aplicada se deve em parte, como já foi dito, às necessidades oriundas de aplicações tanto na ciência quanto na indústria.

Métodos de solução de problemas inversos podem ser divididos em iterativos e não-iterativos. Dentre os iterativos podemos citar iteração de Landweber [Two77, EHN96], gradiente conjugado associado ao problema adjunto [JOB91, NO93] e ν -method (método ν) [EHN96]. Já dentre os não-iterativos, também chamados de métodos de regularização contínuos [EHN96], temos o método da "molificação" (*mollifier methods*) [Lou96, LM90, Mur93], o método de Backus-Gilbert [BG67, BG68, BG70, Han94, KSB88], o método da quasi-inversão ou quasi-reversibilidade [LL69, Mil73, TA77], a regularização de Tikhonov [TA77, Tik43, Tik63] e a regularização baseada no princípio da máxima entropia [SW49, Jay57b, RG95, EHN96]. Estes dois últimos métodos serão mais amplamente estudados neste trabalho, caracterizando como veremos uma metodologia pretensamente geral para a solução de problemas mal-postos.

O problema clássico (bem-posto) em condução do calor é o *problema direto* de calcular a evolução da temperatura num corpo com parâmetros térmicos conhecidos, dada a temperatura inicial e a temperatura ou fluxo de calor em todo o contorno (fronteira). Muitos tipos importantes de problemas inversos surgem neste contexto: o problema de determinação da temperatura inicial com base em medições posteriores, matematicamente falando, *the backward heat equation*; o problema de determinação de parâmetros térmicos do material com base em medições de temperatura e; o problema de determinação da temperatura ou fluxo de calor numa parte inacessível da fronteira com base em medições do fluxo de calor e temperatura em outras partes do contorno, a assim chamada *sideways heat equation*.

Neste trabalho apresenta-se inicialmente uma discussão de caráter geral sobre problemas inversos, problemas mal-postos e técnicas de regularização. Alguns exemplos de problemas inversos são estabelecidos com o objetivo de ilustrar a principal dificuldade no tratamento deste tipo de problema: a instabilidade em relação aos dados; e também para ressaltar a indiscutível importância desta classe de problemas.

Posteriormente estuda-se alguns métodos de regularização aplicados a um problema inverso em condução do calor: determinação da condição inicial da equação do calor (difusão) visto que se conhece a distribuição de temperatura transiente. Problemas inversos em condução do calor envolvendo a estimativa de fluxo de calor na fronteira (superfície), ou estimativa de propriedades térmicas, têm sido amplamente estudados [Ali79, Bec70, BBC85, Fra96, MM93, Mur93, ZWR93]. Por outro lado, há uma quantidade de trabalho relativamente limitada na questão de determinação de condição inicial [Can66, HL86, NO93].

Dentre os métodos de solução utilizados neste problema de determinação de condição inicial encontram-se as regularizações de Tikhonov [Tik63, TA77] e o princípio da máxima entropia [SW49, RG95]. O critério da discrepância, introduzido por Morozov [Mor66, Mor93], para a escolha do parâmetro de regularização será examinado. Este problema apresenta uma relevância interessante para ser tomado como problema modelo, visto que ele apresenta uma "solução" (que se mostrará de computação prática inviável) e sua instabilidade em relação aos dados pode ser demonstrada explicitamente.

No próximo capítulo apresenta-se algumas definições que serão úteis no desenrolar deste trabalho, tais como a clássica definição de um problema inverso dada por Alifanov e a caracterização de um problema mal-posto no sentido de Hadamard.

O capítulo 3 se destina ao estudo genérico da regularização e à apresentação do critério da discrepância como uma regra de escolha do parâmetro de regularização. Nas seções finais a regularização de Tikhonov e o princípio da máxima entropia são apresentados. No capítulo 4 a resolução numérica de equações integrais via regras de quadratura é estudada.

Nos dois capítulos seguintes o problema de determinação de condição inicial da equação do calor é estudado em detalhes: estabelece-se o problema e determina-se a sua instabilidade em relação aos dados, desenvolve-se algumas técnicas explícitas de inversão, as quais seriam abordagens extremamente naturais se não estivéssemos lidando com um problema inverso mal-posto.

No capítulo final apresenta-se os resultados numéricos obtidos para o problema inverso tomado como base para aplicação das técnicas de inversão, sendo que este último capítulo também é destinado às conclusões e comparações entre os métodos e à explanação das possibilidades de desenvolvimentos futuros para este trabalho.

2 PROBLEMA INVERSO

O que causa um determinado efeito? Muitas vezes esta pergunta não tem uma resposta definitiva. Pode-se sugerir um número de causas distintas possíveis para um efeito e às vezes pode-se não achar nenhuma causa razoável dentre todas as que poderiam gerar um determinado efeito ("mistério"). Mais ainda, pode acontecer que causas muito diferentes resultem em efeitos indistinguíveis.

Uma adequada definição de problema inverso é dada por um dos grandes conhecedores desta área, Oleg Alifanov:

" A solução de um problema inverso consiste na determinação de causas desconhecidas baseada na observação de seus efeitos. Em contraste com o correspondente problema direto, cuja solução envolve encontrar efeitos baseando-se numa completa descrição de suas causas ".

Observe-se que quando há um problema *real* por trás do problema matemático estudado, há, na maioria dos casos, uma distinção bem natural entre o problema direto e o problema inverso. Por exemplo, desejando-se prever o comportamento futuro de um sistema físico com base no conhecimento de seu estado presente e das leis físicas envolvidas (incluindo-se os valores específicos de todos os parâmetros físicos), então este é o assim chamado *problema direto*. Possíveis *problemas inversos* são a determinação do estado presente do sistema com base em observações futuras (isto é, o cálculo da evolução do sistema para trás no tempo) ou a identificação de parâmetros físicos com base em observações da evolução do sistema (*identificação de parâmetros*).

Existem, do ponto de vista das aplicações, duas diferentes motivações para estudar tais problemas inversos: primeiro, deseja-se conhecer estados passados ou parâmetros de um sistema físico. Segundo, deseja-se saber como influenciar um sistema através de seu estado presente ou através dos parâmetros com o objetivo de dirigí-los para que se obtenha um estado desejado no futuro.

Aqui vale observar que muitos autores [BBC85, Ö80] fazem uma distinção entre a terminologia *estimativa de função* e *estimativa de parâmetro*. Se o problema envolve a determinação de uma função desconhecida sem um conhecimento a priori da forma funcional da quantidade desconhecida, o problema é referenciado como um problema de *estimativa de função*, exigindo a determinação de um grande número de componentes da função desconhecida (problema de minimização de *dimensão infinita*). Por outro lado, se algum conhecimento prévio sobre a forma funcional da função desconhecida está disponível, pode-se utilizar uma parametrização e então o problema é referenciado como um problema de *estimativa de parâmetros* porque somente um número limitado de parâmetros tem que ser estimados (problema de minimização de *dimensão finita*). No entanto, se, neste contexto, o número de parâmetros que devem ser estimados cresce, pode não ser possível fazer uma clara distinção entre problemas de estimativa de parâmetros e problemas de estimativa de função.

2.1 Problemas Mal-Condicionados e Problemas Mal-Postos

O problema direto pode ser identificado como aquele de determinar o efeito y de uma dada causa x quando um modelo matemático definido K está colocado: $Kx = y$. Para tais problemas diretos assume-se que o operador K esteja bem definido e seja contínuo, assim há um único efeito y para cada causa x e pequenas variações em x resultam em pequenas variações em y .

Dada um problema direto do tipo a pouco discutido, dois problemas inversos podem imediatamente ser colocados. Estes são os problemas inversos de causa (dados K e y , determinar x) e identificação do modelo (dados x e y , determinar K). Particularmente aqui estamos interessados na determinação da causa x . No problema direto existência, unicidade e estabilidade de soluções são assumidas, mas em problemas inversos nem todas essas propriedades podem ser garantidas, daí o caráter desafiador e matematicamente interessante desta área.

Um modelo físico abstrato pode ser descrito por um mapeamento (K) de um conjunto X de "parâmetros teóricos" num conjunto Y de "resultados":

$$K : X \longrightarrow Y$$

$$x \rightsquigarrow K(x) = Kx = y.$$

"Solucionar o problema direto" é equivalente a dar uma descrição precisa de K . Entretanto, a frase "solucionar o problema inverso" ou "interpretar os dados $y \in Y$ " é uma questão de construção das imagens recíprocas de um ou mais elementos de Y de modo que elas estejam mais próximas de y (para qualquer $y \in Y$). Esta seria uma abordagem natural para o problema se K fosse uma bijeção (existência e unicidade de soluções), com K e K^{-1} contínuos (estabilidade do problema direto e do problema inverso). Contudo, fisicamente, isto raramente acontece, as medições dos dados são sempre tomadas de uma maneira finita e os parâmetros são muitas vezes funções contínuas, assumindo uma infinidade de valores.

O trabalho realizado por Tikhonov serviu como base para a composição e justificativa de métodos numéricos para solucionar problemas mal-postos. A princípio esses métodos reduzem-se a solucionar as seguintes equações "operacionais" (envolvendo operadores):

$$Kx = y, \quad y \in Y \text{ e } x \in X, \quad (2.1)$$

onde X e Y são espaços vetoriais normados e $K : X \rightarrow Y$ é um operador com domínio de definição em $D \subset X$, $y \in Y$ é conhecido e $x \in D$ é a variável da equação.

Definição 1 *Sejam X e Y espaços normados, $K : X \rightarrow Y$ um operador (linear ou não-linear). A equação (ou problema) $Kx = y$ é dita bem-posta (bem-posto) se*

1. **(Existência)** *Para qualquer $y \in Y$ existe (pelo menos um) $x \in X$ tal que $Kx = y$. (sobrejetividade)*
2. **(Unicidade)** *Para qualquer $y \in Y$ existe no máximo um $x \in X$ tal que $Kx = y$, isto é, se $Kx_1 = Kx_2$, $x_j \in X$, então $x_1 = x_2$. (injetividade)*

3. (Estabilidade) A solução x depende continuamente de y , isto é, para qualquer sequência $\{x_n\} \subset X$ tal que $Kx_n \rightarrow Kx$ ($n \rightarrow \infty$), então $x_n \rightarrow x$ ($n \rightarrow \infty$).

Equações para as quais (pelo menos) uma das propriedades não é satisfeita são chamadas mal-postas (problemas mal-postos). Particularmente, se a condição 3 de estabilidade não é satisfeita a equação é dita mal-condicionada ou um problema mal-condicionado.

Por um longo tempo, na literatura matemática [Had32, CH53], foi aceito o ponto de vista de que todo problema matemático associado a um fenômeno físico tinha que satisfazer essas três hipóteses anteriores, ou seja, a natureza não-física de qualquer problema matemático mal-posto. Esta visão não é mais considerada, já que um enorme número de problemas mal-postos apresentam uma incondicional relevância tanto do ponto de vista matemático quanto físico [EHN96, BBC85].

É importante salientar que a definição de um problema mal-posto é dada *com respeito a um dado par de espaços normados* (X, Y) . Este mesmo problema pode ser bem-posto - no sentido da estabilidade em relação aos dados - quando considera-se outras normas, conforme ficará ilustrado em exemplos posteriores.

O problema inverso caracteriza-se pela obtenção de x que satisfaça a equação (2.1) visto que já se conhece y e o operador K . Uma solução natural da equação acima seria

$$x = K^{-1}y,$$

contudo, conforme observado anteriormente, esta "inversão" (K^{-1}) pode caracterizar-se por um operador descontínuo em relação aos dados (y), isto é, instável, denotando então um problema inverso mal-posto. Observe-se que a comprovação analítica de que um problema é mal-posto nem sempre é possível, pode-se dizer que em grande parte de problemas aplicados esta caracterização não ocorre [Isa97].

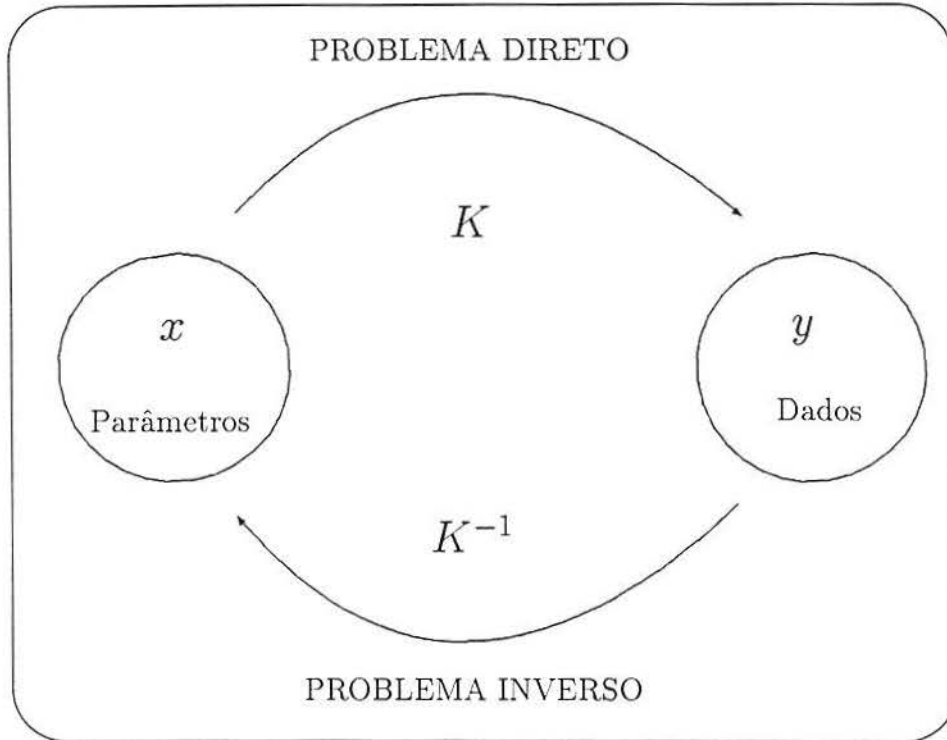


Figura 2.1 Problema inverso versus problema direto: $(Kx = y) \times (x = K^{-1}y)$

Uma outra maneira de abordar o problema seria buscar um elemento $x \in X$ através da minimização da "distância" entre os dados y e a projeção Kx , ou seja, encontrar um $x_* \in X$ tal que

$$\|Kx_* - y\| = \min_{x \in X} \|Kx - y\|, \quad (2.2)$$

onde $\|\cdot\|$ é uma norma definida em Y . Considera-se portanto x_* como uma solução generalizada de $Kx = y$, ou seja, há uma redefinição da idéia de solução do problema 2.1.

2.2 Exemplos de Problemas Mal-Postos

Desde o início do século e mesmo na época do surgimento dos primeiros e inovadores trabalhos de Tikhonov [Tik43, Tik63, TA77], seguiu-se a noção de Hadamard [Had02, Had32, Had23] da limitação a problemas bem-postos em física matemática e a proposição equivocada da natureza não física de qualquer problema matemático mal-

posto, a qual foi amplamente adotada por muitos pesquisadores [CH53]. Por volta da virada do século, Hadamard claramente formulou o conceito de um problema bem-posto. Ele disse que existência, unicidade e estabilidade de soluções eram características de um problema bem-posto e afirmou que situações físicas sempre levam a problemas bem-postos. Essa idéia foi sustentada por Petrovskii [Pet57] em 1956 e em Courant & Hilbert [CH53], por exemplo, encontra-se a seguinte frase: "... um problema matemático não pode ser considerado realisticamente correspondendo a fenômenos físicos a menos que uma variação dos dados fornecidos numa pequena faixa leve a uma variação arbitrariamente pequena na solução". Contudo três páginas adiante encontra-se o seguinte: "... problemas bem-postos não são os únicos a refletir apropriadamente fenômenos reais".

Interessantemente, Maxwell em 1873 teve algo a dizer sobre a instabilidade: "Há certas classes de fenômenos ... nas quais um pequeno erro nos dados introduz um pequeno erro nos resultados ... Os eventos neste caso ocorrem de uma maneira estável. Há outra classe de fenômenos que são mais complicados e nos quais casos de instabilidade ocorrem, a quantidade de tais casos cresce, de uma maneira extremamente rápida, conforme o número de variáveis aumenta".

Hoje, sabe-se que muitos problemas inversos interessantes e importantes em ciência levam a problemas matemáticos que não são bem-postos no sentido de Hadamard [EHN96, Isa97, BBC85, Tar87, RG95]. O problema de Cauchy para operadores de Laplace (um exemplo de problema mal-posto indicado por Hadamard [Had32, Had23]) foi objeto de intensas investigações nos anos 50 [Lav59, Joh55]. Nesta seção são apresentados alguns problemas mal-postos, dentre os quais o problema de Cauchy para a equação de Laplace.

Nos exemplos aqui apresentados há uma diferença fundamental entre os problemas direto e inverso. Em grande parte dos casos o problema inverso é mal-posto no sentido de Hadamard, enquanto o problema direto é bem-posto.

Hadamard diz em [Had23] (1923) que um modelo matemático para um problema físico (ele estava pensando em termos de um problema de valor de contorno para uma equação diferencial parcial) **tem** que ser bem posto no sentido de que ele tenha as seguintes propriedades:

1. Existe uma solução para o problema (existência).
2. Existe no máximo uma solução para o problema (unicidade).
3. A solução depende continuamente dos dados (estabilidade).

Nos exemplos a seguir a notação varia de acordo com a notação comumente utilizada em cada problema específico, visto que sempre é interessante manter as variáveis de tal forma que se possa fazer uma ligação relativamente natural com o problema físico associado.

Exemplo 1 (Diferenciação)

Considera-se aqui o problema direto de achar a integral y com $y(0) = 0$ de uma função contínua x em $[0, 1]$, isto é, calcular

$$y(t) = \int_0^t x(s) ds, \quad t \in [0, 1].$$

No problema inverso, tem-se uma função y continuamente diferenciável em $[0, 1]$ com $y(0) = 0$ e deseja-se determinar $x = y'$. Isto significa que temos que solucionar a equação integral $Kx = y$, onde $K : C[0, 1] \rightarrow C[0, 1]$ é definida por

$$(Kx)(t) := \int_0^t x(s) ds, \quad t \in [0, 1], \quad \text{para } x \in C[0, 1],$$

onde $C[0, 1]$ denota o espaço das funções contínuas no intervalo $[0, 1]$. Aqui associa-se a $C[0, 1]$ a norma do supremo (Chebyshev) definida por

$$\|x\|_\infty = \max_{0 \leq t \leq 1} |x(t)|.$$

A solução de $Kx = y$ é a derivada $x = y'$, considerando que $y(0) = 0$ e que y é continuamente diferenciável.

