
Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica

**Métodos level set para
problemas inversos**

Vanderlei Martins
Orientador: Prof. Dr. Antonio Leitão

Florianópolis
Fevereiro de 2005

Universidade Federal de Santa Catarina
Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica

Métodos level set para problemas inversos

Dissertação apresentada ao Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica, do Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina, para a obtenção do grau de Mestre em Matemática, com Área de Concentração em Matemática Aplicada.

Vanderlei Martins
Florianópolis
Fevereiro de 2005

Métodos Level Set para Problemas Inversos

por

Vanderlei Martins

Esta Dissertação foi julgada para a obtenção do Título de “Mestre”, Área de Concentração em Matemática Aplicada, e aprovada em sua forma final pelo Curso de Pós-Graduação em Matemática e Computação Científica.

Igor Mozolevski
Coordenador

Comissão Examinadora

Prof. Dr. Antonio Leitão (UFSC - Orientador)

Prof. Dr. Celso Melchiades Doria (UFSC)

Prof. Dr. Igor Mozolevski (UFSC)

Prof. Dr. Jorge Zubelli (IMPA)

Florianópolis, fevereiro de 2005.

À minha sobrinha Daniela.

Agradecimentos

Agradeço de modo especial à minha família que sempre me compreendeu e incentivou apesar de todas as dificuldades, particularmente à minha sobrinha Daniela pela sua história. Agradeço aos colegas e amigos, que participaram desta etapa, deixando registrada minha amizade e gratidão pelos momentos vividos.

Serei sempre grato ao grande amigo Borba por sua amizade e encorajamento, principalmente nos difíceis momentos iniciais.

Com muito carinho agradeço à Caroline, pelas longas conversas e momentos agradáveis; além de ser uma grande motivadora, ajudou a superar muito da minha insegurança e proporcionou um grande crescimento pessoal.

Agradeço ao meu orientador Antonio Leitão, pelo incentivo, paciência e ensinamentos.

Agradeço a todo o Departamento de Matemática da UFSC.

Agradeço à CAPES pelo suporte financeiro sem o qual nada disso estaria sendo dito.

Resumo

Neste trabalho são discutidos os métodos level set, uma ferramenta recente para tratar problemas inversos, que mostra-se bastante eficiente. Relacionamos métodos level set com otimização restrita e, seguindo as propriedades da regularização assintótica, fazemos análise de convergência. Ainda apresentamos dois exemplos numéricos com os métodos level set. Estes experimentos estão relacionados com o problema do potencial inverso [12] e com a identificação de perfis de doping [2, 19].

Abstract

In this manuscript we analyze the level sets methods, a recent tool to deal with inverse problems, which has been showed to be very efficient. We derive a relation between level set methods and constraint optimization and, based on the properties of asymptotic regularization, prove some convergence analysis results. Furthermore, we present two numerical experiments with level set methods which are related to the inverse potential problem [12] and to the inverse doping profile [2, 19].

Conteúdo

Introdução	1
1 Problemas inversos e regularização	2
1.1 Regularização de Tikhonov	4
1.2 Iteração de Landweber	5
1.3 Regularização assintótica	6
2 Abordagem level set para problemas inversos envolvendo obstáculos	8
2.1 Cálculo formal de variações	9
2.2 Equação de evolução	10
3 Otimização restrita e métodos level set	13
3.1 Método level set	14
4 Regularização assintótica e métodos level set	20
4.1 Escolha da velocidade	21
4.2 Análise de convergência	25
4.3 Apêndice	30
5 Exemplos numéricos	32
5.1 O problema do potencial inverso	32
5.2 A identificação de perfis de doping	34
Bibliografia	41

Introdução

Apresentamos neste trabalho um estudo de métodos level set para problemas inversos. Embora recentes, os métodos level set têm se mostrado uma ferramenta eficiente no tratamento destes problemas. Uma aplicação está na resolução de problemas de reconstrução da forma, que são problemas inversos cuja incógnita é um subconjunto limitado de \mathbb{R}^d . Em muitas situações, o subconjunto que deseja-se reconstruir e seu complemento representam conjuntos onde algum parâmetro do modelo assume valores constantes diferentes (por exemplo, devido a diferentes propriedades materiais). A forma a ser reconstruída pode ser um obstáculo em um domínio, como no problema do espalhamento inverso [4].

No capítulo 1 apresentamos uma breve discussão sobre problemas inversos e mal postos, sobre a necessidade de utilizar técnicas de regularização e sobre os métodos de regularização de Tikhonov, de Landweber e da regularização assintótica, que são base para obtenção e análise de métodos level set. No segundo capítulo discutimos a abordagem de Santosa [20], que foi a precursora no emprego dos métodos level set para problemas inversos. A seguir, apresentamos a abordagem de Leitão e Scherzer [17], que introduz uma relação entre level set e regularização com restrição. No quarto capítulo, estudamos a abordagem de Burger [1], que é a mais completa no sentido que apresenta análise de convergência para o método proposto. Por fim, no último capítulo, mostramos dois experimentos numéricos relacionados com o problema do potencial inverso e com o problema de identificação de perfis de doping, realizados em [8] e [2], respectivamente.

Capítulo 1

Problemas inversos e regularização

Segundo J.B. Keller [14], dois problemas são ditos inversos um ao outro se a formulação de cada um deles envolve toda a, ou parte da, solução do outro. Frequentemente, por razões históricas, um dos dois problemas foi estudado extensivamente por algum tempo, enquanto o outro é novo e então, não muito bem compreendido. Pode-se dizer que um destes problemas, geralmente o mais simples ou o que foi estudado antes, é o problema direto e o outro, é o problema inverso. Contudo, para Engl *et al* [6], se existe um problema real por trás de um problema matemático estudado, existe, em muitos casos, uma distinção natural entre o problema direto e o inverso. Por exemplo, se alguém quer prever o comportamento de um sistema físico conhecendo seu estado atual e as leis físicas, este será dito o problema direto. Possivelmente, problemas inversos são a determinação do estado presente do sistema a partir de observações futuras (calcular a evolução do sistema para trás no tempo) ou a identificação de parâmetros físicos a partir de observações da evolução do sistema (identificação de parâmetros). Assim, pode-se dizer que problemas inversos estão relacionados com a determinação de causas para um efeito desejado ou observado.

Do ponto de vista das aplicações, existem diferentes motivações para estudar tais problemas inversos. Por exemplo, conhecer estados passados ou parâmetros de um sistema físico, ou saber como influenciar um sistema para que ele atinja um estado desejado no futuro.

Em geral, problemas inversos são não lineares, mesmo que o problema direto correspondente seja linear, e levam a modelos matemáticos que não são “bem postos” no sentido de Hadamard, segundo o qual, um problema matemático é bem posto se para todos os dados admissíveis

- (i) existe uma solução para o problema (existência)
- (ii) a solução é única (unicidade)
- (iii) a solução depende continuamente dos dados (estabilidade).

Se pelo menos uma destas propriedades não valer, o problema é dito mal posto.

A área de problemas inversos tem crescido muito nos últimos anos. Este crescimento deve-se à necessidade de aplicações tanto na ciência como, por exemplo, na medicina (tomografia computadorizada) e na geofísica (prospecção de petróleo), quanto na indústria.

Problemas inversos são geralmente representados por equações do tipo

$$F(u) = y, \tag{1.1}$$

onde F é um operador entre espaços de Hilbert X e Y . Em geral, F não é dado explicitamente e representa o operador que associa aos dados do problema o parâmetro a ser identificado (*parameter to output map*). No caso em que (1.1) tem uma única solução, a violação do item (iii) do critério de Hadamard é de especial importância, já que dependência descontínua dos dados, geralmente associada a problemas mal postos, causa sérias instabilidades numéricas. Se a solução de um problema não depende continuamente dos dados, em geral a solução calculada pode estar muito distante da solução verdadeira. Note que, na prática, o dado exato y não é conhecido precisamente, mas somente uma aproximação y^δ , não necessariamente em $F(X)$, com

$$\|y - y^\delta\| < \delta \tag{1.2}$$

está disponível, onde δ é dito nível de ruído. Para evitar estas instabilidades é necessário utilizar algum método de regularização.

De acordo com Engl *et al* [6], regularização, em termos gerais, é a aproximação de um problema mal posto por uma família de problemas bem postos. Assim, queremos uma aproximação u_α^δ da solução u^* , que dependa continuamente dos dados perturbados y^δ , podendo então ser calculada de uma maneira estável, e que, quando o nível de ruído δ decresce a zero, com o parâmetro de regularização α escolhido adequadamente, u_α^δ convirja para u^* . A escolha do parâmetro de regularização precisa ser feita de modo que se tenha equilíbrio entre estabilidade e precisão. Além disso, para construir aproximações para a solução u^* , é indispensável para qualquer método de regularização, conhecer um limite para a perturbação nos dados, ou seja, conhecer δ em (1.2).

Para construir uma técnica de regularização é preciso uma estratégia para escolha do parâmetro de regularização, a fim de conseguirmos uma aproximação estável e confiável para a solução u^* de (1.1), conforme [6] (ver também [16]). Existem dois tipos de regras para determinar o parâmetro de regularização: as regras *a priori*, onde o parâmetro depende somente do nível de ruído δ , e as regras *a posteriori*, nas quais o parâmetro depende também dos dados perturbados y^δ . Um critério *a posteriori* bastante natural é o princípio da discrepância, que escolhe o parâmetro baseado no fato, bastante razoável, que a qualidade dos resultados deve ser comparável com a qualidade dos dados, ver [10].

Discutiremos a seguir os problemas (1.1), os quais precisam ser regularizados para termos aproximações razoáveis para u^* , com $F : D(F) \subset X \rightarrow Y$, X e Y espaços de Hilbert, supondo que (1.1) tem uma solução u^* , a qual não precisa ser única. Denotaremos por F' a derivada de Fréchet de F e por $(F')^*$, seu adjunto.

1.1 Regularização de Tikhonov

A regularização de Tikhonov, que é o método mais conhecido, consiste em substituir o problema mal posto (1.1), com dados com ruído y^δ satisfazendo (1.2), pelo problema de minimizar o funcional

$$J_\alpha(u) = \|F(u) - y^\delta\|^2 + \alpha\|u - u_0\|^2, \quad u \in D(F), \quad (1.3)$$

sendo $\alpha > 0$ o parâmetro de regularização, $u_0 \in X$ uma aproximação inicial para a solução (desconhecida) u^* de (1.1) e $D(F) \subset X$ o domínio do operador direto F . O funcional J_α em (1.3) é dito o funcional de Tikhonov. Supondo que:

- (i) F é contínuo
- (ii) F é fracamente fechado, i.e., para qualquer seqüência $(u_n) \subset D(F)$, $u_n \rightharpoonup u$ em X e $F(u_n) \rightarrow y$ em Y implica que $u \in D(F)$ e $F(u) = y$,

o funcional de Tikhonov (1.3) admite uma solução u_α^δ , em geral não única. O problema de minimizar (1.3) é estável no sentido da dependência contínua das soluções em relação aos dados y^δ , ou seja, se (y_k) e (u_k) são seqüências tais que $y_k \rightarrow y^\delta$ e u_k é um minimizador de (1.3) com y_k no lugar de y^δ , então existe uma subseqüência de u_k convergente e o limite de qualquer subseqüência convergente é um minimizador de (1.3).

Ainda, se o parâmetro de regularização é escolhido em função do nível de ruído, de modo que $\alpha(\delta) \rightarrow 0$ e $\frac{\delta^2}{\alpha} \rightarrow 0$, quando $\delta \rightarrow 0$, então toda seqüência $(u_{\alpha_k}^{\delta_k})$, onde $\delta_k \rightarrow 0$, $\alpha_k = \alpha(\delta_k)$ e $u_{\alpha_k}^{\delta_k}$ é um minimizador de (1.3), tem uma subseqüência convergente e o limite de qualquer subseqüência convergente é uma u_0 -solução de norma mínima de (1.1). Uma u_0 -solução de norma mínima de (1.1), denotada por u^\dagger , satisfaz $F(u^\dagger) = y$ e $\|u^\dagger - u_0\| = \min\{\|u^* - u_0\|; F(u^*) = y\}$. Este conceito é utilizado para problemas não lineares, onde $u_0 = 0$, usado no caso linear, não tem um papel especial. Deste modo, u_0 passa a ter um certo poder de seleção sobre u^\dagger , no caso em que esta não é única.

Para o caso linear, os resultados de convergência para dados atingíveis (y na imagem de F) valem, sob as mesmas condições, para o caso de dados não atingíveis, onde o problema (1.1) é resolvido no sentido de quadrados mínimos. Para problemas não lineares, a condição $\frac{\delta^2}{\alpha} \rightarrow 0$ precisa ser trocada pela limitação de $\frac{\delta}{\alpha}$, que é uma condição mais forte, para garantir convergência para uma solução de quadrados mínimos e, trocada por

$\frac{\delta}{\alpha} \rightarrow 0$, para garantir convergência para uma u_0 -solução de norma mínima, no sentido de quadrados mínimos.

Uma desvantagem da regularização de Tikhonov é que, para problemas não lineares, o funcional de Tikhonov em geral não é convexo, admitindo assim mínimos locais, ou seja, não temos unicidade de solução. Para problemas lineares a teoria está bem desenvolvida. Mais informações podem ser encontradas em [6].

1.2 Iteração de Landweber

Neste método, uma aproximação regularizada u_N^δ da solução u^* é obtida pelo processo iterativo

$$u_{k+1}^\delta = u_k^\delta + F'(u_k^\delta)^*(y^\delta - F(u_k^\delta)), \quad k = 0, 1, \dots, N-1, \quad u_0^\delta = u_0, \quad (1.4)$$

onde o número de iterações N faz o papel do parâmetro de regularização e u_0 é uma aproximação adequada da solução u^* . Se F for não linear, conforme [11], exige-se que F seja Fréchet diferenciável, com derivada localmente uniformemente limitada e que, em uma bola $B_r(u_0)$ de raio r em torno de u_0 , tenha-se

$$\|F(u) - F(\tilde{u}) - F'(u)(u - \tilde{u})\| \leq \eta \|F(u) - F(\tilde{u})\|, \quad \eta < \frac{1}{2}, \quad u, \tilde{u} \in B_r(u_0) \subset D(F). \quad (1.5)$$

Mesmo no caso em que $y^\delta \notin F(X)$, u_k^δ em (1.4) ainda permite uma aproximação estável de u^* , desde que a iteração seja parada após $N = N(\delta)$ passos de acordo com o princípio da discrepância

$$\|y^\delta - F(u_N^\delta)\| \leq \tau \delta < \|y^\delta - F(u_k^\delta)\|, \quad 0 \leq k \leq N, \quad (1.6)$$

onde $\tau > 2\frac{1+\eta}{1-\eta} > 2$. Em outras palavras, devemos parar de iterar quando o resíduo $y^\delta - F(u_k^\delta)$ for aproximadamente da mesma ordem do ruído. Note que (1.6) determina um índice de parada bem definido $N < \infty$.

