

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA CENTRO DE CIÊNCIAS FÍSICAS E MATEMÁTICAS DEPARTAMENTO DE MATEMÁTICA CURSO DE LICENCIATURA EM MATEMÁTICA

Felipe Kaminsky Riffel

Métodos de Regularização aplicados à Tomografia por Impedância Elétrica

Florianópolis 2023 Felipe Kaminsky Riffel

Métodos de Regularização aplicados à Tomografia por Impedância Elétrica

Trabalho de Conclusão de Curso apresentado ao Curso de Matemática, do Departamento de Matemática - Centro de Ciências Físicas e Matemáticas da Universidade Federal de Santa Catarina, para a obtenção do título de Licenciado em Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Fábio Júnior Margotti

Universidade Federal de Santa Catarina Centro de Ciências Físicas e Matemática Departamento de Matemática Licenciatura em Matemática

Orientador: Dr. Fábio Júnior Margotti

Florianópolis 2023 Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor, através do Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

```
Riffel, Felipe Kaminsky
Métodos de Regularização aplicados à Tomografia por
Impedância Elétrica / Felipe Kaminsky Riffel ; orientador,
Fábio Júnior Margotti, 2023.
116 p.
Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade Federal de Santa Catarina, Centro de Ciências
Físicas e Matemáticas, Graduação em Matemática -
Licenciatura, Florianópolis, 2023.
Inclui referências.
1. Matemática - Licenciatura. 2. Problemas Inversos. 3.
Métodos de Regularização. 4. Tomografia por Impedância
Elétrica. I. Margotti, Fábio Júnior. II. Universidade
Federal de Santa Catarina. Graduação em Matemática -
Licenciatura. III. Título.
```

Felipe Kaminsky Riffel

Métodos de Regularização aplicados à Tomografia por Impedância Elétrica

Este Trabalho de Conclusão de Curso foi julgado adequado para obtenção do título de Licenciado em Matemática e aprovado em sua forma final pelo Curso de Licenciatura em Matemática.

Florianópolis, 2023.

Prof. Dr. Felipe Lopes Castro Coordenador do Curso

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Fábio Júnior Margotti Universidade Federal de Santa Catarina

Prof. Dr. Leonardo Silveira Borges Universidade Federal de Santa Catarina

Florianópolis 2023

Prof. Dr. Everton Boos Universidade Federal de Santa Catarina

Agradecimentos

Agradeço primeiramente à minha família: meus pais Adriano e Sandra, minhas irmãs Adriana e Maria, e minha vó Beta. Todo o suporte, apoio e inspiração incondicionais que me forneceram a vida inteira foram cruciais. Só tenho a agradecer sempre por toda a companhia, por estarem comigo em todas as decisões, me reerguerem e incentivar nos momentos difíceis, e sempre estarem lá para celebrar todos os bons momentos e conquistas. Vocês foram essenciais para eu estar aqui hoje.

Agradeço a todos os amigos que conheci ao longo da graduação, principalmente os que me acompanham desde meu início no curso e os que fiz nos meus tempos de PET, por toda a parceria, companhia e incentivos que me deram nessa caminhada. Poder dividir com vocês os momentos e todo tipo de sentimento que uma graduação em matemática pode fornecer tornou esse período muito melhor.

Agradeço aos companheiros de pesquisa que estiveram comigo na IC que levou a este trabalho por todas as ajudas e trocas de experiências. Em especial ao meu orientador, Fábio, por me aceitar nessa empreitada, por todo o apoio e paciência durante esse período e por me fazer brilhar os olhos ainda mais pela área dos Problemas Inversos.

Agradeço ainda aos professores e colegas, tanto da UFSC como do IFC, que contribuíram à minha formação, por todos os aprendizados e todas as oportunidades que me abriram nessa trajetória.

"You miss 100% of the shots you don't take. - Wayne Gretzky" (Michael Scott)

Resumo

No problema inverso da Tomografia por Impedância Elétrica (TIE), busca-se reconstruir a imagem de uma seção horizontal de um corpo dadas medições de potenciais resultantes de correntes elétricas aplicadas em sua superfície, tendo diversas aplicações científicas e industriais. Ocorre que esse é um problema muito sensível a pequenas perturbações nas medições, que pode facilmente levar a soluções indesejadas. Nesse sentido, o seguinte trabalho busca avaliar a resolução de tal problema com o uso de Métodos de Regularização, procedimentos que fornecem soluções aproximadas de forma controlada para um problema inverso. Faz-se um estudo apresentando o funcionamento e as principais propriedades dos procedimentos abordados. Ao final, são executados diferentes experimentos numéricos avaliando o desempenho e precisão obtida pelos métodos Landweber, Levenberg-Marquardt e métodos REGINN na reconstrução de imagens da TIE a partir de dados sintéticos.

Palavras-chave: Problemas Inversos; Métodos de Regularização; Tomografia por Impedância Elétrica

Abstract

The Electrical Impedance Tomography (EIT) inverse problem aims to reconstruct the image of a body horizontal section, given the resulting potentials of electrical currents applied over its surface. This procedure has several scientific and industrial applications. However, since it is a very sensitive problem to small noises in the measurements, classical reconstruction algorithms may delivery undesirable solutions. This work is dedicated to evaluate the quality of the reconstructed solutions obtained by the use of the so-called regularization methods, which are algorithms that provide approximate solutions to the inverse problems in a controlled manner. The study presents the operation and main properties of such methods. Finally, different numerical experiments are carried out to evaluate the performance and accuracy obtained by the Landweber, Levenberg-Marquardt and REGINN methods, in reconstructing EIT images from synthetic data.

Keywords: Inverse Problems; Regularization Methods; Electrical Impedance Tomography.

Lista de Figuras

Figura	1.2.1 –	Ilustração da solução de mínimos quadrados como projeção, no caso	
		de um operador A com contradomínio em \mathbb{R}^3	2
Figura	5.1.1 -	Exemplo de triangulação do disco unitário $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 x^2 + y^2 < 1\}, \text{ com } N = 594 \text{ e } K = 378 \dots 88$	4
Figura	5.1.2 -	Gráfico de uma função no espaço V_2 a partir uma triangulação do	
		disco unitário.	5
Figura	5.2.1 -	Triangulação \mathcal{T} de Ω , com $K = 569$ vértices e $N = 912$ triângulos 9	2
Figura	5.2.2 -	Triangulação Θ de Ω , com $K = 3182$ vértices e $N = 5690$ triângulos. 9	3
Figura	5.2.3 -	Gráficos das funções $\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, \gamma^{(3)}, \gamma^{(4)}$ na triangulação Θ 9	4
Figura	5.2.4 -	Gráfico com os dados de potenciais gerados a partir de cada condu-	
		tividade	6
Figura	5.2.5 –	Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ com $\delta_r = 0$	8
Figura	5.2.6 –	Erro relativo E_n por iteração	9
Figura	5.2.7 –	Resíduo relativo res_n por iteração $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots $ 9	9
Figura	5.2.8 –	Número de iterações internas dos métodos REGINN para cada iteração	
		externa na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ dado $\delta = 0$, até $n = 50$ 10	0
Figura	5.2.9 –	À esquerda, comparação entre os potenciais medidos $U_{\gamma^{(1)}}$ originais	
		e com ruído adicionado $U^{\delta}_{\gamma^{(1)}}$. À direita, gráfico com o ruído presente	
		em cada entrada. O ruído relativo adicionado é de $\delta_r = 1,0\%$ 10	1
Figura	5.2.10 -	-Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ pelos métodos LW, LM, NG e NT,	
		dados $\delta_r = 1,0\%$ e $\tau = 1,005$	3
Figura	5.2.11 -	- Gráficos de Erro e Resíduo percentuais por iteração na reconstrução	
		de $\gamma^{(1)}$, dados $\delta_r = 1,0\%$ e $\tau = 1,005$	4
Figura	5.2.12 -	- Número de iterações internas dos métodos REGINN para cada iteração	
		externa na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ dado $\delta = 1, 0\%$	4
Figura	5.2.13 -	-Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ utilizando método NT a partir de	
		dados com diferentes δ_r , usando critério de parada do princípio da	
		discrepância e $\tau = 1,00510$	6
Figura	5.2.14 -	- Gráficos de Erro e Resíduo percentuais por iteração na reconstrução	
		de $\gamma^{(1)}$ com método NT, dados diferentes δ_r , usando critério de pa-	
		rada do princípio da discrepância e $\tau = 1,005.$	7
Figura	5.2.15 -	-Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ utilizando método NT a partir de	
		dados com diferentes δ_r , usando critério de parada $n_{\text{max}} = 20. \dots 10$	8
Figura	5.2.16 -	- Gráficos de Erro e Resíduo percentuais por iteração na reconstrução	
		de $\gamma^{(1)}$ com método NT, dados diferentes δ_r e critério de parada	
		$n_{\rm max} = 20 \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots $	9

Figura 5.2.17 –	Comparação	entre o g	ráfico or	iginal e	imagens	reconstruídas	das
	diferentes con	ndutividad	es, com à	$\delta_r = 0, 2$	5%		112

Lista de Tabelas

Tabela 1 –	Resultados para $\gamma^{(1)}$ com $\delta_r = 0$ e $n_{\text{max}} = 2000$ em todos os experimentos 97
Tabela 2 –	Resultados de cada método para $\gamma^{(1)}$ com $\delta_r=1\%,\tau=1,005$ e $n_{\rm max}=$
	200
Tabela 3 –	Resultados do método NT na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ com diferentes níveis
	de ruído relativos δ_r , usando critério de parada do princípio da dis-
	crepância e $\tau=1,005.$
Tabela 4 –	Resultados do método NT na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ com diferentes níveis
	de ruído relativos $\delta_r,$ usando critério de parada $n_{\rm max}=20.\ .\ .\ .\ .$. 108
Tabela 5 $-$	Reconstruções das diferentes condutividades γ estabelecidas com o
	método NT, dados $\delta_r=0,25\%$ e $\tau=1,005.$

Sumário

	INTRODUÇÃO	14
1	TEORIA DE REGULARIZAÇÃO	16
1.1	Problemas inversos	16
1.2	Regularização de problemas inversos lineares	18
1.2.1	Pseudo-inversa de Moore-Penrose	20
1.2.2	Regularização de problemas lineares	25
1.3	Regularização de problemas inversos não lineares	29
1.3.1	Características de problemas inversos não lineares	30
1.3.2	Métodos de regularização para problemas não lineares	32
2	MÉTODOS DE REGULARIZAÇÃO PARA PROBLEMAS IN-	
	VERSOS LINEARES	35
2.1	Métodos de regularização de Tikhonov	35
2.1.1	Tikhonov Clássico	36
2.1.2	Tikhonov Iterado	39
2.2	Método de regularização do gradiente	48
2.2.1	Definição do algoritmo	49
2.2.2	Análise de convergência	52
3	MÉTODOS DE REGULARIZAÇÃO PARA PROBLEMAS IN-	
	VERSOS NÃO LINEARES	58
3.1	Adaptações dos métodos lineares	58
3.2	Métodos de Newton-Inexato	59
3.2.1	Definição e procedimento geral	60
3.2.2	Newton-Inexato com Tikhonov (Levenberg-Marquardt) $\ldots \ldots \ldots$	63
3.2.3	REGINN Tikhonov-Iterado	64
3.2.4	REGINN Gradiente	67
4	TOMOGRAFIA POR IMPEDÂNCIA ELÉTRICA	72
4.1	Modelo Contínuo	72
4.1.1	Hipóteses do Modelo Contínuo	72
4.1.2	Formulação do problema direto	74
4.1.3	Formulação do problema inverso	75
4.2	Modelo Completo de Eletrodos	76
4.2.1	Hipóteses do Modelo Completo de Eletrodos	76

4.2.2	Formulação do problema direto
4.2.3	Formulação do problema inverso
4.2.4	Derivada do operador direto
5	EXPERIMENTOS NUMÉRICOS
5.1	Implementação computacional da Tomografia por Impedância
	Elétrica
5.1.1	Discretização do problema
5.1.2	Cálculo do operador direto
5.1.3	Cálculo da derivada do operador direto
5.2	Experimentos com dados sintéticos
5.2.1	Geração dos dados sintéticos
5.2.2	Experimento 1: Dados sem ruído ($\delta = 0$)
5.2.3	Experimento 2: Nível de ruído fixo $\delta_r = 1,0\%$
5.2.4	Experimento 3: Diferentes níveis de ruído δ_r
5.2.5	Experimento 4: Comparando diferentes condutividades γ $\ .$ 109
6	$CONCLUSÃO \dots 114$
	REFERÊNCIAS

Introdução

Os problemas inversos formam uma classe que reúne diversos problemas advindos de modelagens físicas, dos mais variados cenários e aplicações, nos quais busca-se determinar ou reconstruir um objeto conhecendo seu efeito através de algum processo conhecido. Matematicamente, como descreve Kirsch (2011), tais problemas podem ser caracterizados da seguinte forma: dados dois espaços X, Y, um operador $K : X \to Y$ e um $y \in Y$ conhecido, queremos determinar $x \in X$ tal que K(x) = y. Isto é, busca-se uma solução para tal equação. Em especial, um dos Problemas Inversos de grande interesse e que será foco deste trabalho é a chamada Tomografia por Impedância Elétrica.