Se x é a solução exata de $Kx = y$ e perturba-se y na norma $\|\cdot\|_\infty$, então o lado direito (perturbado) \tilde{y} da equação não tem necessariamente que ser diferenciável. E

mesmo que se tenha a solução do problema com perturbação, esta não está necessariamente próxima à solução exata. Pode-se perturbar y por $\delta \sin(t/\delta^2)$ para δ pequeno e então o erro nos dados (com respeito a norma $\|\cdot\|_\infty$) é δ e o erro na solução é $1/\delta$. Daí que o problema $(K, C[0, 1], C[0, 1])$ é portanto mal-posto. Mais precisamente, com $y_1(t) = y_2(t) + \delta \sin(t/\delta^2)$, $x_1 = y_1'$ e $x_2 = y_2'$, então para $\delta \rightarrow 0$

$$\|y_1 - y_2\|_\infty \rightarrow 0 \quad \text{mas} \quad \|x_1 - x_2\|_\infty \not\rightarrow 0,$$

pois

$$\begin{aligned} \|y_1 - y_2\|_\infty &= \max_{0 \leq t \leq 1} \{ \delta |\sin(t/\delta^2)| \} = \delta \quad \text{e} \\ \|x_1 - x_2\|_\infty &= \left\| \frac{d}{dt} [\delta \sin(t/\delta^2)] \right\|_\infty = \|1/\delta \cos(t/\delta^2)\|_\infty = 1/\delta. \end{aligned}$$

Agora escolhe-se um espaço diferente $Y := \{y \in C^1[0, 1] : y(0) = 0\}$ para os dados (lado direito da equação) com $C^1[0, 1]$ denotando o espaço das funções continuamente diferenciáveis em $[0, 1]$. E associa-se a Y a norma mais forte

$$\|y\|_{C^1} := \sup_{0 \leq t \leq 1} \{ |y(t)| + |y'(t)| \}.$$

Se os dados são perturbados com respeito à norma $\|\cdot\|_{C^1}$, então o problema $(K, C[0, 1], Y)$ é bem-posto, pois $K : C[0, 1] \rightarrow Y$ é tal que a solução depende continuamente dos dados.

$$\|y_1 - y_2\|_{C^1} \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \|x_1 - x_2\|_\infty \rightarrow 0,$$

visto que $\|y_1 - y_2\|_{C^1} \geq \sup_{0 \leq t \leq 1} |y_1'(t) - y_2'(t)|$, isto é, $\|x_1 - x_2\|_\infty \leq \|y_1 - y_2\|_{C^1}$.

Esse exemplo ilustra também o fato de que um problema pode ser ou não bem-posto dependendo das normas envolvidas. Contudo, muitas vezes em problemas práticos, essas exigências sobre as funções $y(t)$ não podem ser satisfeitas. Pode-se dizer que a norma usada acima para estimar a diferença entre funções $y(t)$ não é uma norma natural para o problema de diferenciação. Busca-se a solução y' para este problema e neste caso "mede-se", em certo sentido, via $\sup \{ |y| + |y'| \}$, justamente a solução y' .

Exemplo 2 (Equação de Fredholm do primeiro tipo)

Considere a equação integral de Fredholm do primeiro tipo com núcleo $k(t, s)$:

$$\int_a^b k(t, s) x(s) ds = y(t), \quad t \in [c, d], \quad (2.3)$$

onde $x(s)$ é a função desconhecida num espaço normado X e $y(t)$ é uma função conhecida num espaço normado Y .

Assume-se que o núcleo $k(t, s)$ seja contínuo com respeito à variável t e que tenha uma derivada parcial contínua $\partial k / \partial t$. Denotando-se por K o operador definido por

$$K(x) = \int_a^b k(t, s) x(s) ds.$$

Busca-se então uma solução $x(s)$ na classe $C[a, b]$ das funções contínuas no intervalo $[a, b]$. Supondo que a medida das variações no lado direito da equação é tomada com a norma L_2 , definida por

$$\|y_1 - y_2\|_Y = \left\{ \int_c^d |y_1(t) - y_2(t)|^2 dt \right\}^{1/2}, \quad \text{para } y_1, y_2 \in Y,$$

enquanto que a medida das variações na solução $x(s)$ é tomada na norma de Chebyshev ($\|\cdot\|_\infty$) definida por

$$\|x_1 - x_2\|_X = \max_{s \in [a, b]} |x_1(s) - x_2(s)|, \quad \text{para } x_1, x_2 \in X.$$

Supondo ainda que para algum $y = y_*(t)$ a função $x_*(s)$ é uma solução da equação 2.3, isto é,

$$\int_a^b k(t, s) x_*(s) ds = y_*(t).$$

Se, ao invés da função $y_*(t)$ conhece-se somente uma aproximação $y(t)$ que difere muito pouco (na norma L_2) de $y_*(t)$, **pode-se falar então somente em encontrar uma solução aproximada da equação 2.3**, isto é, uma função próxima a $x_*(s)$. Aqui, o membro do lado direito $y(t)$ pode ser obtido experimentalmente e pode ter "corners" ou

”picos” nos quais a função $y(t)$ não tem uma derivada. Com esse lado direito, a equação 2.3 não tem uma solução (no sentido clássico) já que o núcleo $k(t, s)$ tem uma derivada contínua com respeito a t e portanto o membro direito deve também ter uma derivada contínua em relação a t [Tit53].

Isto significa que não pode-se tomar como ”solução” da equação 2.3 a aproximação da solução exata $x_*(s)$ obtida pela equação com o membro do lado direito $y(t) (\neq y_*(t))$, visto que $y(t)$ é conhecido aproximadamente e assim tal solução pode não existir. A questão fundamental que surge é o que significa uma solução aproximada da equação 2.3 com os dados (membro do lado direito) conhecidos aproximadamente.

Assim, a equação 2.3 tem uma solução (no sentido clássico) somente para membros do lado direito $y(t)$ que pertencem à imagem $K(X)$ do conjunto X de funções $x(s)$ sob o mapeamento

$$y = K(x) \equiv \int_a^b k(t, s) x(s) ds, \quad x(s) \in X.$$

Além disso, a solução da equação, entendida no sentido clássico, isto é, obtida através de $x = K^{-1}y$, onde K^{-1} é o operador inverso de K , não possui a propriedade de estabilidade sob pequenas variações nos ”dados” (lado direito $y(t)$).

Para ver isto, note que a função $x_2(s) = x_1(s) + C \sin(ns)$ é uma solução da equação 2.3 e correspondentemente

$$y_2(t) = y_1(t) + C \int_a^b k(t, s) \sin(ns) ds.$$

Assim, para qualquer número C , se os valores de n são suficientemente grandes, pode-se fazer a variação

$$\|y_1 - y_2\|_Y = |C| \left\{ \int_c^d \left[\int_a^b k(t, s) \sin(ns) ds \right]^2 dt \right\}^{1/2}$$

arbitrariamente pequena (lema de Riemann-Lebesgue [Wei95]). No entanto, a variação entre as correspondentes soluções $x_1(s)$ e $x_2(s)$, dada por

$$\|x_1 - x_2\|_X = \max_{s \in [a,b]} |x_2(s) - x_1(s)| = \max_{s \in [a,b]} |C \sin n s| = |C|,$$

pode ser arbitrariamente grande. Aqui, mede-se a diferença entre $x_1(s)$ e $x_2(s)$ na norma de Chebyshev ($\|\cdot\|_\infty$):

$$\|y_1 - y_2\|_Y \rightarrow 0 \quad \text{mas} \quad \|x_1 - x_2\|_X \not\rightarrow 0$$

Se a diferença entre as soluções é estimada na norma L_2 , a solução da equação 2.3 é novamente instável sob pequenas variações em $y(t)$. Especificamente,

$$\begin{aligned} \|x_1 - x_2\|_X &= \left\{ \int_a^b |x_1(s) - x_2(s)|^2 ds \right\}^{1/2} = |C| \left\{ \int_a^b \sin^2(n s) ds \right\}^{1/2} \\ &= |C| \sqrt{\frac{b-a}{2} - \frac{1}{2n} \sin(n(b-a)) \cos(n(b+a))}. \end{aligned} \quad (2.4)$$

Pode-se notar que os números n e C podem ser escolhidos de tal forma que, para arbitrariamente pequenas discrepâncias entre y_1 e y_2 , a discrepância ou variação entre as soluções correspondentes pode ser arbitrária (equação 2.4). Observe que a quantidade $\|x_1 - x_2\|_X$ vai para infinito quando $C, n \rightarrow \infty$, já que as funções seno e cosseno são limitadas:

$$\|y_1 - y_2\|_Y \rightarrow 0 \quad \text{mas} \quad \|x_1 - x_2\|_X \not\rightarrow 0.$$

Exemplo 3 (Soma numérica da série de Fourier)

Soma numérica da série de Fourier quando os coeficientes são conhecidos aproximadamente na norma de ℓ_2 .

Supondo-se que $f(t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos nt$. Se ao invés de a_n toma-se os coeficientes $c_n = a_n + \epsilon/n$ para $n \geq 1$ e $c_0 = a_0$, obtém-se a série $f_2(t) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cos nt$. Os coeficientes $\{a_n\}$ e $\{c_n\}$ nestas séries diferem (na norma do ℓ_2) por

$$\epsilon_1 = \left\{ \sum_{n=0}^{\infty} (c_n - a_n)^2 \right\}^{1/2} = \epsilon \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \right\}^{1/2} = \epsilon \sqrt{\frac{\pi^2}{6}},$$

que pode-se fazer arbitrariamente pequeno através da escolha de ϵ suficientemente pequeno. Por outro lado, a diferença

$$f_2(t) - f_1(t) = \epsilon \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \cos nt$$

pode ser arbitrariamente grande (para $t = 0$, esta última série diverge).

Assim, tomando-se a discrepância da soma da série na norma de Chebyshev, a soma das séries de Fourier não é estável:

$$\|\{c_n\} - \{a_n\}\|_{\ell_2} \rightarrow 0 \quad \text{mas} \quad \|f_1 - f_2\|_{\infty} \not\rightarrow 0.$$

Note-se que se a diferença entre as funções $f(t)$ é estimada na norma de L_2 , o problema de somar as séries de Fourier com coeficientes conhecidos aproximadamente (na norma ℓ_2) será bem-posto. Especificamente, do teorema de Parseval [Wei95], tem-se

$$\left\{ \int_0^{\pi} |f_1(t) - f_2(t)|^2 dt \right\}^{1/2} = \left\{ \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\pi}{2} (c_n - a_n)^2 \right\}^{1/2} = \epsilon_1 \sqrt{\frac{\pi}{2}}.$$

Portanto, a diferença (na norma L_2) na soma da série de Fourier vai para zero quando a diferença entre os coeficientes vai para zero:

$$\|\{c_n\} - \{a_n\}\|_{\ell_2} \rightarrow 0 \quad \Rightarrow \quad \|f_1 - f_2\|_{L_2} \rightarrow 0.$$

Exemplo 4 (O problema de Cauchy para a equação de Laplace)

O problema de Cauchy para a equação de Laplace bidimensional foi utilizado por Hadamard [Had23, Had32] como um dos exemplos ilustrativos para a caracterização de suas idéias sobre problemas mal-postos. Este problema consiste em encontrar uma solução u da equação de Laplace

$$\Delta u(x, y) := \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u(x, y)}{\partial y^2} = 0, \text{ em } -\infty < x < \infty, y \geq 0,$$

que satisfaça as "condições iniciais"

$$u(x, 0) = f(x), \quad \frac{\partial u}{\partial y}(x, 0) = \varphi(x), \quad -\infty < x < \infty,$$

onde $f(x)$ e $\varphi(x)$ são funções conhecidas.

Com $f(x) \equiv 0$ e $\varphi(x) = 1/n \sin(nx)$, a solução do problema de Cauchy [Had23] é dada por

$$u(x, y) = \frac{1}{n^2} \sin(nx) \sinh(ny), \quad x \in R, y \geq 0.$$

Assim tem-se

$$\sup_{x \in R} \{|f(x)| + |\varphi(x)|\} = \frac{1}{n} \rightarrow 0, \quad n \rightarrow \infty, \quad \text{mas}$$

$$\sup_{x \in R} |u(x, y)| = \frac{1}{n^2} \sinh(ny) \rightarrow \infty, \quad n \rightarrow \infty,$$

para qualquer $y > 0$. O erro nos dados vai para zero enquanto o erro na solução u tende para infinito.

Portanto, este problema é mal-posto, não apresenta a propriedade de estabilidade. Note-se que o problema de Cauchy para a equação de Laplace já é encontrado em diversas aplicações há algum tempo [Lav57, New60, Phi62].

Nos exemplos citados, pode-se formular o problema direto como o cálculo de um operador K agindo sobre um "modelo" conhecido x num espaço (do modelo) X e o problema inverso como a solução da equação $K(x) = y$:

PROBLEMA DIRETO:

dado x (e K), calcula-se $K(x)$.

×

PROBLEMA INVERSO:

dado y (e K), soluciona-se $K(x) = y$ para x .

Em geral, o cálculo de $K(x)$ significa solucionar um problema de valor de contorno para uma equação diferencial ou avaliar uma integral.

Observe que é importante especificar X , Y e K e suas normas. Existência e unicidade dependem somente da natureza algébrica dos espaços e do operador, isto é, se o operador é sobrejetivo ou injetivo. No entanto, estabilidade depende também da topologia dos espaços, isto é, se o operador inverso

$$K^{-1} : Y \longrightarrow X$$

é contínuo.

Matematicamente, a existência de uma solução pode ser forçada através de um "aumento" do espaço solução. Se um problema tem mais de uma solução, então informação sobre o modelo está faltando. Nesse caso, propriedades adicionais, como condições sobre os sinais, podem ser construídas [Two77]. A exigência de estabilidade é a mais importante. Se um problema perde a propriedade de estabilidade então sua solução é praticamente impossível de calcular, pois qualquer medição ou computação numérica está poluída por erros inevitais: os dados de um problema estão sempre perturbados por ruído! Se a solução de um problema não depende continuamente dos dados, então em geral a solução calculada não tem nada a ver com a solução exata (verdadeira). Realmente, não há uma maneira de superar esta dificuldade a menos que informação adicional sobre a solução esteja disponível.

Em [Lan97], Lanczos diz: "Uma falta de informação não pode ser remediada através de um artifício matemático".¹

Nos dois próximos exemplos descreve-se dois problemas inversos relacionados com a equação da difusão.

Exemplo 5 (Difusão num meio não-homogêneo)

A equação de difusão num meio não-homogêneo em duas dimensões é descrita pela equação

$$\frac{\partial u(x, t)}{\partial t} = \frac{1}{c} \nabla \cdot (\kappa \nabla u(x, t)), \quad x \in D, t > 0 \quad (2.5)$$

onde c é uma constante e $\kappa = \kappa(x)$ é um parâmetro que descreve o meio. No caso estacionário, a equação se reduz a

$$\nabla \cdot (\kappa \nabla u(x, t)) = 0, \quad x \in D. \quad (2.6)$$

O problema direto é solucionar o problema de valor de contorno para essa equação para valores de fronteira $u|_{\partial D}$ fornecidos e uma dada função κ . No problema inverso, mede-se u e o fluxo $\frac{\partial u}{\partial \nu}$ sobre o contorno ∂D e tenta-se determinar a função desconhecida κ em D .

Este é um exemplo do problema de identificação de parâmetro para uma equação diferencial.

¹"A lack of information cannot be remedied by any mathematical trickery!"

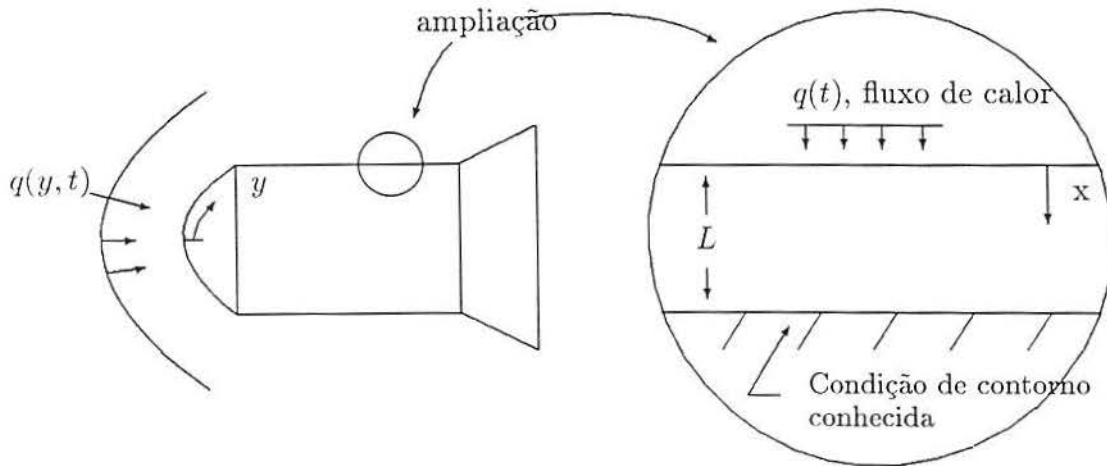


Figura 2.2 Exemplo de reentrada de um veículo espacial para o qual a determinação do fluxo de calor na superfície é necessária.

Exemplo 6 (Determinação da temperatura numa parte inacessível da fronteira)

Considere-se o problema de determinação da temperatura em uma parte inacessível da fronteira com base na temperatura ou fluxo de calor medidos em outras partes da fronteira [Bec70].

Este problema consiste em determinar

$$f(t) = u(1, t), \quad t \in R$$

com base em medições de

$$g(t) = u(0, t), \quad t \in R$$

e sob a informação de que a fronteira esquerda de $[0, 1]$ está isolada, isto é,

$$\frac{\partial u}{\partial x}(0, t) = 0, \quad t \in R,$$

e onde assume-se que u satisfaz a equação linear do calor

$$\frac{\partial^2 u(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial u(x, t)}{\partial t}, \quad \text{em } [0, 1] \times R.$$

Assumindo-se que para todo $x \in [0, 1]$, $u(x, \cdot) \in L^2(\mathbb{R})$, pode-se tratar este problema via transformadas de Fourier e após algumas manipulações obtém-se

$$F(w) = \cosh(\sqrt{iw}) G(w), \quad w \in \mathbb{R},$$

onde $F(w)$ e $G(w)$ denotam respectivamente as transformadas de Fourier de $f(t)$ e $g(t)$ [Wei95].

Assim, uma solução formal para o problema de determinação de f visto que g é conhecida pode ser obtida através da transformada inversa de Fourier

$$f(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{iwt} \cosh(\sqrt{iw}) G(w) dw, \quad t \in \mathbb{R}.$$

3 A REGULARIZAÇÃO

Neste capítulo considera-se a equação

$$Kx = y, \tag{3.1}$$

onde K é um operador contínuo (não necessariamente linear) tal que

$$\begin{aligned} K : X &\longrightarrow Y \\ x &\rightsquigarrow K(x) = Kx = y, \end{aligned}$$

onde $x \in X$ (espaço normado) deve ser encontrado conhecendo-se $y \in Y$ (espaço normado).

Em muitas aplicações a solução x de um problema do tipo $Kx = y$ pode não existir para todos os elementos $y \in Y$. Contudo se tal solução existe (considerando-se aí a possível multiplicidade dessas soluções), esta pode depender descontinuamente dos dados. Ou seja, a instabilidade permanece mesmo quando não se leva em conta a questão de unicidade. Então parte-se para a **regularização**, que é uma abordagem para problemas mal-postos que objetiva obter soluções aproximadas de $Kx = y$ que sejam estáveis sob pequenas variações no valor de y , já que na maioria das aplicações y só é conhecido aproximadamente. Tal abordagem baseia-se no conceito de um operador de regularização.

Na realidade, em problemas aplicados, a formulação (3.1) consiste do operador K de X em Y que descreve o fenômeno físico em questão, x denota os parâmetros (funções ou vetores) a serem determinados e \tilde{y} representa os dados experimentais obtidos com imprecisões de medida (ruído) que estão naturalmente ligadas a problemas aplicados, ou seja, $\tilde{y} = y^{exato} + \text{ruído}$.

Nesse caso, sem a condição de estabilidade, a solução do problema (3.1) não pode ser computada, pois na prática, nunca se conhece exatamente os dados devido a erros de medida e computação. No entanto, a utilização racional de métodos de "estabilização" pode sanar esta situação.

3.1 Operadores de Regularização

De fato, foi Tikhonov quem em 1944 observou que a introdução de restrições poderia restaurar alguma estabilidade a um problema inverso mal-posto de gravimetria, e essa observação foi um dos marcos iniciais na teoria de problemas mal-postos.

A idéia básica em solucionar (3.1) é usar regularização, isto é, substitui-se essa equação por uma equação "próxima" envolvendo um pequeno parâmetro α , de tal modo que a equação modificada possa ser resolvida de um modo estável e sua solução esteja próxima da solução da equação original (3.1) quando α é pequeno.

