

Inverse problemer

Klaus Mosegaard, Niels Bohr Institutet, Københavns Universitet

Inverse problemer – det at kunne drage konklusioner om fænomener i naturen ud fra data – er en ryggrad i videnskab og teknologi. Rækken af succeser på dette område er lang, men hvor går grænsen for vores erkendelse gennem data? Dette er, hvad teorien for inverse problemer søger at give svar på.

Hadamard og de “dårligt stillede spørgsmål”

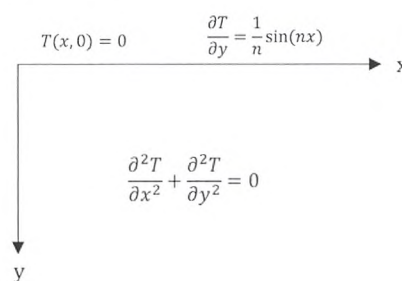
Efter nogle produktive år i Bordeaux vendte den franske matematiker Jacques Hadamard i 1897 tilbage til Paris. Som dengang 32-årig havde han slået sit navn fast som en af Europas førende matematikere, særligt gennem sine bidrag til klassisk analyse, og ikke mindst for sit bevis for primtalsteoremet i 1896. I de efterfølgende år koncentrerede Hadamard sig om problemer i den matematiske fysik, særligt partielle differentiaalligninger, variationsregning og grundlaget for funktionalanalyse. Det var i disse år, at han gjorde en vigtig opdagelse, der skulle ændre vores opfattelse af begrænsningerne for, hvad den matematiske fysik kan lære os om strukturer og processer i naturen.



Figur 1. Jacques Hadamard.

Hadamard studerede *inverse problemer*, altså problemer, hvor man ønsker at bruge måledata til at beregne fysiske objekters indre struktur. Han var særligt interesseret i teorien for varmeledning – en teori, der var blevet grundlagt af Joseph Fourier i 1822. Kernen i denne teori var varmeledningsligningen, hvis løsning allerede var velbeskrevet af Fourier og en række andre matematikere op gennem 1800-tallet. Varmeledningsligningen var et stort fremskridt med mange tekniske anvendelser, og man kendte til en række vanskeligheder ved at bruge ligningen til at regne temperaturen ud baglæns i tiden, og ved at ekstrapolere temperaturen væk

fra eksisterende målepunkter. Man antog imidlertid, at dette problem var et spørgsmål om at måle nøjagtigt nok, men Hadamard havde fået en mistanke om, at problemet var langt større og mere alvorligt, end nogen havde forestillet sig!