Tomografia por Impedância Elétrica (TIE) é um problema descrito da seguinte forma: na superfície de um determinado corpo são aplicadas uma série de correntes elétricas com amperagens conhecidas. A partir delas, medindo os potenciais resultantes, tenta-se reconstruir uma imagem de seu interior, em especial de sua impedância ou condutividade elétrica (SOMERSALO; CHENEY; ISAACSON, 1992). Tal problema possui uma grande variedade de aplicações e vantagens sobre outros métodos de tomografia, o que o torna um objeto de estudo de grande interesse.

Cheney, Isaacson e Newell (1999) relatam que uma das principais aplicações se dá na área médica, tendo vários usos possíveis para diagnóstico por imagem, podendo ser vantajosa devido a não necessidade de exposição a materiais e fenômenos radioativos, como a usual Tomografia por Raios-X. Outras aplicações citadas são a determinação de depósitos minerais no interior da Terra, rastreamento da propagação de contaminantes na Terra, avaliação não-destrutiva de componentes de máquina e controle de processos industriais (CHENEY; ISAACSON; NEWELL, 1999). Além dessas, há também a aplicação que deu origem a essa pesquisa: a imagem de escoamento multifásico.

Este trabalho surge de um projeto de pesquisa desenvolvido em parceria entre o Departamento de Matemática da Universidade Federal de Santa Catarina e o Instituto Federal de Santa Catarina, com apoio do CNPq, denominado "Impedance Tomography for monitoring multiphase flows" (MARGOTTI, 2022). Nesse projeto, o objetivo principal é desenvolver um sistema de Tomografia por Impedância Elétrica mirando o monitoramento do escoamento de fluidos multifásicos, analisando a composição dos fluidos passando por uma tubulação ou duto, aplicação especialmente interessante na exploração de petróleo e similares. Tendo o objetivo de obter reconstruções precisas e de forma otimizada, surge a necessidade de estudar e implementar métodos eficientes para resolução do problema inverso em questão.

Como Kirsch (2011) descreve, a TIE pode ser caracterizada como um problema

inverso, sendo este determinar o conteúdo do interior de um corpo conhecendo os potenciais resultantes após esse ser atravessado por certas correntes. Entretanto, nas modelagens mais comuns, é possível identificar a TIE como um problema inverso mal posto, pois não apresenta certas condições que garantem uma estabilidade na aproximação de soluções (KIRSCH, 2011). Com essa instabilidade, especialmente dado que em situações práticas existe um certo nível de ruído presente nas medições, torna-se necessário o estudo de técnicas mais robustas para determinar aproximações para a solução de forma controlada, em especial dos chamados Métodos de Regularização.

Métodos de regularização, também chamadas estratégias de regularização, são procedimentos que buscam fornecer soluções aproximadas para um Problema Inverso, de forma que sejam suficientemente precisas para um nível de ruído das medições pequeno o bastante (KIRSCH, 2011). A aplicabilidade e eficiência de cada método de regularização depende das propriedades do problema inverso em questão, tornando-se necessário tanto estudar as características de cada método e do problema inverso, bem como avaliar através de experimentos como se comportam em conjunto.

Considerando a motivação e as problemáticas apresentadas, o seguinte trabalho tem por objetivo estudar e comparar diferentes métodos de regularização aplicados ao problema da Tomografia por Impedância Elétrica, explorando os aspectos teóricos desses métodos e avaliando suas aplicações no problema por meio de experimentos numéricos. Esses experimentos foram realizados com uso de implementações computacionais disponíveis da Tomografia da Impedância Elétrica, desenvolvidas em trabalhos anteriores, em particular a biblioteca desenvolvida por Hafemann (2023) na linguagem de programação Python.

Para cumprir o objetivo elencado, este trabalho se estrutura da seguinte forma: no Capítulo 1 abordamos as caracterizações e principais resultados que envolvem a teoria geral de problemas inversos e dos métodos de regularização. No Capítulo 2 descrevemos alguns métodos próprios para problemas inversos lineares, discutindo as principais propriedades e condições que garantem o bom funcionamento deles. O Capítulo 3 apresenta uma discussão similar, focado nos métodos voltados para problemas inversos não lineares. A Tomografia por Impedância Elétrica é descrita em detalhes no Capítulo 4, onde abordamos os conceitos físicos envolvidos e apresentamos os principais modelos matemáticos. Por fim, o Capítulo 5 traz os experimentos numéricos, descrevendo as técnicas de implementação computacional empregadas, bem como o desenvolvimento e análise dos experimentos.

1 Teoria de Regularização

1.1 Problemas inversos

Vários problemas modelados a partir de situações físicas, de engenharia e afins, no qual o objetivo é tentar identificar um objeto a partir de como ele afeta ou é afetado por um determinado processo, são classificados como problemas inversos. Esses problemas podem ser caracterizados na definição a seguir, dada por (KIRSCH, 2011). No que segue, chamamos *operador* qualquer função $K : X \to Y$ entre dois espaços vetoriais, utilizando a notação K(x) = Kx.

Definição 1.1.1. Dados X, Y espaços vetoriais e um operador $K : X \to Y$ conhecido, denominamos:

- Problema direto o problema que consiste em obter o valor Kx dado qualquer $x \in X$;
- Problema inverso o problema dado por, a partir de um certo $y \in Y$ conhecido, obter $x \in X$ tal que Kx = y, o qual chamamos de solução do problema.

Normalmente, nos referimos a um problema inverso referente ao operador K como "problema inverso Kx = y".

Há uma grande gama de problemas inversos de diferentes naturezas e comportamentos, que podem ou não apresentar soluções a depender dos dados apresentados, e cuja abordagem para encontrar ou aproximar uma solução difere em cada situação. Tais fatores dependem essencialmente do operador K envolvido e dos espaços no qual ele opera, seu domínio e imagem, os quais ainda levam a diferentes categorias de problemas inversos. Uma classificação que nos interessa em especial é a de problemas bem postos e mal postos, que podem ser caracterizados na definição a seguir.

Definição 1.1.2. Dados dois espaços normados X, Y e um operador $K : X \to Y$, dizemos que o problema inverso Kx = y é *bem posto*, segundo Hadamard, se as seguintes condições são satisfeitas:

- 1. Para cada $y \in Y$ existe ao menos um $x \in X$ de forma que Kx = y;
- 2. Para qualquer $y \in Y$ há no máximo um $x \in X$ tal que Kx = y;
- 3. Se uma sequência $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ de elementos e um elemento x em X são tais que $Kx_n \to Kx$, então segue que $x_n \to x$.

Tais condições ainda são chamadas, respectivamente, de Existência, Unicidade e Estabilidade das soluções. Um problema inverso é dito mal posto caso qualquer uma das três condições acima não seja atendida. ■

Observação 1.1.1. Pode-se notar que essa definição equivale a afirmar que o operador K é bijetivo e tem inversa $K^{-1}: Y \to X$ contínua.

Observação 1.1.2. A definição apresentada é mais comum para problemas inversos lineares, que serão definidos a seguir. Mais adiante, no final do capítulo, discutiremos a noção de má posição local de um problema inverso.

Inicialmente, existia a concepção de que se o problema inverso não apresentava alguma das condições listadas, então o problema não estava modelado corretamente, suas hipóteses estavam mal colocadas. Se entendia que as soluções sempre fossem seriam determinadas e deveriam depender continuamente dos dados. Daí, o termo "mal posto" empregado (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). Ocorre que, à medida que o tema foi sendo mais estudado e diferentes problemas se enquadravam como problemas inversos, percebeu-se que muitos deles não apresentavam problemas quanto a suas modelagens físicas e matemáticas, mas mesmo assim eram classificados como mal postos. Com isso, entendeu-se que tais características podiam aparecer dependendo da natureza do problema.

Nesse sentido, o conceito de problemas bem postos pode ser entendido como o quão 'bem comportado' é um problema inverso com relação às suas soluções. Essencialmente, como se procura uma solução, é preciso primeiro saber se o problema admite solução e se esta é única. Além disso, grande parte dos métodos convencionais para aproximar soluções de equações do tipo Kx = y se baseia em gerar sequências (x_n) tais que Kx_n se aproxime do valor conhecido y. Assim, torna-se relevante saber se é possível obter uma aproximação satisfatória para uma solução ao usar um método dessa natureza. Em outras palavras, se $x_n \to x$ sempre que $Kx_n \to Kx$.

Outra classificação que diferencia certos problemas inversos, sendo de grande relevância no estudo de soluções e métodos apropriados, é quanto à linearidade do problema. Operadores lineares entre espaços vetoriais possuem diversas propriedades interessantes, as quais podem ser de grande utilidade no estudo de problemas inversos definidos com operadores dessa natureza. Tal classificação é dada na definição a seguir.

Definição 1.1.3. Dados X, Y espaços vetoriais sobre \mathbb{R} e um operador $K : X \to Y$, dizemos que o problema inverso Kx = y é *linear* se o operador K é linear. Isto é, se para quaisquer $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ e quaisquer $x, z \in X$ tem-se:

$$K(\alpha x + \beta z) = \alpha K x + \beta K z.$$

Chamamos ainda de operador não linear aquele que não atende a propriedade de ser linear. Um problema inverso é dito *não linear* se o operador K é não linear.

A linearidade de um operador traz diversas propriedades e garantias com as quais não podemos contar no caso não linear. Assim, a análise se torna particular para cada classe de problemas inversos. Desse modo, separamos a seguir uma seção para a regularização de problemas inversos lineares e outra para problemas não lineares, onde veremos como a análise pode ser executada em cada caso.

1.2 Regularização de problemas inversos lineares

Nessa seção, estamos interessados em problemas inversos definidos por operadores lineares, conforme Definição 1.1.3. No geral, consideramos problemas inversos definidos entre espaços de Hilbert reais X, Y. Estes, consistem essencialmente em espaços vetoriais reais com produto interno completos, ou seja, toda sequência de Cauchy converge com a métrica induzida pelo produto interno, conforme definido por Kreyszig (1991).

Outra suposição que é quanto aos operadores que estamos tratando serem *limi-tados*, noção que apresentamos na definição a seguir.