Definição 2 *Uma família de operadores contínuos $R_\alpha : Y \rightarrow X$ é chamada um esquema de regularização para a equação (3.1) quando*

$$\lim_{\alpha \rightarrow 0} R_\alpha Kx = x,$$

para qualquer $x \in X$. O parâmetro positivo α é chamado de parâmetro de regularização.

Neste ponto, surge uma questão: como construir esquemas de regularização? Seguindo a formulação sugerida por Tikhonov & Arsenin em [TA77], um método geral de regularização pode ser definido pela modificação do critério de mínimos quadrados através da incorporação das informações adicionais disponíveis.

Supõe-se que o operador K^{-1} seja descontínuo em relação aos dados $y \in Y$. Sejam $\|\cdot\|_X$ e $\|\cdot\|_Y$ normas definidas nos espaços X e Y respectivamente. Considerando-se um elemento $y_\delta \in Y$ que difere da informação exata y (dados exatos) por não mais que δ , isto é, $\|y_\delta - y\|_Y \leq \delta$, então a solução aproximada x_δ da equação (3.1) **não** pode ser definida **como a solução exata** dessa equação visto que só se conhece os dados aproximados y_δ .

O número δ denota o erro nos dados y da equação (3.1). Por isso, é natural definir x_δ com a ajuda de um operador que seja dependente de um parâmetro que tenha seu valor escolhido levando em conta o erro δ nos dados iniciais y_δ .

Com o objetivo de obter uma solução regularizada para o problema mal-posto, resolve-se a equação (3.1) através da minimização (em relação a x) do seguinte funcional:

$$M^\alpha[x] := \|Kx - y_\delta\|_Y^2 + \alpha \Omega[x], \quad (3.2)$$

onde $\Omega[x]$ é o funcional estabilizador definido em X , que incorpora as restrições e informações a priori sobre a solução procurada, como quotas sobre as derivadas ou condição sobre os sinais, $\|\cdot\|_Y$ denota a norma definida em Y , $M^\alpha[x]$ é o chamado funcional suavizador e α é o chamado parâmetro de regularização.

De acordo com a formulação sugerida, o "papel da regularização" está caracterizado pelo funcional $\Omega[x]$, isto é, as *informações a priori* que estão disponíveis pretensamente tornarão o método estável. No funcional $M^\alpha[x]$, o primeiro termo, quando α é pequeno, garante que x é "quase" uma solução de mínimos quadrados, enquanto que o segundo termo "deve suavizar" as instabilidades em x .

Assim, a obtenção de um método de regularização consiste em:

1. Achar o funcional estabilizador $\Omega[x]$.
2. Escolher o parâmetro de regularização α , preferencialmente levando-se em conta o ruído, que é, a princípio, mais uma informação disponível, isto é, $\|y_{exato} - y_\delta\| \leq \delta$.

Esse método de construção de soluções aproximadas é chamado de método de regularização [TA77, Mor93, Isa97].

A regularização pode ser vista como um procedimento que muda a abordagem por mínimos quadrados (minimização do resíduo) através da **adição de termos que pretendem reduzir flutuações na função ou vetor desconhecido x** , flutuações estas que são inerentes a problemas mal-postos. Assim, passa-se de uma abordagem natural via mínimos quadrados para uma abordagem com regularização ($\Omega[x]$):

$$\min_{x \in X} \|Kx - y\|_Y^2 \quad \Longrightarrow \quad \min_{x \in X} (\|Kx - y\|_Y^2 + \alpha \Omega[x])$$

↑

(+ termo regularizador).

A base teórica do procedimento de regularização foi introduzida por Tikhonov [Tik43, Tik63]. Desde então, uma grande quantidade de procedimentos têm sido desenvolvidos baseados nos conceitos de Tikhonov [Ali79, EHN96, Isa97, Mor93, TA77, TG87, TGSY95].

3.2 Determinação do Parâmetro de Regularização

Em muitos problemas aplicados pode-se avaliar o "tamanho" do erro máximo de medida nos dados experimentais. Erros de medida que são inerentes a problemas práticos e em geral apresentam um caráter aleatório.

Quando $\delta \rightarrow 0$ ($y_\delta \rightarrow y$ (exato) na norma de Y), a solução aproximada x_δ deve (na norma de X) aproximar-se da solução exata x da equação

$$Kx = y.$$

A função $\alpha = \alpha(\delta)$ depende também de y_δ . A dependência do parâmetro α de y_δ implica também dependência de y e portanto de x , visto que $Kx = y$.

Se $\|y - y_\delta\|_Y \leq \delta$, sabe-se que se pode tomar para uma solução aproximada da equação (3.1), com dados y_δ conhecidos aproximadamente, o elemento $x^\alpha = R_\alpha(y_\delta)$ obtido com a ajuda do operador de regularização R_α , onde $\alpha = \alpha(\delta, y_\delta)$ de acordo com o erro nos dados iniciais y_δ . Esta solução é chamada uma solução regularizada da equação $Kx = y$. O parâmetro numérico α indica o parâmetro de regularização.

Claramente, todo o operador de regularização define um método estável de construção aproximada da solução da equação (3.1) contanto que a escolha de α seja consistente com a precisão δ dos dados iniciais. Sabendo-se que $\|y - y_\delta\|_Y \leq \delta$, pode-se, pela definição de um operador de regularização, escolher o valor do parâmetro de regularização $\alpha = \alpha(\delta)$ de tal modo que, quando $\delta \rightarrow 0$, a solução regularizada $x^\alpha = R_{\alpha(\delta)}(y_\delta)$ aproxime-se (na norma de X) da solução exata procurada, isto é, $\|x - x^{\alpha(\delta)}\|_X \rightarrow 0$. Isto justifica tomar-se como solução aproximada da equação $Kx = y$ a solução regularizada.

O problema de seleção do parâmetro de regularização é um dos principais problemas para a abordagem através do funcional de Tikhonov. O parâmetro tem, de fato, o mesmo papel que, por exemplo, a amplitude da banda de um filtro digital. Assim, quando o parâmetro é muito grande a solução é sobre-suavizada. Por outro lado, se o parâmetro é muito pequeno a solução ainda permanece afetada por grandes erros.

Considere-se hipoteticamente que $x \in X$ seja a solução exata para um dado $y \in Y$ também exato, isto é, $Kx = y$. Contudo em problemas aplicados tal y exato não é possível de ser obtido, na verdade obtém-se uma aproximação y_δ para esse y . Supondo-se então que tem-se uma cota do erro máximo de medida ou ruído dos dados

$$\|Kx - y_\delta\|_Y = \|y - y_\delta\|_Y \leq \delta,$$

então o parâmetro de regularização α é determinado utilizando-se a relação

$$\|Kx^{\alpha(\delta)} - y_\delta\|_Y = \delta, \quad (3.3)$$

onde $\|\cdot\|_Y$ é uma norma em Y (L_2 por exemplo). Assim, busca-se um parâmetro α cuja solução $x^{\alpha(\delta)}$ gere a mesma diferença em relação aos dados experimentais y_δ que a solução exata x geraria.

Tikhonov chama em [TA77] a relação (3.3) de princípio da discrepância. Na verdade, este método se deve a Morozov [Mor66, Mor93, EHN96] e é muitas vezes referenciado como o princípio da discrepância de Morozov.

Portanto uma possível regra de escolha do parâmetro de regularização é o método da discrepância. Para um operador K , o parâmetro $\alpha(\delta)$ é tomado como uma raiz da equação

$$\psi(\alpha) \equiv \|K x_\delta^\alpha - y_\delta\|_Y^2 - \delta^2 = 0. \quad (3.4)$$

O elemento x_δ^α é o extremo do funcional de Tikhonov M^α , para um $\alpha > 0$ fixo. A função $\psi(\alpha)$ é uma função monótona e contínua de α para $\alpha > 0$ e, portanto, o parâmetro α pode ser determinado unicamente.

Para encontrar a raiz da equação (3.4) geralmente inicia-se os cálculos com um valor de $\alpha = \alpha_*$ relativamente alto tal que

$$\psi(\alpha_*) > 0.$$

Então pode-se efetuar qualquer procedimento iterativo, tal como

$$\alpha_k = \alpha_* q^k,$$

onde $0 < q < 1$ e $k = 1, 2, \dots$, até o ponto em que $\psi(\alpha)$ torne-se menor que zero (fig. 3.1).

O valor exato do parâmetro de regularização pode ser obtido utilizando-se qualquer método para solucionar a equação não linear 3.4. No entanto, geralmente não há a necessidade de determinar α precisamente, visto que a influência de α sobre os resultados dos cálculos pode ser negligenciado para uma certa variação de α .

Portanto a eficiência da escolha de α é determinada por experimentos computacionais.

Existem alguns outros métodos de escolha do parâmetro de regularização, tal como o método *error free* [EHN96] e o *cross-validation* [Wah90]. Mas o mais amplamente utilizado ainda é o método da discrepância. Há uma grande quantidade de variações deste princípio na literatura [Vai82, Vai83].

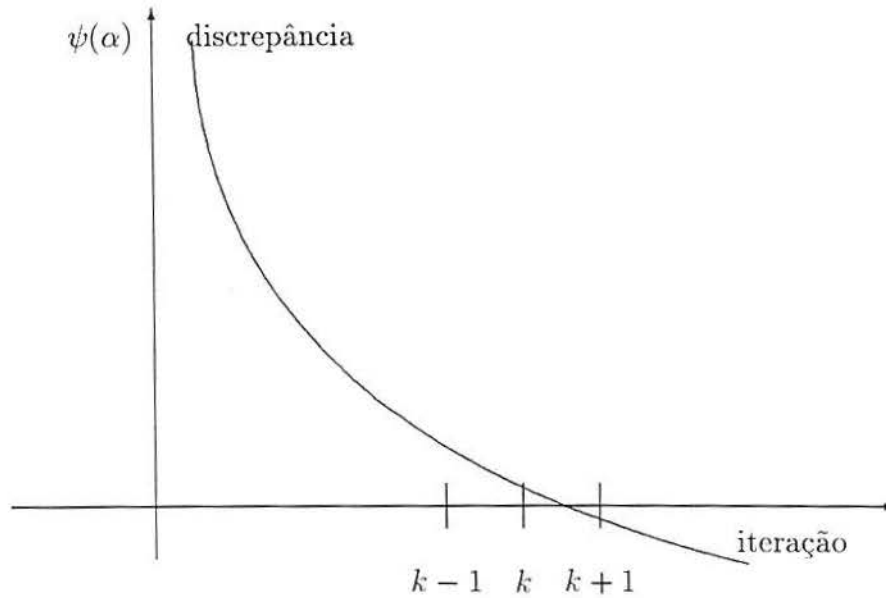


Figura 3.1 Seleção do parâmetro de regularização com o princípio da discrepância

3.3 A Regularização de Tikhonov

Considera-se aqui $x = x(t)$ na equação $Kx = y$, isto é, x é uma função de t . Tikhonov apresenta em [TA77] uma técnica de regularização obtida através da definição do seguinte funcional estabilizador

$$\Omega[x] = \alpha_0 \|x\|_2^2 + \alpha_1 \|x^{(1)}\|_2^2 + \cdots + \alpha_p \|x^{(p)}\|_2^2,$$

onde $x^{(i)}$ denota a i -ésima derivada de x em relação a t para $i = 0, \dots, p$ (já que $x = x(t)$) e os parâmetros de regularização $\alpha_p \geq 0$ são os chamados estabilizadores de ordem p de Tikhonov.

Por exemplo, se $\alpha_0 = 1$ e $\alpha_i = 0$ para $i = 1, \dots, p$ então o método é chamado de **regularização de Tikhonov de ordem zero**, onde o funcional estabilizador $M^\alpha[x]$ apresenta a seguinte forma

$$M^\alpha[x] = \|Kx - y\|_2^2 + \alpha \Omega[x] = \|Kx - y\|_2^2 + \alpha \|x\|_2^2.$$

Aqui nota-se que quando $\alpha \rightarrow 0$ há predominância do termo "em mínimos quadrados", isto é, ao minimizar-se o funcional acima busca-se um ajuste perfeito entre Kx (valor calculado) e y (valor "medido ou experimental"). Contudo quando $\alpha \ll 1$ o termo $\Omega[x]$ pode crescer bastante, na medida em que o produto $\alpha \Omega[x]$ não apresenta um valor significativo na minimização do funcional acima definido e portanto a magnitude $\|x\|_2$ da solução pode crescer de uma maneira absurda, podendo-se assim obter um método possivelmente instável em relação aos dados. Por outro lado, para α grande, as magnitudes de x diminuem e tendem a zero no limite quando α tende a infinito, perdendo-se então quase toda informação disponível sobre o sistema físico que está sendo modelado.

Portanto o efeito desta regularização ($\alpha_0 = 1, \alpha > 0$) é fazer com que as magnitudes de x sejam reduzidas e, com uma escolha adequada de α pode-se retirar a instabilidade inerente das soluções de um problema mal-posto (mal-condicionado).

Analogamente, quando $\alpha_1 = 1$ e $\alpha_i = 0$ para $i \neq 1$ tem-se o **método de regularização de Tikhonov de ordem um**. Obtendo-se então

$$M^\alpha[x] = \|Kx - y\|_2^2 + \alpha \Omega[x] = \|Kx - y\|_2^2 + \alpha \|x^{(1)}\|_2^2.$$

Para esta regularização, quando $\alpha \gg 1$, ao minimizar-se o funcional $M^\alpha[x]$ busca-se soluções que tenham as derivadas de primeira ordem com menor magnitude, ou seja, "a primeira derivada mais próxima de zero". Formalmente, esse perfil de soluções regularizadas caracteriza-se por apresentar pequenas variações, perfis constantes:

$$\begin{aligned} \min_{x \in X} M^\alpha[x] &= \min_{x \in X} \{ \|Kx - y\|_2^2 + \alpha \|x^{(1)}\|_2^2 \} \quad (\text{com } \alpha \gg 1) \\ \min_{x \in X} M^\alpha[x] &\approx \min_{x \in X} \alpha \|x^{(1)}\|_2^2 = \alpha \min_{x \in X} \|x^{(1)}\|_2^2. \end{aligned}$$

Portanto, na minimização da derivada primeira tem-se

$$\frac{dx}{dt}(t) \approx 0, \quad \text{isto é, } x \approx \text{constante}.$$

Novamente, através de uma escolha adequada do parâmetro de regularização, pode-se obter soluções com flutuações reduzidas. A definição de regularizações de Tikhonov de ordem superior segue a mesma linha desenvolvida para as regularizações de ordem zero e um.

Portanto, a regularização de Tikhonov é um procedimento que modifica a abordagem por mínimos quadrados através da adição de fatores suavizadores que reduzem a influência de erros de medida sobre os resultados. Do ponto de vista matemático isto consiste em construir um novo operador que pode gerar resultados estáveis no sentido da continuidade em relação aos dados [Isa97, Mor93].

As Regularizações de Tikhonov na Forma Discreta

A regularização de Tikhonov de ordem zero apresenta o funcional estabilizador da forma $\|x\|_2^2$. Quando passa-se ao caso discreto, considerando-se a base canônica e o vetor \vec{x} da forma $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$, esse funcional estabilizador pode ter a representação

$$\Omega[\vec{x}] = \sum_{i=1}^n x_i^2 = \vec{x}^T \vec{x} = \vec{x}^T \mathbf{I}_n \vec{x},$$

onde \mathbf{I}_n é a matriz identidade de ordem n .

Analogamente, para a regularização de Tikhonov de ordem um, o funcional suavizador, envolvendo a primeira derivada, discretamente pode ser substituído pela soma dos quadrados das primeiras diferenças $(x_2 - x_1), (x_3 - x_2), \dots, (x_n - x_{n-1})$, que numa malha regular apresenta-se como

$$\Omega[\vec{x}] = \sum_{i=1}^{n-1} (x_{i+1} - x_i)^2 = (\mathbf{L} \vec{x})^T \mathbf{L} \vec{x} = \vec{x}^T \mathbf{L}^T \mathbf{L} \vec{x},$$

onde \mathbf{L} é a matriz de ordem $(n - 1) \times n$ tal que

$$\mathbf{L} = \begin{bmatrix} -1 & 1 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -1 & 1 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & -1 & 1 \end{bmatrix}.$$

Portanto, muitas vezes o operador de regularização $\Omega[x]$ pode ser escrito como

$$\Omega[\vec{x}] = \|\mathbf{L} \vec{x}\|_2^2 = (\mathbf{L} \vec{x})^T \mathbf{L} \vec{x},$$

onde \mathbf{L} é uma matriz que aproxima um operador de diferenciação.

A Regularização de Tikhonov para o Caso Linear Discreto

Assuma-se que a equação $Kx = y$ tenha, na formulação discretizada, uma representação envolvendo matrizes e vetores (em relação à base canônica) tal que

$$\mathbf{A} \vec{x} = \vec{y},$$

onde \mathbf{A} é a matriz quadrada de ordem n correspondente à discretização do operador K e os vetores \vec{x} e \vec{y} representam respectivamente a solução procurada e os dados.

Com " T " indicando a transposição da matriz ou vetor e seguindo a formulação da regularização de Tikhonov (discretamente) deseja-se minimizar

$$\begin{aligned} M^\alpha[\vec{x}] &= \|\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}\|_2^2 + \alpha \|\vec{x}\|_2^2 \\ &= (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y})^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}) + \alpha (\mathbf{L} \vec{x})^T \mathbf{L} \vec{x}. \end{aligned}$$

Seja $\{\vec{e}_1, \vec{e}_2, \dots, \vec{e}_n\}$ a base canônica (em R^n) então para minimizar $M^\alpha[\vec{x}]$, onde $\vec{x} = (x_1, \dots, x_n)^T$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial M^\alpha[\vec{x}]}{\partial x_i} &= \frac{\partial}{\partial x_i} \{ (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y})^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}) + \alpha (\mathbf{L} \vec{x})^T \mathbf{L} \vec{x} \} = 0, \quad \text{isto é,} \\ (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y})^T \mathbf{A} \vec{e}_i + (\mathbf{A} \vec{e}_i)^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}) + \alpha \{ (\mathbf{L} \vec{x})^T \mathbf{L} \vec{e}_i + (\mathbf{L} \vec{e}_i)^T \mathbf{L} \vec{x} \} &= 0. \end{aligned}$$

Agora, visto que $(\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y})^T \mathbf{A} \vec{e}_i = (\mathbf{A} \vec{e}_i)^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}) = \vec{e}_i^T \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y})$ e $(\mathbf{L} \vec{x})^T \mathbf{L} \vec{e}_i = (\mathbf{L} \vec{e}_i)^T \mathbf{L} \vec{x}$, então

$$\begin{aligned} (\mathbf{A} \vec{e}_i)^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}) + \alpha (\mathbf{L} \vec{e}_i)^T \mathbf{L} \vec{x} &= 0 \\ \Rightarrow \vec{e}_i^T \{ \mathbf{A}^T (\mathbf{A} \vec{x} - \vec{y}) + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L} \vec{x} \} &= 0, \quad \forall i = 1, \dots, n. \end{aligned}$$

Portanto, já que isto vale para todo \vec{e}_i , $i = 1, \dots, n$,

$$(\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L}) \vec{x} = \mathbf{A}^T \vec{y}$$

e a solução neste caso é dada por

$$\vec{x} = (\mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{L}^T \mathbf{L})^{-1} \mathbf{A}^T \vec{y}.$$

3.4 O Princípio da Máxima Entropia

De acordo com a formulação contendo os ditos funcionais "estabilizadores", faz sentido usar outros termos de regularização (penalidades) diferentes de $\|x\|^2$, como na regularização usual de Tikhonov. A escolha do termo de regularização depende de hipóteses qualitativas sobre a solução [EHN96].

Propriedades lineares de certos esquemas de regularização, como Tikhonov, não são verificadas para uma outra classe de termos de regularização amplamente utilizados, os quais envolvem a assim chamada entropia, termo oriundo da teoria da informação.