A condição (1.5), que é forte o suficiente para garantir pelo menos convergência local, garante que todas as iterações $u_k^\delta \in D(F)$, $0 \leq k \leq N$, o que torna a iteração (1.4) bem definida. Supondo ainda que

$$\|F'(u)\| \leq 1, \quad u \in B_r(u_0),$$

consegue-se uma certa monotonia do erro de iteração: se u^* é uma solução de (1.1) em $B_{\frac{r}{2}}(u_0)$ e N o índice final de iteração de acordo com o critério de parada (1.6), para o

caso de dados perturbados y^δ satisfazendo (1.2), tem-se

$$\|u^* - u_{k+1}^\delta\| \leq \|u^* - u_k^\delta\|, \quad 0 \leq k \leq N$$

e no caso em que $\delta = 0$,

$$\sum_{k=0}^{\infty} \|y - F(u_k)\|^2 < \infty.$$

Ainda, se (1.1) tem uma solução em $B_{\frac{r}{2}}(u_0)$, u_k converge para uma solução $u^* \in B_{\frac{r}{2}}(u_0)$ de (1.1) e, no caso de dados com ruído, usando (1.6) para parar a iteração perturbada, tem-se

$$u_N^\delta \rightarrow u^*, \quad \delta \rightarrow 0.$$

1.3 Regularização assintótica

O método da regularização assintótica é o análogo contínuo ao método de Landweber (1.4). Neste método uma aproximação regularizada $u^\delta(T)$ da solução u^* é obtida resolvendo o problema de valor inicial

$$\dot{u}^\delta(t) = F'(u^\delta(t))^*(y^\delta - F(u^\delta(t))), \quad 0 < t \leq T, \quad u^\delta(0) = u_0, \quad (1.7)$$

onde T faz o papel do parâmetro de regularização. Para $T < \infty$, obtém-se existência de uma única solução $u^\delta(t) \in C(0, T; X)$ de (1.7), se o operador $F'(u)^*(y^\delta - F(u))$ for localmente Lipschitz contínuo em X . Esta solução é denotada $u^\delta(T)$.

No caso linear, com $\delta = 0$, verifica-se facilmente que

$$\frac{d}{dT} \|u(T) - u^*\|^2 = -2\|F(u(T)) - y\|^2, \quad (1.8)$$

onde $u(T)$ é solução de (1.7) com $\delta = 0$. Esta é a principal propriedade da regularização assintótica que será usada para obter o método level set no Capítulo 4.

Para problemas mal postos não lineares, conforme [22], exige-se que F seja Fréchet diferenciável, com derivada localmente uniformemente limitada em uma bola $B_r(u_0)$ de raio r em torno de $u_0 \in X$. Assim, tem-se

$$\frac{d}{dT} \|F(u^\delta(T)) - y^\delta\|^2 = -2\|F'(u^\delta(T))^*(F(u^\delta(T)) - y^\delta)\|^2. \quad (1.9)$$

Supondo também que

$$\|F(\tilde{u}) - F(u) - F'(u)(\tilde{u} - u)\| \leq \eta \|F(u) - F(\tilde{u})\|, \quad \eta < 1, \quad u, \tilde{u} \in B_r(u_0) \subset D(F)$$

e que vale (1.2), mostra-se que

$$\frac{d}{dT} \|u^\delta(T) - u^*\|^2 \leq -2 \|F(u^\delta(T)) - y^\delta\| \left((1 - \eta) \|F(u^\delta(T)) - y^\delta\| - (1 + \eta) \delta \right), \quad (1.10)$$

sendo u^* uma solução de (1.1) em $B_r(u_0)$. No caso em que $\delta = 0$, vale

$$\int_0^\infty \|F(u(T)) - y\|^2 dT \leq \frac{1}{2(1 - \eta)} \|u^* - u_0\|^2.$$

A propriedade (1.9) mostra que a discrepância $\|F(u^\delta(T)) - y^\delta\|$ como uma função de T é monótona não crescente. Já (1.10) mostra que o erro $\|u^\delta(T) - u^*\|$, como função de T , é decrescente enquanto $\|F(u^\delta(T)) - y^\delta\| > \tau\delta$, com $\tau = \frac{1+\eta}{1-\eta}$. Assim, faz sentido escolher o parâmetro de regularização em (1.7) a partir do princípio da discrepância, ou seja, escolher T como uma solução da equação não linear

$$h(T) = \|F(u^\delta(T)) - y^\delta\| - \tau\delta = 0, \quad (1.11)$$

com $\tau > \frac{1+\eta}{1-\eta}$. Se $\|F(u_0) - y^\delta\| > \tau\delta > 0$ e u^* é uma solução de (1.1) em $B_r(u_0)$, então (1.11) tem uma única solução $T^* = T^*(\delta, y^\delta) < \infty$.

Com as hipóteses acima, se (1.1) tem uma solução em $B_r(u_0)$ então a solução regularizada $u(T)$ converge para uma solução $u^* \in B_r(u_0)$ de (1.1), quando $T \rightarrow \infty$ (convergência para dados exatos). No caso de dados com ruído, a solução regularizada $u^\delta(T^*)$ converge para uma solução $u^* \in B_r(u_0)$ de (1.1), quando $\delta \rightarrow 0$.

Capítulo 2

Abordagem level set para problemas inversos envolvendo obstáculos

Apresentamos neste capítulo a descrição do método level set proposta por Santosa em [20]. O método level set tratado aqui está ligado à identificação de parâmetros a partir de informações indiretas sobre os mesmos, sendo o parâmetro um domínio, i.e., um conjunto D contido em \mathbb{R}^2 ou \mathbb{R}^3 . Alternativamente, o parâmetro a ser identificado pode ser considerado como uma função característica. Tal problema pode ser posto como

encontre D na equação (1.1) tal que

$$u(x) = \begin{cases} u_{int}, & x \in D \\ u_{ext}, & x \notin D \end{cases}. \quad (2.1)$$

Aqui, y representa os dados e u um parâmetro do modelo. O operador F é uma aplicação do parâmetro nos dados do problema. Os valores u_{int} e u_{ext} são constantes conhecidas.

Consideramos, sem perda de generalidade, um problema bidimensional. Denominando por $D \subset \mathbb{R}^2$ o conjunto de interesse, a fronteira de D pode ser representada pela superfície de nível de uma função $\phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$, dita função level set. A fronteira de D pode ser descrita pela função ϕ como

$$\partial D = \{x \in \mathbb{R}^2; \phi(x) = 0\}.$$

Na abordagem level set, gera-se uma seqüência de funções ϕ_k tais que os correspondentes D_k satisfaçam

$$D_k \rightarrow D,$$

sendo $\partial D_k = \{x; \phi_k(x) = 0\}$. O parâmetro k pode ser considerado tanto contínuo, quanto discreto.

A função u em (2.1) pode ser associada à função level set ϕ da seguinte forma:

$$u(x) = \begin{cases} u_{int}, & \phi(x) \leq 0 \\ u_{ext}, & \phi(x) > 0 \end{cases}. \quad (2.2)$$

Algumas características deste modo de representar u com a função ϕ são:

- (i) não é necessário fazer hipóteses *a priori* sobre o conjunto D . Por exemplo, D pode ser constituído de várias componentes conexas.
- (ii) não é necessário fazer hipóteses *a priori* sobre a natureza de D . Por exemplo, freqüentemente encontra-se na literatura de espalhamento a hipótese que o domínio (obstáculo) tem forma estelar (star-shaped).
- (iii) usando esta descrição, um problema inverso linear torna-se não linear, devido à dependência não linear de u em relação à ϕ .

Com esta descrição, o problema inverso colocado acima torna-se

encontre ϕ em

$$u(x) = \begin{cases} u_{int}, & \phi(x) \leq 0 \\ u_{ext}, & \phi(x) > 0 \end{cases},$$

tal que

$$F(u) = y.$$

Descrevemos a seguir uma abordagem para encontrar ϕ em um tal problema. Ela baseia-se em uma equação de evolução, a saber, a equação de Hamilton-Jacobi. A motivação para propor esta abordagem está em sua flexibilidade em descrever obstáculos.

2.1 Cálculo formal de variações

Para encontrar a dependência da aplicação F em relação a perturbações na fronteira do obstáculo, é preciso calcular a variação de u causada por uma variação em ϕ . Seja x um ponto na curva $\partial D = \{x; \phi(x) = 0\}$. Supondo que ϕ é perturbada por uma pequena variação $\delta\phi$ e sendo δx a variação correspondente do ponto x , a região D transforma-se numa nova região, denotada por D' . O vetor unitário normal exterior à curva é

$$n(x) = \frac{\nabla\phi(x)}{|\nabla\phi(x)|}.$$

Considerando agora a variação δu de u no ponto x , supondo que a superfície está se movendo para fora, i.e., que o ponto $x + \delta x$ está na região onde antes tínhamos $\phi > 0$,

δu irá fazer com que u na região entre x e $x + \delta x$ torne-se u_{int} . Logo, nesta região $\delta u = u_{int} - u_{ext}$, a menos de sinal. Considerando o produto interno de δu com uma função teste f , temos

$$\langle \delta u, f \rangle := \int_{\mathbb{R}^2} \delta u(x) f(x) dx = \int_{D \Delta D'} \delta u(x) f(x) dx,$$

já que em $\mathbb{R}^2 \setminus (D \Delta D')$ temos $\delta u = 0$. Como δx é infinitesimal, o produto interno pode ser simplificado para

$$\langle \delta u, f \rangle = \int_{\partial D} (u_{int} - u_{ext}) \delta x \cdot n(x) f(x) ds(x),$$

onde $ds(x)$ é a taxa incremental de comprimento de arco. A expressão $\delta x \cdot n(x) ds(x)$ pode ser interpretada como a área incremental sobre a qual u varia em x . Assim, integrando sobre a fronteira de D , temos o produto interno de δu com f . Da última expressão podemos identificar δu como o produto de $(u_{int} - u_{ext})$ pela componente normal de δx , i.e.,

$$\delta u = (u_{int} - u_{ext}) \frac{\nabla \phi(x)}{|\nabla \phi(x)|} \cdot \delta x \Big|_{x \in \partial D}. \quad (2.3)$$

O produto $\frac{\nabla \phi(x)}{|\nabla \phi(x)|} \cdot \delta x$ induz o sinal correto para δu . Se a componente normal de δx estiver na mesma direção de $n(x)$, $\frac{\nabla \phi(x)}{|\nabla \phi(x)|} \cdot \delta x$ será positivo e δu terá o mesmo sinal que $(u_{int} - u_{ext})$ no ponto x . De outro modo, δu terá sinal oposto se a componente normal de δx estiver na direção oposta à normal $n(x)$.

2.2 Equação de evolução

Propõe-se resolver o problema inverso formulando uma equação de evolução para ϕ . A equação terá a propriedade que quando $t \rightarrow \infty$, a função ϕ e a função u associada em (2.2) convergem para uma solução do problema inverso. A função ϕ pode ser considerada uma função da variável espacial x e da variável temporal t . Tomando a variação formal da equação $\phi(x, t) = 0$, temos

$$\delta \phi + \nabla \phi \cdot \delta x = 0. \quad (2.4)$$

Usando a notação

$$D(t) = \{x \in \mathbb{R}^2; \phi(x, t) = 0\},$$

associa-se uma região $D(t)$ à $\phi(\cdot, t)$. O problema inverso será resolvido no sentido de quadrados mínimos, i.e., procura-se o minimizador do funcional

$$Q(u) := \frac{1}{2} \|F(u) - y\|_2^2. \quad (2.5)$$

A exigência mínima para a escolha da variação de ϕ é que Q seja uma função decrescente em relação a t . Inicialmente, supomos que cada ponto $x \in \partial D(t)$ move-se perpendicularmente à superfície $\partial D(t)$, i.e., a variação δx satisfaz

$$\delta x = \alpha(x, t) \frac{\nabla \phi(x, t)}{|\nabla \phi(x, t)|}. \quad (2.6)$$

Aqui, $\alpha(x, t)$ pode ser visto como a velocidade da superfície $\phi = 0$ em x no instante t . Substituindo esta expressão em (2.3), obtemos

$$\begin{aligned} \delta u &= (u_{int} - u_{ext}) \frac{\nabla \phi(x, t)}{|\nabla \phi(x, t)|} \cdot \alpha(x, t) \frac{\nabla \phi(x, t)}{|\nabla \phi(x, t)|} \Big|_{x \in \partial D(t)} \\ &= (u_{int} - u_{ext}) \alpha(x, t) \Big|_{x \in \partial D(t)}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

A derivada direcional de Q na direção δu é dada por

$$\delta Q(u) = \langle F'(u)^*(F(u) - y), \delta u \rangle.$$

Substituindo a forma de δu em (2.7) na expressão acima, obtemos

$$\delta Q(u) = \int_{\partial D(t)} F'(u)^*(F(u) - y) (u_{int} - u_{ext}) \alpha(x, t) ds(x). \quad (2.8)$$

Supondo, sem perda de generalidade, que $u_{int} > u_{ext}$, chegamos a uma escolha natural de α . Para que δQ seja negativa, escolhe-se

$$\alpha(x, t) \Big|_{\partial D(t)} = -F'(u)^*(F(u) - y) \Big|_{\partial D(t)}. \quad (2.9)$$

Para determinar a equação para $\delta \phi$, usamos (2.4) e (2.6):

$$\delta \phi = -\nabla \phi \cdot \delta x = -\nabla \phi \cdot \alpha \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|} = -\alpha |\nabla \phi|.$$

Qualquer α satisfazendo (2.9) produzirá uma variação $\delta \phi$ tal que $\delta Q \leq 0$. Escolhe-se α sendo

$$\alpha(x, t) = -F'(u)^*(F(u) - y), \quad x \in \mathbb{R}^2, \quad (2.10)$$

i.e., α é a extensão de $-F'(u)^*(F(u) - y) \Big|_{\partial D(t)}$. Isto leva a

$$\delta \phi = F'(u)^*(F(u) - y) |\nabla \phi|.$$

O problema de valor inicial para ϕ é uma equação de Hamilton-Jacobi,

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} + V \cdot \nabla \phi = 0 \\ \phi(\cdot, 0) = \phi_0 \end{cases}, \quad (2.11)$$

com

$$V = -F'(u)^*(F(u) - y) \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}.$$

A expectativa é que, começando de uma condição inicial ϕ_0 próxima da solução, a evolução descrita por (2.11) levará à solução do problema inverso. Nota-se que

- (i) A evolução é tal que Q é não crescente, ou seja, $\frac{\partial}{\partial t} Q(u) \leq 0$.
- (ii) Se uma solução u existe, i.e., $F(u) = y$, então $\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$ em u .
- (iii) Pode-se ver a evolução como um fluxo na direção de descida mais rápida para o funcional de quadrados mínimos Q .