Definição 1.2.1 (Operadores Limitados/Norma de Operador). Sejam X, Y espaços vetoriais dotados de uma norma e $K : X \to Y$ um operador linear. Dizemos que K é *limitado* se existe uma constante $c \in \mathbb{R}_+$ tal que

$$||Kx|| \le c ||x||, \forall x \in X.$$

Ainda, se K é limitado, definimos sua *norma* $||K|| \in \mathbb{R}_+$ como o supremo das constantes c que satisfazem essa propriedade. Ou seja,

$$||K|| := \sup_{x \in X \setminus \{0\}} \frac{||Kx||}{||x||}$$

Operadores limitados nos permitem fazer certas estimativas, sabendo que a norma da imagem de um vetor não ultrapassa uma certa razão com relação à norma do próprio vetor, em particular, a norma do operador. Isso se torna particularmente interessante quando tentamos analisar o comportamento de um operador no limite de sequências no qual ele está sendo aplicado, processo utilizado por muitos métodos. Além disso, temos o seguinte resultado.

Teorema 1.2.1. Dados X, Y espaços normados $e K : X \to Y$ operador linear, K é limitado se, e somente se, é contínuo.

Demonstração. Veja Teorema 2.7-9 de Kreyszig (1991).

Ou seja, o fato de um operador ser limitado nos garante também sua continuidade, sendo mais um recurso propício para analisar comportamento de sequências.

Dadas essas observações, poderíamos pensar que operadores lineares e limitados são bem comportados e não apresentariam muitos problemas para sua inversão. Todavia, nem sempre é o caso. Vejamos o que ocorre no seguinte exemplo.

Exemplo 1.2.1. Considere o espaço vetorial $X = C[0, 1] = \{f : [0, 1] \to \mathbb{R} \mid f \in \text{contínua}\}$ das funções reais contínuas no intervalo [0, 1]. Defina o operador $K : X \to X$ dado por:

$$(Kf)(x)=\int_0^x f(t)dt, x\in [0,1]$$

Podemos mostrar que K é um operador linear injetivo. Porém, note que a princípio não é sobrejetivo, pois para qualquer $f \in X$ temos $(Kf)(0) = \int_0^0 f(t)dt = 0$. Além disso, pelo Teorema Fundamental do Cálculo, a função $g(x) = \int_0^x f(t)dt$ é derivável, tendo sua derivada contínua. Assim, não é toda função $g \in X$ que satisfaz g = Kf para alguma $f \in X$. Porém, se restringirmos $K : X \to Y$, sendo $Y = C_{\diamond}^1 = \{f : [0, 1] \to \mathbb{R} \mid f(0) = 0 \in f' \in C[0, 1]\}$, tornamos o operador bijetivo entre esses dois espaços.

Todavia, consideramos agora ambos espaços com a norma

$$||f|| = \sup_{x \in [0,1]} |f(x)|$$

e a métrica induzida d(f,g) = ||f - g||. Sob essa norma, o operador K é limitado, visto que dada $f \in X$, segue para qualquer $x \in [0, 1]$ que

$$|(Kf)(x)| = \left| \int_0^x f(t)dt \right| \le \int_0^x |f(t)|dt \le \int_0^x \sup_{s \in [0,1]} |f(s)|dt = x ||f||.$$

Assim,

$$||Kf|| = \sup_{x \in [0,1]} |(Kf)(x)| \le x ||f|| \le 1 \cdot ||f||.$$

Logo, K é limitado, consequentemente contínuo, com $||K|| \leq 1$. Todavia, mostraremos a seguir que o operador K não atende à propriedade de Estabilidade da Definição 1.1.2. Para isso, definimos a sequência de funções $f_n : [0, 1] \to \mathbb{R}$ onde dado um $n \in \mathbb{N}$ qualquer a função $f_n(x)$ é dada por

$$f_n(x) = \cos(nx).$$

Inicialmente, observamos que denotando 0 a função nula, temos K0 = 0, visto que para qualquer $x \in [0, 1]$ vale $(K0)(x) = \int_0^x 0 dx = 0$. A seguir, nossa intenção é mostrar que temos $Kf_n \to K0 = 0$ mas $f_n \not\to 0$.

Para mostrar que $Kf_n \rightarrow 0$, que remos mostrar essencialmente que

$$\lim_{n} d(Kf_{n}, 0) = \lim_{n} ||Kf_{n} - 0|| = 0.$$

Veja que,

$$(Kf_n)(x) = \int_0^x \cos(nt)dt = \frac{\sin(nx)}{n}$$

isto é, $Kf_n(x) = \frac{sen(nx)}{n}$. Com isso, visto que $|sen(nx)| \le 1$ para qualquer $n \in \mathbb{N}$ e qualquer $x \in [0, 1]$, obtemos

$$||Kf_n|| = \sup_{x \in [0,1]} \left| \frac{sen(nx)}{n} \right| = \sup_{x \in [0,1]} \left| \frac{1}{n} \right| |sen(nx)| \le \frac{1}{n}$$

Desse modo, analisando o limite lim $||Kf_n - 0||$, temos

$$\lim \|Kf_n - 0\| = \lim \|Kf_n\| \le \lim \frac{1}{n} = 0,$$

ou seja, $\lim d(f_n, 0) = 0$ e logo $Kf_n \to 0$.

Vejamos agora a convergência de f_n . Dado $Kf_n \to 0$, seria interessante pensar que $f_n \to 0$. Porém, note que, para qualquer $n \in \mathbb{N}$,

$$||f_n|| = ||\cos(n \cdot)|| = \sup_{x \in [0,1]} |\cos(nx)| = 1$$

vendo que $-1 \leq cos(nx) \leq 1$ dado $x \in [0, 1]$, e em particular $cos(n \cdot 0) = 1$. Com isso

$$\lim \|f_n - 0\| = \lim \|f_n\| = 1.$$

Isto é, $d(f_n, 0) \not\rightarrow 0$, e portanto $f_n \not\rightarrow 0$.

Esse exemplo ilustra que mesmo um operador linear limitado pode levar a um problema inverso mal posto. Com isso, torna-se necessário analisar sob quais condições o problema é bem posto, bem como trabalhar alternativas para aproximar suas soluções. Nas seções a seguir, veremos como tais questões podem ser abordadas. Discutimos inicialmente a Pseudo-Inversa de Moore-Penrose, operador que fornece soluções generalizadas e nos ajuda a conceituar de forma alternativa a boa posição de um problema. Na sequência, discutimos estratégias para aproximar soluções considerando a instabilidade presente nos problemas, os chamados métodos de regularização.

1.2.1 Pseudo-inversa de Moore-Penrose

Conforme comentado anteriormente, a noção de problemas mal postos apresentada na definição 1.1.2 é um tanto restrita, no sentido que admite apenas soluções exatas e únicas para o problema inverso. Porém, em muitos casos é interessante generalizar a ideia de uma solução. No que segue, para destacar que se trata do caso particular de problemas lineares, denotaremos $A : X \to Y$ um operador linear e limitado entre dois espaços.

Definição 1.2.2. Sejam X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ um operador linear limitado e $y \in Y$. Uma solução de quadrados mínimos, ou solução generalizada, do problema inverso Ax = y é um vetor $\hat{x} \in X$ tal que:

$$||A\hat{x} - y|| \le ||Ax - y||, \forall x \in X.$$

Soluções de quadrados mínimos têm por intenção justamente expressar que não são soluções exatas para o problema inverso, mas são as "melhores possíveis", traduzidos na noção que sua imagem pelo operador A tem a menor distância ao vetor y. É fácil notar que toda solução para o problema é também uma solução de quadrados mínimos.

Determinar uma solução de quadrados mínimos envolve um problema de minimização, isto é, de determinar um elemento que dê um valor mínimo para a função. Esse é um tipo de problema que pode trazer várias peculiaridades e complexidades, ainda mais trabalhando em espaços vetoriais de forma geral. Porém, sendo A linear e limitado, existem algumas características interessantes que auxiliam nessa tarefa. O resultado a seguir expressa algumas condições equivalentes para a solução de quadrados mínimos.

Teorema 1.2.2. Sejam X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ operador linear e limitado, $\hat{x} \in X \ e \ y \in Y$ qualquer. Denote $\mathcal{R}(A)$ a imagem de $A \ e \ M = \overline{\mathcal{R}(A)}$ seu fecho. Então, as seguintes afirmações são equivalentes:

- 1. $||A\hat{x} y|| \le ||Ax y||, \forall x \in X.$
- 2. $\hat{x} \notin tal que A\hat{x} = proj_M y.$
- 3. \hat{x} é solução da equação $A^*Ax = A^*y$.

Aqui, $A^* : Y \to X$ indica o operador adjunto de A, conforme define Kreyszig (1991, Seção 3.9). Ainda, $proj_M : Y \to M$ representa a projeção ortogonal sobre o espaço M, conforme definido por Kreyszig (1991, Seção 3.3).

Demonstração. Veja Teorema A.1 em (PAULETI, 2021).

Observação 1.2.1. A equação $A^*Ax = A^*y$ recebe o nome de *equação normal*.

Esse Teorema nos mostra que determinar uma solução de quadrados mínimos para o problema Ax = y equivale a determinar uma solução das equações normais $A^*Ax = A^*y$. Assim, podemos explorar sob quais condições existem as soluções de norma mínima de um problema estudando as soluções para a equação normal correspondente.

Além disso, a equivalência da primeira e segunda propriedades, juntamente com a definição de soluções de quadrados mínimos, nos diz que a imagem de uma solução \hat{x} de quadrados mínimos nada mais é que a projeção ortogonal sobre o fecho da imagem de A. Intuitivamente, se pensarmos A um operador sobre \mathbb{R}^3 e com imagem $\mathcal{R}(A)$ sendo um plano, ainda que y não esteja no plano $\mathcal{R}(A)$, podemos pegar sua projeção sobre ele. A solução de mínimos quadrados $\hat{x} \in X$ corresponde justamente ao vetor que leva a essa projeção na imagem. Essa situação é ilustrada na Figura 1.2.1.

Figura 1.2.1 – Ilustração da solução de mínimos quadrados como projeção, no caso de um operador A com contradomínio em \mathbb{R}^3



Fonte: Elaborado pelo autor.

Essa intuição, entretanto, não corresponde ao caso geral. Um resultado conhecido, mostrado por Kreyszig (1991, Teorema 2.4-2), nos diz que todo espaço de dimensão finita é fechado. Assim, sendo tanto o contradomínio como a imagem de A espaços de dimensão finita, projetar sobre $M = \overline{\mathcal{R}(A)}$ corresponde a projetar sobre $\mathcal{R}(A)$, o que não é verdade em geral em espaços de dimensão infinita.

Apesar da projeção sempre existir sobre o fecho de $\mathcal{R}(A)$ sendo esse um subespaço fechado (KREYSZIG, 1991, Teorema 3.3-4), pode ser que não pertença a $\mathcal{R}(A)$ caso esta não for fechada. Nessa situação, não existirá um $x \in X$ tal que $Ax = proj_M y$, consequentemente, não tendo uma solução de mínimos quadrados para o problema. O teorema a seguir indica sob quais condições a solução de mínimos quadrados existe.

Teorema 1.2.3. Sejam X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ operador linear e limitado, $y \in Y$ qualquer. Então, o conjunto de soluções de mínimos quadrados

$$U(y) = \{x \in X : A^*Ax = A^*y\}$$
(1.2.1)

é não vazio se, e somente se, $y \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$.

Demonstração. Veja a demonstração do Teorema A.2 trazida por Pauleti (2021).

O resultado expresso no teorema acima nos dá uma primeira condição para a existência de soluções de mínimos quadrados: o vetor y deve pertencer ao espaço $\mathcal{R}(A) \oplus$ $\mathcal{R}(A)^{\perp}$. Isso nos indica que, ainda que busquemos soluções de forma generalizada, é preciso pelo menos que o vetor y esteja no espaço $\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$. Em espaços de dimensão

finita, esse espaço corresponde ao espaço Y inteiro, não sendo problema. Porém, não é o caso geral em espaços de dimensão infinita.