Entropia é um conceito probabilístico que aparece na teoria da informação e em mecânica estatística. Por isso, uma motivação para a regularização por máxima entropia é dada de um ponto de vista probabilístico. Isto é feito através da consideração do problema de determinação de uma distribuição de probabilidade com base em dados incompletos. Por simplicidade considera-se o caso de uma variável aleatória finita. O caso de distribuições contínuas segue então através de um argumento limite [Isa97].

Um vetor com componentes não-negativos e que somem 1 pode ser chamado de *distribuição de probabilidade*. A "entropia" de uma distribuição de probabilidade χ é definida como segue

Definição 3 Dado $\chi = (x_1, x_2, \dots, x_{n-1}, x_n)$ tal que $x_i \in [0, 1]$ e onde $\sum_{i=1}^n x_i = 1$, define-se a entropia deste conjunto como a seguinte quantidade não-negativa

$$S[\chi] = - \sum_{i=1}^n x_i \log(x_i). \quad (3.5)$$

Referencia-se esta quantidade como a entropia de Shannon-Jaynes [EHN96, Isa97, Jay57a, Jay57b].

Logaritmos com respeito a base 2 são usados somente por razões históricas, e qualquer outra base poderia ser utilizada. Se $x_i = 0$, o i -ésimo termo $x_i \log(x_i)$ é definido como 0. Esta última convenção sempre se aplica ($0 \log 0$ é assumido como 0). $S[\chi]$ representa a informação obtida através de um experimento que gera x_1, \dots, x_n . $S[\chi]$ também pode ser considerado como uma medida da incerteza sobre a qual x_i , um ponto aleatório de χ , recairá.

Considerando-se um vetor $\vec{x} = (x_1, x_2)$ tal que $x_1 + x_2 = 1$ e $x_1, x_2 \in [0, 1]$, então a entropia de \vec{x} é dada por

$$\Omega[\vec{x}] = -x_1 \log(x_1) - x_2 \log(x_2) = -x_1 \log(x_1) - (1 - x_1) \log(1 - x_1).$$

Tem-se portanto para

$$\begin{cases} \vec{x} = (0, 1) \rightarrow \Omega[\vec{x}] = -0 \log(0) - 1 \log(1) = 0 \\ \vec{x} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2}) \rightarrow \Omega[\vec{x}] = -\frac{1}{2} \log(2^{-1}) - \frac{1}{2} \log(2^{-1}) = 1. \end{cases}$$

Assumindo-se que \vec{x} , do ponto de vista estatístico, seja uma distribuição de probabilidade, então pode-se notar que para $\vec{x} = (\frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ (máxima entropia) não se pode inferir muita coisa sobre a ocorrência do evento 1 ou 2, visto que a chance de qualquer um destes eventos ocorrer é a mesma (maior incerteza). Já para $\vec{x} = (0, 1)$ (entropia mínima) sabe-se que o evento 2 ($x_2 = 1$) ocorrerá e que o evento 1 ($x_1 = 0$) jamais ocorrerá, havendo portanto uma completa determinação do sistema.

Entropia mede o grau de incerteza sobre as respostas a uma questão, podendo ser interpretada como a medida da incerteza de uma função distribuição de probabilidade.

De certa maneira, quanto maior a entropia maior "a incerteza da distribuição dos dados", menos previsível é o sistema (vetor de parâmetros \vec{x}). Portanto, pode-se definir um critério, que funciona como uma regularização, baseado na entropia dos vetores de parâmetros. Entre dois vetores candidatos à solução, escolhe-se aquele vetor que apresenta uma entropia maior, ou seja, o vetor que tenha uma distribuição mais uniforme, evitando assim perfis de soluções com oscilações. Note-se que, em certos casos, é necessário fazer algumas mudanças no vetor de parâmetros para tornar viável o cálculo e a aplicação do critério de entropia, algo como translações e normalizações do espaço de parâmetros.

De acordo com o teorema a seguir a entropia é máxima quando todos x_i são iguais a $\frac{1}{n}$ e com $\chi = \{\frac{1}{n}, \dots, \frac{1}{n}\}$ tem-se

$$\begin{aligned} S[\chi] &= -\sum_i x_i \log x_i = -\sum_{i=1}^n \frac{1}{n} \log\left(\frac{1}{n}\right) = -\log(n^{-1}) \\ S[\chi] &= \log(n). \end{aligned}$$

Teorema 1 A entropia $S[\chi]$ é máxima quando $x_i = 1/n$ para todo $i = 1, \dots, n$.

Prova

Para encontrar o máximo da função $S[\chi] = -\sum_{i=1}^n x_i \ln x_i$ sujeito à condição

$$G[\chi] = \sum_{i=1}^n x_i - 1 = 0,$$

com $0 \leq x_i \leq 1$, tem-se $\frac{\partial S[\chi]}{\partial x_i} = -1 - \ln x_i$ para $i = 1, \dots, n$ e

$$\begin{aligned} \text{grad } S[\chi] &= (-1 - \ln x_1, -1 - \ln x_2, \dots, -1 - \ln x_n), \\ \text{grad } G[\chi] &= (1, 1, \dots, 1) \neq 0. \end{aligned}$$

Se $\chi^* = (x_1^*, \dots, x_n^*)$ é extremo de S , sujeito à condição G , então existe um número λ tal que

$$\text{grad } S[\chi^*] = \lambda \text{grad } G[\chi^*].$$

Assim $-1 - \ln x_1^* = \lambda, \dots, -1 - \ln x_n^* = \lambda$, o que implica que $\lambda = -1 - \ln x_1^* = \dots = -1 - \ln x_n^*$ e conseqüentemente $x_1^* = x_2^* = \dots = x_n^*$.

Como χ^* deve satisfazer a equação $G[\chi^*] = G(x_1^*, \dots, x_n^*) = 0$, isto é, $\sum_{i=1}^n x_i^* = 1$, então obtém-se

$$x_i^* = \frac{1}{n}, \quad i = 1, \dots, n.$$

É então claro que $(1/n, 1/n, \dots, 1/n)$ é um máximo da entropia S . \square

Portanto a *entropia*, da maneira como foi definida acima, pode ser utilizada como um critério de regularização para problemas mal-condicionados onde seja "coerente" a sua aplicação. A utilização do critério de máxima entropia deve acontecer quando, de acordo com a física do problema, não espera-se uma solução que apresente um perfil que oscile muito, ou seja, busca-se uma solução que seja relativamente homogênea. O funcional suavizador a ser minimizado em relação a x , que se utiliza da máxima entropia para compor o termo regulador agregado aos mínimos quadrados, apresenta a seguinte descrição:

$$M^\alpha[x] = \|Kx - y\|_2^2 - \alpha S[x], \quad (3.6)$$

onde $S[x]$ é a entropia de x .

Observe-se que o primeiro termo do funcional acima ($\|Kx - y\|_2^2$) representa o critério de mínimos quadrados com a métrica usual. Ao minimizar-se o funcional suavizador M^α espera-se que com uma adequada escolha do parâmetro de regularização α a resposta ou solução do problema apresente poucas oscilações, sendo fisicamente aceitável [EHN96].

A entropia indica o quão homogêneo é um sistema, quanto maior a entropia mais homogêneo é esse sistema. Seja \vec{x} um vetor com componentes x_i tais que $x_i \in [0, 1]$ e $\sum_i x_i = 1$, como já foi ressaltado anteriormente, a entropia máxima desse vetor \vec{x} é alcançada quando todos x_i são idênticos. A entropia mínima é obtida quando todos os elementos x_i são nulos, exceto um:

$$\Omega[\vec{x}] = 0 \log 0 + \cdots + 0 \log 0 + 1 \log 1 = 0. \quad (3.7)$$

Utilizando-se a descrição acima pode-se definir uma regularização baseada no critério de máxima entropia, ou seja, a busca de soluções homogêneas, contudo em determinados problemas pode-se usar o critério de mínima entropia para obtenção de soluções onde deseje-se perfis com picos, isto é, vetores-solução que apresentem o valor de um de seus componentes muito maior que o restante [RC96].

4 MÉTODOS LINEARES DE INVERSÃO

A equação integral fundamental relacionada a medições indiretas

$$y(s) = \int k(t, s) x(t) dt$$

é uma equação linear. A inversa formal é linear e muitos (não todos) algoritmos de inversão são lineares. Muitos desses métodos lineares são muito similares à inversão de sistemas de equações lineares, mas no entanto diferem deste no sentido de acrescentarem de alguma forma restrições sobre a solução com o objetivo de prevenir a aparição das instabilidades que já foram discutidas ao longo deste trabalho.

4.1 Quadratura - Redução de Equações Integrais a Sistemas Lineares

A maioria das técnicas de inversão envolvem transformações integrais do tipo

$$\int_a^b k_i(t) x(t) dt,$$

mas o cálculo numérico para $x(t)$ arbitrária deve levar em conta uma aproximação dessa integral por uma soma. Tal aproximação de uma integral é conhecida como "quadratura" ou "quadratura numérica" e uma grande variedade de fórmulas de quadratura existe. A exatidão de uma quadratura pode ser sempre melhorada através do aumento do número de pontos, isto é, o grau de subdivisão no intervalo (a, b) . Se $k_i(t)$ variar rapidamente então uma subdivisão muito fina pode ser necessária, mas já que grande parte dos núcleos físicos, como em problemas de sensoriammento remoto [Tar87], são um tanto suaves, um número grande de pontos é raramente necessário para computar $\int k_i(t) x(t) dt$, dado $x(t)$, para que se obtenha uma precisão muito melhor do que aquela para a qual a transformação pode ser medida.

Um procedimento simples de quadratura envolve a divisão do intervalo (a, b) em intervalos menores através da interposição de N , assim chamados, pontos de quadratura t_1, t_2, \dots, t_N dentro do intervalo, considerando que $x(t)$ assuma os valores x_1, x_2, \dots, x_N naqueles pontos e comporte-se linearmente através dos sub-intervalos $t_j \rightarrow t_{j+1}$ ($= (t_j, t_{j+1})$). Se $x(t)$ assume um valor fixo (tal como zero) em $t = a$ e $t = b$, os pontos de quadratura não precisam incluir $t = a$ e $t = b$; caso contrário t_1 denotará a e t_N será b . Em qualquer caso, a integral é aproximada através da soma sobre todos os subintervalos da integral

$$\int_{t_j}^{t_{j+1}} (A_j + B_j t) k_i(t) dt,$$

onde A_j e B_j são escolhidos tal que $A_j + B_j t$ coincida com $x(t)$ em $t = t_j$ e $t = t_{j+1}$.

Dessa forma tem-se:

$$A_j + B_j t_j = x_j$$

$$A_j + B_j t_{j+1} = x_{j+1},$$

e então

$$B_j = \frac{x_{j+1} - x_j}{t_{j+1} - t_j}; \quad A_j = \frac{t_{j+1} x_j - t_j x_{j+1}}{t_{j+1} - t_j}.$$

Assim o intervalo $t_j \rightarrow t_{j+1}$ apresenta a seguinte contribuição:

$$A_j \int_{t_j}^{t_{j+1}} k(t) dt + B_j \int_{t_j}^{t_{j+1}} t k(t) dt,$$

que pode ser reescrita em termos dos fatores x_j e x_{j+1} :

$$\begin{aligned} & \left[\frac{t_{j+1}}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} k(t) dt - \frac{1}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} t k(t) dt \right] x_j \\ & + \left[\frac{-t_j}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} k(t) dt + \frac{1}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} t k(t) dt \right] x_{j+1}. \end{aligned}$$

A componente x_{j+1} aparecerá, é claro, de novo do intervalo $t_{j+1} \rightarrow t_{j+2}$ e a componente x_j do intervalo $t_{j-1} \rightarrow t_j$. Adicionando as contribuições de todos os sub-

intervalos, finalmente obtém-se a fórmula de quadratura que pode ser escrita como:

$$\int_a^b k_i(t) x(t) dt \approx \sum_{j=1}^N w_j x_j, \quad (4.1)$$

onde w_j representa

$$\begin{aligned} & -\frac{t_{j-1}}{t_j - t_{j-1}} \int_{t_{j-1}}^{t_j} k(t) dt + \frac{t_{j+1}}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} k(t) dt \\ & + \frac{1}{t_j - t_{j-1}} \int_{t_{j-1}}^{t_j} t k(t) dt - \frac{1}{t_{j+1} - t_j} \int_{t_j}^{t_{j+1}} t k(t) dt. \end{aligned}$$

As integrais $\int k(t) dt$ e $\int t k(t) dt$ para cada subintervalo podem ser avaliadas numericamente ou analiticamente. A precisão da quadratura depende somente do quão boa é a aproximação linear para $x(t)$ em cada intervalo.

O procedimento acima explicitado é geralmente adequado para grande parte das computações numéricas em certos problemas físicos, tal como sensoriamento remoto [Tar87]. Procedimentos mais elaborados estão disponíveis [Lan56], mas não são relevantes para a presente discussão, visto que a exatidão da *computação* de $\int k(t) x(t) dt$ não é geralmente um problema.

Neste contexto, uma outra aproximação simples de uma equação integral para uma malha regular é a regra do trapézio. A integral $\int_a^b g(t) dt$ (considerando-se $g(t) = k_i(t) x(t)$) é aproximada numericamente por

$$\int_a^b g(t) dt \approx h \left[\frac{1}{2} g(t_1) + g(t_2) + \cdots + g(t_{N-1}) + \frac{1}{2} g(t_N) \right], \quad (4.2)$$

onde h indica a passo de discretização utilizado.

Pode-se portanto, selecionando uma fórmula adequada de quadratura, reduzir-se a equação integral

$$y(s) = \int k(t, s) x(t) dt$$

a uma aproximação linear

$$\vec{y}_{(M \times 1)} = \mathbf{A}_{(M \times N)} \vec{x}_{(N \times 1)}, \quad (4.3)$$

onde \vec{x} contém os valores de $x(t)$ num conjunto representativo de pontos selecionados t_1, \dots, t_N , \vec{y} contém os M valores fornecidos de y , $y(s_1), \dots, y(s_M)$, enquanto a_{ij} é o j -ésimo coeficiente da quadratura para a integral contendo o i -ésimo núcleo, isto é:

$$\int k(t, s_i) x(t) dt \approx \sum_j a_{ij} x(t_j).$$

Aqui, considerada a possibilidade dos números M e N serem muito grandes, surge o problema da natureza das medições de y e a precisão finita das fórmulas de quadratura, estes dois fatos asseguram que haverá sempre um pequeno componente de erro na equação linear $y(s) = \int k(t, s) x(t) dt$. Quando deseja-se inverter esta equação inverte-se não y , mas $y + \text{ruído}$. Pode-se ter uma estimativa para este ruído, mas não sabe-se no entanto mais detalhes sobre cada um dos elementos individuais. A questão crucial é saber que efeito esta incerteza gerará sobre a solução e, examinar isto de modo que esses sistemas possam ser tratados por algum método.

Considerando-se $M = N$ na equação (4.3), pode-se obter, através de uma escolha do esquema de quadratura e de uma "inversão direta" da matriz resultante, uma solução do tipo

$$\vec{x} = \mathbf{A}^{-1} \vec{y},$$

isto é, uma inversão via quadratura.

5 UM PROBLEMA INVERSO EM CONDUÇÃO DO CALOR: DETERMINAÇÃO DA CONDIÇÃO INICIAL

Três técnicas de regularização associadas ao critério de mínimos quadrados são utilizadas para estimar a condição inicial para um problema de condução do calor unidimensional numa barra isolada nas extremidades: regularização de Tikhonov de ordem zero; regularização de Tikhonov de ordem um e o princípio da máxima entropia.

O objetivo é obter a distribuição inicial de temperatura com base nas medições das temperaturas transientes (após decorrido um tempo τ) em pontos igualmente espaçados da barra de comprimento unitário.

Verifica-se a validade do critério de discrepância introduzido por Morozov para a determinação do parâmetro de regularização α e, para denunciar o mal-condicionamento deste problema inverso utiliza-se uma "técnica sequencial" baseada numa discretização *backward-time centered-space* (para trás no tempo e centrada no espaço) da equação do calor e também uma "inversão direta", isto é, discretiza-se o operador envolvido no problema direto e inverte-se essa matriz resultante. A solução do problema direto associado ao critério de mínimos quadrados baseia-se nas aproximações das equações integrais desenvolvidas no capítulo anterior.

5.1 Transformação para Forma Adimensional

O estágio computacional de todos métodos numéricos para solucionar problemas de qualquer complexidade geralmente envolve uma grande quantidade de aritmética. Costuma-se, no entanto, arranjar, sempre que possível, uma solução que englobe uma variedade de problemas diferentes. Isto pode ser feito expressando-se todas equações em termos de variáveis adimensionais. Então todos os problemas com a mesma formulação matemática adimensional, ou seja, problemas que são idênticos matematicamente quando expressos em termos de variáveis adimensionais, podem ser tratados através de uma só

solução. Os problemas não precisam, é claro, ser dimensionalmente diferentes, podem ser apenas variações do mesmo tipo de problema. Uma só solução da equação adimensional correspondente leva a solucionar uma ampla variedade de problemas.

O processo de adimensionalização é ilustrado a seguir com a equação do calor

$$\frac{\partial \Theta}{\partial \tau} = k \frac{\partial^2 \Theta}{\partial X^2}, \quad k \text{ constante}, \quad (5.1)$$

cuja solução dá uma temperatura Θ a uma distância X de uma extremidade de uma barra fina uniforme após um tempo τ . Seja L o comprimento da barra e Θ_0 alguma temperatura particular tal como a temperatura máxima ou mínima num tempo zero. Seja

$$x = \frac{X}{L} \quad \text{e} \quad T = \frac{\Theta}{\Theta_0}.$$

Então

$$\frac{\partial \Theta}{\partial X} = \frac{\partial \Theta}{\partial x} \frac{dx}{dX} = \frac{\partial \Theta}{\partial x} \frac{1}{L}$$

e

$$\frac{\partial^2 \Theta}{\partial X^2} = \frac{\partial}{\partial X} \left(\frac{\partial \Theta}{\partial X} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{1}{L} \frac{\partial \Theta}{\partial x} \right) \frac{dx}{dX} = \frac{1}{L^2} \frac{\partial^2 \Theta}{\partial x^2},$$

assim a equação (5.1) transforma-se em

$$\frac{\partial(T\Theta_0)}{\partial \tau} = \frac{k}{L^2} \frac{\partial^2(T\Theta_0)}{\partial x^2},$$

isto é,

$$\frac{1}{kL^{-2}} \frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}. \quad (5.2)$$

Mais ainda, escrevendo $t = k\tau/L^2$, então

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} = \frac{\partial T}{\partial t} \frac{dt}{d\tau} = kL^{-2} \frac{\partial T}{\partial t},$$

assim a equação (5.2) torna-se

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \frac{\partial^2 T}{\partial x^2}, \quad (5.3)$$

sendo esta a forma adimensional de (5.1). Observe-se que t é ocasionalmente referenciado como o número ou módulo de Fourier [CJ59] e que o número representando o comprimento da barra é 1.

Desta maneira, o problema inverso de determinação de condição inicial da equação do calor será considerado através de uma formulação adimensional, de acordo com o que foi descrito anteriormente. Particularmente para o caso de condições de contorno adiabáticas, a formulação utilizada será apresentada a seguir.

5.2 Formulação Matemática do Problema Direto

O problema direto a ser tratado aqui consiste de um problema transiente de condução do calor numa barra com condições de contorno adiabáticas e inicialmente a uma temperatura denotada por $f(x)$. A formulação matemática deste problema, visto que já se conhece a distribuição inicial de temperatura, apresenta a seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 T(x,t)}{\partial x^2} &= \frac{\partial T(x,t)}{\partial t}, & 0 < x < 1, t > 0, \\ \frac{\partial T(x,t)}{\partial x} &= 0, & x = 0 \text{ e } x = 1, t > 0, \\ T(x,0) &= f(x), & 0 \leq x \leq 1, t = 0, \end{aligned} \quad (5.4)$$

onde $T(x,t)$ (temperatura), $f(x)$ (condição inicial), x (variável espacial) e t (variável temporal) são quantidades adimensionais.