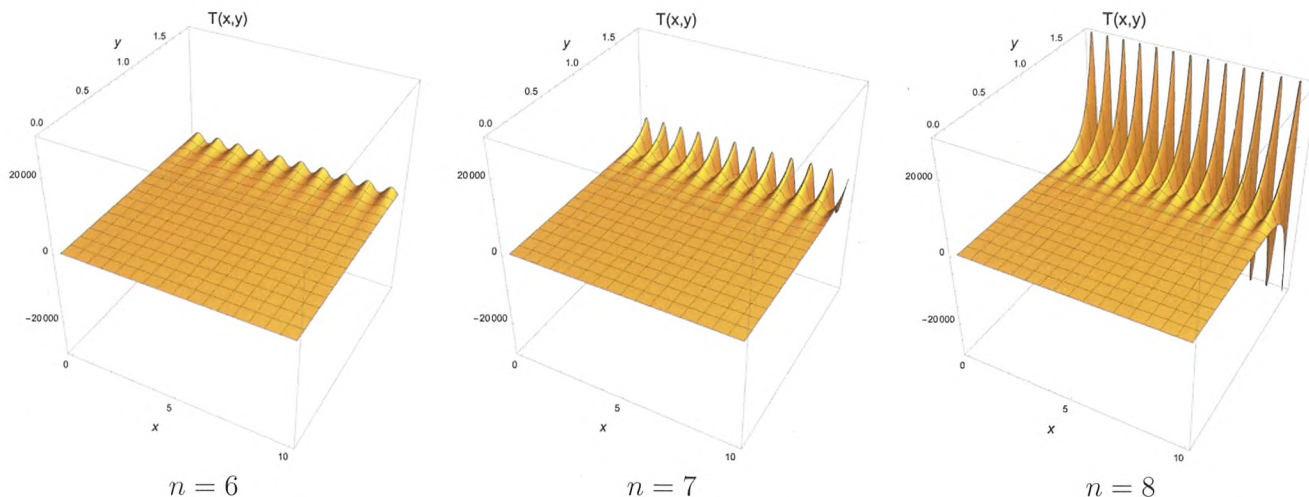

$$T(x, 0) = 0 \quad \frac{\partial T}{\partial y} = \frac{1}{n} \sin(nx)$$
$$\frac{\partial^2 T}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 T}{\partial y^2} = 0$$

Figur 2. Hadamards varmeledningsproblem.

Hadamard studerede løsninger til varmeledningsligningen i det simple tilfælde, hvor temperaturfeltet er konstant i tiden. Under disse forhold reduceres ligningen til Laplace-ligningen, og Hadamards bekymringer var rettet mod den indflydelse, randbetingelserne havde på det beregnede temperaturfelt. Figur 2 viser et område, fx under jordoverfladen, hvor temperaturen varierer, men hvor der ingen ændringer er i tiden. I dette område hersker Laplace-ligningen $\partial^2 T / \partial x^2 + \partial^2 T / \partial y^2 = 0$ og på jordoverfladen ($y = 0$) antager vi, at vi har målt temperaturen til $T = 0$ og varmestrømmen gennem jordoverfladen til $-\partial T / \partial y = (1/n) / \sin(nx)$. Altså en periodisk variation langs overfladen med amplitude $1/n$ og bølgetal n . Figur 3 viser løsningen til dette temperaturproblem for tre forskellige bølgelængder $2\pi/n$ ($n = 6, 7, 8$) af varmestrømmen ved overfladen. I dette eksempel falder både størrelsen og bølgelængden af den varierende varmestrøm ved overfladen med n (på grund af de små varmestrømme ses dette dog ikke på figurene). Vi ser her det overraskende, at på trods af faldende varmestrøm ved overfladen, vokser amplituden af de forudsagte temperaturvariationer eksplosivt med n for store værdier af y ! Den fulde løsning til problemet ser således ud:

$$T(x, y) = \frac{1}{n^2} \sin(nx) \sinh(ny), \quad (1)$$

hvoraf det ses, at amplituden af temperaturvariationerne for store værdier af y kan blive vilkårlig store, blot man vælger n tilstrækkeligt stor. Dette følger af, at funktionen $\sinh(ny) = (e^{ny} - e^{-ny})/2$ vokser meget hurtigt med y .



Figur 3. Løsninger til Hadamards varmemproblem for tre bølgetal ($n = 6, 7$ og 8) for varmemstrømmen ved overfladen. Overfladen er ved $y = 0$ i nederste venstre del af figurene. Bemærk den eksplosive forstærkning af amplituden ved $y = 1.9$ for voksende n .

Konsekvenserne af dette fænomen er dramatiske: Hvis man forestiller sig målinger af temperatur og varmemstrøm gennem overfladen af et objekt, og hvis man ønsker at bruge disse data til at beregne temperaturen inde i objektet, så kan selv den mindste kortbølgede målestøj medføre ødelæggende fejl i beregningen og gøre resultatet helt ubrugeligt! Hadamard kaldte problemer med denne egenskab *ill-posed problems* (“dårligt stillede spørgsmål”). “Ill-posedness” er typisk for mange *inverse problemer* og sætter en principiel grænse for, hvilken information der kan uddrages af måledata.