Vamos então supor $y \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$. A outra questão a se resolver agora é: quanto à unicidade? De forma geral, não podemos garantir que exista uma única solução de mínimos quadrados.

Para verificar isso, seja $y \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$, considere $\hat{x} \in X$ uma solução de mínimos quadrados para Ax = y e tome $z \in \mathcal{N}(A)$ um elemento do núcleo de A. Então, pela linearidade de A e tendo por definição Az = 0, note que:

$$A(\hat{x} + z) = A\hat{x} + Az = A\hat{x} + 0 = A\hat{x}$$

Assim:

$$||A(\hat{x} + z) - y|| \le ||A\hat{x} - y|| \le ||Ax - y||, \forall x \in X.$$

Isto é, $\hat{x} + z$ é também uma solução de mínimos quadrados. Com isso, sendo $\mathcal{N}(A)$ um espaço vetorial, vemos ainda que podem existir infinitas soluções dessa forma, transladando qualquer solução por um elemento de $\mathcal{N}(A)$, com exceção do caso de A ser injetor, de onde temos $\mathcal{N}(A) = \{0\}$.

Desse modo, é comum contornar tal situação adicionando uma restrição: queremos que a solução de mínimos quadrados tenha também norma mínima. Isto é, vamos buscar uma solução de mínimos quadrados $x^{\dagger} \in X$ para Ax = y tal que

$$\|x^{\dagger}\| \le \|x\|, \forall x \in U(y)$$

Assim, queremos não apenas que a solução generalizada gere um resíduo mínimo, mas também que a própria norma da solução seja a menor possível. Utilizando alguns resultados de otimização, a partir das propriedades da norma e do operador A ser linear, pode se chegar no seguinte teorema.

Teorema 1.2.4. Sejam X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ operador linear e limitado, $y \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$ qualquer. Então, existe um único vetor de norma mínima em U(y).

Demonstração. Veja a demonstração do Teorema A.4 apresentada por Pauleti (2021).

Note que cada conjunto solução U(y) depende do vetor y estabelecido, representando um conjunto solução diferente para cada problema inverso Ax = y. Assim, com o operador A fixo, dado um vetor $y \in \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$, podemos tentar fazer a associação desse y com a solução de norma mínima x^{\dagger} correspondente. Isso será feito através da chamada *pseudo-inversa*, apresentada na seguinte definição.

Definição 1.2.3 (Pseudo-Inversa). Considere $\mathcal{D}(A^{\dagger}) = \mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$. Definimos o operador:

$$A^{\dagger}: \mathcal{D}(A^{\dagger}) \subset Y \to X,$$

que associa $y \in \mathcal{D}(A)$ com o único vetor $x^{\dagger} \in U(y)$, solução de mínimos quadrados, de norma mínima. Chamamos A^{\dagger} de *pseudo-inversa*, também conhecida como *inversa de Moore-Penrose*.

Os teoremas anteriores mostram que este operador está bem definido. Assim, a partir de um $y \in \mathcal{D}(A^{\dagger})$, temos uma maneira de obter uma solução generalizada para o problema inverso Ax = y, dada justamente por $x^{\dagger} = A^{\dagger}y$. Note ainda que se existe a inversa de A, ela coincide com a pseudoinversa.

Ocorre que, como elencado anteriormente, a princípio a pseudoinversa só está definida no espaço $\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$, que no geral não corresponde ao espaço Y inteiro. Podemos então tentar verificar sobre quais condições o domínio de A^{\dagger} se estende para todo o espaço. O seguinte teorema, cuja demonstração encontra-se em (PAULETI, 2021, Teorema A.7), expressa justamente essas condições.

Teorema 1.2.5. Sejam X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ operador linear e limitado, $A^{\dagger} : D(A^{\dagger}) \subset Y \to X$ conforme definição anterior. Então, são válidas as seguintes afirmações:

- 1. A^{\dagger} está definido em todo Y se, e somente se, $\mathcal{R}(A)$ é fechado;
- 2. $\mathcal{R}(A^{\dagger}) = \mathcal{N}(A)^{\perp}$
- 3. $\mathcal{N}(A^{\dagger}) = \mathcal{R}(A)^{\perp}$
- 4. A^{\dagger} é linear;
- 5. A^{\dagger} é contínuo se, e somente se, $\mathcal{R}(A)$ é fechado.

Com esse teorema, vemos que uma condição primordial para ter as características favoráveis de A^{\dagger} é que a imagem de A seja fechada.

Tratando a solução de um problema inverso de forma generalizada, isto é, considerando as soluções de mínimos quadrados, a condição de que $\mathcal{R}(A)$ seja fechada nos garante de certa forma uma 'boa posição'. Isto é, considerando o problema inverso Ax = ye $\mathcal{R}(A) = \overline{\mathcal{R}(A)}$, temos $\mathcal{D}(A^{\dagger}) = Y$ e A^{\dagger} contínua. Logo, dado $y \in Y$, vendo que a continuidade de A^{\dagger} equivale à imagem ser fechada, segue que com relação às soluções de mínimos quadrados, temos:

• Existência e unicidade: existe uma única solução de mínimos quadrados de norma mínima, $x^{\dagger} = A^{\dagger}y$

• Estabilidade: sendo A^{\dagger} contínua, temos para qualquer sequência $Ax_n \to y$ que $A^{\dagger}Ax_n \to A^{\dagger}y = x^{\dagger}$.

Nesse sentido, considerando a solução para o problema inverso dessa forma menos estrita temos a seguinte definição alternativa de má posição para problemas inversos lineares:

Definição 1.2.4. Dados X, Y espaços de Hilbert e $A : X \to Y$ operador linear e limitado, o problema inverso Ax = y é bem posto se, e somente se, $\mathcal{R}(A)$ é um subespaço fechado de Y.

Observação 1.2.2. Tal definição é conhecida como boa posição no sentido de Nashed, em referência ao matemático que propôs tal conceituação (PAULETI, 2021).

Nessa concepção, podemos caracterizar a boa ou má posição de um problema inverso analisando o comportamento da imagem do operador que o define, relacionada ao espaço em que A^{\dagger} está definido. Isso é especialmente interessante dado que em situações práticas de problemas inversos, não conhecemos o vetor $y \in \mathcal{R}(A)$ 'exato', no sentido que, mesmo que exista uma solução determinada x^{\dagger} não conseguimos medir exatamente $y = Ax^{\dagger}$. Acabamos conhecendo apenas uma versão com ruídos y^{δ} , próxima de y, mas que pode já não estar em $\mathcal{R}(A) \oplus \mathcal{R}(A)^{\perp}$.

Assim, se a imagem de A é fechada, temos A^{\dagger} definido no espaço inteiro e contínuo, podendo fazer uma aproximação 'razoável' na forma $A^{\dagger}y^{\delta} \approx A^{\dagger}y$. Caso contrário, ou y^{δ} pode não estar no domínio de A^{\dagger} , ou temos uma descontinuidade de A^{\dagger} , o que pode fazer essa aproximação imprecisa.

No geral, os problemas que trabalharemos são mal postos, fazendo com que não possamos contar com A^{\dagger} para buscar soluções satisfatoriamente aproximadas. Veremos, entretanto, como contornar essa situação para tornar as aproximações feitas suficientemente próximas de $x^{\dagger} = A^{\dagger}y$, mesmo trabalhando com medições imprecisas.

1.2.2 Regularização de problemas lineares

Consideramos aqui X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ um operador linear e limitado. Dado um vetor $y \in \mathcal{R}(A)$, estamos interessados no problema inverso Ax = y. No geral, estaremos considerando a hipótese de $y \in \mathcal{R}(A)$, pensando que nosso problema admite uma solução. Assim, existe uma solução de norma mínima $x^{\dagger} \in X$ dada por

$$x^{\dagger} = A^{\dagger}y.$$

Todavia, esse vetor y "exato" gerado pela solução procurada não costuma ser acessível. Em situações práticas, ele consiste nas medições disponíveis do problema, correspondendo ao efeito observado, a partir do qual tentaremos reconstruir o objeto que causou tal efeito. Se tratando de dados advindos de medições, devemos considerar que sempre haverá um certo nível de ruído, causado por imprecisões experimentais ou fenômenos relacionados.

Desse modo, não conhecemos o vetor $y \in \mathcal{R}(A)$ exato, mas sim uma *medição com ruídos y*^{δ} $\in Y$. Supomos que para um certo parâmetro $\delta \in \mathbb{R}_+$, esse vetor perturbado y^{δ} satisfaz:

$$\|y - y^{\delta}\| \le \delta, \tag{1.2.2}$$

onde chamamos δ de *nível de ruído* dos dados.

Visto que não temos os dados exatos, nossa meta é obter, a partir de y^{δ} , uma solução aproximada $x^{\delta} \in X$ para a solução de mínimos quadrados x^{\dagger} , de forma que essa aproximação seja suficientemente próxima, dado um ruído pequeno o bastante. Isso pode ser entendido como: dado $y \in \mathcal{R}(A)$, para cada par (y^{δ}, δ) satisfazendo (1.2.2), queremos determinar $x^{\delta} \in X$ de maneira que

$$x^{\delta} \to x^{\dagger} = A^{\dagger}y$$
, conforme $\delta \to 0$.

Conforme discutido na seção anterior, para problemas lineares bem postos essa aproximação pode ser desempenhada pelo operador A^{\dagger} . O problema é que, no geral, estamos trabalhando com problemas mal postos, onde tal operador pode não funcionar como esperado. Assim, essa aproximação deve recorrer a outras estratégias, sendo papel especial dos chamados *métodos de regularização*.

Para formalizar a ideia dos métodos de regularização, queremos inicialmente traduzir essa noção de uma aproximação x^{δ} em termos de algum operador R que satisfaça $Ry^{\delta} = x^{\delta}$. Primeiramente, definimos os operadores que servem de base para construir os métodos de regularização, chamados operadores de reconstrução.

Definição 1.2.5. Dados X, Y espaços de Hilbert, um operador de reconstrução é um operador contínuo $R: Y \to X$ satisfazendo R(0) = 0.

Esses operadores de reconstrução serão os responsáveis por retornar a aproximação desejada. Veja que não temos muitas restrições sobre R além da continuidade, apenas que R(0) = 0 vendo que 0 é solução de norma mínima para Ax = 0 num problema inverso linear. Entretanto, como discutimos acima, queremos que essa aproximação seja controlada em termos do nível de ruído δ .

Para contornar essa situação, não utilizamos um único operador de reconstrução fixo, mas sim uma família de operadores de reconstrução $(R_t)_{t>0}$ dependentes de um certo parâmetro $t \in \mathbb{R}^*_+$. Ou seja, para cada t > 0 informado, teremos um operador $R_t : Y \to X$ que tem seu comportamento regulado pelo parâmetro t. A escolha desses parâmetros é essencial para garantir uma aproximação adequada. Um dos fatores que influenciarão nessa escolha, de fato, é o nível de ruído δ . Porém, em geral, é preciso também que essa escolha leve em conta o vetor $y^{\delta} \in Y$ em questão, pois isso pode influenciar no resultado gerado pelo operador de reconstrução. Com essas considerações, temos a seguinte definição do que são *parâmetros de regularização*.

Definição 1.2.6 (Parâmetros de regularização). Uma *escolha de parâmetros* é uma função $\alpha : \mathbb{R}^*_+ \times Y \to \mathbb{R}^*_+$ que satisfaz:

$$\sup\{\alpha(\delta, y^{\delta})|y^{\delta} \in Y, \|y - y^{\delta}\| \le \delta\} \to 0, \text{ conforme } \delta \to 0.$$

Dados um $\delta \in y^{\delta}$ especificados, chamamos o valor $\alpha(\delta, y^{\delta})$ de parâmetro de regularização.