Santosa enfatiza em [20], que não tem-se fundamentação teórica que garanta a convergência deste método. No entanto, a experiência computacional leva a crer que este método pode ser usado para calcular uma solução aproximada para o problema inverso (2.1).

Esta foi uma primeira investida com a intenção de resolver problemas inversos usando métodos level set. Depois dela, vários autores empenharam esforços neste caminho, conseguindo bons resultados. Dois deles são estudados neste trabalho, nos próximos capítulos.

Capítulo 3

Otimização restrita e métodos level set

Neste capítulo apresentamos as idéias de Leitão e Scherzer [17], relacionando métodos level set, apresentados no capítulo 1, com regularização restrita. O objetivo é resolver, para u , o problema (1.1) com u restrita à classe admissível $U := \{u; u = P(\phi), \phi \in \mathcal{D}(P)\}$. Este problema pode ser formulado como um problema sem restrição

$$F(P(\phi)) = y. \quad (3.1)$$

Assumindo que o problema (1.1) é mal posto, ele precisa ser regularizado para termos solução estável. Resultados clássicos sobre convergência e estabilidade de soluções regularizadas são aplicáveis se P é

- (i) linear e limitado ou
- (ii) não linear, contínuo e fracamente fechado.

A fim de relacionar regularização restrita e métodos level set, precisaremos considerar operadores P descontínuos. Neste caso, as ferramentas clássicas da teoria de regularização não são aplicáveis.

A teoria de regularização de Tikhonov para resolver (1.1), sem restrição, consiste em aproximar a solução de (1.1) pelo minimizador u_α do funcional de Tikhonov (1.3).

Se F for Fréchet diferenciável, derivando e igualando a zero, temos

$$\begin{aligned} 0 &= \langle F'(u), F(u) - y \rangle + \alpha \langle 1, u - u_0 \rangle \\ &= \langle 1, F'(u)^*(F(u) - y) \rangle + \alpha \langle 1, u - u_0 \rangle \\ &= F'(u)^*(F(u) - y) + \alpha(u - u_0). \end{aligned}$$

Se u_α é o minimizador, então

$$F'(u_\alpha)^*(F(u_\alpha) - y) + \alpha(u_\alpha - u_0) = 0. \quad (3.2)$$

A equação (3.2) é a condição de otimalidade para um minimizador do funcional de Tikhonov J_α . Adotando a notação $\Delta t := \frac{1}{\alpha}$, $u(\Delta t) := u_\alpha$ e $u(0) := u_0$, temos

$$F'(u(\Delta t))^*(F(u(\Delta t)) - y) + \frac{u(\Delta t) - u(0)}{\Delta t} = 0.$$

Assim, $u_\alpha = u(\Delta t)$ pode ser considerado como a solução de um passo de tempo implícito, com tamanho do passo $\Delta t = \frac{1}{\alpha}$ para resolver a equação de evolução

$$\frac{\partial u}{\partial t} = -F'(u)^*(F(u) - y), \quad (3.3)$$

que corresponde ao método da regularização assintótica [22].

Em [17] os autores mostram que o método da regularização assintótica para o problema inverso sem restrição (3.1), com P apropriado, é um método level set.

3.1 Método level set

Considera-se aqui o problema de otimização com restrição, de resolver (1.1) no conjunto das funções constantes por partes que atingem dois valores, os quais, por simplicidade, são fixados em 0 e 1. Exemplos típicos incluem problemas de identificação de parâmetros onde o valor 1 denota uma inclusão.

Sejam $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ limitado com fronteira Lipschitz e

$$\mathcal{P} := \{u; u = \chi_{\tilde{\Omega}}, \tilde{\Omega} \subset \Omega, \tilde{\Omega} \text{ aberto}, \partial\tilde{\Omega} \cap \partial\Omega = \emptyset\} \cap L^2(\Omega).$$

Assim, o problema inverso sem restrição consiste em resolver (3.1) com

$$P : H^1(\Omega) \rightarrow \mathcal{P} \\ \phi \mapsto \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \text{sgn}(\phi) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \begin{cases} 1, & \phi \geq 0 \\ -1, & \phi < 0 \end{cases}.$$

Supomos que $F : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ é Fréchet diferenciável. É possível considerar o operador F em outros espaços de Hilbert, como por exemplo, $F : H^1(\Omega) \rightarrow L^2(\partial\Omega)$. Como isso não faz qualquer diferença metodológica, F será considerado um operador em $L^2(\Omega)$. A escolha do espaço $H^1(\Omega)$ reflete a regularidade esperada das funções level set (no domínio de P).

A regularização de Tikhonov para este problema consiste em minimizar o funcional

$$\|F(P(\phi)) - y\|_{L^2}^2 + \alpha \|\phi - \phi_0\|_{H^1}^2,$$

i.e., minimizar

$$\int_{\Omega} (F(P(\phi)) - y)^2 + \alpha \int_{\Omega} ((\phi - \phi_0)^2 + |\nabla(\phi - \phi_0)|^2). \quad (3.4)$$

Como o funcional (3.4) pode não atingir um mínimo, já que P é descontínuo, é preciso generalizar a definição de minimizador de uma forma apropriada. Definimos

$$\phi_{\alpha} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \phi_{\varepsilon, \alpha},$$

onde $\phi_{\varepsilon, \alpha}$ minimiza o funcional

$$\int_{\Omega} (F(P_{\varepsilon}(\phi)) - y)^2 + \alpha \int_{\Omega} ((\phi - \phi_0)^2 + |\nabla(\phi - \phi_0)|^2). \quad (3.5)$$

Aqui, P_{ε} são aproximações para P . Escolhendo

$$P_{\varepsilon}(t) := \begin{cases} 0, & t < -\varepsilon \\ 1 + \frac{t}{\varepsilon}, & -\varepsilon \leq t \leq 0 \\ 1, & t > 0 \end{cases}$$

para aproximar P quando $\varepsilon \rightarrow 0^+$, tem-se

$$P'(t) := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} P'_{\varepsilon}(t) = \delta(t).$$

Aqui, $\delta(t)$ denota a δ -distribuição unidimensional. Definimos ainda

$$u_{\alpha} := \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} P_{\varepsilon}(\phi_{\varepsilon, \alpha}).$$

Não exige-se que $u_{\alpha} = P(\phi_{\alpha})$. Na seqüência, obtém-se uma condição de otimalidade para um minimizador de (3.4), o qual é considerado o limite, quando $\varepsilon \rightarrow 0^+$, dos minimizadores dos funcionais (3.5). Para este propósito, precisaremos de alguns resultados da teoria de Morse sobre superfícies e de um caso particular da fórmula da *co-area*. Aqui só será aplicada a teoria de Morse para subconjuntos compactos suaves de \mathbb{R}^2 , que é claro, podem ser considerados como superfícies.

Proposição 3.1.1 *Seja ϕ uma função suave em uma superfície compacta suave M e $\phi^{-1}[a, b] \subset M$ sem pontos críticos de ϕ . Então:*

(i) *os conjuntos de nível $\phi^{-1}(a)$ e $\phi^{-1}(b)$ são difeomorfos. Em particular, a medida de*

Hausdorff de $\phi^{-1}(\rho)$, $\rho \in [a, b]$, é contínua como função de ρ .

(ii) *para $\rho \in [a, b]$, $\phi^{-1}(\rho)$ é uma superfície compacta suave. Em particular, $\phi^{-1}(\rho)$ pode ser parametrizada por um número finito de curvas disjuntas.*

Demonstração. Ver [7], Proposição 6.2.1. □

Proposição 3.1.2 (Fórmula da co-area) *Sejam $\phi : \mathbb{R}^2 \rightarrow \mathbb{R}$ uma função Lipschitz contínua e $E \subset \mathbb{R}^2$ mensurável. Então,*

$$\int_E |\nabla \phi(x)| dx = \int_{\mathbb{R}} \mathcal{H}^1(E \cap \phi^{-1}(\rho)) d\rho, \quad (3.6)$$

onde \mathcal{H}^1 denota a medida de Hausdorff unidimensional.

Demonstração. Ver [18]. □

Lema 3.1.3 *Seja ϕ uma função suave sem pontos críticos em uma vizinhança compacta M do conjunto de nível $\phi^{-1}(0)$. Então*

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} P'_\varepsilon(\phi) = \frac{1}{|\nabla \phi|} \delta(\phi),$$

lembrando que $\delta(\phi)$ é a δ -distribuição unidimensional centrada na curva de nível zero de ϕ .

Demonstração. Faremos a prova adaptada para funções level set em dimensão dois. Pela Proposição 3.1.1, o conjunto de nível $\phi^{-1}(0)$ é uma superfície compacta que pode ser parametrizada por uma curva $s(\tau)$, $\tau \in [0, 2\pi)$, i.e.,

$$\phi^{-1}(0) := \{s(\tau) = (s_1(\tau), s_2(\tau)); \tau \in [0, 2\pi)\}.$$

Supõe-se que o conjunto de nível é parametrizado somente por uma curva para simplificar a apresentação. O caso geral de um número finito de curvas disjuntas é análogo. O vetor normal ao conjunto de nível é caracterizado como

$$n(\tau) = -\frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}(s(\tau)).$$

O sinal negativo na definição do vetor normal está baseado na seguinte consideração: se ϕ é monotonamente crescente na direção normal ao conjunto de nível, apontando para dentro do domínio limitado pelo conjunto de nível, então $n(\tau)$ como definido acima aponta para

fora deste domínio. A idéia básica da prova é encontrar uma relação entre um parâmetro ε e uma função paramétrica $\psi : [0, 2\pi) \rightarrow \mathbb{R}^+$ tal que os conjuntos

$$\Omega_\psi := \{s(\tau) + \rho n(\tau); \tau \in [0, 2\pi), \rho \in [0, \psi(\tau))\}$$

e $\phi^{-1}(-\varepsilon, 0]$ correspondam-se assintoticamente. Fazendo a expansão em série de Taylor tem-se

$$\begin{aligned} \phi(\Omega_\psi) &= \phi \left(\left\{ s(\tau) - \rho \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}(s(\tau)); \tau \in [0, 2\pi), \rho \in [0, \psi(\tau)) \right\} \right) \\ &= \left\{ \phi \left(s(\tau) - \rho \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}(s(\tau)) \right); \tau \in [0, 2\pi), \rho \in [0, \psi(\tau)) \right\} \\ &= \left\{ \phi(s(\tau)) - \rho \frac{\nabla \phi}{|\nabla \phi|}(s(\tau)) \nabla \phi(s(\tau)) + O(\rho^2); \tau \in [0, 2\pi), \rho \in [0, \psi(\tau)) \right\} \\ &= \left\{ -\rho |\nabla \phi|(s(\tau)) + O(\rho^2); \tau \in [0, 2\pi), \rho \in [0, \psi(\tau)) \right\}. \end{aligned}$$

Escolhendo $\psi(\tau) := \psi_\varepsilon(\tau) = \frac{\varepsilon}{|\nabla \phi(s(\tau))|}$ e fixando $C_{min} := \inf\{|\nabla \phi|(s(\tau)); \tau \in [0, 2\pi)\}$, existe uma constante C tal que

$$\Omega_- := \left[-\varepsilon + \varepsilon^2 \frac{C}{C_{min}^2}, -\varepsilon^2 \frac{C}{C_{min}^2} \right] \subset \phi(\Omega_\psi) \subset \left[-\varepsilon - \varepsilon^2 \frac{C}{C_{min}^2}, \varepsilon^2 \frac{C}{C_{min}^2} \right] =: \Omega_+.$$

Fixando $\tau = \frac{C}{C_{min}^2}$, para $v \in C(\bar{\Omega})$, segue pela fórmula da *co-area* (3.6), que

$$\begin{aligned} \left| \int_{\phi^{-1}(-\varepsilon, 0)} v - \int_{\Omega_\psi} v \right| &\leq \int_{\phi^{-1}(-\varepsilon, 0)} \sup |v| \frac{|\nabla \phi|}{|\nabla \phi|} + \int_{\Omega_\psi} \sup |v| \frac{|\nabla \phi|}{|\nabla \phi|} \\ &\leq \frac{\sup |v|}{C_{min}} \left[\int_{\phi^{-1}(-\varepsilon - \tau \varepsilon^2, -\varepsilon + \tau \varepsilon^2)} |\nabla \phi| + \int_{\phi^{-1}(-\tau \varepsilon^2, \tau \varepsilon^2)} |\nabla \phi| \right] \\ &\leq \frac{\sup |v|}{C_{min}} \left[\int_{-\varepsilon - \tau \varepsilon^2}^{-\varepsilon + \tau \varepsilon^2} \mathcal{H}^1(\phi^{-1}(\rho)) d\rho + \int_{-\tau \varepsilon^2}^{\tau \varepsilon^2} \mathcal{H}^1(\phi^{-1}(\rho)) d\rho \right], \end{aligned}$$

sendo $\mathcal{H}^1(\phi^{-1}(\rho))$ a medida de Hausdorff unidimensional do conjunto $\phi^{-1}(\rho)$.