Hvad skal man stille op, når man har med et ill-posed-problem at gøre? Lad os formelt opskrive det inverse problem som en ligning

$$\mathbf{d} = g(\mathbf{m}), \quad (2)$$

hvor $\mathbf{d}$ er data (i Hadamards problem de observerede temperaturer og varmeledningseværdier ved overfladen), $\mathbf{m}$ er de ubekendte (fx temperaturerne for en stor værdi af y), og g den funktion, der afbilder $\mathbf{m}$ over i $\mathbf{d}$. Det inverse problem er at finde $\mathbf{m}$, når vi kender $\mathbf{d}$ og g . Hadamards resultat kan således beskrives ved, at selv inverse problemer, der har en entydig løsning, kan have den egenskab, at hvis data er forurenet med støj $\mathbf{n}$, kan vilkårligt store fejl i løsningen $\mathbf{m}$ frembringes af selv den mindste støj $\mathbf{n}$, hvis fx $\mathbf{n}$ er tilstrækkelig kortbølget.

Flere metoder til at omdanne et ill-posed-problem til et *well-posed-problem* er blevet foreslået gennem tiderne. Alle metoder har det tilfælles, at de omformulerer problemet, så det nye problem på den ene side kun har løsninger, der er fysisk acceptable (fx er lavfrekvente og har begrænsede udsving), men som på den anden side ikke nødvendigvis tilfredsstiller ligning (2) helt. For *lineære* inverse problemer, hvor ligning (2) er en matrix-ligning $\mathbf{d} = \mathbf{G}\mathbf{m}$, foreslog den russiske matematiker Andrey Tikhonov allerede i 1943 følgende omformulering [1]:

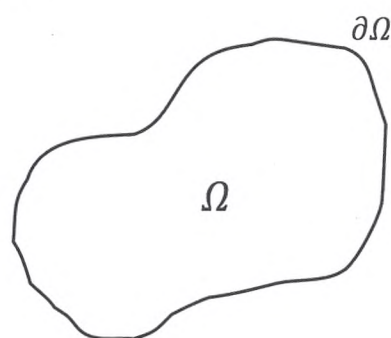
$$\mathbf{d} = \mathbf{G}\mathbf{m} \longrightarrow \mathbf{G}^T \mathbf{d} = (\mathbf{G}^T \mathbf{G} + \lambda \mathbf{I})\mathbf{m} \quad (3)$$

hvor λ er et lille, positivt tal, der justeres således, at løsningen $\mathbf{m}$ ser “fornuftig” ud (et subjektivt valg!).

Prisen for en sådan omformulering er, at løsningen kun forklarer data tilnærmelsesvis. I Hadamards varmeledningsproblem vil Tikhonovs metode fx betyde, at de kraftige variationer i temperaturen for store værdier af y bliver dæmpet. Derved kan de kortbølgede variationer i varmemstrømmen ved overfladen ikke genskabes. Dette dilemma kan imidlertid være til at leve med, hvis vi i forvejen ved, at de kortbølgede variationer i varmemstrømmen ved overfladen udelukkende er støj.

Problemer med mange løsninger

Ill-posedness er kun én af de markante egenskaber, der karakteriserer inverse problemer. Et andet karakteristisk problem er, at inverse problemer ofte har (måske uendeligt) mange løsninger, der forklarer måledata nøjagtigt lige godt. Undertiden er det nemt at afgøre, om løsninger er entydige eller flertydige (fx hvis lineære ligninger beskriver sammenhængen mellem $\mathbf{m}$ og $\mathbf{d}$), men i andre situationer kræver det dybtgående matematiske undersøgelser.



Figur 4. Et 2-dimensionalt, planart trommeskind Ω , hvor randen er den lukkede kurve $\partial\Omega$.

Et berømt eksempel på dette kan findes i Marc Kacs artikel fra 1966 med titlen “Can one hear the shape of a drum?” [2]. Kac var interesseret i spørgsmålet, om det er muligt at bruge egensvingningerne af et fysisk objekt, fx et trommeskind, til at bestemme objektets form. Problemet viste sig at være uhyre vanskeligt og forblev uløst i mange år. Ejendommeligt nok havde

man allerede besvaret spørgsmålet for 16-dimensionale trommeskind! John Milnor fra Princeton havde nemlig i 1964 bevist, at formen af visse typer af 16-dimensionale trommeskind ikke kunne bestemmes ud fra spektret, men hans bevismetode kunne desværre ikke umiddelbart overføres til det 2-dimensionale, planare trommeskind [3].