Observação 1.2.3. Uma escolha de parâmetros pode depender apenas de δ , não sendo influenciada pelo y^{δ} ou outros procedimentos auxiliares. Nesses casos, dizemos que a escolha é feita *a priori*. Do contrário, dizemos que a escolha é *a posteriori*.

Note que nessa definição α é uma função que retorna um parâmetro a partir de um nível de ruído $\delta > 0$ e o vetor $y^{\delta} \in Y$ escolhido. Além disso, é exigido que $\alpha(\delta, y^{\delta}) \to 0$ à medida que $\delta \to 0$, de forma que ele acompanhe o tamanho do ruído quando esse se torna pequeno o suficiente.

Com uma família de operadores de reconstrução $(R_t)_{t>0}$ disponíveis, estabelecemos uma maneira de escolher os parâmetros via uma função $\alpha(\delta, y^{\delta})$. A partir de um parâmetro $\alpha = \alpha(\delta, y^{\delta})$ escolhido, obtemos um operador $R_{\alpha} : Y \to X$, o qual será utilizado para a aproximação $x^{\delta} = R_{\alpha}y^{\delta}$.

Tal procedimento, de estabelecer os operadores e a escolha dos parâmetros, consiste num chamado *método de regularização*. Porém, precisamos ainda exigir que esse processo, de fato, forneça soluções suficientemente aproximadas. Isso é estabelecido na definição a seguir.

Definição 1.2.7 (Métodos de regularização). Considere o problema inverso Ax = y, com X, Y espaços de Hilbert, $A : X \to Y$ operador linear e limitado, $y \in \mathcal{R}(A)$. Dada uma família de operadores de reconstrução $(R_t)_{t>0}$ e uma escolha de parâmetros $\alpha : \mathbb{R}^*_+ \times Y \to \mathbb{R}^*_+$, um método de regularização é um par $((R_t)_{t>0}, \alpha)$ que satisfaz

$$\sup\{\|R_{\alpha(\delta,y^{\delta})}y^{\delta} - A^{\dagger}y\| \|y^{\delta} \in Y, \|y - y^{\delta}\| \le \delta\} \to 0$$

à medida que $\delta \to 0$.

Dessa definição, temos que $R_{\alpha(\delta,y^{\delta})}y$ converge pontualmente a $A^{\dagger}y$ conforme $\delta \to 0$ (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). Isto é, para cada $y \in \mathcal{D}(A^{\dagger})$:

$$\lim_{\delta \to 0} R_{\alpha(\delta,y)} y = A^{\dagger} y$$

Com isso, garantimos a princípio que, tomando um vetor no domínio de A^{\dagger} , com um nível de ruído reduzido o bastante, o método de regularização se aproxima da pseudoinversa.

Com essa característica, denotando agora $\alpha = \alpha(\delta, y^{\delta})$ podemos analisar a seguinte estimativa:

$$||R_{\alpha}y^{\delta} - A^{\dagger}y|| \le ||R_{\alpha}y^{\delta} - R_{\alpha}y|| + ||R_{\alpha}y - A^{\dagger}y||.$$

Pela observação anterior, sendo $((R_t), \alpha)$ um método de regularização, temos no segundo termo que $\lim_{\delta \to 0} ||R_{\alpha}y - A^{\dagger}y|| = 0$. Porém, não temos garantias quanto ao termo $||R_{\alpha}y - R_{\alpha}y^{\delta}||$, podendo divergir caso não seja feita uma escolha adequada de α .

No caso particular de $(R_t)_{t>0}$ ser uma família de operadores lineares e limitados, podemos limitar superiormente o termo $||R_{\alpha}y^{\delta} - R_{\alpha}y^{\delta}||$ da seguinte forma:

$$\|R_{\alpha}y - R_{\alpha}y^{\delta}\| \le \|R_{\alpha}\|\|y - y^{\delta}\| \le \|R_{\alpha}\|\delta$$

Desse modo, poderia se pensar se existe uma cota superior para $||R_{\alpha}||$ para estimar melhor esse erro. Porém, conforme proposição listada por Margotti, Hafemann e Santana (2023), não existe um limitante M > 0 tal que $||R_t|| < M$ para todo t > 0 caso o problema seja mal posto. Isto é, não temos controle sobre a norma desses operadores.

Isso mostra a importância da escolha feita pelo parâmetro de regularização, a fim de que o erro também se aproxime de 0. Outro fator crucial é a influência do nível de ruído na escolha dos parâmetros. Por um teorema denominado Veto de Bakushinskii, como demonstrado em Margotti, Hafemann e Santana (2023), em um método de regularização a escolha de parâmetros só não depende de δ se o problema for bem posto. Ou seja, para problemas mal postos em geral, é preciso fazer uma escolha adequada em função do nível de ruído.

Por fim, uma última característica dos métodos de regularização é que não é possível estabelecer uma taxa de convergência em termos do nível de ruído. Isto é, não existe uma função $f : \mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ que forneça uma estimativa

$$\|R_{\alpha(\delta,y^{\delta})}y^{\delta} - A^{\dagger}y\| \le f(\delta)$$

de maneira uniforme, para todo $y \in \mathcal{D}(A^{\dagger})$ tal que $||y|| \leq 1$. Com isso, a convergência do método de regularização pode ser arbitrariamente lenta (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023).

Nessa seção, discutimos os métodos de regularização para problemas inversos lineares. Essencialmente, obtemos alguns operadores $R_{\alpha} : Y \to X$, definidos com um certo parâmetro $\alpha = \alpha(\delta, y^{\delta})$ dependendo do ruído e do vetor a ser reconstruído, que serão responsáveis por retornar a solução aproximada. Ou seja,

$$x^{\delta} = R_{\alpha(\delta, y^{\delta})} y^{\delta} \approx A^{\dagger} y = x^{\dagger}.$$

Cada método funcionará de maneira particular, com uma escolha de parâmetros adequada. Na seção a seguir, discutiremos as particularidades de problemas não lineares, bem como as estratégias de soluções nesses casos.

1.3 Regularização de problemas inversos não lineares

Nesta seção, exploramos algumas características que envolvem a solução e regularização de problemas inversos não lineares. Muitos problemas inversos são dessa natureza, em particular, o problema da Tomografia por Impedância Elétrica, no qual estamos interessados. Com isso, torna-se necessário compreender as particularidades desse tipo de problema.

Dados X, Y espaços de Hilbert, $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ um operador contínuo, possivelmente não linear, e $y \in R(F)$, estamos interessados no problema inverso

$$F(x) = y.$$

Sendo F não linear, já não temos tantas hipóteses ou propriedades além da continuidade. Porém, em certos problemas, uma hipótese adicional que pode-se obter é quanto à diferenciabilidade do operador. Isto é, a existência de uma derivada de Fréchet, apresentada na definição a seguir.

Definição 1.3.1 (Derivada de Fréchet). Sejam X, Y espaços de Hilbert e $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ um operador. Dado $x \in int(\mathcal{D}(F))$, dizemos que F é Fréchet-diferenciável em x se existe um operador $S : X \to Y$ linear e contínuo tal que

$$\lim_{\|h\|\to 0} \frac{\|F(x+h) - F(x) - Sh\|}{\|h\|} = 0.$$

Se esse operador existe, denotamos F'(x) = S e o chamamos de *derivada de Fréchet* de *F* no ponto *x*.

A derivada de Fréchet estende a ideia da derivada enquanto melhor aproximação linear em torno do ponto x para um contexto mais geral. Intuitivamente, pela definição apresentada, para h suficientemente pequeno podemos fazer a aproximação

$$F(x+h) - F(x) - F'(x)h \approx 0$$

Desse modo, denotando w = x + h,

$$F(w) \approx F'(x)(w-x) + F(x)$$

Ou seja, dado um ponto w próximo o bastante de x, podemos aproximar F(w) com uso de F'(x). Tal ideia será utilizada na construção de alguns métodos e estimativas.

A seguir, discutimos algumas características envolvidas na boa posição de problemas não lineares, em particular, com respeito à estabilidade desse tipo de problema. Em seguida, iremos discutir os métodos de regularização, estratégias para fornecer aproximações para a solução do problema de forma controlada, para o caso dos problemas não lineares.

1.3.1 Características de problemas inversos não lineares

Assim como feito nos problemas inversos lineares, podemos contornar as condições de existência e unicidade de soluções em alguns casos, estendendo a noção de solução do problema. Veremos mais adiante de que maneira isso pode tentar ser adaptado no caso de problemas inversos não lineares. Com isso, estaremos mais focados em discutir a estabilidade do problema.

Na definição de problemas bem postos apresentada na Definição 1.1.2, a estabilidade do problema é considerada de forma global. Ou seja, a condição que $F(x_n) \to F(x)$ implique em $x_n \to x$ deve valer para qualquer $x \in X$. Entretanto, para problemas não lineares, se faz interessante analisar essa característica em pontos específicos, vendo que esta pode valer para pontos particulares de interesse, mas não necessariamente em todo o domínio. Isso motiva a definição a seguir.

Definição 1.3.2 (Problemas localmente bem postos). Sejam X, Y espaços de Hilbert, $y \in \mathcal{R}(F) \in F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ um operador contínuo. Dado $\overline{x} \in \mathcal{D}(F)$, dizemos que o problema inverso F(x) = y é *localmente bem posto em* \overline{x} se existe uma bola aberta $B_r(\overline{x})$ de raio r > 0 centrada em \overline{x} tal que, para toda sequência $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset B_r(\overline{x}) \cap \mathcal{D}(F)$, se $F(x_n) \to F(x)$, então $x_n \to \overline{x}$.

Se o problema não é localmente bem posto em \overline{x} , dizemos que ele é *localmente* mal posto em \overline{x} .

Essa definição expressa em outros termos que numa certa vizinhança de \overline{x} , podese garantir que $x_n \to \overline{x}$ sempre que $F(x_n) \to F(\overline{x})$. Desse modo, conseguimos analisar como um problema inverso se comporta em pontos particulares.

Como comentam Margotti, Hafemann e Santana (2023), para o caso que o operador $F: X \to Y$ é linear e limitado, se o problema é localmente bem posto em algum ponto, então é também em qualquer ponto do domínio. Além disso, se F for injetivo, as definições de problema linear bem posto e problema localmente bem posto se tornam equivalentes.

Conforme comentado anteriormente, em alguns casos se faz interessante utilizar a aproximação linear com uso da derivada de Fréchet de F em algum ponto x. Alguns procedimentos para resolução de uma equação da forma F(x) = y como, por exemplo, o Método de Newton, se baseiam em resolver a equação

$$y = F'(\overline{x})(x - \overline{x}) + F(\overline{x}) \tag{1.3.1}$$

para gerar uma aproximação da solução, recorrendo geralmente a um processo iterativo. Note que esse se trata de um problema inverso linear, dado que $F'(\bar{x})$ é linear e limitado, e podemos encarar a equação na forma equivalente

$$F'(\overline{x})s = y - F(\overline{x})$$

sendo $s = x - \overline{x}$. Ocorre que, sob determinadas condições, se o problema F(x) = y for localmente mal posto em \overline{x} , então o problema (1.3.1) também será localmente mal posto (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023).

Algumas condições ainda ajudam a garantir em certo ponto a regularidade do problema. Em determinados problemas não lineares, pode-se obter uma propriedade para F que diz respeito a sua não linearidade, chamada Condição do Cone Tangencial, apresentada na definição a seguir.