Pela Proposição 3.1.1, $\mathcal{H}^1(\phi^{-1}(\rho))$ é uniformemente limitada. Isto implica que

$$\left| \int_{\phi^{-1}(-\varepsilon, 0)} v - \int_{\Omega_\psi} v \right| = O(\varepsilon^2)$$

e conseqüentemente,

$$\begin{aligned}
\lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\Omega} P'_\varepsilon(\phi)v &= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} \int_{\phi^{-1}(-\varepsilon, 0)} v = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{\varepsilon} \int_{\Omega_{\psi_\varepsilon}} v = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{\Omega_{\psi_\varepsilon}} \frac{1}{\psi_\varepsilon |\nabla \phi|} v \\
&= \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{2\pi} \frac{1}{|\nabla \phi|(s(\tau))} \frac{1}{\psi_\varepsilon(\tau)} \int_0^{\psi_\varepsilon} v \left| \det \begin{bmatrix} s'_1(\tau) + \rho n'_1(\tau) & n_1(\tau) \\ s'_2(\tau) + \rho n'_2(\tau) & n_2(\tau) \end{bmatrix} \right| d\rho d\tau \\
&= \int_{\Omega} \delta(\phi) \frac{v}{|\nabla \phi|}.
\end{aligned}$$

□

O Lema 3.1.3 é fundamental para obter a condição de otimalidade para um minimizador de (3.4). Como $\phi_{\varepsilon, \alpha}$ é um minimizador de (3.5), segue que, para todo $h \in H^1(\Omega)$,

$$\begin{aligned}
0 &= \int_{\Omega} (F(P_\varepsilon(\phi_{\varepsilon, \alpha})) - y) F'(P_\varepsilon(\phi_{\varepsilon, \alpha})) P'_\varepsilon(\phi_{\varepsilon, \alpha}) h + \alpha \int_{\Omega} \left((\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) h + \nabla(\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) \nabla h \right) \\
&= \int_{\Omega} (F(u_{\varepsilon, \alpha}) - y) F'(u_{\varepsilon, \alpha}) P'_\varepsilon(\phi_{\varepsilon, \alpha}) h + \alpha \int_{\Omega} \left((\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) h + \nabla(\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) \nabla h \right) \\
&= \int_{\Omega} P'_\varepsilon(\phi_{\varepsilon, \alpha}) F'(u_{\varepsilon, \alpha})^* (F(u_{\varepsilon, \alpha}) - y) h + \alpha \int_{\Omega} \left((\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) h - \Delta(\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) h \right) + \\
&\quad + \alpha \int_{\partial\Omega} \frac{\partial(\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*)}{\partial n} h
\end{aligned}$$

onde denotamos por $F'(u)^*$ e $P'_\varepsilon(\phi)^*$ os adjuntos de $F'(u)$ e $P'_\varepsilon(\phi)$ em $L^2(\Omega)$, respectivamente, i.e., $\forall v, w \in L^2(\Omega)$

$$\int_{\Omega} w(F'(u)v) = \int_{\Omega} (F'(u)^*w)v \quad \text{e} \quad \int_{\Omega} w(P'_\varepsilon(\phi)v) = \int_{\Omega} (P'_\varepsilon(\phi)^*w)v,$$

e usamos o fato de $P'_\varepsilon(\phi)$ ser autoadjunto, i.e., $P'_\varepsilon(\phi)^* = P'_\varepsilon(\phi)$. Segue que

$$\begin{cases} P'_\varepsilon(\phi_{\varepsilon, \alpha}) F'(u_{\varepsilon, \alpha})^* (F(u_{\varepsilon, \alpha}) - y) + \alpha(I - \Delta)(\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*) = 0, & \text{em } \Omega \\ \frac{\partial(\phi_{\varepsilon, \alpha} - \phi_*)}{\partial n} = 0, & \text{em } \partial\Omega \end{cases}. \quad (3.7)$$

Tomando o limite $\varepsilon \rightarrow 0^+$ em (3.7), segue do Lema 3.1.3 que $u_\alpha = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} u_{\varepsilon, \alpha}$ e $\phi_\alpha = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \phi_{\varepsilon, \alpha}$ satisfazem

$$\begin{aligned}
0 &= \frac{1}{|\nabla \phi_\alpha|} \delta(\phi_\alpha) F'(u_\alpha)^* (F(u_\alpha) - y) + \alpha(I - \Delta)(\phi_\alpha - \phi_*) \\
&= \delta(\phi_\alpha) \frac{F'(u_\alpha)^* (F(u_\alpha) - y)}{|\nabla \phi_\alpha|} + \alpha(I - \Delta)(\phi_\alpha - \phi_*). \quad (3.8)
\end{aligned}$$

Para simplificar a apresentação, supomos que o operador F é tal que $F'(u)^*(F(u) - y)$ é contínuo (em geral este pode não ser o caso, já que $F'(u)^*(F(u) - y) \in H^1(\Omega)$). Segue

de (3.8) que

$$(I - \Delta)^{-1} \left(\delta(\phi_\alpha) \frac{F'(u_\alpha)^*(F(u_\alpha) - y)}{|\nabla\phi_\alpha|} \right) + \alpha(\phi_\alpha - \phi_*) = 0.$$

Fazendo $\alpha = \frac{1}{\Delta t}$, $\phi_\alpha = \phi(t)$, $\phi_* = \phi(0)$ e $u_\alpha = u(t)$,

$$\frac{\phi(t) - \phi(0)}{\Delta t} = -(I - \Delta)^{-1} \left(\delta(\phi(t)) \frac{F'(u(t))^*(F(u(t)) - y)}{|\nabla\phi(t)|} \right).$$

Tomando o limite quando $\Delta t \rightarrow 0^+$, tem-se um método análogo ao da regularização assintótica:

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} = -(I - \Delta)^{-1} \left(\delta(\phi(t)) \frac{F'(u(t))^*(F(u(t)) - y)}{|\nabla\phi(t)|} \right). \quad (3.9)$$

Assim, o lado direito v de (3.9) é solução da equação:

$$\begin{cases} (I - \Delta)v = -\delta(\phi(t)) \frac{F'(u(t))^*(F(u(t)) - y)}{|\nabla\phi(t)|}, & \text{em } \Omega \\ \frac{\partial v}{\partial n} = 0, & \text{em } \partial\Omega \end{cases}.$$

A equação (3.9) é um método level set descrevendo a evolução da função level set ϕ . O conjunto de nível zero de ϕ descreve a fronteira do domínio a ser reconstruído.

A equação (3.9) é uma equação de Hamilton-Jacobi da forma

$$\frac{\partial\phi}{\partial t} + V \cdot \nabla\phi = 0,$$

com velocidade

$$V = \frac{(I - \Delta)^{-1} \left(\delta(\phi(t)) \frac{F'(u(t))^*(F(u(t)) - y)}{|\nabla\phi(t)|} \right) \nabla\phi(t)}{|\nabla\phi(t)|}.$$

que é similar ao método level set considerado por Santosa em [20], o qual sugeriu a velocidade

$$V = -F'(u(t))^*(F(u(t)) - y) \frac{\nabla\phi(t)}{|\nabla\phi(t)|}.$$

Capítulo 4

Regularização assintótica e métodos level set

Neste capítulo estudamos o método level set proposto por Burger em [1]. O objetivo é construir um método level set similar aos demais, baseado em uma teoria matemática rigorosa. Além de mostrar que o método desenvolvido converge na ausência de ruído, também mostramos que ele é um método de regularização para problemas mal postos se o tempo de parada é escolhido apropriadamente, em função do nível de ruído. Consideramos u uma função característica, já que todo problema onde u assume dois valores diferentes, conhecidos, pode ser transformado neste caso. A velocidade será escolhida em função do resíduo $F(u) - y$, para obter um método de descida, idéia que também foi usada por Santosa em [20]. A diferença é que não existe resultado de convergência para o método proposto por Santosa.

O ponto de partida para construir um método level set para o problema (1.1) é explorar semelhanças com o método da regularização assintótica, o qual consiste em resolver a equação diferencial

$$\frac{d}{dt}u(t) = -F'(u(t))^*(Fu(t) - y), \quad (4.1)$$

para $t \in \mathbb{R}^+$. Utilizaremos como guia uma propriedade básica da regularização assintótica no caso linear, a saber, a identidade

$$\frac{d}{dt}\|u(t) - u^*\|^2 = -2\|Fu(t) - y\|^2, \quad (4.2)$$

onde u^* é uma solução de (1.1). Este método não pode ser aplicado diretamente para construir uma evolução de funções constantes por partes, já que a derivada de u em relação à t não está definida em L^2 .

Veremos que um método level set satisfazendo (4.2) pode ser analisado de maneira similar à regularização assintótica. Traduziremos as propriedades regularizantes de (4.1)

para esta abordagem level set no caso de dados com ruído, ou seja, quando conhecemos somente uma perturbação y^δ de y com uma estimativa do ruído dada por (1.2). O efeito regularizante vem de parar a evolução em algum tempo final T escolhido em função do nível de ruído δ e do dado com ruído y^δ . O método padrão para escolher o tempo de parada T^* na regularização assintótica é o princípio da discrepância, o qual escolhe T^* como o tempo mínimo em que o resíduo é menor que o nível de ruído. Veremos que o princípio da discrepância também pode ser usado para métodos level set.

4.1 Escolha da velocidade

Consideremos a equação (1.1), onde $F : L^2(\Omega) \rightarrow Y$, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ limitado, é um operador linear limitado com inversa generalizada não limitada e Y é um espaço de Hilbert. Usaremos A em lugar de F , que é a notação usual para operadores lineares, ou seja, escreveremos o problema (1.1) como

$$Au = y. \quad (4.3)$$

Procuramos por uma solução u , que supomos ser constante por partes, i.e., da forma de uma função característica e denotamos

$$u(\cdot, t) = \chi_{D(t)}, \quad \text{onde } D(t) = \{x \in \mathbb{R}^d; \phi(x, t) \geq 0\}. \quad (4.4)$$

Supomos ainda, que existe uma função $u^* = \chi_D$, solução de (4.3), com $D \subset\subset \Omega$.

A diferença entre a função característica u e a solução u^* , no tempo t , na norma L^2 , pode ser calculada como

$$E(t) = \|u(\cdot, t) - u^*\|_{L^2(\Omega)}^2 = \int_{D(t) \Delta D} 1 dx = d_S(D(t), D), \quad (4.5)$$

onde d_S denota a distância de dois conjuntos na métrica da diferença simétrica, i.e.,

$$d_S(D(t), D) = |D(t) - D| + |D - D(t)|.$$

A estimativa (4.2) na evolução da distância entre $u(\cdot, t)$ e u^* é fundamental para a análise de convergência da regularização assintótica [22]. O correspondente aqui é calcular a derivada do funcional E em relação ao tempo. Para isso precisamos da proposição a seguir.

Proposição 4.1.1 *Sejam $\psi \in C^1(\mathbb{R}^d)$ e $D(t) = F_t(D)$, em que D é um conjunto mensurável dado e F_t é a transformação de conjuntos de acordo com a velocidade $V \in C(0, T; C^1(\mathbb{R}^d))^d$. Então, o funcional*

$$t \rightarrow \int_{D(t)} \psi(x) dx$$

é diferenciável em relação a t e sua derivada é dada por

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{D(t)} \psi(x) dx \right) = \int_{D(t)} \operatorname{div}_x (\psi(x)V(x, t)) dx. \quad (4.6)$$

Demonstração. A demonstração pode ser encontrada em [21], Proposição 2.45. \square

Como desejamos uma classe de velocidades mais geral, precisamos fazer uma extensão da Proposição 4.1.1.

Proposição 4.1.2 *Seja $V_n \in C(0, T; C^1(\mathbb{R}^d))^d \cap C(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))^d$ uma seqüência de velocidades tal que $V_n \rightarrow V$ e $\operatorname{div} V_n \rightarrow \operatorname{div} V$ em $L^2(\mathbb{R}^d \times (0, T))$, para alguma velocidade $V \in L^\infty(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))^d$ com $\operatorname{div} V \in L^1(0, T; L^\infty(\mathbb{R}^d)) \cap L^\infty(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))$. Então, o funcional*

$$\ell : t \rightarrow \int_{\mathbb{R}^d} u(x, t) dx,$$

em que a função característica u é uma solução fraca de

$$\frac{\partial u}{\partial t} + V \cdot \nabla u = 0, \quad \text{em } \mathbb{R}^d \times (0, T) \quad (4.7)$$

com valor inicial $u(\cdot, 0) = \chi_D(\cdot)$, para algum conjunto mensurável D , é fracamente diferenciável com

$$\frac{d}{dt} \ell(t) = \int_{\mathbb{R}^d} u(x, t) \operatorname{div} V(x, t) dx \quad (4.8)$$

para $t \in (0, T)$ q.s.

Demonstração. Definimos $D_n(t) := F_t^n(D)$, onde F_t^n é a transformação de conjuntos de acordo com a velocidade V_n , e $u_n(\cdot, t) := \chi_{D_n(t)}(\cdot)$. Então, segue com a Proposição 4.1.1 que u_n é a solução fraca de

$$\frac{\partial v}{\partial t} + V_n \cdot \nabla v = 0, \quad \text{em } \mathbb{R}^d \times (0, T)$$

com valor inicial $v(\cdot, 0) = \chi_D(\cdot)$. Conforme apêndice no final deste capítulo, $u_n \rightharpoonup u$ em $L^2(\mathbb{R}^d \times (0, T))$, onde u é uma função característica e a única solução fraca de (4.7) com valor inicial $u(\cdot, 0) = \chi_D(\cdot)$. Denotando por ℓ_n o funcional

$$\ell_n : t \rightarrow \int_{\mathbb{R}^d} u_n(x, t) dx,$$

temos que $\frac{d}{dt} \ell_n(t) = \int_{\mathbb{R}^d} u_n(x, t) \operatorname{div} V_n(x, t) dx$, i.e., $\ell_n \in C^1([0, T])$ devido à Proposição

4.1.1 e

$$\begin{aligned}
\langle \ell_n - \ell, h \rangle_{L^2(0,T)} &= \int_0^T h(t) \left[\int_{\mathbb{R}^d} (u_n(x,t) - u(x,t)) dx \right] dt \\
&= \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} 1h(t)(u_n(x,t) - u(x,t)) dx dt \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^T 1h(t)(u_n(x,t) - u(x,t)) dt dx \\
&\rightarrow 0,
\end{aligned}$$

já que $u_n \rightarrow u$ e $1h(t) \in L^2(\mathbb{R}^d \times (0, T))$. Logo, $\ell_n \rightarrow \ell$ em $L^2([0, T])$. Ainda,

$$\begin{aligned}
\lim_n \frac{d}{dt} \ell_n(t) &= \lim_n \int_{\mathbb{R}^d} u_n(x,t) \operatorname{div} V_n(x,t) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \lim_n u_n(x,t) \operatorname{div} (\lim_n V_n(x,t)) dx \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} u(x,t) \operatorname{div} V(x,t) dx =: \ell'(t)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\left\langle \frac{d}{dt} \ell_n - \ell', h \right\rangle_{L^2(0,T)} &= \int_0^T h(t) \left[\int_{\mathbb{R}^d} (u_n(x,t) \operatorname{div} V_n(x,t) - u(x,t) \operatorname{div} V(x,t)) dx \right] dt \\
&= \int_0^T \int_{\mathbb{R}^d} 1h(t)(u_n(x,t) \operatorname{div} V_n(x,t) - u(x,t) \operatorname{div} V(x,t)) dx dt \\
&= \int_{\mathbb{R}^d} \int_0^T 1h(t)(u_n(x,t) \operatorname{div} V_n(x,t) - u(x,t) \operatorname{div} V(x,t)) dt dx \\
&\rightarrow 0,
\end{aligned}$$

pois se $u_n \rightarrow u$ e $\operatorname{div} V_n \rightarrow \operatorname{div} V$, então $u_n \operatorname{div} V_n \rightarrow u \operatorname{div} V$ e $1h(t) \in L^2(\mathbb{R}^d \times (0, T))$. Portanto, $\frac{d}{dt} \ell_n \rightarrow \ell'$ em $L^2([0, T])$, com $\ell'(t) := \int_{\mathbb{R}^d} u(x,t) \operatorname{div} V(x,t) dx$.