Problemet kan formuleres på følgende måde: Betragt figur 4, som viser et 2-dimensionalt, planart trommeskind Ω hvis rand er angivet med den lukkede kurve $\partial\Omega$. Hvis u er den lodrette forskydning af membranen fra dens hvilestilling, så opfylder u bølgeligningen

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} = \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (4)$$

i Ω , med randbetingelsen $u = 0$ på randen $\partial\Omega$. Hvis vi søger en produktløsning af formen

$$u(x, y, t) = \psi(t)\phi(x, y), \quad (5)$$

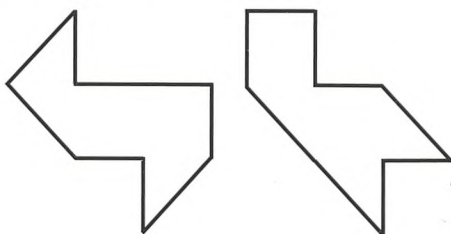
finder vi at

$$u(x, y, t) = \sin(\omega t)\phi(x, y) \quad (6)$$

hvor

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \omega^2 \phi = 0 \quad (7)$$

i området Ω , og med randbetingelsen $\phi = 0$ på $\partial\Omega$. Dette er et såkaldt egenværdiproblem, som kun har løsninger for visse værdier af frekvensen ω . Dette blev vist af Hilbert i 1909 og (i en mere generel form) af von Neumann i 1928. Vi kan formulere dette ved at sige, at spektret for trommeskindets svingninger er et "liniespektrum", dvs. det har kun værdier forskelligt fra 0 i et diskret (men muligvis uendeligt) sæt af frekvenser. Disse frekvenser afhænger af trommens form $\partial\Omega$, så derfor kan vores inverse problem formuleres som det at beregne trommens form ud fra kendskabet til alle egenfrekvenserne: $\omega_1, \omega_2, \omega_3, \dots$. Amplituden for hver egensvingning indgår ikke i vores observationer, fordi de ikke er karakteristiske for trommens form, men kan variere alt efter, hvor trommen anslås.



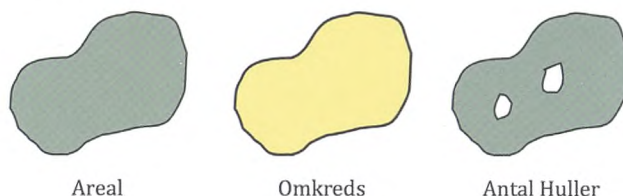
Figur 5. To trommeskind med samme egenfrekvenser. Trommeskindene er begge sammensat af 7 identiske, lige-benede trekanter.

Først i 1991 lykkedes det matematikerne David Webb og Carolyn Gordon fra Washington University, i samarbejde med Scott Wolpert fra University of Maryland [4], at løse problemet. Deres svar på spørgsmålet: "Can one hear the shape of a drum?" er nej. I deres bevis konstruerede de eksempler på par af trommeskind med identiske egenfrekvenser, og de viste

dermed, at de diskrete frekvenser i lydspektret ikke tillader os at bestemme trommeskindets form. Figur 5 viser et af deres eksempler på trommepar med præcis samme egensvingningsfrekvenser. En lettilgængelig udgave af beviset kan findes i [5].

Problemer med en entydig løsning

Den flertydige løsning til trommeproblemet betyder løst sagt, at der er flere forskellige (ubekendte) kurver i planen, end der er (kendte) frekvenser i det diskrete spektrum. Problemet ser dermed ud til at være "underbestemt", omtrent som når vi fx forsøger at løse 2 ligninger med 3 ubekendte. Det er derfor nærliggende at spørge, om der er "middelegenskaber" for trommen, der kan bestemmes entydigt. Det viser sig faktisk at være tilfældet.