Dada uma distribuição de temperatura inicial $f(x)$, $0 \leq x \leq 1$, a solução do problema direto $T(x,t)$, para $0 \leq x \leq 1$ e $t > 0$, é formalmente obtida utilizando-se o método espectral e por superposição linear.

O método espectral busca soluções não identicamente nulas da forma $T(x, t) = X(x) e^{\lambda t}$ e isto leva a considerar o problema de contorno

$$\begin{aligned} X''(x) + \beta^2 X(x) &= 0, \\ X'(0) = 0 &= X'(1), \end{aligned}$$

onde $\lambda = -\beta^2$. Assim, as soluções deste problema de autovalor são

$$X_n(x) = \cos(n\pi x) \quad e \quad \beta_n = n\pi.$$

Deste modo $\lambda_n = -n^2\pi^2$, e temos as soluções exponenciais da forma

$$T_n(x, t) = \exp\{-n^2 \pi^2 t\} X_n(x).$$

E pela superposição linear tem-se

$$T(x, t) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n T_n(x, t).$$

Com δ_{mn} indicando o delta de Kronecker tem-se a seguinte relação de ortogonalidade entre as autofunções $X(\beta_n, x)$ ($= X_n(x)$):

$$\int_0^1 X(\beta_m, x) X(\beta_n, x) dx = \delta_{mn} N(\beta_m) = \begin{cases} N(\beta_m), & \text{para } m = n \\ 0, & \text{para } m \neq n. \end{cases}$$

Utilizando-se a condição inicial, expandida em série de Fourier relativa às autofunções $X(\beta_m, x)$, isto é,

$$f(x) = \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{1}{N(\beta_m)} \left(\int_0^1 X(\beta_m, x') f(x') dx' \right) X(\beta_m, x).$$

E comparando os coeficientes a_n de $T(x, t)$ decorre

$$T(x, t) = \sum_{m=0}^{+\infty} e^{-\beta_m^2 t} \frac{1}{N(\beta_m)} X(\beta_m, x) \int_0^1 X(\beta_m, x') f(x') dx', \quad (5.5)$$

onde $X(\beta_m, x)$ são as autofunções associadas ao problema de autovalores, β_m são os autovalores e $N(\beta_m)$ é a norma ou integral de normalização (definida como a integral da respectiva autofunção ao quadrado no intervalo $[0, 1]$).

Definindo o núcleo

$$k(x, x', t) = \sum_{m=0}^{+\infty} e^{-\beta_m^2 t} \frac{1}{N(\beta_m)} X(\beta_m, x) X(\beta_m, x'), \quad (5.6)$$

tem-se a representação integral

$$T(x, t) = \int_0^1 k(x, x', t) f(x') dx', \quad (5.7)$$

ou mais compactamente

$$T = A f,$$

onde A denota o operador integral (associado ao problema direto).

A representação 5.5 acima requer que a temperatura inicial $f(x)$ seja uma função limitada, satisfazendo as condições de contorno [CJ59].

5.3 "Solução" do Problema Inverso

Supondo-se conhecida a distribuição de temperatura num tempo $t = \tau > 0$ em toda a barra ($T(x, \tau)$ para $x \in [0, 1]$), então o problema inverso aqui caracteriza-se pela determinação da condição inicial $f(x)$. Esta seria uma versão não-discreta do problema.

Utilizando-se a ortogonalidade das funções $X(\beta_m, x)$ pode-se obter "analiticamente" uma expressão para a distribuição inicial de temperatura para $x \in (0, 1)$:

$$f(x) = \sum_{m=0}^{+\infty} e^{\beta_m^2 \tau} \frac{1}{N(\beta_m)} X(\beta_m, x) \int_0^1 X(\beta_m, x') T(x', \tau) dx', \quad (5.8)$$

isto é,

$$f(x) = \int_0^1 k(x, x', -\tau) T(x', \tau) dx', \quad (5.9)$$

ou mais compactamente

$$f = A^{-1} T.$$

Para a obtenção do resultado acima procede-se formalmente da seguinte maneira:

- Expressa-se a solução do problema direto sob a forma:

$$T(x, t) = \sum_{m=0}^{+\infty} c_m X(\beta_m, x) e^{-\beta_m^2 t} \quad (5.10)$$

- Aplicando-se a condição inicial obtém-se:

$$f(x) = \sum_{m=0}^{+\infty} c_m X(\beta_m, x) \quad \text{para } x \in (0, 1) \quad (5.11)$$

- Então multiplica-se a expressão obtida em (5.10) pela auto-função $X(\beta_n, x)$:

$$\begin{aligned} T(x, t) X(\beta_n, x) &= X(\beta_n, x) \sum_{m=0}^{+\infty} c_m X(\beta_m, x) e^{-\beta_m^2 t} \\ T(x, t) X(\beta_n, x) &= \sum_{m=0}^{+\infty} c_m X(\beta_m, x) X(\beta_n, x) e^{-\beta_m^2 t}. \end{aligned}$$

- Integrando-se o resultado anterior em relação a x no intervalo $[0, 1]$:

$$\begin{aligned} \int_0^1 T(x', t) X(\beta_n, x') dx' &= \int_0^1 \sum_{m=0}^{+\infty} c_m e^{-\beta_m^2 t} X(\beta_n, x') X(\beta_m, x') dx' \\ &= \sum_{m=0}^{+\infty} c_m e^{-\beta_m^2 t} \int_0^1 X(\beta_n, x') X(\beta_m, x') dx' \end{aligned}$$

$$\int_0^1 T(x', t) X(\beta_n, x') dx' = c_n e^{-\beta_n^2 t} N(\beta_n).$$

$$= \sum_{m=0}^{+\infty} c_m e^{-\beta_m^2 t} \delta_{mn} N(\beta_m)$$

- Obtém-se então uma expressão para os coeficientes c_m em termos de $T(x, t)$ (temperatura transiente):

$$c_n = \frac{e^{\beta_n^2 t}}{N(\beta_n)} \int_0^1 T(x', t) X(\beta_n, x') dx'. \quad (5.12)$$

- Substituindo a expressão obtida para c_m na equação (5.11) obtém-se a expressão (5.8).

A seguir o operador inverso A^{-1} será caracterizado como descontínuo em relação a T (dados).

5.4 Unicidade do Problema Inverso

A unicidade deste problema inverso de determinação de condição da equação do calor segue facilmente da representação oriunda do método de autofunções ou separação de variáveis, porque os coeficientes c_m são unicamente determinados através das relações 5.12.

5.5 O Mal-Condicionamento do Problema Inverso de Determinação de Condição Inicial

Utilizando-se a norma usual do espaço L_2 prova-se que o problema de determinação de condição inicial é mal-condicionado, isto é, não apresenta estabilidade em relação aos dados $T(x, \tau)$.

Seja $L_2([0, 1])$ tanto o espaço das soluções admissíveis para a condição inicial quanto o espaço das temperaturas transientes para um tempo τ fixo. Considere-se $f_1(x)$ e $f_2(x)$ duas distribuições iniciais de temperatura, então a medida da distância entre f_1 e f_2 é dada (via métrica L_2) por

$$\|f_1 - f_2\|_2 = \left\{ \int_0^1 |f_1(x) - f_2(x)|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Similarmente, para medir distâncias entre duas temperaturas transientes $T_1(x, \tau)$ e $T_2(x, \tau)$ com τ conhecido, tem-se

$$\|T_1 - T_2\|_2 = \left\{ \int_0^1 |T_1(x, \tau) - T_2(x, \tau)|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}}.$$

Deseja-se mostrar que uma pequena variação em $T(x, \tau)$ (dados) não implica necessariamente que em $f(x)$ (solução) se terá uma pequena variação. Dessa forma estabelece-se o seguinte teorema

Teorema 2 *Para o problema de determinação de condição inicial, onde $f, T \in L_2([0, 1])$ tem-se que f (condição inicial) não depende continuamente dos dados T (temperatura transiente), ou seja, o problema é mal-posto no sentido de Hadamard, visto que a propriedade de estabilidade não é satisfeita.*

Prova (para $\tau > 0$)

Considere-se as condições iniciais $f_1, f_2 \in L_2([0, 1])$ tal que $f_2(x) = f_1(x) + C \cos(n\pi x)$, com $C \neq 0$ e $n \in \mathbb{N}$. Assumindo-se que as correspondentes soluções transientes (para um $\tau > 0$ fixo) são respectivamente $T_1(x, \tau)$ e $T_2(x, \tau)$. Então pela linearidade do operador que descreve o problema (equação (5.5)) e com $N_m = \int_0^1 \cos^2(m\pi x) dx$ indicando a integral de normalização, tem-se:

$$T_2(x, \tau) = T_1(x, \tau) + \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{1}{N_m} e^{-m^2 \pi^2 \tau} \cos(m\pi x) \int_0^1 C \cos(m\pi x) \cos(n\pi x) dx$$

$$\begin{aligned}
T_2(x, \tau) &= T_1(x, \tau) + \sum_{m=0}^{+\infty} \frac{e^{-m^2 \pi^2 \tau}}{N_m} \cos(m\pi x) \mathbf{C} \delta_{mn} N_m \\
T_2(x, \tau) &= T_1(x, \tau) + \frac{\mathbf{C}}{N_m} e^{-n^2 \pi^2 \tau} \cos(n\pi x) N_m. \\
\Rightarrow [T_2(x, \tau) - T_1(x, \tau)]^2 &= \mathbf{C}^2 e^{-2n^2 \pi^2 \tau} \cos^2(n\pi x).
\end{aligned}$$

Portanto uma medida da diferença entre $T_1(x, \tau)$ e $T_2(x, \tau)$ para um tempo τ fixo e x no intervalo $[0, 1]$ é dada por

$$\begin{aligned}
\|T_2 - T_1\|_2 &= \left\{ \int_0^1 |T_2(x, \tau) - T_1(x, \tau)|^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{ \mathbf{C}^2 e^{-2n^2 \pi^2 \tau} \int_0^1 \cos^2(n\pi x) dx \right\}^{\frac{1}{2}} \\
\|T_2 - T_1\|_2 &= \frac{|\mathbf{C}| e^{-n^2 \pi^2 \tau}}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{2}}{2} |\mathbf{C}| e^{-n^2 \pi^2 \tau} = \mathbf{C}_1 e^{-n^2 \pi^2 \tau} (\rightarrow 0^+ \text{ quando } n \text{ cresce}).
\end{aligned}$$

Esta quantidade $\|T_2 - T_1\|_2$ pode ser tomada arbitrariamente pequena através da escolha de n suficientemente grande e de \mathbf{C} adequadamente.

Similarmente uma medida da diferença entre f_1 e f_2 é dada por

$$\begin{aligned}
\|f_2 - f_1\|_2 &= \left\{ \int_0^1 [f_2(x) - f_1(x)]^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} = \left\{ \int_0^1 [\mathbf{C} \cos(n\pi x)]^2 dx \right\}^{\frac{1}{2}} \\
\|f_2 - f_1\|_2 &= |\mathbf{C}| \int_0^1 \cos^2(n\pi x) dx = \frac{\sqrt{2}}{2} |\mathbf{C}| = \mathbf{C}_1 = \text{constante} > 0.
\end{aligned}$$

Portanto, para variações arbitrariamente pequenas entre $T_1(x, \tau)$ e $T_2(x, \tau)$, os valores de n e \mathbf{C} podem ser escolhidos de tal maneira que a diferença entre $f_1(x)$ e $f_2(x)$ ($= \frac{\sqrt{2}}{2} |\mathbf{C}|$) pode ser arbitrariamente grande ($\|T_1 - T_2\|_2 \rightarrow 0$, porém $\|f_1 - f_2\|_2 \not\rightarrow 0$). Tem-se então um problema inverso instável e portanto mal-posto. \square

Observe que, da natureza física do processo, a estrutura detalhada da distribuição inicial de temperatura f é altamente difundida num tempo posterior $t = \tau$ e portanto reconstruir essa informação detalhada com base em medições de $T = T(\tau)$ é muito difícil. A dificuldade neste problema de reconstrução fica clara ao observar-se a forma do núcleo em (5.6). Especificamente, componentes de alta frequência de f (isto é,

componentes associados com $\cos(n\pi x)$ para valores grandes de n) são altamente suavizados (amortecidos) pelo fator $e^{-n^2 C}$ (muito pequeno, C constante), tornando sua influência sobre T praticamente imperceptível. O operador representando o problema direto tem fortes propriedades de suavidade, o que é uma característica de problemas mal-postos, no sentido da estabilidade.

Da demonstração acima nota-se que

$$\|f_1 - f_2\|_2 = e^{\beta_n^2 \tau} \|T_2 - T_1\|_2,$$

o que significa que o erro na solução desse problema inverso é amplificado exponencialmente pelo fator $e^{\beta_n^2 \tau}$. Claramente, o erro torna-se pior conforme τ cresce, mas mesmo com $\tau (> 0)$ pequeno a amplificação exponencial do erro permanece. Nesse contexto, um simples exemplo surge ao supor-se que o erro nas medições dos dados é $\delta = O(e^{-10})$ e toma-se $\beta_n^2 \tau = 20$, então obtém-se um erro na solução dado por $\epsilon = O(e^{10})!$

Resumindo de uma maneira abstrata, o operador integral A é compacto e simétrico em $L^2([0, 1])$ e então o problema de primeira classe $Af = T$ é mal-condicionado em $L^2([0, 1])$ [EHN96].

5.6 Formulação Discreta do Problema

Para definir a versão discreta do problema considera-se que a temperatura transiente T está disponível num número finito de diferentes posições do meio $([0, 1])$. Em problemas reais, esta temperatura é geralmente encontrada experimentalmente e portanto conhecida somente aproximadamente.

Assumindo-se que se conhece o perfil de temperatura num tempo $\tau > 0$ em um número finito de pontos igualmente espaçados do intervalo $[0, 1]$, isto é, conhece-se

$$T(x_i, \tau) \text{ onde } x_i = i\Delta x \text{ para } i = 1, \dots, N \text{ e } \Delta x = \frac{1}{N},$$

deseja-se obter a distribuição inicial de temperatura $f(x_i)$ para $i = 1, \dots, N$.

Quando passa-se a tratar o caso discreto aparecem então vetores e matrizes nas equações que descrevem o problema. No problema tratado aqui deseja-se determinar a temperatura inicial $f(x)$ nos mesmos N pontos do intervalo $[0, 1]$ onde se conhece $T(x, \tau)$. Portanto, a partir deste momento se tratará tanto a temperatura transiente quanto a temperatura inicial como vetores. Como consequência imediata disto, o operador A será tratado como uma matriz \mathbf{A} (o operador discretizado), como se verá a seguir. Denotando $f(x_i)$ e $T(x_i, \tau)$ por f_i e T_i respectivamente, tem-se

$$\begin{aligned}\vec{f} &= [f_1, f_2, \dots, f_{N-1}, f_N]^T \text{ e;} \\ \vec{T} &= [T_1, T_2, \dots, T_{N-1}, T_N]^T\end{aligned}$$

o que implica em

$$\vec{T} = \mathbf{A}\vec{f}.$$

Observe que para computar $f(x)$ de acordo com (5.8), no caso de conhecer-se $T(x, \tau)$ para $\tau > 0$ em N pontos discretos $x = x_i \in [0, 1]$ ($i = 1, \dots, N$) o somatório não pode ser computado ($\sum \rightarrow +\infty$), pois há um crescimento de ordem exponencial quadrática $\{e^{\beta_m^2 \tau}\}$ que vai muito rápido para infinito.

6 ABORDAGENS PRELIMINARES PARA A INVERSÃO

Algumas abordagens foram desenvolvidas para tratar este problema inverso com o intuito de comprovar numericamente o mal-condicionamento deste problema: 1) inversão direta do funcional que descreve o problema, seguindo a idéia do capítulo 4; 2) uma técnica sequencial baseada numa discretização "centrada no espaço" e "para trás no tempo" (*backward-time centered-space*) da equação do calor e; 3) o método de mínimos quadrados, isto é, a minimização, em relação a f , do funcional suavizador $M^\alpha[Af, T]$ com $\alpha = 0$ (sem regularização), isto é, a minimização de $\|Af - T\|_2^2$.

Após evidenciado o mal-condicionamento, aplica-se as regularizações de Tikhonov de ordem zero, Tikhonov de ordem um e o princípio da máxima entropia, obtendo-se assim respostas muito mais satisfatórias para o problema de determinação de condição inicial.

6.1 A Inversão Direta

Considere-se a solução do problema direto da forma

$$T(x, t) = \int_0^1 k(x, x', t) f(x') dx', \quad (6.1)$$

onde $k(x, x', t) = \sum_{m=0}^{+\infty} e^{-\beta_m^2 t} \frac{1}{N(\beta_m)} X(\beta_m, x) X(\beta_m, x')$, de acordo com a equação (5.7).

Deseja-se avaliar $f = f(x)$ em cada ponto $x = x_i$ onde a temperatura transiente $T = T(x, \tau)$ é conhecida. Portanto tem-se para cada x_i ($i = 1, \dots, N$)

$$T(x_i, \tau) = T_i = \int_0^1 k(x_i, x', \tau) f(x') dx'. \quad (6.2)$$

E assim obtém-se

$$\vec{T} = \mathbf{A} \vec{f}, \quad (6.3)$$

onde a matriz quadrada $\mathbf{A} = [a_{ij}]_{(1,\dots,N) \times (1,\dots,N)}$ caracteriza a regra de quadratura utilizada, de acordo com o capítulo 4. A solução inversa então é dada por

$$\vec{f} = \mathbf{A}^{-1}\vec{T}.$$

6.2 A Técnica Sequencial

Considerando-se a equação do calor da forma

$$\frac{\partial^2 T(x, t)}{\partial x^2} = \frac{\partial T(x, t)}{\partial t}, \quad x \in (0, 1) \text{ e } t > 0. \quad (6.4)$$

O que se propõe é discretizar esta equação de modo que obtenha-se um esquema explícito de \vec{f} (condição inicial) em função de \vec{T} (temperatura transiente).

Notação: $T(x_i, t_n) = T_i^n$, onde $t_n = n\Delta t$ e $x_i = i\Delta x$ para Δt e Δx discretizações temporais e espaciais respectivamente.

Utilizando-se uma discretização para trás no tempo (*backward-time*) e centrada no espaço (*centered-space*) para aproximar as derivadas da equação do calor acima, obtém-se

$$\frac{\partial^2 T(x_i, t_n)}{\partial x^2} \approx \frac{T_{i+1}^{n+1} - 2T_i^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}}{\Delta x^2} \quad \text{e} \quad \frac{\partial T(x_i, t_n)}{\partial t} \approx \frac{T_i^{n+1} - T_i^n}{\Delta t}.$$

O que resulta na seguinte aproximação dessa equação

$$T_i^n = T_i^{n+1}(1 + 2D) - D(T_{i+1}^{n+1} + T_{i-1}^{n+1}), \quad \text{para } i = 2, \dots, N - 1$$

onde $D = \Delta t / \Delta x^2$.