Então, temos $\ell \in L^2([0, T])$, $\ell_n \rightarrow \ell$ em $L^2([0, T])$ e $\frac{d}{dt} \ell_n \rightarrow \ell'$ em $L^2([0, T])$. Isto implica que $\ell_n \rightarrow \ell$ em $H^1([0, T])$, que é fechado. Assim, ℓ_n é fracamente convergente em $H^1([0, T])$ e portanto, temos $\ell \in H^1([0, T])$ e $\frac{d}{dt} \ell = \ell'$. Como $u \in L^\infty(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))$, conforme apêndice, e $\operatorname{div} V \in L^\infty(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))$, temos que $\frac{d}{dt} \ell \in L^\infty([0, T])$. Logo, a identidade (4.8) vale para $t \in [0, T]$ q.s. \square

Como consequência direta da Proposição 4.1.2 obtemos que

$$\frac{d}{dt} \int_{D(t)-\Omega} 1 dx = \int_{D(t)-\Omega} \operatorname{div} V(x,t) dx = 0, \quad \text{para } t \in [0, T] \text{ q.s.},$$

se o suporte de $\operatorname{div} V$ é um subconjunto de Ω . Assim, modificando a função característica

u em conjuntos de medida nula, podemos construir conjuntos $D(t) \subset \Omega$ para $t \in [0, T]$ q.s. Na seqüência será sempre denotado por u uma função característica tal que $D(t) \subset \Omega$.

Usando a Proposição 4.1.2, podemos calcular as derivadas em relação a t :

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{D(t)-D} 1 dx \right) &= \int_{D(t)-D} \operatorname{div} V(x, t) dx \\ &= \int_{D(t)} (u(x, t) - u^*(x)) \operatorname{div} V(x, t) dx \end{aligned} \quad (4.9)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\int_{D-D(t)} 1 dx \right) &= \int_{D-D(t)} \operatorname{div} V(x, t) dx \\ &= \int_{\Omega-D(t)} (u^*(x) - u(x, t)) \operatorname{div} V(x, t) dx. \end{aligned} \quad (4.10)$$

Proposição 4.1.3 *Sejam g a função definida por*

$$g(x, t) := (-1 + 2u(x, t)) \operatorname{div} V(x, t), \quad \forall x \in \Omega,$$

com V como na Proposição 4.1.2, a função level set ϕ evoluindo de acordo com (2.11) e u escolhida de acordo com (4.4). Então, a derivada do funcional E em relação ao tempo é dada por

$$\frac{d}{dt} E(t) = \int_{\Omega} (u(x, t) - u^*(x)) g(x, t) dx,$$

para todo $t \in \mathbb{R}^+$.

Demonstração. De (4.5), (4.9) e (4.10), concluímos que

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} E(t) &= \frac{d}{dt} \int_{D(t) \Delta D} 1 dx = \frac{d}{dt} \int_{(D(t)-D) \dot{\cup} (D-D(t))} 1 dx \\ &= \frac{d}{dt} \left(\int_{D(t)-D} 1 dx + \int_{D-D(t)} 1 dx \right) = \frac{d}{dt} \int_{D(t)-D} 1 dx + \frac{d}{dt} \int_{D-D(t)} 1 dx \\ &= \int_{D(t)} (u(x, t) - u^*(x)) \operatorname{div} V(x, t) dx + \int_{\Omega-D(t)} (u^*(x) - u(x, t)) \operatorname{div} V(x, t) dx \\ &= \int_{D(t)} (u(x, t) u^*(x)) g(x, t) dx + \int_{\Omega-D(t)} (u(x, t) - u^*(x)) g(x, t) dx \\ &= \int_{D(t) \dot{\cup} (\Omega-D(t))} (u(x, t) - u^*(x)) g(x, t) dx \\ &= \int_{\Omega} (u(x, t) - u^*(x)) g(x, t) dx, \end{aligned}$$

pois $g(x, t)|_{D(t)} = \operatorname{div} V(x, t)|_{D(t)}$ e $g(x, t)|_{\Omega-D(t)} = -\operatorname{div} V(x, t)|_{\Omega-D(t)}$. □

Conseqüentemente, para obter um fluxo na direção de descida que satisfaça a estimativa (4.2), possivelmente com uma escala diferente, temos que escolher a velocidade V tal que

$$\operatorname{div}V(x, t) = g(x, t)(-1 + 2u(x, t)) = -A^*(Au(x, t) - y(x))(-1 + 2u(x, t)) \quad (4.11)$$

em $\Omega \times \mathbb{R}^+$. Como o suporte de u deve continuar sendo um subconjunto de $\bar{\Omega}$ durante a evolução, parece adequado escolher

$$\operatorname{div}V(x, t) = 0, \quad \forall x \in \mathbb{R}^d \setminus \Omega, \quad (4.12)$$

que implica $D(t) \subset \Omega$, como visto acima. Se denotarmos por P_Ω o operador de extensão de $L^2(\Omega)$ em $L^2(\mathbb{R}^d)$ definido por

$$P_\Omega[v](x) = \begin{cases} v(x), & x \in \Omega \\ 0, & x \notin \Omega \end{cases},$$

podemos reescrever (4.11) e (4.12) como

$$\operatorname{div}V = P_\Omega[-A^*(Au - y)](-1 + 2u). \quad (4.13)$$

Note que uma função V com a propriedade (4.13) sempre existe: por exemplo, podemos escolher

$$\nabla\psi - V = 0$$

em \mathbb{R}^d com $\psi(x) \rightarrow 0$ quando $|x| \rightarrow 0$, o que significa que ψ é justamente a única solução do problema de Dirichlet para a equação de Laplace com lado direito como em (4.13) em \mathbb{R}^d , e V é seu gradiente. Escreveremos $-A^*(Au - y)$ em vez de $P_\Omega[-A^*(Au - y)]$.

4.2 Análise de convergência

Na seqüência, voltamos nossa atenção para a análise de convergência do método level set quando $t \rightarrow \infty$ e $\delta \rightarrow 0$. Começamos com o caso de dados exatos, $\delta = 0$. Para dados com ruído, $\delta > 0$, temos que parar a iteração em algum tempo finito T , que deve depender de δ e y^δ . Escolhemos o tempo de parada pelo princípio da discrepância generalizado:

$$T(\delta, y^\delta) = \inf\{t \in \mathbb{R}^+; \|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\| \leq \tau\delta\}, \quad (4.14)$$

para algum $\tau > 1$. A razão por trás deste critério de parada é que conhecendo o nível de ruído, não faz sentido distinguir entre aproximações u que já produzem um resíduo menor que o nível de ruído. O ponto de partida para a análise de convergência é um resultado mais geral sobre a monotonia das iterações com e sem ruído. Para diferenciar as evoluções com dados exatos e com ruído, denotamos a evolução com dados perturbados y^δ por $u^\delta(\cdot, t)$ e $D^\delta(t)$.

Proposição 4.2.1 *Para todo $t \in \mathbb{R}^+$ com $\|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\| > \delta$, o erro é decrescente, i.e.,*

$$\frac{d}{dt}E^\delta(t) < 0. \quad (4.15)$$

Para $\delta = 0$, temos

$$\int_0^\infty \|Au(\cdot, t) - y\|^2 < \infty. \quad (4.16)$$

Demonstração. Da Proposição 4.1.3 obtemos

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}E^\delta(t) &= \frac{d}{dt}\|u^\delta(\cdot, t) - u^*\|_{L^p(\Omega)}^p = \int_\Omega (u^\delta(\cdot, t) - u^*)g(x, t)dx \\ &= - \int_\Omega (u^\delta(\cdot, t) - u^*)A^*(Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta)dx \\ &= - \int_\Omega A(u^\delta(\cdot, t) - u^*)(Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta)dx \\ &= - \langle Au^\delta(\cdot, t) - y, Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta \rangle_{L^2(\Omega)} \\ &= - \langle Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta + y^\delta - y, Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta \rangle \\ &= - \langle Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta, Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta \rangle + \langle y - y^\delta, Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta \rangle \\ &\leq -\|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\|^2 + \|y - y^\delta\|\|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\| \\ &\leq -\|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\|^2 + \delta\|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\|. \end{aligned}$$

Assim, $\frac{d}{dt}E^\delta(t) < 0$, para $\delta < \|Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta\|$. No caso particular em que $\delta = 0$, temos $\frac{d}{dt}E(t) = -\langle Au(\cdot, t) - y, Au(\cdot, t) - y \rangle = -\|Au(\cdot, t) - y\|^2$. Integrando em relação a t , obtemos

$$\begin{aligned} \int_0^s \|Au(\cdot, t) - u^*\|^2 dt &= - \int_0^s \frac{d}{dt}E(t) dt = -E(t)|_0^s \\ &= E(0) - E(s) \leq E(0) < \infty, \quad \forall s \in \mathbb{R}^+, \end{aligned}$$

já que $E \geq 0$. □

Acima, estimamos o decrescimento do erro entre u e u^* , o qual pode ser interpretado como o produto interno, em L^2 , de $u - u^*$ com ele próprio. No lema a seguir mostraremos

como o produto interno de u com uma função característica arbitrária evolui no tempo.

Lema 4.2.2 *Seja χ_C a função característica do domínio C . Então a função*

$$t \rightarrow \langle u^\delta(\cdot, t), \chi_C \rangle = \int_{D^\delta(t) \cap C} 1 dx$$

é continuamente diferenciável com derivada

$$\frac{d}{dt} \langle u^\delta(\cdot, t), \chi_C \rangle = \langle A(\chi_C - u^\delta(\cdot, t)), Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta \rangle. \quad (4.17)$$

Demonstração. Reescrevemos a função como

$$\langle u^\delta(\cdot, t), \chi_C \rangle = \int_{D^\delta(t) \cap C} 1 dx = \int_C 1 dx - \int_{C - D^\delta(t)} 1 dx - \int_{D^\delta(t) - C} 1 dx.$$

Pela Proposição 4.1.2, os três termos são diferenciáveis, com derivadas

$$\frac{d}{dt} \int_C 1 dx = 0,$$

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{C - D^\delta(t)} 1 dx &= \int_{C - D^\delta(t)} \operatorname{div} V dx = \int_{\Omega - D^\delta(t)} \chi_C \operatorname{div} V dx \\ &= \int_{\Omega - D^\delta(t)} (\chi_C - u^\delta(\cdot, t)) \operatorname{div} V dx \\ &= - \int_{\Omega - D^\delta(t)} (\chi_C - u^\delta(\cdot, t)) A^* (Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) (-1 + 2u^\delta(\cdot, t)) dx \\ &= - \int_{\Omega - D^\delta(t)} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) A^* (Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) dx \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \int_{D^\delta(t) - C} 1 dx &= \int_{D^\delta(t) - C} \operatorname{div} V dx = \int_{D^\delta(t)} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) \operatorname{div} V dx \\ &= - \int_{D^\delta(t)} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) A^* (Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) (-1 + 2u^\delta(\cdot, t)) dx \\ &= - \int_{D^\delta(t)} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) A^* (Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) dx. \end{aligned}$$

Assim, a função $t \rightarrow \langle u^\delta(\cdot, t), \chi_C \rangle$ é continuamente diferenciável, com derivada

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\langle u^\delta(\cdot, t), \chi_C \rangle &= 0 + \int_{\Omega - D^\delta(t)} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) A^*(Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) dx + \\
&\quad + \int_{D^\delta(t)} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) A^*(Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) dx \\
&= \int_{\Omega} (u^\delta(\cdot, t) - \chi_C) A^*(Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) dx \\
&= \langle u^\delta(\cdot, t) - \chi_C, A^*(Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta) \rangle \\
&= \langle A(u^\delta(\cdot, t) - \chi_C), Au^\delta(\cdot, t) - y^\delta \rangle.
\end{aligned}$$

□

De modo análogo à monotonia do erro na Proposição 4.2.1 podemos mostrar a monotonia do resíduo.

Lema 4.2.3 *A função $t \rightarrow \|Au(\cdot, t) - y\|$ é monótona decrescente.*

Usando os resultados preliminares obtidos acima podemos agora provar a convergência dos conjuntos na métrica da diferença simétrica.

Teorema 4.2.4 (Convergência para dados exatos) *Sejam $\delta = 0$ e V satisfazendo (4.13). Então $u(\cdot, t) \rightarrow \hat{u}$, quando $t \rightarrow \infty$, onde \hat{u} é solução de (4.3).*

Demonstração. Seja $u_t := u(\cdot, t)$. A monotonia e a continuidade, em relação a t , do resíduo $\|Au_t - y\|$ juntamente com (4.16) implicam que $\|Au_t - y\| \rightarrow 0$, quando $t \rightarrow \infty$. Mostramos agora que u_t converge. Para $t > s$ arbitrário,

$$\begin{aligned}
\|u_t - u_s\|^2 &= \|u_t - u^* + u^* - u_s\|^2 = 2\|u_t - u^*\|^2 + 2\|u^* - u_s\|^2 - \|u_t - u^* - u^* - u_s\|^2 \\
&= 2\|u_t - u^*\|^2 + 2\|u^* - u_s\|^2 - \|u_t - u^*\|^2 - \|u_s - u^*\|^2 - 2\langle u_t - u^*, u_s - u^* \rangle \\
&= \|u_s - u^*\|^2 + \|u_t - u^*\|^2 - 2\langle u_t - u^*, u_s - u^* \rangle \\
&= \|u_s - u^*\|^2 - \|u_t - u^*\|^2 + 2\langle u_t - u^*, u_t - u^* \rangle - 2\langle u_t - u^*, u_s - u^* \rangle \\
&= \|u_s - u^*\|^2 - \|u_t - u^*\|^2 + 2\langle u_t - u^*, u_t - u^* - u_s + u^* \rangle \\
&= \|u_s - u^*\|^2 - \|u_t - u^*\|^2 + 2\langle u_t - u^*, u_t - u_s \rangle.
\end{aligned}$$

Como E é monótono e limitado, existe $\varepsilon \geq 0$ tal que $u_t - u^* \rightarrow \varepsilon$, $t \rightarrow \infty$ ($E \geq 0$, decrescente). Pelo Lema 4.2.2,

$$\begin{aligned}
\frac{d}{d\tau}\langle u_\tau, u_t - u^* \rangle &= \frac{d}{d\tau}\langle u_\tau, u_t \rangle - \frac{d}{d\tau}\langle u_\tau, u^* \rangle \\
&= \langle A(u_t - u_\tau), Au_\tau - y \rangle - \langle A(u^* - u_\tau), Au_\tau - y \rangle \\
&= \langle A(u_t - u_\tau - u^* + u_\tau), Au_\tau - y \rangle \\
&= \langle A(u_t - u^*), Au_\tau - y \rangle.
\end{aligned}$$

Daí,

$$\begin{aligned}
|\langle u_t - u_s, u_t - u^* \rangle| &= \left| \int_s^t \frac{d}{d\tau} \langle u_\tau, u_t - u^* \rangle d\tau \right| = \left| \int_s^t \langle A(u_t - u^*), Au_\tau - y \rangle d\tau \right| \\
&\leq \int_s^t |\langle A(u_t - u^*), Au_\tau - y \rangle| d\tau \leq \int_s^t \|A(u_t - y)\| \|Au_\tau - y\| d\tau \\
&\leq \int_s^t \|Au_\tau - y\|^2 d\tau \leq \int_s^\infty \|Au_\tau - y\|^2 d\tau,
\end{aligned}$$

pois $\tau \leq t$ implica $\|Au_t - y\| \leq \|Au_\tau - y\|$, pelo Lema 4.2.3.