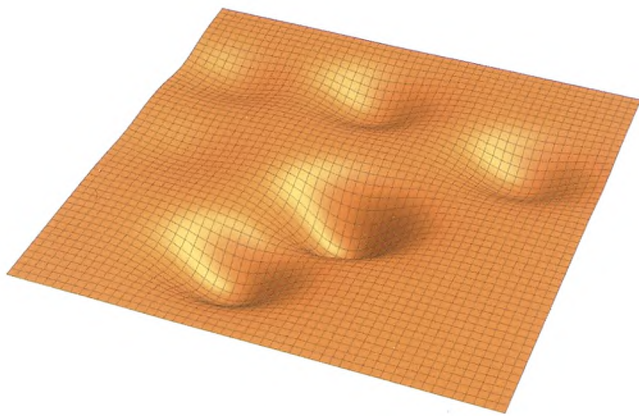
Figur 6. Egenskaber, der entydigt kan bestemmes ud fra en trommes lyd.

For eksempel viste Herman Weyl [6], at arealet af trommeskindet kan bestemmes entydigt af egenfrekvenserne, og senere lykkedes det Pleijel [7] at vise, at omkredsen er entydigt bestemt. For polygon-formede trommeskind viste Mark Kac [2] endog, at antallet af huller i trommeskindet, dvs. når randen består af flere lukkede kurver, også kan bestemmes entydigt! Se figur 6.

Inverse problemer i supercomputerens tidsalder

En tredje alvorlig vanskelighed, man støder ind i, når man løser inverse problemer i forbindelse med videnskabelige og tekniske undersøgelser, er det forhold, at funktionen g , der i ligning (2) afbilder de ubekendte strukturparametre ind i måledata, ofte er så kompliceret, at vi end ikke kan beskrive den med et sæt analytiske formler. Et eksempel på dette er, når d er seismiske data observeret ved jordoverfladen efter et jordskælv, og m er parametre, der beskriver variationer i de elastiske parametre i Jordens indre. I dette tilfælde kan g kun repræsenteres ved et computerprogram, der simulerer bølgeudbredelse i den komplekse jord. Vi kender derfor kun få generelle egenskaber ved funktionen g : Vi ved fx, at den er ikke-lineær og differentiabel, men vi ved ikke, hvor mange løsninger eller tilnærmede løsninger, der er til ligning (2). Desuden er der ingen garanti for, at de mulige løsninger og tilnærmede løsninger ligger tæt på hinanden. Problemer som dette kaldes ofte *stærkt ikke-lineære inverse problemer*.

En særlig vanskelighed ved mange stærkt ikke-lineære inverse problemer er, at det tager meget lang tid, selv på en supercomputer, at beregne data ud fra en given m . Umiddelbart kan det derfor virke håbløst at søge løsninger til disse beregningstunge problemer, men alt håb er ikke ude. Lad os se på, hvilke metoder, der ofte søges anvendt til at tackle denne problemtype.



Figur 7. Grafen for en misfit-funktion $S(\mathbf{m})$ for et stærkt ikke-lineært problem med 2 ukendte parametre $\mathbf{m} = (\mathbf{m}_1, \mathbf{m}_2)$. Karakteristisk er de mange minima, der repræsenterer den korrekte løsning (det dybeste minimum) og flere “biløsninger”.

Da vi ikke har et analytisk udtryk for g , er vi henvist til at bruge søgemetoder til at finde rimelige løsninger. Vi definerer først *misfit-funktionen*, der i sin simpleste form ser således ud:

$$S(\mathbf{m}) = \|\mathbf{d} - \mathbf{g}(\mathbf{m})\|^2. \quad (8)$$

Idéen er nu at konstruere et søgeprogram, der leder efter et $\mathbf{m}$, der minimerer $S(\mathbf{m})$. Dermed er $\mathbf{m}$ nemlig en løsning, eller “næsten en løsning”, til ligning (2). Søgningen starter med et godt bud $\mathbf{m}_0$ på, hvad løsningen kunne være, hvorefter algoritmen tager en række skridt