Uma aproximação de segunda ordem para as derivadas primeiras (espaciais) na fronteira ($x = 0$ e $x = 1$) pode ser usada tal que

$$\frac{\partial T(x_i, t_n)}{\partial x} \approx \frac{T_{i+1}^n - T_{i-1}^n}{2\Delta x}, \quad \text{para } i = 1 \text{ e } i = N$$

Portanto com

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} 1 + 2D & -2D & 0 & \dots & 0 \\ -D & 1 + 2D & -D & \ddots & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & -D & 1 + 2D & -D \\ 0 & \dots & 0 & -2D & 1 + 2D \end{bmatrix}$$

tem-se uma expressão explícita para \vec{f} em função de \vec{T} tal que

$$\vec{T}^{(n)} = \mathbf{B} \vec{T}^{(n+1)} \Rightarrow \vec{f} = \vec{T}^{(0)} = \mathbf{B}^n \vec{T}^{(n)},$$

onde utiliza-se $\tau = n\Delta t$ e $\vec{T} = T^{(n)} = [T(x_i, \tau)] = [T_0, \dots, T_N]_{t=\tau}$ são os dados.

6.3 Mínimos Quadrados

Para encontrar o vetor de parâmetros \vec{f} , simplesmente minimiza-se, em relação a \vec{f} , o funcional

$$\|A\vec{f} - \vec{T}\|_2^2, \quad (= M^0[A\vec{f}, \vec{T}])$$

onde $A\vec{f}$ denota a solução do problema direto, \vec{T} são os dados e $\|\cdot\|_2$ denota a norma-2. Portanto nesta minimização precisa-se calcular a solução do problema direto, já discutida no capítulo 4. Para obter-se a solução do problema direto necessária à minimização de $\|A\vec{f} - \vec{T}\|_2^2$ utiliza-se, numa malha regular, o método integral (4.1) que baseia-se numa aproximação linear de \vec{f} nos sub-intervalos de integração e também considera-se a regra do trapézio (4.2).

7 RESULTADOS NUMÉRICOS E COMENTÁRIOS FINAIS

Os métodos inversos para a determinação da condição inicial são examinados para casos-teste utilizando-se dados sintéticos corrompidos por um ruído branco que simula dados experimentais, ou seja, as medidas de temperatura simuladas são tomadas adicionando-se um erro aleatório à temperatura exata calculada num tempo $\tau > 0$ tal que

$$T = T_{\text{experimental}} = T_{\text{exato}} + \sigma U,$$

onde σ é o desvio padrão dos erros de medida e U é uma distribuição uniforme gerada através da rotina RRND de 'Numerical Recipes - Second Edition', entre -1 e 1 , do erro nos dados experimentais.

Uma função-teste triangular $f(x)$ foi utilizada tal que

$$f(x) = \begin{cases} 2x, & x \in [0, 0.5] \\ 2(1-x), & x \in (0.5, 1]. \end{cases}$$

7.1 Resultados das Inversões sem Regularização

As abordagens preliminares para a resolução do problema inverso em questão evidenciaram o "genuíno" mal-condicionamento deste problema. Em todos os resultados apresentados utilizou-se uma malha espacial de 100 pontos e no método de inversão direta utilizou-se a regra do trapézio.

Analisando-se as figuras 7.1 e 7.2 fica claro que a metodologia de inversão direta é extremamente inadequada para este problema, visto que mesmo sem ruído ($\sigma = 0$) os resultados obtidos não são "bons", apesar de utilizar-se um tempo $\tau = 10^{-4}$ relativamente pequeno. A instabilidade deste esquema torna-se muito mais evidente quando toma-se os dados experimentais com um ruído branco com desvio padrão de 0.05: nota-se

na figura 7.4 que para $\tau = 0.008$ a magnitude da solução encontrada é absurdamente da ordem de 10^5 e que para $\tau = 10^{-4}$ é da ordem de 10^2 (figura 7.3).

A aplicação da técnica sequencial para obtenção dos perfis de temperatura inicial mostra-se um pouco mais eficaz que a inversão direta. Para os tempos $\tau = 0.008$ e $\tau = 10^{-4}$ e sem ruído nos dados recupera-se a função-teste triangular razoavelmente (figuras 7.5 e 7.6), sendo que para um tempo pequeno $\tau = 10^{-4}$ a diferença nos gráficos é praticamente imperceptível. Contudo, quando há a presença de ruído nos dados, a solução encontrada apresenta oscilações, mesmo para um desvio padrão $\sigma = 10^{-4}$ num tempo $\tau = 0.008$ (figura 7.9). As figuras 7.7 e 7.8 expõem a instabilidade do esquema, onde, com um desvio padrão de $\sigma = 0.05$, as soluções encontradas mostram-se oscilatórias.

Na aplicação do método de mínimos quadrados sem regularização obteve-se os melhores resultados para a função-teste utilizada dentre as 3 abordagens preliminares propostas. Observa-se claramente a "boa" recuperação da solução quando não há presença de ruído tanto para $\tau = 0.008$ (figura 7.11) quanto para $\tau = 10^{-4}$ (figura 7.10). Mas, para um desvio padrão de 0.05 do erro uniforme nos dados o esquema mostra-se instável para um tempo $\tau = 0.008$ (figura 7.13) e para $\tau = 10^{-4}$ umas pequenas oscilações ainda estão presentes na solução encontrada (figura 7.12).

Tais resultados eram esperados, afinal o problema que está sendo tratado é **mal-condicionado**.

7.2 Resultados com Regularização

O caso em que o parâmetro de regularização α é nulo (mínimos quadrados "puro") resulta num procedimento instável com f_i oscilando com trocas de sinais e com magnitudes sempre crescentes a medida que α aproxima-se de zero. Por isso, com a escolha adequada de α , a instabilidade pode ser eliminada devido à presença do termo regularizador ($\Omega[f]$) de Tikhonov ou entrópico.

Assume-se a mesma função-teste triangular previamente definida e toma-se um tempo $\tau = 0.008$ como o tempo onde as medidas de temperatura estão disponíveis.

Para um desvio padrão de 0.05, que equivale a um erro máximo de medida de 5% da magnitude máxima da função-teste, aplicou-se o critério da discrepância para a escolha dos parâmetros de regularização dos métodos de Tikhonov de ordens zero e um e do método baseado na máxima entropia. O valor esperado do erro de medida é $0.25 = 100 \cdot \sigma^2$, por isso escolhe-se o parâmetro α cujos dados gerados pela solução calculada difiram dos dados experimentais na norma-2 por aproximadamente 0.25. A tabela 7.1 apresenta valores de $\alpha \times \|A\vec{f} - \vec{T}\|_2^2$ obtidos para a regularização via máxima entropia, Tikhonov de ordem zero e Tikhonov de ordem um respectivamente. Portanto, os parâmetros escolhidos segundo o critério da discrepância são respectivamente 57, 0.073 e 34 e, de fato, as três soluções obtidas com esses parâmetros recuperam relativamente "bem" a função-teste triangular, conforme pode ser notado pelas figuras 7.14, 7.15 e 7.16.

Note-se que no caso da aplicação da entropia, para um α grande, a solução calculada tende a homogeneidade, isto é, $f_i \rightarrow 0.5$ para todo i , fato já esperado devido às propriedades do critério de máxima entropia. Pelas figuras 7.14 e 7.15, as propriedades das regularizações de Tikhonov de ordens zero e um também se evidenciam, onde, para α relativamente grande, Tikhonov-0 apresenta soluções que aproximam-se de zero e Tikhonov-1 apresenta soluções com $f_i \approx 0.5$ para todos i , isto é, um perfil constante. Nos 3 casos, quando α está próximo de zero, a instabilidade começa a aparecer.

Verifica-se se o parâmetro de regularização encontrado para a função triangular pode ser estendido a outras funções-teste que apresentem a mesma magnitude e cujos dados também estejam corrompidos com o mesmo desvio padrão $\sigma = 0.05$ em $\tau = 0.008$. De acordo com as figuras 7.17 e 7.18 parece que neste caso essa extensão é adequada, contudo isto não pode ser afirmado categoricamente. Em geral, em problemas aplicados, a escolha de um parâmetro de regularização para uma determinada função-teste apresenta resultados satisfatórios quando aplicado a outras funções [BBC85].

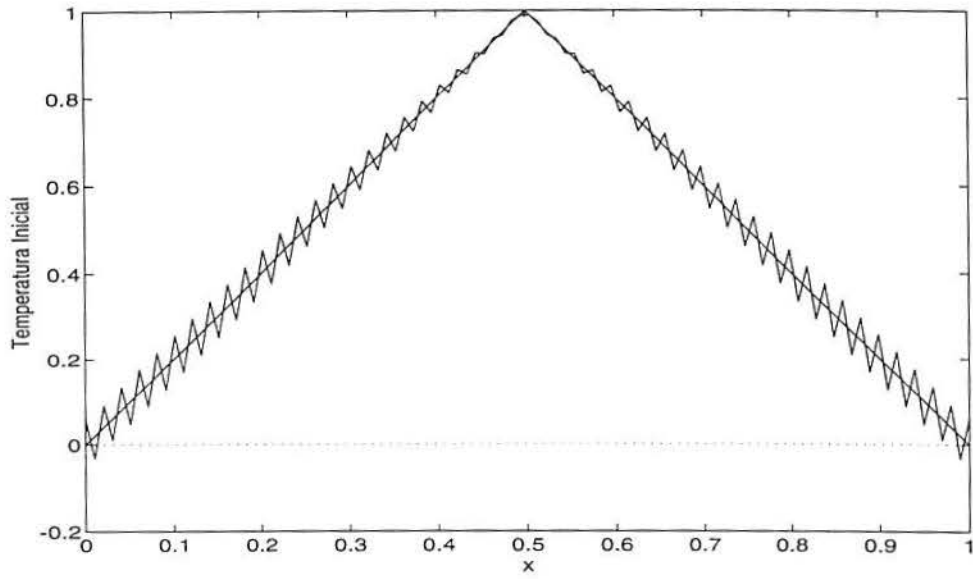


Figura 7.1 Inversão direta sem ruído: $\tau = 10^{-4}$.

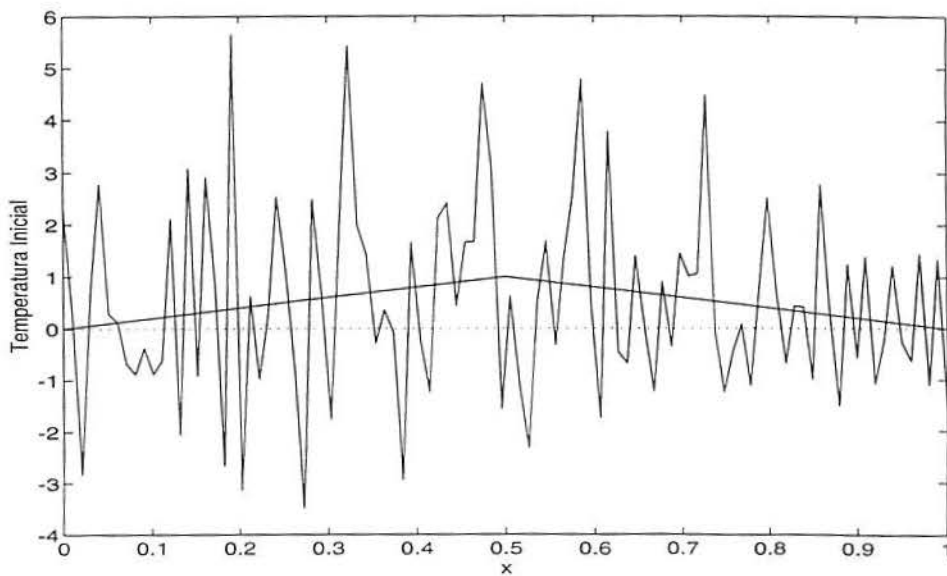


Figura 7.2 Inversão direta sem ruído: $\tau = 0.008$.

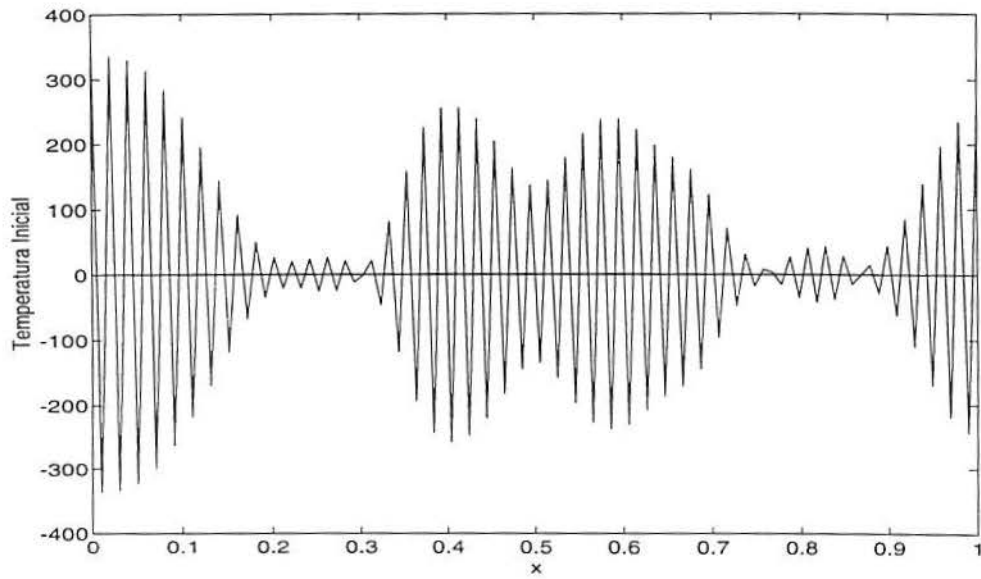


Figura 7.3 Inversão direta: $\tau = 10^{-4}$, $\sigma = 0.05$.

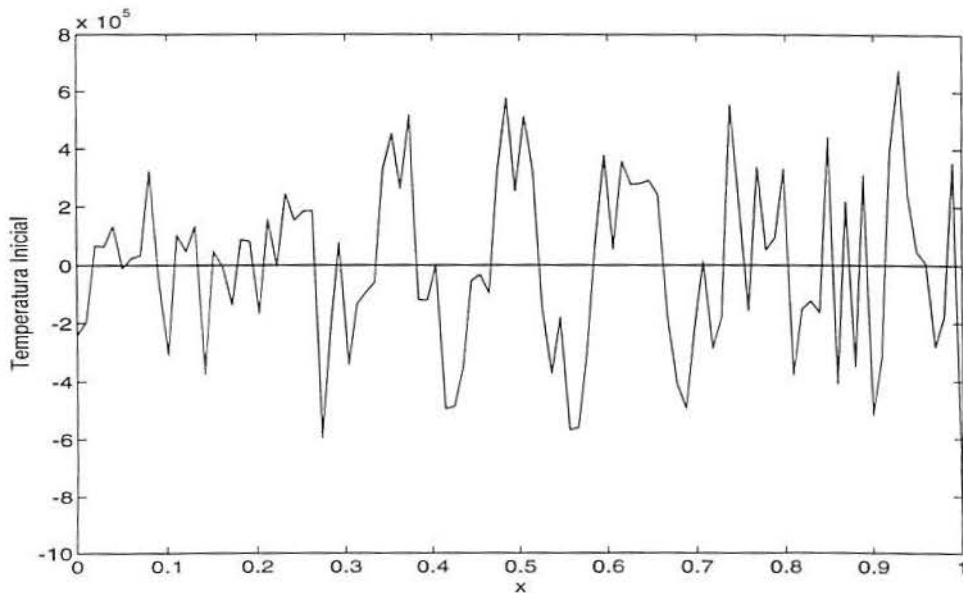


Figura 7.4 Inversão direta com $\tau = 0.008$, $\sigma = 0.05$.

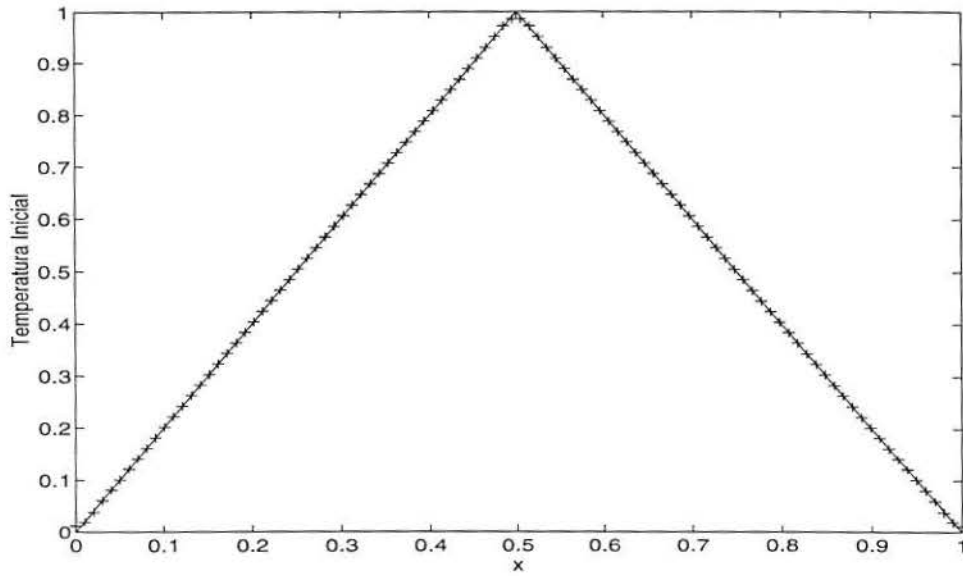


Figura 7.5 Inversão via técnica sequencial: $\tau = 10^{-4}$ e sem ruído.

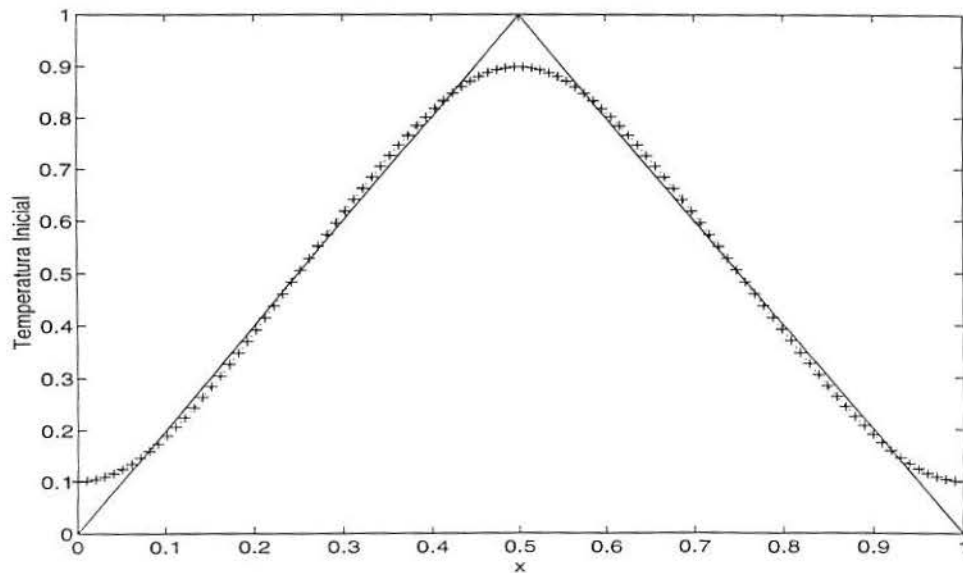


Figura 7.6 Inversão via técnica sequencial: $\tau = 0.008$ e sem ruído.