Por (4.16), $\int_s^\infty \|Au_\tau - y\|^2 d\tau \rightarrow 0$, quando $s \rightarrow \infty$. Assim, para $s \rightarrow \infty$ e $t > s$ arbitrário, $\|u_t - u_s\|^2 \rightarrow \varepsilon^2 - \varepsilon^2 + 0 = 0$. Logo, u_t converge para alguma função \hat{u} que satisfaz $A\hat{u} = y$, pois $Au_t \rightarrow y$, $\|Au_t - y\| \rightarrow 0$, e $Au_t \rightarrow A\hat{u}$, $u_t \rightarrow \hat{u}$. \square

Investigaremos agora o comportamento das iterações na presença de ruído. Primeiro mostramos que o tempo de parada $T(\delta, f^\delta)$ é sempre finito se δ é não nulo.

Lema 4.2.5 *Sejam $\delta > 0$ e $\tau > 1$. Então, o tempo de parada $T(\delta, y^\delta)$ definido por (4.14) é finito.*

Demonstração. Seja $u_t^\delta := u^\delta(\cdot, t)$. Suponha $T(\delta, y^\delta) = \infty$. Então, $\|Au_t^\delta - y^\delta\| > \tau\delta$, $\forall t \in \mathbb{R}^+$. Da prova da Proposição 4.2.1, obtemos

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} E^\delta(t) &= -\langle Au_t^\delta - y, Au_t^\delta - y^\delta \rangle = -\langle Au_t^\delta - y^\delta + y^\delta - y, Au_t^\delta - y^\delta \rangle \\
&= -\langle Au_t^\delta - y^\delta, Au_t^\delta - y^\delta \rangle + \langle y - y^\delta, Au_t^\delta - y^\delta \rangle \\
&\leq -\|Au_t^\delta - y^\delta\|^2 + \|y - y^\delta\| \|Au_t^\delta - y^\delta\| \\
&\leq -\|Au_t^\delta - y^\delta\|^2 + \delta \|Au_t^\delta - y^\delta\| \\
&\leq -\|Au_t^\delta - y^\delta\| (\|Au_t^\delta - y^\delta\| - \delta) \leq -\tau\delta (\|Au_t^\delta - y^\delta\| - \delta) \\
&= \tau\delta (-\|Au_t^\delta - y^\delta\| + \delta) \leq \tau\delta (-\tau\delta + \delta) = -\tau(\tau - 1)\delta^2.
\end{aligned}$$

Assim,

$$E^\delta(t) = E^\delta(0) + \frac{d}{dt} E^\delta(t)t \leq E^\delta(0) - \tau(\tau - 1)\delta^2 t,$$

o que implica a existência de $\bar{t} \in \mathbb{R}^+$ tal que $E^\delta(\bar{t}) < 0$, se $\delta > 0$ e $\tau > 1$. Isto é uma contradição, já que $E^\delta(t) \geq 0$, $\forall t \in \mathbb{R}^+$. Logo, o tempo de parada $T(\delta, y^\delta)$ é finito. \square

Tendo verificado que o tempo de parada é finito, resta somente mostrar que os conjuntos reconstruídos, obtidos neste tempo de parada $T(\delta, y^\delta)$, realmente convergem para uma solução quando o nível de ruído δ tende a zero.

Teorema 4.2.6 *Sejam T escolhido pelo princípio da discrepância com $\tau > 1$ e D^δ a*

evolução de conjuntos com nível de ruído δ . Então, $D^\delta(T(\delta, y^\delta)) \rightarrow \hat{D}$ quando $\delta \rightarrow 0$ na métrica da diferença simétrica, onde $\chi_{\hat{D}}$ é solução de (4.3).

Demonstração. Sejam $\delta_n \rightarrow 0$, $y_n := y^{\delta_n}$ e $D_n := D^{\delta_n}$ a seqüência correspondente. Para cada par (δ_n, D_n) , seja $T_n = T(\delta_n, y_n)$ o índice de parada escolhido pelo princípio da discrepância. Suponhamos primeiro que T_n é limitada. Então T_n é convergente, digamos $T_n \rightarrow T < \infty$. Pela definição de T_n ,

$$\|Au_{T_n}^{\delta_n} - y_n\| \leq \tau\delta_n. \quad (4.18)$$

Como u_T^δ depende continuamente de (T, y^δ) , temos

$$u_{T_n}^{\delta_n} \rightarrow u_T, \quad Au_{T_n}^{\delta_n} \rightarrow Au_T, \quad n \rightarrow \infty, \quad (4.19)$$

já que $\delta_n \rightarrow 0 \Rightarrow y_n \rightarrow y$, $T_n \rightarrow T \Rightarrow u_{T_n}^{\delta_n} \rightarrow u_T$. De (4.18),

$$\|Au_T - y\| = \lim_{n \rightarrow \infty} \|Au_{T_n}^{\delta_n} - y_n\| \leq \lim_{n \rightarrow \infty} \tau\delta_n = \tau 0 = 0,$$

que implica $Au_T = y$. Pelo Teorema 4.2.4, $u_T \rightarrow \hat{u}$, quando $T \rightarrow \infty$. Como o resíduo é monótono e em T já é zero, deve-se ter $u_T = \hat{u}$, onde \hat{u} é solução de $Au = y$. De (4.19), $u_{T_n}^{\delta_n} \rightarrow u_T = \hat{u}$, i.e., $u_{T_n}^{\delta_n} \rightarrow \hat{u}$, $n \rightarrow \infty$.

Consideremos agora o caso em que $T_n \rightarrow \infty$. Sem perda de generalidade, podemos supor T_n monótona, i.e., não decrescente. Então, usando a Proposição 4.2.1 para $n > m$,

$$\|u_{T_n}^{\delta_n} - \hat{u}\| \leq \|u_{T_{n-1}}^{\delta_{n-1}} - \hat{u}\| \leq \dots \leq \|u_{T_m}^{\delta_m} - \hat{u}\| \leq \|u_{T_m}^{\delta_m} - u_{T_m}\| + \|u_{T_m} - \hat{u}\|.$$

Como $u_{T_m} \rightarrow \hat{u}$, pelo Teorema 4.2.4 podemos fixar m de modo que $\|u_{T_m} - \hat{u}\|$ fique suficientemente próximo de zero. Tendo fixado T_m , usamos (4.19) para concluir que $\|u_{T_n}^{\delta_n} - \hat{u}\| \rightarrow 0$, quando $n \rightarrow \infty$. Logo, $\chi_{D_n} = u_{T_n}^{\delta_n} \rightarrow \hat{u} = \chi_{\hat{D}}$, ou seja, $D_n \rightarrow \hat{D}$. \square

4.3 Apêndice

Na demonstração da Proposição 4.1.2, que foi utilizada para calcular a derivada do funcional E , usamos que $u_n \rightharpoonup u$. Este resultado é justificado com a teoria de equações de Hamilton-Jacobi, aplicada à equação level set (2.11), no Teorema 4.3.3. Os dois resultados que aparecem antes deste são utilizados para sua prova. Enunciaremos estes resultados aqui, no entanto sem demonstrá-los, já que nosso objetivo não é estudar essa teoria, que é um tema bastante amplo. Demonstrações completas podem ser encontradas em [1].

A teoria clássica das equações de Hamilton-Jacobi [3] mostra que existe uma única

solução da equação (2.11), a qual é uniformemente contínua em relação à x , se o valor inicial é uniformemente contínuo em \mathbb{R}^d e

$$V \in C(\mathbb{R}^+; C^{0,1}(\mathbb{R}^d))^d, \quad (4.20)$$

i.e., se V é contínua em $\mathbb{R}^d \times \mathbb{R}^+$ e Lipschitz contínua em relação a x .

No caso particular tratado aqui, também precisaremos considerar velocidades V que não são Lipschitz contínuas, mas têm uma derivada fraca $\operatorname{div}V \in L^1(0, T; L^\infty(\mathbb{R}^d))$. Portanto, vamos considerar primeiro este caso e obter a existência de uma solução fraca no intervalo $(0, T)$ sob a condição mais fraca

$$V \in L^1(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))^d, \quad \operatorname{div}V \in L^1(0, T; L^\infty(\mathbb{R}^d)), \quad (4.21)$$

pelo método de viscosidade [3].

Proposição 4.3.1 *Seja V uma velocidade satisfazendo (4.21). Então o problema (2.11) com $\phi_0 \in L^2(\mathbb{R}^d)$, tem uma solução fraca $\phi \in C(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))$ satisfazendo*

$$\|\phi\|_{L^\infty(0, T; L^2(\mathbb{R}^d))} \leq \|\phi_0\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} e^{\|\operatorname{div}V\|_{L^1(0, T; L^\infty(\mathbb{R}^d))}}.$$

Demonstração. A demonstração pode ser encontrada em [1], Proposição 2.1. \square

Proposição 4.3.2 *Suponha que além das hipóteses da Proposição 4.3.1, V satisfaz (4.20) e $\phi_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d)$. Então a solução ϕ é única e existe uma aplicação Lipschitz contínua $\xi : \mathbb{R}^d \times (0, T) \rightarrow \mathbb{R}^d$ tal que $\phi(\xi(x, t), t) = \phi_0(x)$, para todo $(x, t) \in \mathbb{R}^d \times (0, T)$ e portanto, $\phi \in L^\infty(\mathbb{R}^d \times (0, T))$. Se além disso ϕ_0 é Lipschitz contínua, então ϕ é Lipschitz contínua em $\mathbb{R}^d \times (0, T)$.*

Demonstração. Ver Lema 2.2 em [1]. \square

Teorema 4.3.3 *Seja V tal que (4.21) é satisfeita e seja $V_n \in C(0, T; C^{0,1}(\mathbb{R}^d))^d$ uma seqüência de velocidades tal que $\operatorname{div}V_n \rightarrow \operatorname{div}V$ em $L^1(0, T; L^\infty(\mathbb{R}^d))$. Então, as correspondentes soluções fracas ϕ_n de (2.11), com velocidade V_n e $\phi_0 \in L^\infty(\mathbb{R}^d)$, têm uma subseqüência fracamente convergente, cujo limite ϕ é uma solução fraca de (2.11) com velocidade V . Ainda, se ϕ_0 é uma função característica de um conjunto mensurável, então $\phi(\cdot, t)$ é a função característica de um conjunto mensurável, após modificações em um subconjunto de medida nula para quase todo $t \in [0, T]$.*

Demonstração. Ver [1], Teorema 2.3. \square

Capítulo 5

Exemplos numéricos

Apresentamos neste capítulo dois experimentos numéricos realizados com os métodos level set. O primeiro deles é o problema do potencial inverso discutido em [12], de reconstruir a forma de um domínio D conhecendo sua densidade, constante, e medidas dos dados de Cauchy do correspondente potencial. O segundo é a identificação de perfis de doping, envolvendo semicondutores [2, 19]. Estamos apenas apresentando os resultados obtidos para estes problemas nas referências citadas e não resolvendo-os aqui.

5.1 O problema do potencial inverso

Considere o operador

$$\begin{aligned} F : L^2(\Omega) &\rightarrow L^2(\partial\Omega) \\ \chi_D &\rightarrow u_\nu|_{\partial\Omega} \end{aligned},$$

onde u é solução de

$$\Delta u = \chi_D, \quad \text{em } \Omega; \quad u|_{\partial\Omega} = 0, \quad (5.1)$$

sendo χ_D a função característica do domínio $D \subset \Omega$, o qual queremos reconstruir, e $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ limitado. Como $\chi_D \in L^2(\Omega)$, o problema de valor de fronteira de Dirichlet em (5.1) tem uma única solução: o potencial $u \in H^2(\Omega) \cap H_0^1(\Omega)$.

O problema inverso no qual estamos interessados consiste em determinar a forma de D a partir de medidas do traço de Neumann de u em $\partial\Omega$, $u_\nu|_{\partial\Omega}$, em que ν representa o vetor normal exterior a $\partial\Omega$. Este problema pode ser considerado como um problema inverso para o operador *Dirichlet-Neumann* (DtN): para $h \in L^2(\Omega)$ dado, o operador DtN leva um dado de fronteira de Dirichlet no traço de Neumann do potencial, ou seja, $\Lambda : H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega) \rightarrow H^{-\frac{1}{2}}(\partial\Omega)$, $\Lambda(\varphi) := \tilde{u}_\nu|_{\partial\Omega}$, em que \tilde{u} satisfaz

$$\Delta \tilde{u} = h, \quad \text{em } \Omega; \quad \tilde{u}|_{\partial\Omega} = \varphi.$$

O problema inverso para o operador Λ consiste em determinar h a partir de diferentes pares de dados de fronteira Dirichlet-Neumann. O caso geral com $h \in L^2(\Omega)$ já foi considerado por vários autores, entre eles [12], que utilizaram métodos de regularização iterativos para reconstruir um objeto com formato estelar (star-shaped).

Hettlich e Rundell [12] observam que, no caso particular $h = \chi_D$, um par de dados de Dirichlet-Neumann fornece tanta informação quanto o operador DtN , ou seja, é suficiente considerar somente um par de dados de Cauchy para o problema inverso, já que sempre é possível reduzir o problema de reconstrução ao problema de Dirichlet homogêneo: se temos $\Delta u = \chi_D$ em Ω , com $u = \phi$ em $\partial\Omega$, tomando h tal que $\Delta h = 0$ em Ω , $h = \phi$ em $\partial\Omega$ e fazendo $v = u - h$, temos que v satisfaz (5.1).

Também foi observado por Hettlich e Rundell [12], que dados de Cauchy não podem fornecer informação suficiente para reconstruir a fronteira de D , por exemplo, se D não é simplesmente conexo. No que diz respeito à identificabilidade, Isakov observou em [13] que domínios com formato estelar são unicamente determinados por seus potenciais.