Definição 1.3.3 (Condição do Cone Tangencial (CCT)). Seja $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ um operador Fréchet-diferenciável. Dizemos que F atende à *Condição do Cone Tangencial* se existe $x_0 \in X$, constantes $\eta \in [0, 1)$ e $\rho > 0$ tais que, para todos $x, y \in B_{\rho}(x_0)$, tem-se

$$||F(y) - F(x) - F'(x)(y - x)|| \le \eta ||F(y) - F(x)||.$$

Note que essa condição expressa que a aproximação linear de F fornece um erro controlado em uma determinada vizinhança. O termo à esquerda na desigualdade corresponde ao erro obtido na aproximação linear em torno de x no ponto y. A desigualdade presente na definição informa que se F atende à CCT, então o erro obtido na aproximação linear é sempre limitado superiormente pelo erro absoluto ||F(y) - F(x)||, controlado por uma constante $\eta < 1$.

Essa condição se torna de grande interesse na análise de métodos para resolução do problema inverso, especialmente aqueles que se utilizam das aproximações lineares de F em torno de algum ponto. De todo modo, na presença dela, pode-se mostrar também que a boa e malposição local do problema F(x) = y em \overline{x} e do problema (1.3.1) se equivalem (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). Desse modo, sob as características apresentadas, o problema adaptado com uso da aproximação linear torna-se localmente mal posto caso o problema F(x) = y seja localmente mal posto em algum ponto.

Essas características nos mostram que, em geral, trabalhar com problemas não lineares requer que as aproximações obtidas tenham algum controle. Assim como no caso linear, dado o problema inverso não linear F(x) = y, em situações práticas não conseguimos medir exatamente um vetor $y \in \mathcal{R}(F)$ na imagem do operador. Temos acesso apenas a uma versão $y^{\delta} \in Y$, que pode não estar no conjunto imagem, com um determinado nível de ruído.

Desse modo, se o problema fosse estável, poderíamos gerar sequências $(x_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset X$ tais que

$$F(x_n) \to y^{\delta}$$

Assim, para y^{δ} suficientemente próximo de y, teríamos que (x_n) convergiria para uma solução $\overline{x} \in X$ do problema inverso. Porém, conforme discutido ao longo da seção, se Ffor localmente mal posto em \overline{x} , não temos como assegurar essa convergência. Mesmo o problema adaptado na forma (1.3.1), na presença de determinadas condições, pode ser afetado com essa característica.

Com isso elencado, precisamos novamente de métodos que forneçam as soluções aproximadas para o problema de forma controlada, considerando sua instabilidade e o nível de ruído. Na seção a seguir, discutimos a classe de métodos utilizados nesse tipo situação, os chamados métodos de regularização.

1.3.2 Métodos de regularização para problemas não lineares

Novamente, consideramos X, Y espaços de Hilbert, $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ um operador contínuo. Dados $y \in \mathcal{R}(F)$, estamos interessados no problema inverso

$$F(x) = y$$

onde temos acesso a um vetor com ruído $y^{\delta} \in Y$, com $\delta > 0$ tal que

$$\|y - y^{\delta}\| \le \delta.$$

Queremos novamente uma maneira de encontrar uma aproximação $x^{\delta} \in X$, dada em função do nível de ruído. Nossa intenção é que esse x^{δ} seja suficientemente próximo de uma solução para o problema, caso o nível de ruído seja próximo o bastante de 0. De maneira informal, sendo $x^{\dagger} \in \mathcal{D}(F)$ solução para F(x) = y queremos que:

$$\lim_{\delta \to 0} x^{\delta} = x^{\dagger}$$

Novamente, tal aproximação x^{δ} será justamente papel dos *métodos de regularização*. Precisamos, todavia, discutir alguns conceitos iniciais para trazer a definição de forma precisa e bem definida.

No caso particular, estamos supondo $y \in \mathcal{R}(F)$, ou seja, que existe uma solução para o problema inverso. Já quanto à unicidade de soluções, no caso geral, não podemos contar com tal hipótese. Os problemas inversos que trabalhamos podem admitir inúmeras soluções. Podemos tentar recorrer a uma estratégia similar à exercida no caso de problemas inversos lineares, que é exigir a solução obtida seja de norma mínima. Isto é, dado o conjunto de soluções

$$S(y) = \{x \in \mathcal{D}(F) | F(x) = y\} \neq \emptyset, \tag{1.3.2}$$

buscamos um vetor que tenha a menor norma nesse conjunto.

No caso particular dos problemas não lineares, vamos estender um pouco essa noção e trabalhar não especificamente com a norma mínima, mas sim com uma distância mínima com relação a algum referencial. Isso é apresentado na seguinte definição.

Definição 1.3.4 (\hat{x} -solução de norma mínima). Sejam X, Y espaços de Hilbert e seja $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ um operador contínuo. Considere o problema inverso F(x) = y, com $y \in \mathcal{R}(F)$, e seja S(y) o conjunto descrito em (1.3.2). Dado $\hat{x} \in X$, dizemos que $x^{\dagger} \in S(y) \subset X$ é uma \hat{x} -solução de norma mínima se

$$\|x^{\dagger} - \hat{x}\| \le \|x - \hat{x}\|, \forall x \in S(y).$$

Considerando a distância induzida pela norma $d_X(x, z) = ||x-z|| \text{ em } X$, podemos considerar que uma \hat{x} -solução de norma mínima é a solução que possui menor distância ao vetor $\hat{x} \in X$ estabelecido como referência. Além disso, note que tomando $\hat{x} = 0$ a definição corresponde a uma solução de norma mínima.

Sendo F em geral não linear, não há, a princípio, garantias para a existência de uma única \hat{x} -solução de norma mínima no conjunto S(y). De todo modo, caso F atenda à CCT (1.3.3) e tenha a presença de mais algumas condições, é possível demonstrar que existe uma \hat{x} -solução de norma mínima (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). A partir desse conceito, vamos passar a construir a noção dos métodos de regularização, similarmente ao que modo foi desenvolvido para o caso de problemas inversos lineares na Seção 1.2.2.

Primeiramente, definimos os operadores que exercerão o papel de fornecer a aproximação x^{δ} dado um $y^{\delta} \in Y$. Nesse caso, iremos considerar operadores contínuos $R: X \times Y \to X$. Precisamos que R seja dado não apenas em função do y^{δ} disponível, mas também do vetor $\hat{x} \in X$ que será tomado como referência para determinar uma \hat{x} -solução de norma mínima.

Novamente, não trabalhamos com um operador R fixo, mas sim com uma família de operadores $(R_t)_{t>0}$, onde para cada $t \in \mathbb{R}^*_+$ fixado, teremos um operador $R_t : X \times Y \to X$. A escolha desses parâmetros será justamente o que determinará o método de regularização.

Em particular, a escolha de parâmetros é da mesma maneira discutida na Seção 1.2.2, apresentada na Definição (1.2.6). Ou seja, queremos uma escolha de parâmetros $\alpha(\delta, y^{\delta})$

em função do nível de ruído $\delta > 0$ e do vetor y^{δ} que satisfaça

$$\sup\{\alpha(\delta, y^{\delta})|y^{\delta} \in Y, \|y - y^{\delta}\| \le \delta\} \to 0, \text{ conforme } \delta \to 0.$$

Com isso, podemos definir os métodos de regularização para problemas inversos não lineares.

Definição 1.3.5 (Métodos de regularização). Sejam X, Y espaços de Hilbert, $\hat{x} \in X$ e $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ operador contínuo. Dada $(R_t)_{t>0}$ família de operadores contínuos $R_t : X \times Y \to X$ e $\alpha : \mathbb{R}^*_+ \times Y \to \mathbb{R}^*_+$ uma escolha de parâmetros de regularização, dizemos que o par $((R_t)_{t>0}, \alpha)$ é um método de regularização para F se para cada $y \in \mathcal{R}(F)$,

$$\sup\{\|x^{\dagger} - R_{\alpha(\delta, y^{\delta})}(\hat{x}, y^{\delta})\| : y^{\delta} \in Y, \|y - y^{\delta}\| \le \delta\} \to 0, \text{ conforme } \delta \to 0,$$

sendo $x^{\dagger} \in \mathcal{D}(F)$ uma \hat{x} -solução de norma mínima para F(x) = y.

Intuitivamente, a definição apresentada nos informa justamente que para δ suficientemente pequeno, o erro $||x^{\dagger} - R_{\alpha(\delta,y^{\delta})}(\hat{x}, y^{\delta})||$ também fica cada vez mais próximo de 0. Com isso, utilizando um método de regularização, a aproximação

$$x^{\delta} = R_{\alpha(\delta, y^{\delta})}(\hat{x}, y^{\delta}) \approx x^{\dagger}$$

se torna cada vez melhor à medida que δ for reduzido o suficiente, para qualquer $y^{\delta} \in Y$ com $||y - y^{\delta}|| \leq \delta$. Temos, portanto, uma forma de obter aproximações de maneira controlada em função do nível de ruído através do uso de tais métodos. Assim como discutido no caso de métodos para problemas lineares, a escolha do parâmetro α é essencial para garantir o bom funcionamento, sendo particular para cada método escolhido.

Nesse capítulo, discutimos brevemente a Teoria de Regularização para problemas inversos. Em especial, apresentamos o conceito de problemas inversos, as dificuldades envolvidas em problemas mal postos, a necessidade de obter soluções aproximadas considerando o nível de ruído presente nos dados medidos, bem como o papel dos métodos de regularização no desempenho dessa função. Não entramos em muitos detalhes nos resultados citados. Para maiores detalhes e informações, recomendamos consultar alguns dos trabalhos citados, como os de Kirsch (2011), Pauleti (2021) e Margotti, Hafemann e Santana (2023).

Além disso, buscamos abordar apenas as definições e teoria geral dos métodos de regularização, não entrando em métodos específicos. No Capítulo 2 e no Capítulo 3 abordamos alguns métodos de regularização propriamente ditos, onde serão discutidas as definições dos operadores e escolhas de parâmetros utilizadas.

2 Métodos de regularização para problemas inversos lineares

Nesta seção, buscamos explorar a teoria por trás dos métodos de regularização de Problemas Inversos lineares, isto é, problemas do tipo Ax = y onde A é um operador linear e limitado. Existem diferentes métodos adequados para esse tipo de problema, sendo abordados neste trabalho dois particulares: os chamados método de regularização de Tikhonov e método de regularização do Gradiente. Apesar de tratarmos cada um desses como um único método, ambos possuem suas variações, tendo ligeiras mudanças a partir da ideia básica, as quais também serão exploradas nesse trabalho.

Para os tópicos a seguir, consideramos dois espaços de Hilbert $X, Y \in A : X \to Y$ um operador linear e limitado definido entre eles. Estamos interessados no Problema Inverso Ax = y, dado $y \in \mathcal{R}(A) \in y^{\delta} \in Y$ satisfazendo $||y - y^{\delta}|| \leq \delta$, para algum $\delta \in \mathbb{R}_{+}^{*}$. Tratando de Problemas Inversos Lineares, os métodos a seguir explorados buscam fornecer uma aproximação x^{δ} para a solução de mínimos quadrados $x^{\dagger} \in X$ dada por

$$x^{\dagger} = A^{\dagger}y,$$

sendo A^{\dagger} a pseudo-inversa discutida na Seção 1.2.1.

Em cada um dos métodos abordados, buscaremos explicar intuitivamente o princípio geral de seu funcionamento. Na sequência, trazemos uma ideia das demonstrações da propriedade de regularização em cada um deles, explorando os parâmetros utilizados e seus comportamentos em cada método.