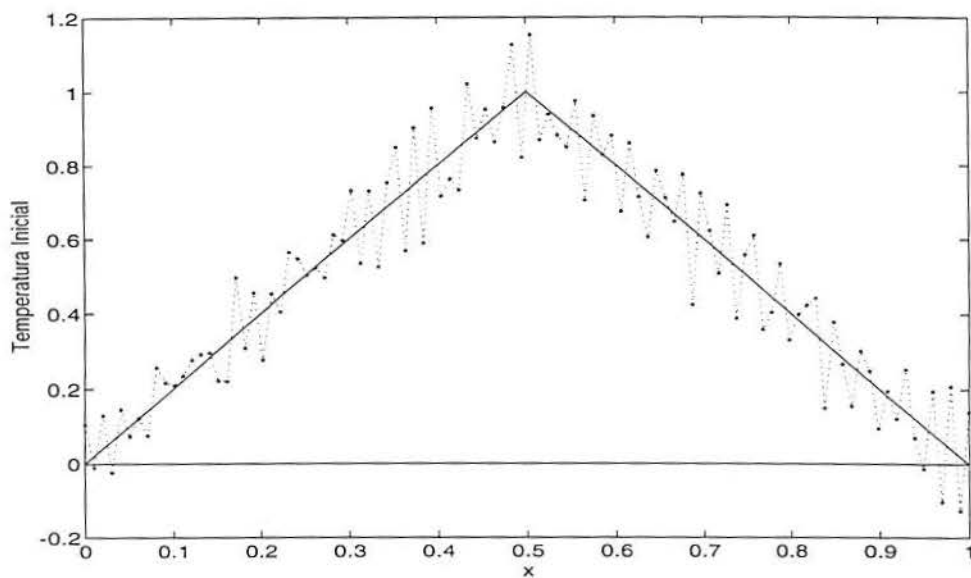


Figura 7.7 Inversão via técnica sequencial: $\tau = 10^{-4}$, $\sigma = 0.05$.

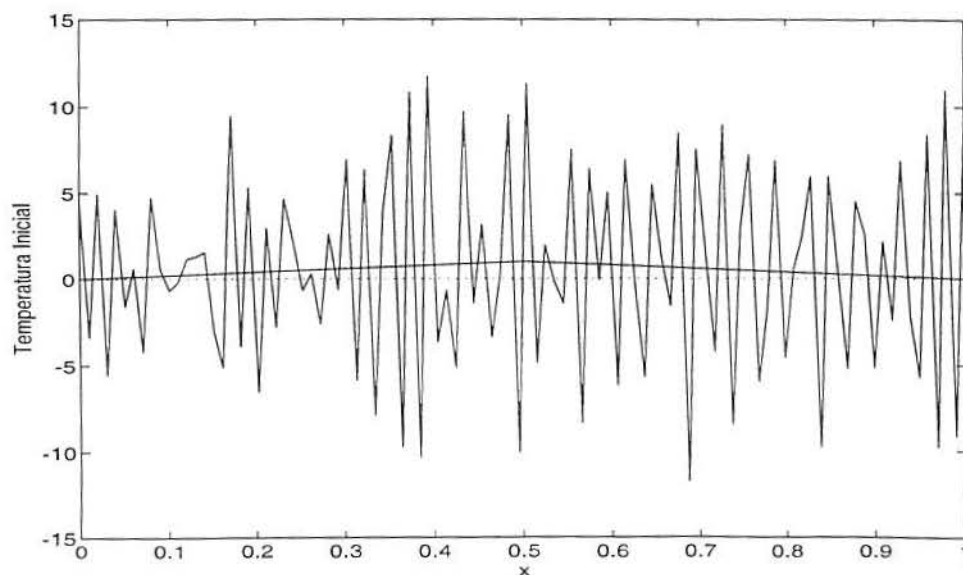


Figura 7.8 Inversão via técnica sequencial: $\tau = 0.008$, $\sigma = 0.05$.

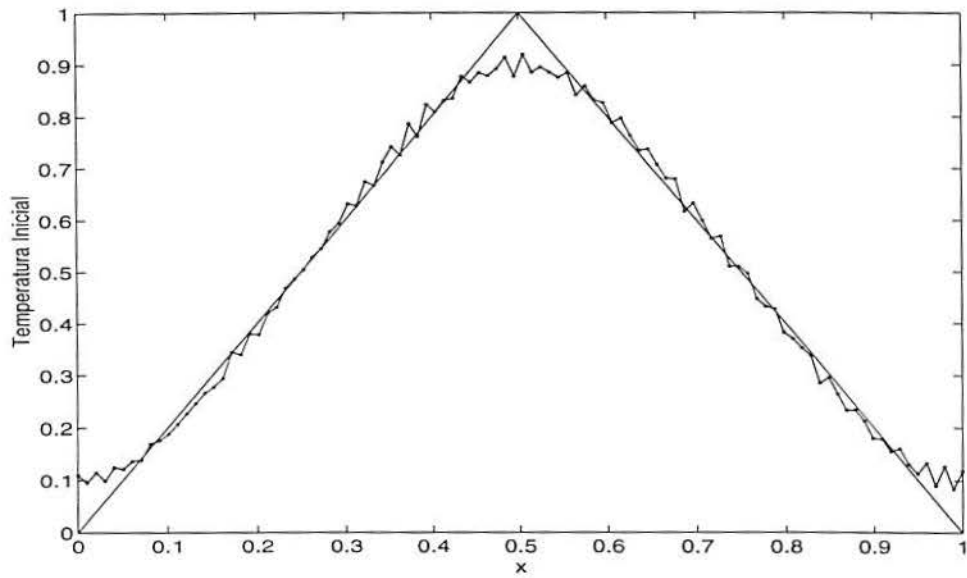


Figura 7.9 Inversão via técnica sequencial: $\tau = 0.008$, $\sigma = 10^{-4}$.

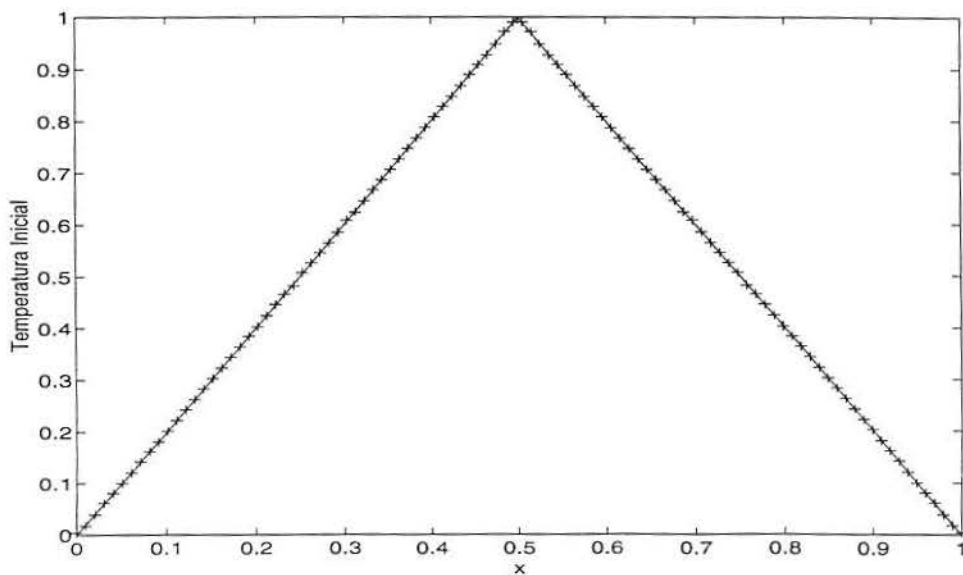


Figura 7.10 Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 10^{-4}$ e sem ruído.

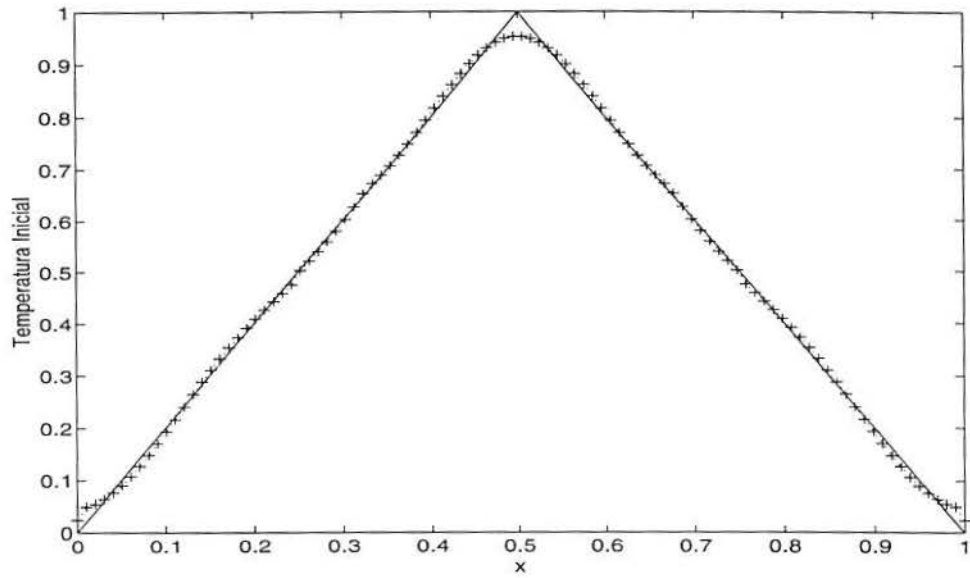


Figura 7.11 Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 0.008$ e sem ruído.

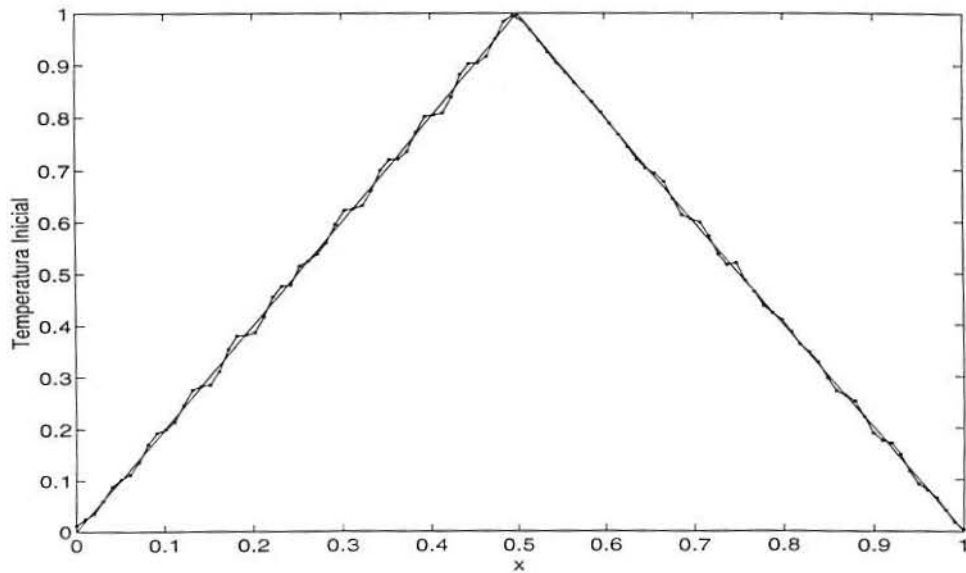


Figura 7.12 Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 10^{-4}$, $\sigma = 0.05$.

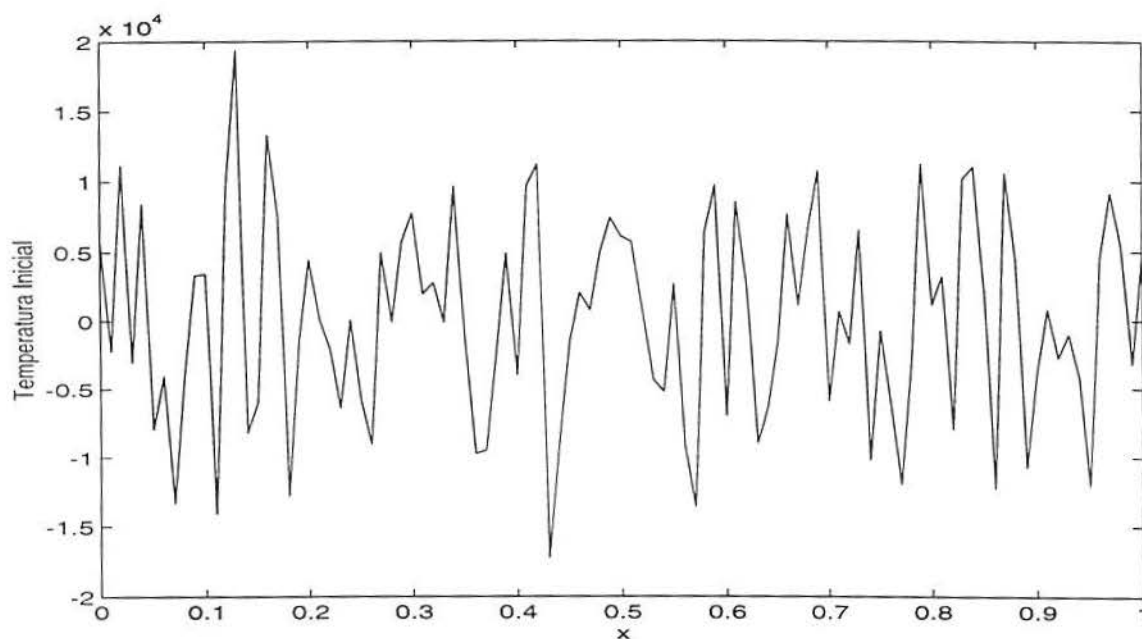


Figura 7.13 Inversão via mínimos quadrados: $\tau = 0.008$, $\sigma = 0.05$.

Tabela 7.1 Valores de mínimos quadrados obtidos em $\tau = 0.008$ para diversos parâmetros de regularização utilizando Tikhonov de ordem zero, de ordem um e princípio da máxima entropia.

Máxima Entropia		Tikhonov ordem zero		Tikhonov ordem um	
α_{Entro}	Min. Quad.	$\alpha_{\text{Tik-0}}$	Min. Quad.	$\alpha_{\text{Tik-1}}$	Min. Quad.
30	0.1318	0.001	0.0733	10^{-2}	0.0732
40	0.1767	0.010	0.0775	1	0.0740
50	0.2191	0.050	0.1618	5	0.0800
53	0.2325	0.060	0.1975	30	0.2196
55	0.2416	0.065	0.2172	31	0.2275
56	0.2461	0.070	0.2382	33	0.2437
57	0.2507 (✓)	0.072	0.2469	34	0.2520 (✓)
58	0.2554	0.073	0.2513 (✓)	35	0.2600
60	0.2647	0.075	0.2602	36	0.2687
64	0.2836	0.077	0.2694	37	0.2773
65	0.2884	0.080	0.2824	39	0.2946
70	0.3127	0.090	0.3330	45	0.3480
100	0.4643	0.100	0.3864	100	0.8640

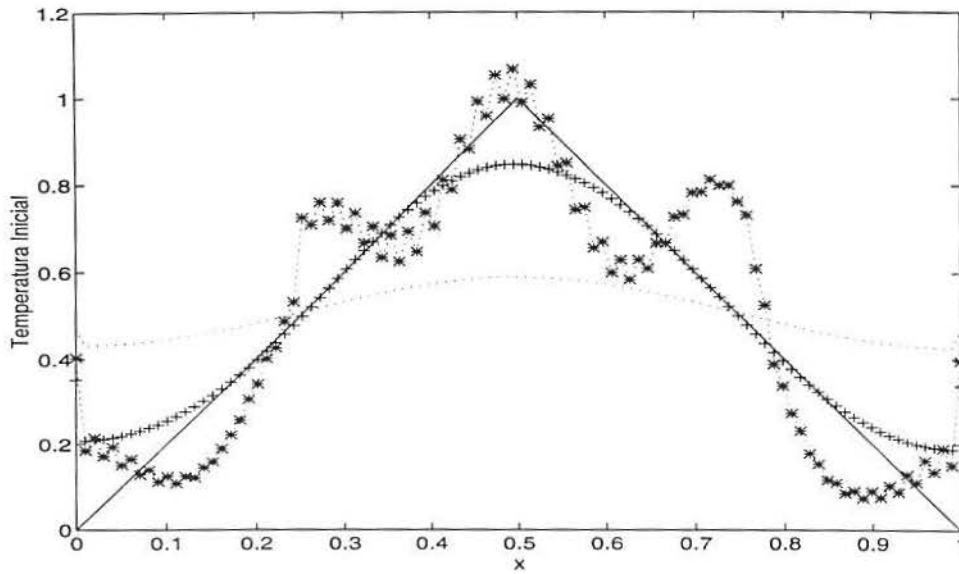


Figura 7.14 Solução regularizada pelo princípio da máxima entropia, onde '-' é a solução exata; '...' indica $\alpha = 1000$; '* *' indica $\alpha = 0.1$ e '+ +' indica $\alpha = 57$.

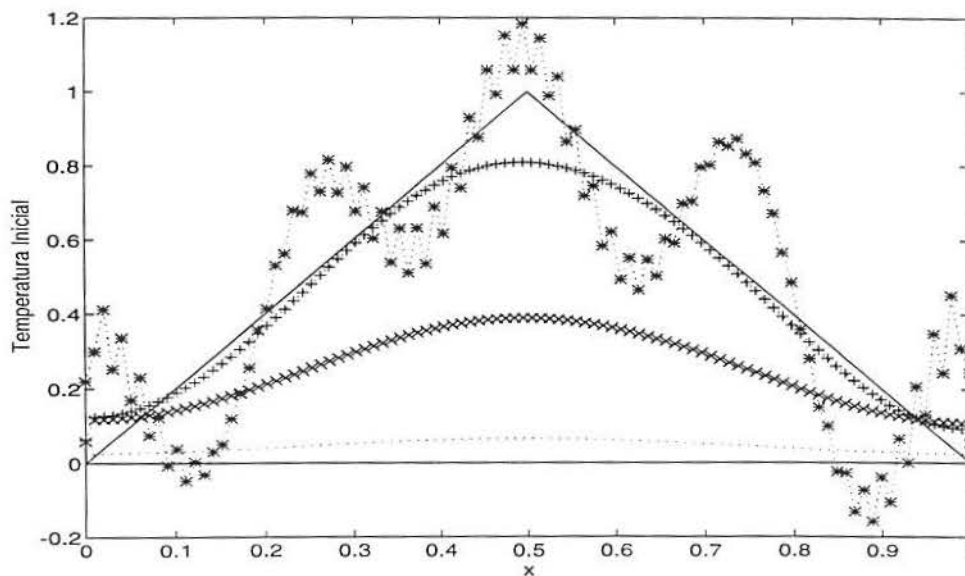


Figura 7.15 Solução regularizada via Tikhonov de ordem zero onde '-' é a solução exata; '* *' indica $\alpha = 10^{-4}$; '+ +' indica $\alpha = 0.073$; 'x x' indica $\alpha = 1$ e '...' indica $\alpha = 10$.

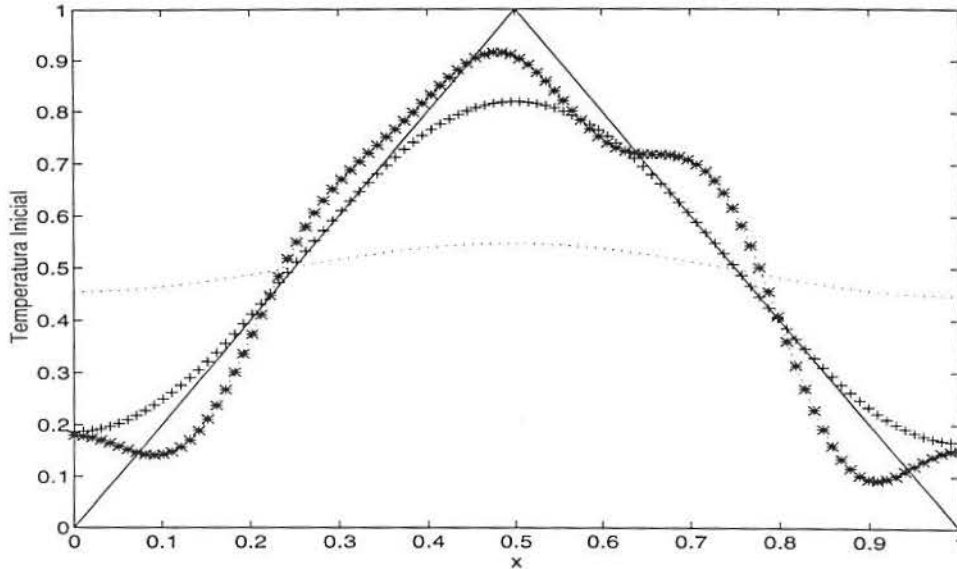


Figura 7.16 Solução regularizada via Tikhonov de ordem 1, onde '-' é a solução exata; '...' indica $\alpha = 1000$; '* * *' indica $\alpha = 10^{-2}$; 'x x' indica $\alpha = 34$.