Descrevemos a seguir o algoritmo de regularização level set. Em cada iteração três problemas de valor de fronteira elípticos são resolvidos: dois do tipo Dirichlet e um do tipo Neumann. O procedimento para a execução de um passo iterativo do método level set pode ser descrito por:

1. Calcule o resíduo $r_k := F(P_\varepsilon(\phi_k)) - y = \frac{\partial u_k}{\partial \nu} - y$, onde u_k é solução de

$$\Delta u_k = P_\varepsilon(\phi_k), \quad \text{em } \Omega; \quad u_k|_{\partial\Omega} = 0.$$

2. Calcule $v_k := F'(P_\varepsilon(\phi_k))^*(r_k) \in L^2(\Omega)$, resolvendo

$$\Delta v_k = 0, \quad \text{em } \Omega; \quad v_k|_{\partial\Omega} = r_k.$$

3. Calcule $w_k \in H^1(\Omega)$, satisfazendo

$$(I - \Delta)w_k = -P'_\varepsilon(\phi_k)v_k, \quad \text{em } \Omega; \quad \left. \frac{\partial w_k}{\partial \nu} \right|_{\partial\Omega} = 0.$$

4. Atualize a função level set $\phi_{k+1} = \phi_k + \frac{1}{\alpha}w_k$.

O algoritmo pode ser implementado usando elementos finitos, como feito em [8], ou diferenças finitas, para a solução das equações diferenciais parciais.

Neste experimento, foi considerado o problema inverso de reconstruir o lado direito χ_D em (5.1), a partir do conhecimento de apenas um par de dados de fronteira $(u, \Lambda u) = (0, y)$ em $\partial\Omega$. Foram utilizados o domínio $\Omega = (0, 1)^2 \subset \mathbb{R}^2$ e a função característica χ_D apresentada na Figura 5.1. O dado medido y para resolver o problema inverso, é obtido

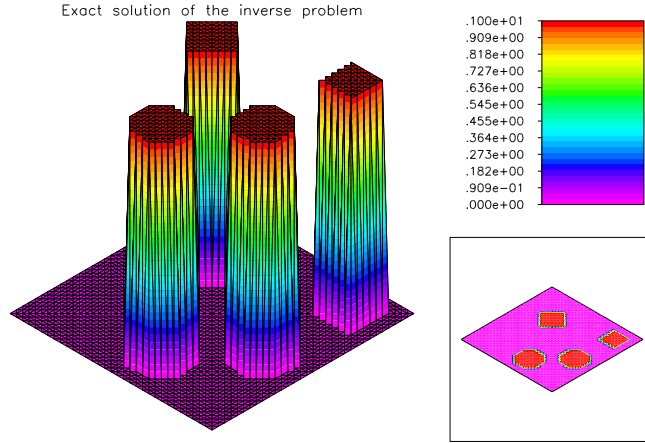


Figura 5.1: *coeficiente a ser reconstruído.*

resolvendo o problema de valor de fronteira elíptico em (5.1). Note que χ_D corresponde à função característica de um subconjunto próprio não conexo de Ω . Para o operador P_ε , definido no Capítulo 3, foi usado $\varepsilon = \frac{1}{8}$. Isto é compatível com o tamanho da malha utilizada, uma vez que o diâmetro dos triângulos na malha uniforme (usados no método de elementos finitos) é aproximadamente $\frac{\sqrt{2}}{32}$.

A Figura 5.2 mostra a evolução level set para dados exatos para os primeiros 20000 passos iterativos. Como pode ser visto nesta figura, o conjunto inicial separa-se em duas componentes após 5000 iterações. Com 10000 iterações já são três componentes. Depois de 12500 iterações, os conjuntos modificam-se lentamente. Na Figura 5.3 é mostrada a função level set, com 2500, 5000, 10000 e 20000 passos.

5.2 A identificação de perfis de doping

Este é um problema inverso relacionado com equações de advecção-difusão estacionárias modelando semicondutores. Nestes problemas, deseja-se identificar o denominado *perfil de doping*: uma função que desempenha o papel de parâmetro em um sistema de equações diferenciais parciais.

As equações são consideradas em um domínio limitado $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d = 1, 2, 3$, representando o semicondutor. A fronteira de Ω é dividida em duas partes não vazias disjuntas: uma parte de Dirichlet $\partial\Omega_D$ e uma parte de Neumann $\partial\Omega_N$. A parte da fronteira $\partial\Omega_D$ corresponde aos contatos do semicondutor, i.e., a região onde o potencial V é prescrito. A parte $\partial\Omega_N$ corresponde às superfícies isoladas e assim fluxo de corrente e campo elétrico nulos na direção normal são prescritos.

A pré-concentração de íons no material é representada pela função C , que depende apenas da variável espacial. Nas subregiões de Ω em que a pré-concentração de íons negativos predomina, as chamadas P-região, temos $C(x) < 0$. Analogamente, nas subregiões

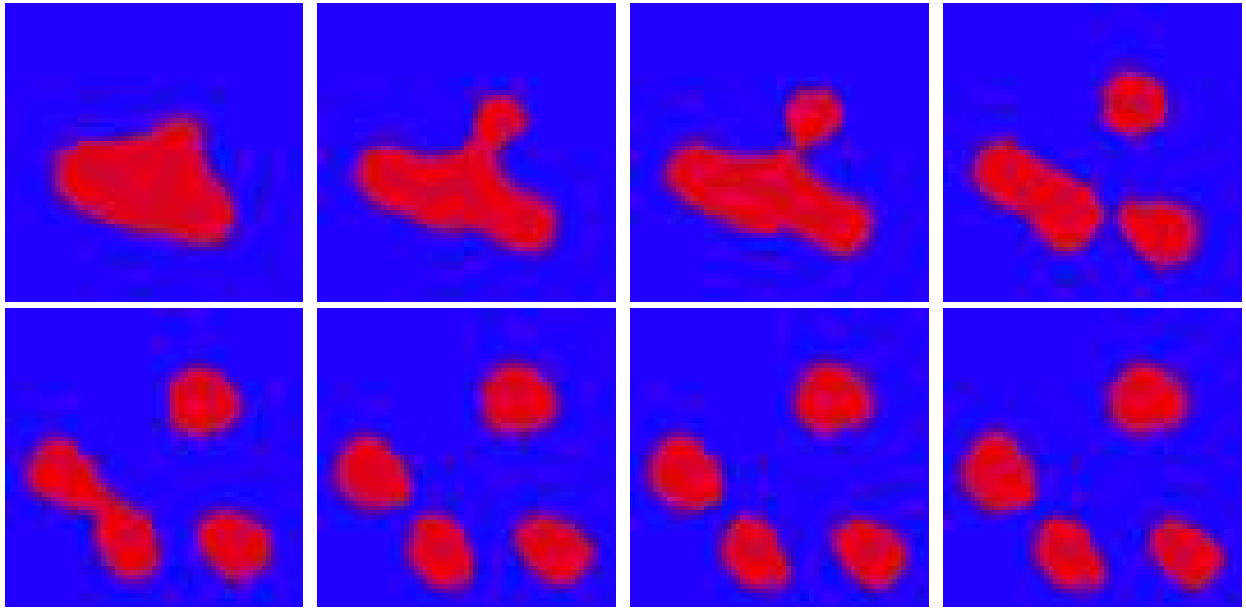


Figura 5.2: *evolução level set: 2500, 5000, 5400, 7500, 10000, 12500, 15000 e 20000 iterações.*

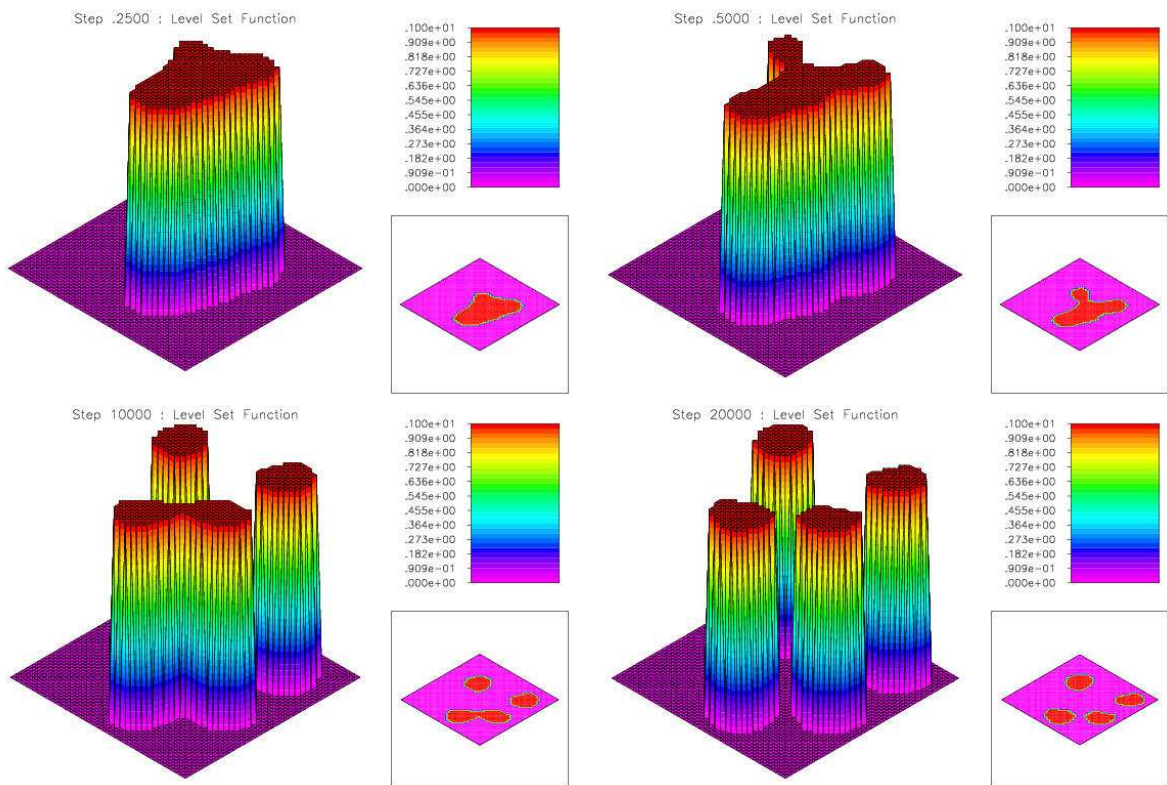


Figura 5.3: *evolução da função level set: 2500, 5000, 10000 e 20000 iterações.*

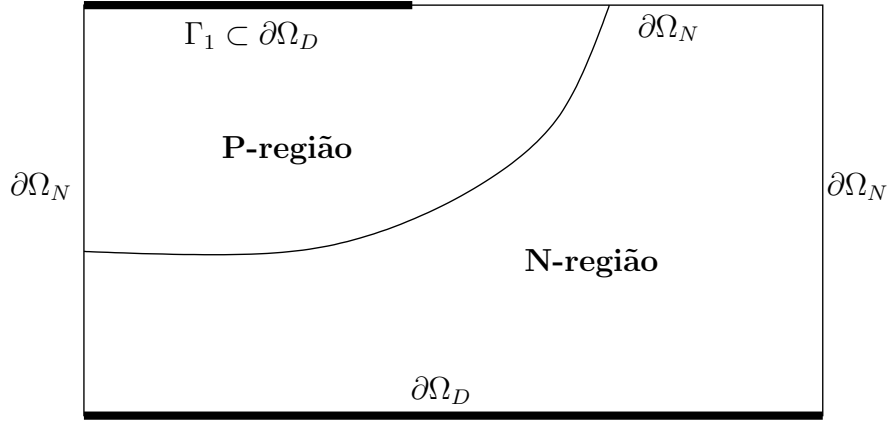


Figura 5.4: Diodo: exemplo de P-N junção.

de Ω em que a pré-concentração de íons positivos predomina, as N-região, temos $C(x) > 0$. A fronteira entre a P-região e a N-região, onde C muda de sinal, é denominada junção P-N. Um exemplo bastante simples é mostrado na Figura 5.4, onde um diodo bidimensional com uma junção P-N é representado. O perfil de doping a ser identificado corresponde à função C , que é considerada uma função constante por partes, assumindo apenas dois valores. A identificação da função C é equivalente à identificação da junção P-N.

No caso unipolar linearizado tratado em [2], o parâmetro a ser identificado é $C = C(x)$ no sistema desacoplado

$$\begin{cases} \lambda^2 \Delta V^0 = e^{V^0} - C(x) & \text{em } \Omega \\ V^0 = V_{bi}(x) & \text{em } \partial\Omega_D \\ \nabla V^0 \cdot \nu = 0 & \text{em } \partial\Omega_N \end{cases} \quad \begin{cases} \operatorname{div}(e^{V^0} \nabla \hat{u}) = 0 & \text{em } \Omega \\ \hat{u} = U(x) & \text{em } \partial\Omega_D \\ \nabla \hat{u} \cdot \nu = 0 & \text{em } \partial\Omega_N \end{cases}$$

que modela o semiconductor no caso considerado (aqui $V_{bi}(x)$ é uma função conhecida, assim como o coeficiente $\lambda > 0$). Podemos escrever $\gamma(x) := e^{V^0(x)}$ e resolver o problema de identificação de parâmetros

$$\begin{cases} \operatorname{div}(\gamma \nabla \hat{u}) = 0 & \text{em } \Omega \\ \hat{u} = U(x) & \text{em } \partial\Omega_D \\ \nabla \hat{u} \cdot \nu = 0 & \text{em } \partial\Omega_N \end{cases}, \quad (5.2)$$

para a função γ . Uma vez identificada γ , podemos finalmente calcular $C = \gamma - \lambda^2 \Delta(\ln \gamma)$.

Como o cálculo de C a partir de γ pode ser feito explicitamente e é um procedimento direto, concentramos nossa atenção na determinação da função parâmetro γ em (5.2). Portanto, o problema inverso de identificação do perfil de doping C é equivalente à

identificação de γ em (5.2), a partir do operador DtN

$$\begin{aligned} \Lambda_\gamma : H^{\frac{3}{2}}(\partial\Omega_D) &\rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\Gamma_1) \\ U &\mapsto \gamma \frac{\partial u}{\partial \nu} \Big|_{\Gamma_1} . \end{aligned}$$

Devido à natureza física do problema, podemos considerar como *inputs* para o operador DtN somente funções do tipo

$$U = \begin{cases} \tilde{U}, & \text{em } \partial\Omega_D \setminus \Gamma_1 \\ 0, & \text{em } \Gamma_1 \end{cases} .$$

Note ainda que os *outputs*, ou medidas, estão disponíveis somente em $\Gamma_1 \subset \partial\Omega_D$. Ou seja, o procedimento para obter os dados do problema consiste em aplicar uma voltagem U em $\partial\Omega_D \setminus \Gamma_1$ e medir a intensidade de corrente $\gamma \hat{u}_\nu$ em Γ_1 .