2.1 Métodos de regularização de Tikhonov

Os Métodos de Regularização de Tikhonov, também conhecidos no contexto da estatística e machine learning como "Ridge Regularization"¹, são métodos tradicionais para solução de Problemas Inversos. Seu princípio de funcionamento parte do objetivo de encontrar a solução de mínimos quadrados para o problema inverso. Isto é, queremos uma solução $x^{\dagger} \in X$ tal que

$$||Ax^{\dagger} - y|| \le ||Ax - y||, \forall x \in X.$$

Portanto, a base do seu funcionamento está em minimizar um funcional da forma

¹ Nesses contextos costuma ser mais referida como "*Ridge Regression*", tendo seu uso majoritário na estimação de parâmetros para regressão.

$$\frac{1}{2}\|Ax - y\|^2$$

Veja que nesse caso utilizamos o quadrado da distância ou da norma, pois como veremos mais adiante, nessa forma dispomos de mais ferramentas para determinar um vetor que a minimize, além de se tratar de um problema equivalente a minimizar a norma ||Ax - y||.

Conforme discussão no capítulo anterior, nem sempre há um único vetor que minimiza esse funcional, o que nos leva a buscar um vetor de norma mínima dentre as soluções. Discutimos na seção citada que podemos definir um operador A^{\dagger} que retorna um minimizador de norma mínima para esse funcional a partir de um y informado. Porém, vimos também que nem sempre ele está definido em todo o espaço Y, tornando o Problema Inverso Mal-Posto. Isso faz com que a aproximação obtida possa divergir da solução procurada, especialmente na existência de vetores ruidosos $y^{\delta} \in Y$.

Para contornar essa situação, o Método de Tikhonov propõe como estratégia adicionar uma penalização em termos da norma de x, evitando que as aproximações obtidas fujam muito do esperado. Essa penalidade ainda é controlada por um parâmetro $\alpha \in \mathbb{R}^*_+$, o qual veremos ser dado em termos do nível de ruído δ . Assim, os Métodos de Tikhonov se baseiam em minimizar o funcional $T_{\alpha}: X \to \mathbb{R}$ dado por

$$T_{\alpha}(x) = \frac{1}{2} \|Ax - y^{\delta}\|^2 + \frac{\alpha}{2} \|x\|^2.$$
(2.1.1)

tendo como aproximação x^{δ} justamente o vetor x que minimiza T_{α} . Esse é o chamado Método de Tikhonov ou Método de Tikhonov Clássico, pois possui algumas variações, as quais flexibilizam a obtenção desse minimizador através de processos iterativos e trazem maiores controles em torno do nível de ruído. Abordaremos brevemente cada uma dessas variações, além do Tikhonov Clássico.

Os métodos tratados nessa seção podem ser generalizados também para Problemas Inversos Não-Lineares. Porém, neste trabalho focaremos nos Métodos de Tikhonov para Problemas Lineares.

2.1.1 Tikhonov Clássico

Conforme comentado anteriormente, o Método de Tikhonov Clássico busca dar como aproximação do Problema Inverso um minimizador do funcional T_{α} . Iniciamos definindo precisamente o funcional utilizado.

Definição 2.1.1. Dados o Problema Inverso Ax = y e um vetor $y^{\delta} \in Y$ fixado, conforme enunciado no início da seção, para cada $\alpha \in \mathbb{R}^*_+$, definimos o funcional T_{α} dado por:
$$T_{\alpha}: X \to \mathbb{R}$$
$$T_{\alpha}(x) = \frac{1}{2} \|Ax - y^{\delta}\|^2 + \frac{\alpha}{2} \|x\|^2,$$

chamado de funcional de Tikhonov.

Gostaríamos agora que a existência de um único minimizador para esse funcional fosse garantida, ou seja, que tivéssemos um $\hat{x} \in X$ tal que

$$T_{\alpha}(\hat{x}) < T_{\alpha}(x), \forall x \in X \setminus \{\hat{x}\}.$$

De fato, podemos notar que T_{α} é limitada inferiormente por 0, pois é definida através da norma. Logo, o conjunto $\{T_{\alpha}(x) : x \in X\} \subset \mathbb{R}_+$ admite um ínfimo, denotado $\inf_{x \in X} T_{\alpha}(x)$. Por resultado da Análise Real, com a existência do ínfimo existe uma sequência $(x_k)_{k \in \mathbb{N}^*}$ tal que $T_{\alpha}(x_k) \to \inf_{x \in X} T_{\alpha}(x)$.

A partir das propriedades dos espaços de Hilbert, do fato de A ser linear e limitado, bem como as propriedades do funcional T_{α} , é possível demonstrar que (x_k) também converge, tendo que seu limite $x_{\alpha} = \lim_{k} x_k$ é o único elemento em X tal que:

$$T_{\alpha}(x_{\alpha}) < T_{\alpha}(x), \forall x \in X \setminus \{x_{\alpha}\}.$$

Em termos mais específicos, essa propriedade equivale a dizer que x_{α} é um minimizador global de T_{α} . Esse resultado é expresso na seguinte proposição, cuja demonstração em mais detalhes pode ser vista no trabalho de Kirsch (2011, Teorema 2.11).

Proposição 2.1.1. Dado y^{δ} qualquer, para cada $\alpha > 0$, o funcional T_{α} conforme (2.1.1) admite um minimizador global $x_{\alpha} \in X$. Isto é, um único vetor em X tal que:

$$T_{\alpha}(x_{\alpha}) < T_{\alpha}(x), \forall x \in X.$$

Observação 2.1.1. Dada a existência e unicidade do minimizador, podemos denotar na forma:

$$x_{\alpha} = \underset{x \in X}{\operatorname{arg\,min}} \ T_{\alpha}(x),$$

ou seja, x_{α} é o único argumento $x \in X$ que fornece o valor mínimo para $T_{\alpha}(x)$.

A partir desse resultado, vemos que, independente da escolha do α e do y tido como referência, o minimizador x_{α} está sempre bem definido. Podemos estabelecer assim um operador de reconstrução para o método de regularização desejado. Tal operador é dado conforme a definição a seguir. **Definição 2.1.2.** Para cada $\alpha > 0$, definimos o operador de reconstrução de Tikhonov R_{α} dado por:

$$R_{\alpha}: Y \to X$$
$$y \mapsto x_{\alpha} = \operatorname*{arg\,min}_{x \in X} T_{\alpha}(x)$$

sendo T_{α} conforme Definição 2.1.1 a partir do $y \in Y$, e x_{α} o minimizador do T_{α} estabelecido.

Observação 2.1.2. É possível demonstrar que obter o minimizador x_{α} equivale a resolver a equação:

$$(A^*A + \alpha I)x_\alpha = A^*y, \tag{2.1.2}$$

denotando $I : X \to X$ o operador identidade em X. Além disso, mostra-se que o operador $A^*A + \alpha I$ é inversível, garantindo que essa equação tem uma solução única $x_{\alpha} = (A^*A + \alpha I)^{-1}A^*y$. Assim, o operador R_{α} pode ser expresso como:

$$R_{\alpha} = (A^*A + \alpha I)^{-1}A^*.$$

Mais detalhes podem ser vistos em (KIRSCH, 2011).

A partir do operador R_{α} definido que conseguimos construir o Método de Tikhonov. Relembrando do Capítulo anterior, um método de regularização consiste de um operador de reconstrução aliado a um parâmetro de regularização. Nos falta, portanto, definir um parâmetro de regularização, isto é, uma escolha $\alpha = \alpha(\delta, y^{\delta})$ em função do vetor medido e do nível de ruído respectivo.

Não há exatamente uma única forma de escolha para α , diferentes estratégias podem ser estabelecidas a depender do problema. De todo modo, o seguinte teorema demonstrado por Kirsch (2011) estabelece uma condição suficiente para que a escolha de α , aliada ao operador R_{α} , os tornam um método de regularização.

Teorema 2.1.1. Considere o problema inverso $Ax = y \text{ com } y \in \mathcal{R}(A)$. Seja $\alpha(\delta)$: $\mathbb{R}_+ \to \mathbb{R}_+$ um parâmetro de regularização em termos de δ . Para cada $y^{\delta} \in Y$ tal que $\|y - y^{\delta}\| \leq \delta$, defina $x_{\alpha} = R_{\alpha}y^{\delta}$, conforme Definição 2.1.2. Se

$$\lim_{\delta \to 0} \alpha(\delta) = 0 \quad e \quad \lim_{\delta \to 0} \frac{\delta^2}{\alpha(\delta)} = 0,$$

então,

$$\lim_{\delta \to 0} x_{\alpha} = A^{\dagger} y = x^{\dagger}$$

Em outras palavras, $(R_{\alpha}, \alpha(\delta))$ constituem um método de regularização.

Demonstração. Veja o Teorema 2.12 (KIRSCH, 2011).

Esse teorema estabelece duas condições básicas para α a fim de garantir a propriedade de regularização: de que $\alpha \to 0$ e $\frac{\delta^2}{\alpha} \to 0$, ambas conforme $\delta \to 0$. A primeira indica que o grau de penalização, o parâmetro de regularização em questão, deve se reduzir à medida que o nível de ruído também diminui. A segunda condição estabelece que essa diminuição de α não deve ocorrer tão mais bruscamente que o ruído, devendo decrescer mais lentamente que a ordem de δ^2 . Nota-se que nesse caso particular a escolha $\alpha \in a$ *priori*, dependendo apenas do nível de ruído, independente do vetor y^{δ} .

Todavia, em alguns casos pode-se utilizar uma escolha *a posteriori* para aprimorar o método. Uma escolha comum é escolher o parâmetro α de forma que

$$\|Ax_{\alpha} - y^{\delta}\| = \delta.$$

Esse é o chamado Princípio da Discrepância de Morozov. Com esse procedimento, a solução x_{α} se aproxima da solução x^{\dagger} procurada à medida que $\delta \rightarrow 0$ (KIRSCH, 2011). Isso ainda é válido tratando o Princípio da Discrepância com uma certa tolerância. Isto é, fixando constantes $0 < t_0 < t_1$ apropriadas, determina-se α de forma que

$$t_0\delta \le \|Ax_\alpha - y^\delta\| \le t_1\delta$$

Uma variação do método de Tikhonov que usa tal princípio é o chamado Método de Tikhonov-Phillips. Nele, é construída uma sequência *a priori* $(\alpha_n)_{n\in\mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^*_+$ adequada. Para cada termo α_n , se estabelece o funcional T_{α_n} conforme Definição 2.1.1, definindo ainda

$$x_n = \operatorname*{arg\,min}_{x \in X} T_{\alpha_n}(x).$$

Fixado uma constante $\tau > 1$, o parâmetro α_n escolhido é o primeiro que faz atingir o critério de parada

$$\|Ax_n - y^{\delta}\| \le \tau \delta,$$

retornando $R_{\alpha}y^{\delta} = x_n$. Pode-se provar que com essa escolha de parâmetros, o Tikhonov-Phillips é um método de regularização (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023).

Tratamos nesse tópico do método de Tikhonov, considerando algumas variações a depender da escolha do parâmetro. No tópico a seguir, discutimos mais a fundo uma das variações que envolve um procedimento iterativo adaptado que segue um princípio de funcionamento similar, o chamado *método de Tikhonov Iterado*.

2.1.2 Tikhonov Iterado

Uma variante do Método de Tikhonov é o chamado Método de Tikhonov Iterado, o qual opera por meio de uma sequência definida iterativamente, fornecendo uma aproximação ao final com base no critério de parada conhecido como Princípio da Discrepância. Novamente, o método atua minimizando um funcional similar ao estudado na seção anterior. Porém, agora a penalização dessa função terá como referência o ponto imediatamente anterior, executando esse processo iterativamente até atingir o critério de parada estabelecido.