Na tabela 7.2 tem-se o número de condicionamento (do *software* MATLAB) das matrizes associadas ao problema direto, tanto pela aproximação através da regra do trapézio quanto pela aproximação linear em cada sub-intervalo.

7.3 Comentários finais

As três técnicas de regularização aplicadas a este problema inverso parecem caracterizar uma boa maneira de abordá-lo. Qualitativamente esta afirmação pode ser examinada graficamente, onde as funções-teste utilizadas foram relativamente *bem* recuperadas com os termos de regularização analisados neste trabalho. Análises do ponto de vista quantitativo também permitem tais conclusões.

O critério da discrepância para a escolha do parâmetro de regularização mostrou-se particularmente eficaz nos casos-teste utilizados e sua aplicabilidade a outras funções-teste de mesma magnitude apresentou um razoável êxito (fig.7.17 e 7.18).

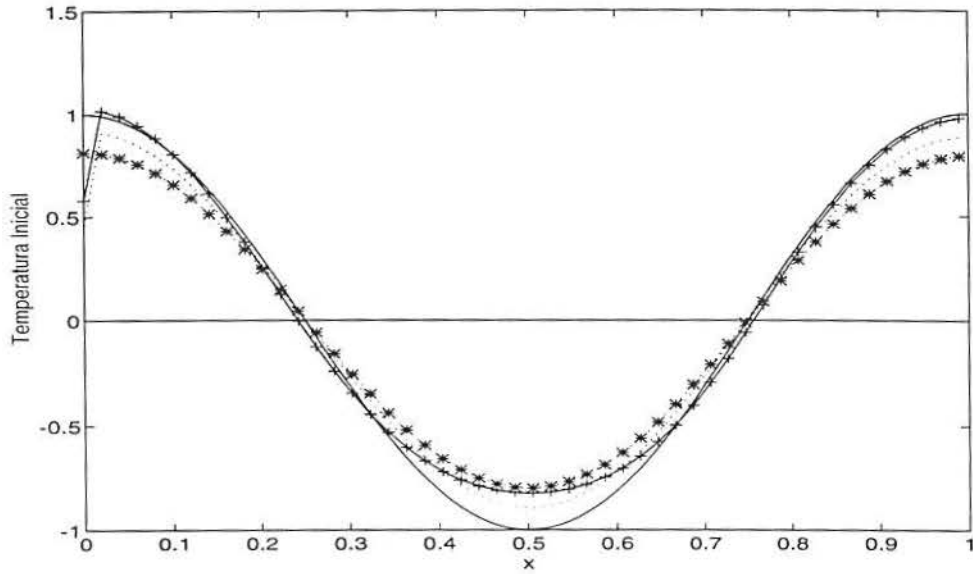


Figura 7.17 Função-teste cosseno, onde '-' é a sol.exata; '...' é a sol. via Tikhonov-0 para $\alpha = 0.073$; '* *' é a sol. via Tikhonov-1 para $\alpha = 34$ e '+ +' é a sol. via max. entropia para $\alpha = 57$.

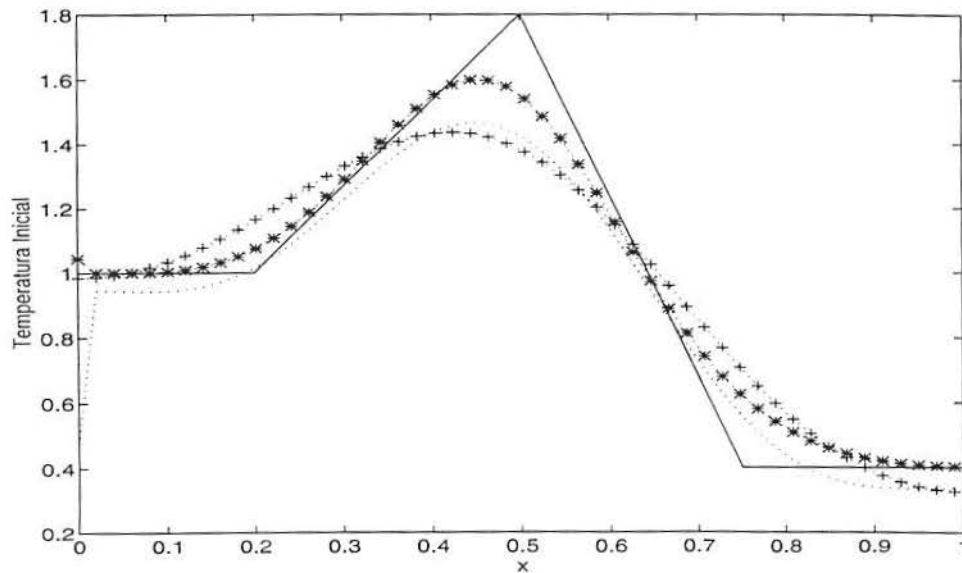


Figura 7.18 Função-teste semi-triângulo, onde '-' é a sol.exata; '...' é a sol. via Tikhonov-0 para $\alpha = 0.073$; '+ +' é a sol. via Tikhonov-1 para $\alpha = 34$ e '* *' é a sol. via max. entropia para $\alpha = 57$.

Tabela 7.2 Número de condicionamento associado à aproximação linear e à regra do trapézio.

Aproximação Linear			Trapézio		
τ	N	COND #	τ	N	COND #
10^{-4}	6	1.1306	10^{-4}	6	2.0141
	11	1.2959		11	1.9783
	21	1.8311		21	1.9346
	51	14.6770		51	10.8170
	101	2.1544×10^4		101	8.5831×10^3
10^{-2}	6	15.2784	10^{-2}	6	6.1296
	11	1.7037×10^4		11	7.3998×10^3
	21	1.0258×10^7		21	7.9565×10^5
	51	2.2269×10^6		51	9.3671×10^6
	101	2.9390×10^6		101	1.1838×10^7
10^{-1}	6	5.6157×10^4	10^{-1}	6	3.0848×10^4
	11	1.3906×10^5		11	6.3477×10^5
	21	1.2261×10^6		21	3.7667×10^6
	51	2.3917×10^6		51	2.6939×10^6
	101	6.3991×10^6		101	7.5625×10^7

Tabela 7.3 Erro entre a solução exata $f(x) = 1 + \cos(\pi x)$ e a solução aproximada f_i em $x = 0, 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1.0$, para um tempo $\tau = 0.1$ através da aproximação linear. $E_{Q\text{ médio}}$ indica o erro quadrático médio, E_{Max} indica o erro máximo e E_{Direto} indica o erro quadrático médio da aproximação do problema direto.

x	$N = 6$	$N = 11$	$N = 21$	$N = 51$	$N = 101$
0	0.5679	-2.4877	2.4763	12.8852	-146.0327
0.2	-0.9796	0.9707	-2.1486	-17.3241	6.5628
0.4	1.4741	-0.9548	1.5969	-1.7980	7.3378
0.6	-1.3385	0.3579	0.4031	2.5057	24.8980
0.8	0.6066	-0.0193	4.1486	-0.9608	-8.4617
1.0	-0.0934	0.3741	-0.4763	37.6550	-71.7995
$E_{Q\text{ médio}}$	0.9681	0.9433	3.4448	10.7452	21.8575
E_{Max}	1.4771	2.4877	10.1669	37.6550	146.0327
E_{Direto}	0.092	0.0023	5.518×10^{-4}	9.2559×10^{-5}	2.3708×10^{-5}

O caráter mal-posto deste problema ficou evidenciado numericamente ao tentar-se aplicar métodos "usuais", que seriam extremamente "naturais" para problemas bem-postos ou diretos. Todos eles apresentaram resultados desastrosos quando na presença de ruído. Estas abordagens preliminares ao problema de determinação de condição inicial devem ser descartadas e é necessário aplicar uma técnica mais sofisticada.

A proposta deste trabalho é validar uma metodologia, pretensamente geral, para abordar problemas inversos mal-condicionados baseando-se na regularização. Isto é feito através da definição de um critério para a escolha do parâmetro de regularização (discrepância de Morozov) e através dos funcionais regularizadores de Tikhonov e entrópico.

Uma característica comum de problemas inversos ("mal-postos") é sua *instabilidade*, isto é, pequenas variações nos dados podem levar a grandes variações na solução. O tratamento computacional de tais problemas requer algum tipo de discretização com o objetivo de "modelar" um problema aproximado no qual existe somente um número finito de variáveis. Problemas de dimensão finita pequena são tipicamente bem-postos, no entanto, conforme a discretização é refinada para melhor modelar o problema original de dimensão infinita, o número de variáveis cresce e a instabilidade do problema original torna-se aparente no modelo discreto. Para o caso de determinação de condição inicial da equação do calor as tabelas 7.2 e 7.3 ilustram este fato.

Num primeiro momento, não parece possível calcular numericamente a solução de um problema se a solução do problema não depende continuamente dos dados, isto é, caso tenha-se um problema mal-posto. No entanto, sob informação adicional a priori sobre a solução, tal como condições sobre os sinais, suavidade e cotas sobre as derivadas, é possível restaurar estabilidade e construir algoritmos numéricos eficientes.

O aspecto de perda de estabilidade e sua restauração através de métodos apropriados (*métodos de regularização*) pode ser tratado num contexto relativamente geral, onde informações e hipóteses adicionais apresentam um papel fundamental.

Então uma estratégia geral para solução de problemas inversos não consiste somente em "determinar as causas de um resultado conhecido", mas também recuperar informação faltando. Além disso, a teoria de métodos de regularização para problemas

inversos lineares está bem desenvolvida e, em certo sentido, para problemas não lineares, essa teoria ainda está "iniciando".

Os muito importantes problemas inversos na ciência e tecnologia moderna mais do que justificam o papel da teoria de inversão. Groeseth chega a dizer entusiasticamente: "... mais importante do que as aplicações científicas é o valor do 'pensamento' inverso, não importando a particular área de atuação".

Bibliografia

- [Ali79] O. M. Alifanov. *Identification of Heat Transfer Processes of Flying Vehicles (An Introduction to the Theory of Inverse Heat Transfer Problems)*. Mashinostroenie Publishing Academy, Moscow, 1979.
- [BBC85] J. V. Beck, B. Blackwell, and C. A. St. Clair. *Inverse Heat Conduction*. Wiley, New York, 1985.
- [Bec70] J. V. Beck. Nonlinear estimation applied to the nonlinear inverse heat conduction problem. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 13:703–716, 1970.
- [BG67] G. E. Backus and J. F. Gilbert. Numerical applications of a formalism for geophysical inverse problems. *Geophys. J. R. Astron. Soc.*, 13:247–276, 1967.
- [BG68] G. E. Backus and J. F. Gilbert. The resolving power of gross earth data. *Geophys. J. R. Astron. Soc.*, 16:169–205, 1968.
- [BG70] G. E. Backus and J. F. Gilbert. Uniqueness in the inversion of inaccurate gross earth data. *Philos. Trans. R. Soc. London*, 266:123–197, 1970.
- [Can66] J. R. Cannon. Some numerical results for the solution of the heat equation backwards in time. In Greenspan [Gre66]. (pp. 21–54).
- [CH53] R. Courant and D. Hilbert. *Methods of Mathematical Physics*, volume 2. Interscience, New York, 1953.
- [CJ59] H. S. Carslaw and J. C. Jaeger. *Conduction of Heat in Solids*. Oxford University Press, London, 1959. (2 ed.).
- [EHN96] H. W. Engl, M. Hanke, and A. Neubauer. *Regularization of Inverse Problems*. Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.
- [Fra96] J. I. Frankel. Residual-minimization least-squares method for inverse heat conduction. *Computers Math. Applic.*, 32(4):117–130, 1996.

- [Gre66] Greenspan, editor. *Numerical Solutions of Nonlinear Differential Equations*, New York, 1966. Wiley.
- [Had02] J. Hadamard. Sur les problèmes aux dérivées partielles et leur signification physique. *Bull. Princeton Univ.*, 13:49–52, 1902.
- [Had23] J. Hadamard. *Lectures on the Cauchy Problem in Linear Partial Differential Equations*. Yale Univ. Press, New Haven, CT, 1923.
- [Had32] J. Hadamard. *Le problème de Cauchy et les équations aux dérivées partielles linéaires hyperboliques*. Hermann, Paris, 1932.
- [Han94] P. C. Hansen. The Backus-Gilbert method: SVD analysis and fast implementation. *Inverse Problems*, 10:895–904, 1994.
- [HL86] C. K. Hsieh and J. Lin. Solution of inverse heat-conduction problems of unknown initial conditions. *Proc. of the 8th International Heat Transfer Conference*, 2:609–614, 1986.
- [Isa97] V. Isakov. *Inverse Problems for Partial Differential Equations*. Springer-Verlag, New York, 1997.
- [Iva55] V. K. Ivanov. An integral equation of the inverse problem of the logarithmic potential. *Dokl. Acad. Nauk USSR*, 105:409–411, 1955.
- [Jay57a] E. T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics II. *Physical Review*, 108:171–190, 1957.
- [Jay57b] E.T. Jaynes. Information theory and statistical mechanics I. *Physical Review*, 106:620–630, 1957.
- [JOB91] Y. Jarny, M. N. Özisik, and J. P. Bardon. A general optimization method using adjoint equation for solving multidimensional inverse heat conduction. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 34(11):2911–2919, 1991.
- [Joh55] F. John. A note on "improper" problems in partial differential equations. *Comm. Pure Appl. Math.*, 8:591–594, 1955.

- [Kel76] J. B. Keller. Inverse problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer Am. Math. Mon.*, 83:107–118, 1976.
- [Kno73] R. J. Knops, editor. *Symposium on Non-Well Posed Problems and Logarithmic Convexity*, New York, 1973. Springer-Verlag.
- [KSB88] A. Kirsch, B. Schomburg, and G. Berendt. The Backus-Gilbert method. *Inverse Problems*, 4:771–783, 1988.
- [Lan56] C. Lanczos. *Applied Analysis*. Prentice Hall, N. J., 1956.
- [Lan97] C. Lanczos. *Linear Differential Operators*. Dover Publications, Mineola, NY, 1997.
- [Lav57] M. M. Lavrentyev. The cauchy problem for linear elliptic equations. *Dokl. Acad. Nauk USSR*, 112(2), 1957.
- [Lav59] M. M. Lavrentyev. On integral equations of the first kind. *Dokl. Acad. Nauk USSR*, 127(1):31–33, 1959.
- [Lav60] M. M. Lavrentyev. On integral equations of the first kind. *Dokl. Acad. Nauk USSR*, 133(2):31–33, 1960.
- [LL69] R. Lattès and J.-L. Lions. *Methods of Quasireversibility: Applications to Partial Differential Equations*. American Elsevier, New York, 1969.
- [LM90] A. K. Louis and P. Maass. A mollifier method for linear operator equations of the first kind. *Inverse Problems*, 6:427–440, 1990.
- [Lou96] A. K. Louis. Approximate inverse for linear and some nonlinear problems. *Inverse Problems*, 12:175–190, 1996.
- [Mil73] K. Miller. Stabilized quasi-reversibility and other nearly-best-possible methods for non-well-posed problems. In Knops [Kno73]. (pp. 161–176).
- [MM93] C. E. Mejía and D. A. Murio. Identification of diffusivity coefficient and initial condition by discrete mollification. In Zabaras et al. [ZWR93]. (pp. 227–235).

- [Mor66] V. A. Morozov. On the solution of functional equations by the method of regularization. *Soviet Math. Dokl.*, 7:414–417, 1966.
- [Mor93] V. A. Morozov. *Regularization Methods for Ill-Posed Problems*. Michael Stessin, Albany, NY, 1993.
- [Mur93] D. A. Murio. *The Mollification Method and the Numerical Solution of Ill-Posed Problems*. Wiley, New York, 1993.
- [New60] D. J. Newman. Numerical method for solution of an elliptic cauchy problem. *J. Math. and Phys.*, 39(1), 1960.
- [NO93] A. J. Silva Neto and M. N. Özisik. An inverse heat conduction problem of estimating initial condition. *Proc. of the 12th Brazilian Congress of Mechanical Engineering*, 1:613–616, Dezembro 1993. Brasília, Brasil.
- [Ö80] M. N. Özisik. *Heat Conduction*. Wiley Interscience, New York, 1980. 2 ed.: 1993.
- [Pet57] I. G. Petrovskii. *Lectures on Theory of Integral Equations*. Graylock Press, Rochester, NY, 1957.
- [Phi62] D. L. Phillips. A technique for the numerical solution of certain integral equations of the first kind. *J. Assoc. Comput. Mach.*, 9(1), 1962.
- [RC96] F. M. Ramos and H. F. Campos Velho. Reconstruction of geoelectric conductivity distributions using a first-order minimum entropy technique. In *Proc. of the 2nd International Conference on Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice*, Le Croisic, France, 1996.
- [RG95] F. M. Ramos and A. Giovannini. Résolution d'un problème inverse multidimensionnel de diffusion de la chaleur par la méthode des éléments analytiques et par le principe de l'entropie maximale. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 38(1):101–111, 1995.
- [Sab85] P. Sabatier. Inverse problems - an introduction. *Inverse Problems*, 1:1–4, 1985.

- [SW49] C. E. Shannon and W. Weaver. *The Mathematical Theory of Communication*. Univ. of Illinois Press, Urbana, IL, 1949.
- [TA77] A. N. Tikhonov and V. Y. Arsenin. *Solutions of Ill-Posed Problems*. V. H. Winston and Sons, Washington, DC, 1977.
- [Tar87] A. Tarantola. *Inverse Problems: Methods for Data Fitting and Model Parameter Estimation*. Elsevier, 1987.
- [TG87] A. N. Tikhonov and A. V. Goncharsky, editors. *Ill-Posed Problems in the Natural Sciences*. Mir Publ., Moscow, 1987.
- [TGSY95] A. N. Tikhonov, A. V. Goncharsky, V. V. Stepanov, and A. G. Yagola. *Numerical Methods for Solution of Ill-Posed Problems*. Kluwer, Dordrecht, 1995.
- [Tik43] A. N. Tikhonov. On stability of inverse problems. *Dokl. Acad. Nauk USSR*, 39(5):195–198, 1943.
- [Tik63] A. N. Tikhonov. On solving incorrectly posed problems and method of regularization. *Dokl. Acad. Nauk USSR*, 151(3):501–504, 1963.
- [Tit53] E. C. Titchmarsh. *The Theory of Functions*. Oxford Univ. Press, Londres, 1953. (2 ed.).
- [Two77] S. Twomey. *Introduction to the Mathematics of Inversion in Remote Sensing and Indirect Measurements*. Elsevier Scientific Publishing Co., 1977.
- [Vai82] G. M. Vainikko. The discrepancy principle for a class of regularization methods. *USSR Comp. Math. Math. Phys.*, 22(3):1–19, 1982.
- [Vai83] G. M. Vainikko. The critical level of discrepancy in regularization methods. *USSR Comp. Math. Math. Phys.*, 23(6):1–9, 1983.
- [Wah90] G. Wahba. *Spline Models for Observational Data*. SIAM, Philadelphia, 1990.

- [Wei95] H. F. Weinberger. *A First Course in Partial Differential Equations with Complex Variables and Transform Methods*. Dover Publications, New York, 1995.
- [ZWR93] N. Zabaras, K. A. Woodbury, and M. Raynaud, editors. *Inverse Problems in Engineering: Theory and Practice*, Palm Coast, Florida, USA, 1993. ASME.