Então, temos a seguinte formulação do problema:

- (1) parâmetro: $\gamma = \gamma(x) \in L^2(\Omega) =: X$;
- (2) input (fixo): $U \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_D)$, $U|_{\Gamma_1} = 0$;
- (3) output (dados): $y = \gamma \frac{\partial \hat{u}}{\partial \nu} \Big|_{\Gamma_1} \in L^2(\Gamma_1) =: Y$;
- (4) operador *parâmetro-output*

$$\begin{aligned} F : X &\rightarrow Y \\ \gamma &\mapsto \gamma \frac{\partial \hat{u}}{\partial \nu} \Big|_{\Gamma_1} . \end{aligned}$$

O domínio de definição do operador F é

$$D(F) := \{\gamma \in L^2(\Omega); \gamma(x) \geq \gamma_- > 0, \text{ em } \Omega\},$$

onde γ_- é uma constante positiva apropriada. Assim, podemos representar o problema inverso do perfil de doping na forma abstrata

$$F(\gamma) = y. \tag{5.3}$$

A seguir descrevemos um procedimento iterativo, baseado no método level set discutido no Capítulo 3, para calcular γ :

1. $\gamma_k = P(\phi_k)$;
2. Calcule $v_k := F'(\gamma_k)^*(F(\gamma_k) - y) \in L^2(\Omega)$;

3. Calcule $w_k \in H^1(\Omega)$, satisfazendo

$$(I - \Delta)w_k = -P'_\varepsilon(\phi_k)v_k, \quad \text{em } \Omega; \quad \left. \frac{\partial w_k}{\partial \nu} \right|_{\partial\Omega} = 0;$$

4. Atualize a função level set $\phi_{k+1} = \phi_k + \frac{1}{\alpha}w_k$.

A fim de calcular v_k , utilizamos a formulação variacional

$$\langle v_k, h \rangle_{L^2(\Omega)} = -\langle F'(\gamma_k)h, F(\gamma_k) - y \rangle_{L^2(\Omega)}, \quad (5.4)$$

onde $h \in H^1(\Omega)$ é uma função teste. Para calcular o produto interno no lado direito de (5.4), usamos a identidade

$$\langle F'(\gamma)h, z \rangle_{L^2(\Gamma_1)} = \int_{\Omega} h \nabla G(\gamma) \cdot \nabla \Phi(\gamma) dx, \quad (5.5)$$

onde $z \in L^2(\Gamma_1)$ e as funções $\Phi(a)$, $G(a) \in H^1(\Omega)$ são soluções de

$$\left\{ \begin{array}{l} -\nabla(a(x)\nabla w) = 0, \quad \text{em } \Omega \\ w = z, \quad \text{em } \Gamma_1 \\ w = 0, \quad \text{em } \partial\Omega \setminus \Gamma_1 \end{array} \right. \quad \text{e} \quad \left\{ \begin{array}{l} -\nabla(a(x)\nabla w) = 0, \quad \text{em } \Omega \\ a(x)w_\nu = 0, \quad \text{em } \partial\Omega_N \\ w = g, \quad \text{em } \partial\Omega_D \end{array} \right. ,$$

respectivamente. De fato, como a derivada de Fréchet do operador

$$\Psi : H^2(\Omega) \rightarrow H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega), \quad \text{onde} \quad \left\{ \begin{array}{l} -\nabla(a(x)\nabla w) = f, \quad \text{em } \Omega \\ w = g, \quad \text{em } \partial\Omega \end{array} \right. ,$$

$$a \mapsto aw_\nu|_{\partial\Omega},$$

na direção $h \in H^2(\Omega)$, conforme [2], é dada por

$$\Psi'(a) \cdot h = hG_\nu(a) + a\psi_\nu, \quad \text{onde} \quad \left\{ \begin{array}{l} -\nabla(a(x)\nabla\psi) = \nabla(h(x)\nabla G(a)), \quad \text{em } \Omega \\ \psi = 0, \quad \text{em } \partial\Omega \end{array} \right. ,$$

temos

$$\begin{aligned}
\langle F'(\gamma)h, z \rangle_{L^2(\Gamma_1)} &= \int_{\Gamma_1} z(hG_\nu(\gamma) + \gamma\psi_\nu) = \int_{\Gamma_1} zhG_\nu(\gamma) + \int_{\Gamma_1} \Phi(\gamma)\gamma\psi_\nu \\
&= \int_{\Gamma_1} zhG_\nu(\gamma) + \int_{\Gamma_1} \Phi(\gamma)\gamma\psi_\nu + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_1} \Phi(\gamma)\gamma\psi_\nu \\
&= \int_{\Gamma_1} zhG_\nu(\gamma) + \int_{\Omega} \nabla(\gamma\nabla\psi)\Phi(\gamma) + \int_{\Omega} \gamma\nabla\psi \cdot \nabla\Phi(\gamma) \\
&= \int_{\Gamma_1} zhG_\nu(\gamma) - \int_{\Omega} \nabla(h\nabla G(\gamma))\Phi(\gamma) + \int_{\partial\Omega} \psi\gamma\Phi_\nu(\gamma) - \\
&\quad - \int_{\Omega} \psi\nabla(\gamma\nabla\Phi(\gamma)) \\
&= \int_{\Gamma_1} zhG_\nu(\gamma) - \int_{\partial\Omega} hG_\nu(\gamma)\Phi(\gamma) + \int_{\Omega} h\nabla G(\gamma) \cdot \nabla\Phi(\gamma) \\
&= \int_{\Gamma_1} zhG_\nu(\gamma) - \left[\int_{\Gamma_1} hG_\nu(\gamma)\Phi(\gamma) + \int_{\partial\Omega \setminus \Gamma_1} hG_\nu(\gamma)\Phi(\gamma) \right] + \\
&\quad + \int_{\Omega} h\nabla G(\gamma) \cdot \nabla\Phi(\gamma) \\
&= \int_{\Omega} h\nabla G(\gamma) \cdot \nabla\Phi(\gamma).
\end{aligned}$$

Portanto, o termo no lado direito de (5.4) pode ser calculado pela fórmula (5.5) tomando $z = F(\gamma_k) - y$.

Para este experimento, $\Omega = (0, 1) \times (0, 1) \subset \mathbb{R}^2$ e as partes da fronteira são:

$$\begin{aligned}
\Gamma_1 &:= \{(x, 1); x \in (0, 1)\}, \quad \partial\Omega_D := \Gamma_1 \cup \{(x, 0); x \in (0, 1)\} \quad e \\
\partial\Omega_N &:= \{(0, y); y \in (0, 1)\} \cup \{(1, y); y \in (0, 1)\}.
\end{aligned}$$

O *input* $U \in H^{\frac{1}{2}}(\partial\Omega_D)$, mostrado na Figura 5.5, é uma função constante por partes, suportada em $\partial\Omega_D \setminus \Gamma_1$

$$U(x) := \begin{cases} 1, & |x - \frac{1}{2}| \leq \frac{1}{8} \\ 0, & \text{c.c.} \end{cases},$$

Para gerar os dados para o problema inverso, é preciso resolver o problema direto em (5.2) para a função *input* U . O perfil de doping C a ser reconstruído corresponde à função $\gamma^*(x)$ mostrada na Figura 5.6, onde também é mostrada a condição inicial utilizada. Na Figura 5.7 temos a evolução level set.

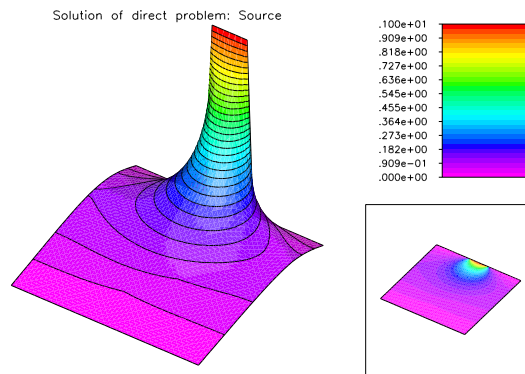


Figura 5.5: *input U utilizado.*

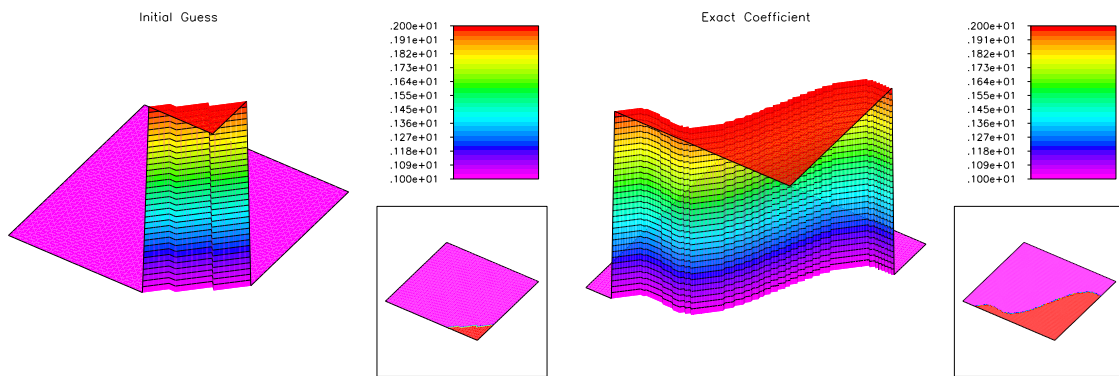


Figura 5.6: *condição inicial (esquerda) e solução exata (direita).*

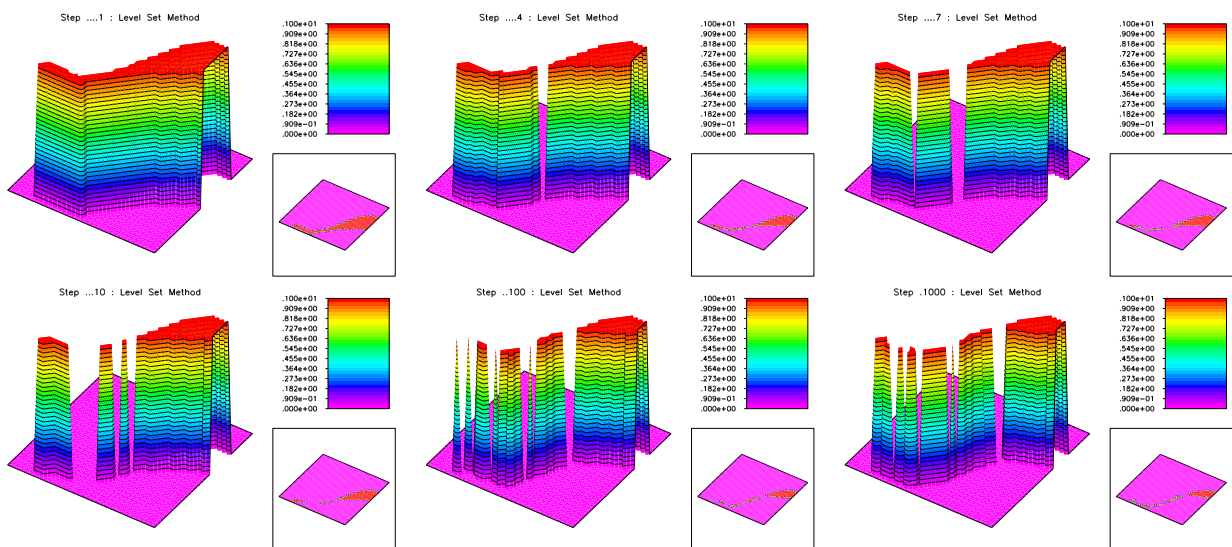


Figura 5.7: *evolução level set após 1, 4, 7, 10, 100 e 1000 iterações.*

Bibliografia

- [1] M. Burger, *A level set method for inverse problems*, Inverse Problems 17(2001), 1327-55.
- [2] M. Burger, H.W. Engl, A. Leitão e P.A. Markowich, *On inverse problems for semiconductor equations*, Milan J. Math. 72(2004), 273-313.
- [3] M.G. Crandall e P.L. Lions, *On existence and uniqueness of solutions of Hamilton-Jacobi equations*, Nonlinear Anal. 10(1986), 353-70.
- [4] D. Colton e R. Kress, *Inverse Acoustic and Eletromagnetic Scattering Theory*, 2nd edn, Springer, Berlin, 1998.
- [5] R. Dautray e J.-L. Lions, *Mathematical Analysis and Numerical Methods for Science and Technology*, Volume 2, Functional and Variational Methods, Springer, Berlin, 1988.
- [6] H.W. Engl, M. Hanke e A. Neubauer, *Regularization of Inverse Problems*, Kluwer Academic Publishers, Dordrecht, 1996.
- [7] A.T. Fomenko e T.L. Kunii, *Topological Modeling and Visualization*, Springer, Berlin, 1997.
- [8] F. Fruehauf, A. Leitão e O. Scherzer, *Analysis of regularization methods for the solution of ill-posed problems involving discontinuous operators*, SIAM Journal on Numerical Analysis, Philadelphia (to appear).
- [9] C.W. Groetsch, *Inverse Problems in the Mathematical Sciences*, Vieweg Mathematics for Scientists and Engineers, Wieweg, Braunschweig, 1993.
- [10] C.W. Groetsch, *The Theory of Tikhonov Regularization for Fredholm Equations of the First Kind*, Pitman, Boston, 1984.
- [11] M. Hanke, A. Neubauer e O. Scherzer, *A convergence analysis of the Landweber iteration for nonlinear ill-posed problems*, Numerische Mathematik, 72(1995), 21-37.

- [12] F. Hettlich e W. Rundell, *Iterative methods for the reconstruction of an inverse potential problem*, Inverse Problems 12(1996), 251-66.
- [13] V. Isakov, *Inverse source problems*, American Mathematical Society, Providence, Rhode Island, 1990.
- [14] J.B. Keller, *Inverse problems*, Am. Math. Mon., 83(1976), 107-18.
- [15] R. Kress, *Linear Integral Equations*, 2nd edn, Springer, Berlin, 1999.
- [16] P. Kügler, *A Derivative Free Landweber Method for Parameter Identification in Elliptic Partial Differential Equations with Applications to the Manufacture of Car Windshields*, PhD thesis, Johannes Kepler University, Linz, Austria, 2003.
- [17] A. Leitão e O. Scherzer, *On the relation between constraint regularization, level sets, and shape optimization*, Inverse Problems 19(2003), L1-L11.
- [18] J. Malý, D. Swanson e W.P. Ziemer *The co-area formula for Sobolev mappings*, Trans. Amer. Math. Soc. 355(2003), 477-92.
- [19] P.A. Markowich, C.A. Ringhofer e C. Schmeiser, *Semiconductor Equations*, Springer-Verlag, Vienna, New York, 1990.
- [20] F. Santosa, *A level-set approach for inverse problems involving obstacles*, ESAIM Controle Optim. Calc. Var. 1(1996), 17-33.
- [21] J. Sokolowski e J.P. Zolesio, *Introduction to Shape Optimization*, Springer, Berlin, 1992.
- [22] U. Tautenhahn, *On the asymptotical regularization of nonlinear ill-posed problems*, Inverse Problems 10(1994), 1405-18.