$$\mathbf{m}_0 \rightarrow \mathbf{m}_1 \rightarrow \mathbf{m}_2 \rightarrow \mathbf{m}_3 \rightarrow \dots \rightarrow \mathbf{m}_n \quad (9)$$

indtil misfit $S(\mathbf{m}_n)$ er tæt på 0. Hele problemet består naturligvis i at finde ud af, hvordan disse skridt skal tages. Den simpleste strategi går ud på at beregne, i hvilken retning skridtet skal tages for at reducere størrelsen af misfittet mest muligt. Denne metode kaldes *steepest descent* (stejleste nedstigning), og den bruger de afledede af S med hensyn til vektoren $\mathbf{m}$'s komponenter til at finde skridtretningen i hvert trin. Denne metode kan være effektiv, hvis man ved, at $S(\mathbf{m})$ kun har ét minimum, eller hvis man ved, at $\mathbf{m}_0$ ligger i nærheden af det rette minimum. Desværre er dette langt fra tilfældet for mange vigtige inverse problemer, fx for det ovenfor nævnte seismologiske eksempel. Bruger man steepest descent til dette problem, skal $\mathbf{m}_0$ være så tæt på den rigtige løsning, at problemet næsten er løst på forhånd!

Løsningen på dette dilemma var overraskende og blev opdaget allerede i 1967, meget tidligt i den moderne computers æra. Den russiske matematiker og seismolog Vladimir Keilis-Borok, og den russiske seismolog Tatiana Yanovskaya fandt, at hvis de lod computeren afprøve tilfældige, mulige løsninger efter

en nøje tilrettelagt strategi, kunne de løse det inverse seismologiske problem, og samtidig afsløre biløsninger til problemet [8]. Denne såkaldte *Monte Carlo*-metode havde ydermere den fordel, at man på en naturlig måde kunne begrænse søgningen til fysiske realistiske løsninger: Man tillod simpelthen kun computeren at afprøve acceptable muligheder!

Monte Carlo-metoder blev et vigtigt skridt frem mod at kortlægge flertydigheden af det stærkt ikke-lineære problem. Men det er indlysende, at når beregningen af $g(\mathbf{m})$ i udtrykket for misfittet (8) kræver fx en beregningstung simulering af data, så er Monte Carlo-metoder meget ressourcekrævende. Selv supercomputere kan bringes i knæ, når stor-skala inverse problemer skal løses. Forskningen koncentrerer sig i disse år om løsning af denne type problemer, men der er stadig et stykke vej til, at fx inversion af alle indsamlede seismiske data fra Jorden kan bruges til at frembringe et detaljeret billede af Jordens indre.

Litteratur

- [1] A.N. Tikhonov (1943) On the stability of inverse problems (in Russian). *Doklady Akademii Nauk SSSR*, bind 39, nr. 5, side 195–198.
- [2] M. Kac (1966) Can one hear the shape of a drum?, *Amer. Math. Monthly*, bind 73, nr. 4, del 2, side 16.
- [3] J. Milnor (1964) Eigenvalues of the Laplace Operator on certain manifolds. *Proc. Natl. Acad. Sci. USA.*, bind 51, nr. 4, side 542.
- [4] C. Gordon, D. Webb og S. Wolpert (1992) One cannot hear the shape of a drum, *Bull. Amer. Math. Soc.*, bind 27, side 134–138.
- [5] S.J. Chapman (1995) Drums That Sound the Same, *The American Mathematical Monthly*, bind 102, nr 2, side 124–138.
- [6] H. Weyl (1946) *The Classical Groups*, Princeton University Press, Princeton.
- [7] Å. Pleijel (1954) A study of certain Green's functions with applications in the theory of vibrating membranes, *Ark. Mat.*, bind 2, side 553–569.
- [8] V.J. Keilis-Borok og T.B. Yanovskaya (1967) Inverse problems in seismology (structural review), *Geophys. J. Royal Astr. Soc.*, bind 13, side 223–234.



Klaus Mosegaard er professor i geofysik ved Niels Bohr Institutet.