Primeiramente, trabalhamos com o Problema inverso Ax = y conhecendo um vetor $y^{\delta} \in Y$ tal que $||y^{\delta} - y|| \leq \delta$ para $\delta > 0$, partindo de um ponto inicial $x_0 \in X$. Então, a cada ponto x_k , é escolhido um certo parâmetro $\alpha_k > 0$ e define-se o funcional T_k dado por

$$\begin{split} T_k &: X \to Y \\ x \mapsto \|Ax - y^{\delta}\|^2 + \alpha_k \|x - x_k\|^2. \end{split}$$

Em seguida, toma-se como próximo ponto x_{k+1} o minimizador de T_k , isto é, o vetor x_{k+1} tal que:

$$T_k(x_{k+1}) < T_k(x), \forall x \in X \setminus \{x_{k+1}\}.$$

A ideia é que no funcional T_k figura novamente o termo $||Ax - y^{\delta}||^2$, que mede o quão distante a imagem obtida com o ponto está do vetor medido. Porém, agora conta com um termo de penalização na forma $||x - x_k||^2$, não mais dado pela simples norma do vetor, mas sim como a norma da diferença, consistindo na distância até o vetor x_k anterior.

A definição da sequência $(\alpha_k)_{k\in\mathbb{N}} \subset \mathbb{R}^*_+$ será ponto importante para o bom funcionamento do Tikhonov Iterado. Como veremos ao longo dessa seção, existem algumas restrições para essa sequência para garantir a convergência do método. De todo modo, sua escolha pode ser tanto *a priori* como *a posteriori*, isto é, a definição de (α_k) pode ser independente ou tendo restrições com base nos x_k obtidos ao longo do processo. Em particular, usando uma sequência constante $\alpha_k = \alpha$, para um $\alpha > 0$, chamamos o método de *Tikhonov Iterado Estacionário*.

Tal como no Tikhonov Clássico, precisamos a princípio garantir que existe um único vetor que dê valor mínimo para T_k . De fato, é possível demonstrar que dados quaisquer $\alpha_k > 0$ e $x_k \in X$, o funcional T_k definido acima admite um mínimo global (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). Com isso, podemos definir o processo precisamente conforme a definição a seguir.

Definição 2.1.3 (Sequência de Tikhonov Iterado). Considere o problema inverso Ax = ycom $y^{\delta} \in Y$ tal que $||y - y^{\delta}|| < \delta \in \delta > 0$.

Escolha uma sequência $(\alpha_k)_{k\in\mathbb{N}} \subseteq \mathbb{R}_+$. A sequência do Método de Tikhonov Iterado consiste no seguinte processo iterativo: escolha um ponto inicial $x_0 \in X$ e construa a sequência $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ definindo para cada $k \in \mathbb{N}$ o funcional $T_k : X \to \mathbb{R}$ como

$$T_k(x) = \|Ax - y^{\delta}\|^2 + \alpha_k \|x - x_k\|^2, \qquad (2.1.3)$$

e defina o próximo iterado $x_{k+1} \in X$ por

$$x_{k+1} = \underset{x \in X}{\arg\min} T_k(x).$$
 (2.1.4)

Podemos definir o método para o caso sem ruídos $\delta = 0$, isto é, trabalhando com os vetores imagem $y \in \mathcal{R}(A)$ em vez dos vetores ruidosos y^{δ} . Isto pode ser feito substituindo o vetor y^{δ} no funcional (2.1.3) pelo vetor $y \in \mathcal{R}(A)$.

A definição acima apenas descreve a sequência utilizada, não consiste no método de regularização em si. O Método de Tikhonov Iterado consiste em retornar uma solução aproximada x^{δ} através de um critério de parada para a sequência $(x_k)_k$ definida acima. Em especial, retorna-se o primeiro ponto x_k da sequência que atinja o critério do Princípio da Discrepância.

Para o Princípio da Discrepância, fixa-se uma constante $\tau \in \mathbb{R}$, tal que $\tau > 1$. Dada a sequência da Definição 2.1.3, é retornado como solução aproximada $x^{\delta} \in X$ o primeiro termo da sequência que atinja o critério do Princípio da Discrepância. Isto é, estabeleça $x^{\delta} = x_{k_{\delta}}$, onde o índice k_{δ} é definido por:

$$k_{\delta} := \inf\{k \in \mathbb{N} : \|Ax_k - y^{\delta}\| \le \tau\delta\}.$$

$$(2.1.5)$$

Nossa intenção até o final dessa seção é abordar a propriedade de Regularização do Método de Tikhonov Iterado. Isto é, que a aproximação x^{δ} é tal que $x^{\delta} \to x^{\dagger}$ conforme $\delta \to 0$. Dividiremos isso em algumas etapas.

Primeiramente, veremos algumas condições que fazem o critério de parada bem definido, ou seja, que o índice k_{δ} é atingido e a iteração termina após um número finito de passos. Em seguida, veremos que no caso sem ruídos, trabalhando com vetores $y \in \mathcal{R}(A)$ e $\delta = 0$, o algoritmo não para e a sequência converge para x^{\dagger} . Ao final, veremos como essas propriedades, aliadas à chamada Estabilidade do método, garantem a propriedade de regularização.

Começando pela parada do algoritmo, veremos primeiramente a monotonia da norma do resíduo $||Ax_k - y^{\delta}||$. Inicialmente, note que pela definição de x_{k+1} , como sendo minimizador de T_k conforme (2.1.3), temos que:

$$T_k(x_{k+1}) \le T_k(x_k)$$

Pela definição do funcional T_k , segue

$$T_k(x_{k+1}) \le T_k(x_k)$$
$$\|Ax_{k+1} - y^{\delta}\|^2 + \alpha_k \|x_{k+1} - x_k\|^2 \le \|Ax_k - y^{\delta}\|^2 + \alpha_k \|x_k - x_k\|^2 = \|Ax_k - y^{\delta}\|^2,$$

ou seja, $||Ax_{k+1} - y^{\delta}||^2 + \alpha_k ||x_{k+1} - x_k||^2 \le ||Ax_k - y^{\delta}||^2$.

Como $||Ax_{k+1}-y^{\delta}||^2 \leq ||Ax_{k+1}-y^{\delta}||^2 + \alpha_k ||x_{k+1}-x_k||^2$, obtemos por transitividade que $||Ax_{k+1}-y^{\delta}||^2 \leq ||Ax_k-y^{\delta}||^2$. Pela norma ser não-negativa, segue que para todo $k \in \mathbb{N}$, vale $||Ax_{k+1}-y^{\delta}|| \leq ||Ax_k-y^{\delta}||$, ou seja, o resíduo é monótono e não-crescente. Assim, temos ao menos a garantia de que a imagem gerada pela sequência Ax_k não se distancia do vetor medido.

A seguir, veremos que o erro, dado por $||x^{\dagger} - x_k||$, é também monótono sob certas hipóteses. A demonstração desse fato seguirá a partir de mostrar que o ganho $||x^{\dagger} - x_{k+1}||^2 - ||x^{\dagger} - x_k||^2$ é não-positivo.

Dados os 3 vetores $x^{\dagger}, x_k, x_{k+1}$ pertencentes ao espaço de Hilbert real X, prova-se a seguinte identidade:

$$\|x^{\dagger} - x_{k+1}\|^2 - \|x^{\dagger} - x_k\|^2 = -\|x_{k+1} - x_k\|^2 + 2\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger}\rangle$$
(2.1.6)

Note que já temos o termo $-||x_{k+1} - x_k||^2 \leq 0$, para quaisquer $x_{k+1}, x_k \in X$. Resta agora observar as condições para que o termo $\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle$ seja também não-positivo.

Pelo fato de T_k admitir um mínimo global, é possível demonstrar que obter o minimizador x_{k+1} conforme a definição 2.1.3 equivale a solucionar o seguinte sistema linear (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023)

$$(A^*A + \alpha_k I)x_{k+1} = A^* y^{\delta} + \alpha_k x_k, \qquad (2.1.7)$$

o qual admite solução única, podendo provar que $(A^*A + \alpha_k I)$ tem um operador inverso contínuo.

É possível obter também pela linearidade de A que:

$$(A^*A + \alpha_k I)x_{k+1} = A^*y^{\delta} + \alpha_k x_k. \iff x_{k+1} - x_k = -\frac{1}{\alpha_k} \left[A^*(Ax_{k+1} - y^{\delta}) \right].$$
(2.1.8)

Usando essa expressão no termo $\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle$, obtém-se:

$$\begin{aligned} \langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle \\ &= \langle -\frac{1}{\alpha_k} \left[A^* (A x_{k+1} - y^{\delta}) \right], x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle \\ &= -\frac{1}{\alpha_k} \langle A x_{k_1} - y^{\delta}, A (x_{k+1} - x^{\dagger}) \rangle \qquad \text{(propriedades do P.I. e da adjunta } A^*) \\ &= -\frac{1}{\alpha_k} \langle A x_{k+1} - y^{\delta}, A x_{k+1} - y \rangle \qquad \text{(linearidade de } A e A x^{\dagger} = y). \end{aligned}$$

Ou seja,

$$\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle = -\frac{1}{\alpha_k} \langle A x_{k+1} - y^{\delta}, A x_{k+1} - y \rangle.$$
 (2.1.9)

Para o caso $\delta = 0$, temos $y^{\delta} = y$, portanto:

$$-\frac{1}{\alpha_k} \langle Ax_{k+1} - y^{\delta}, Ax_{k+1} - y \rangle = -\frac{1}{\alpha_k} \|Ax_{k+1} - y\|^2 \le 0,$$

visto que $-\frac{1}{\alpha_k} < 0$. Com isso, por (2.1.6) segue que $||x^{\dagger} - x_{k+1}||^2 - ||x^{\dagger} - x_k||^2 \le 0$, de onde temos a monotonia do erro $||x^{\dagger} - x_{k+1}|| \le ||x^{\dagger} - x_k||$.

Já no caso $\delta > 0$, podemos demonstrar que para x_k que não atingiu o critério de parada, isto é, caso $||Ax_k - y^{\delta}|| > \tau \delta$ conforme (2.1.5), se tivermos $\alpha_k \ge \frac{||A||^2}{c-1}$ para uma constante c > 1 fixa, então:

$$\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle \le -\frac{1}{\alpha_k} \left(\frac{1}{c} - \frac{1}{\tau} \right) \|Ax_k - y^{\delta}\|^2,$$

conforme Margotti, Hafemann e Santana (2023, Exercício B.6(c)).

Assim, assumindo $\tau > c > 1$, segue que $\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle \leq 0$ e então por (2.1.6) obtém-se $||x^{\dagger} - x_{k+1}||^2 - ||x^{\dagger} - x_k||^2 \leq 0$. Ou seja, $||x^{\dagger} - x_{k+1}|| \leq ||x^{\dagger} - x_k||$ para todo x_k que não atingiu o critério da discrepância, nos garantindo que o erro da sequência é não-crescente.

Em outros termos, esses fatos mostram que sob a condição $\alpha_k \geq \frac{\|A\|^2}{c-1}$, o erro de iteração da sequência é monótono enquanto não atinge o critério de parada. Cada iterado x_{k+1} fica sempre mais próximo, ou ao menos não mais distante, da solução x^{\dagger} que o iterado anterior x_k . Além disso, em quaisquer condições a monotonia também segue no caso $\delta = 0$. A partir desses dois fatos, adicionando a condição de que $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} = \infty$, podemos garantir a seguinte proposição:

Proposição 2.1.2 (Parada do Tikhonov Iterado). Se $\delta > 0$, para $\tau > 1$ $e \ c \in \mathbb{R}$ fixos tais que $\tau > c > 1$, se a sequência de parâmetros $(\alpha_k) \subset \mathbb{R}_+$ for tal que $\alpha_k > \frac{||A||^2}{c-1}$ para todo $k \ e \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} = \infty$, então k_{δ} está bem definido. Ou seja, existe $k_{\delta} \in \mathbb{N}$ tal que

$$\|Ax_{k_{\delta}} - y^{o}\| \le \tau \delta,$$

garantindo a parada do algoritmo de Tikhonov Iterado.

Essa proposição estabelece que o método apresentado, com as condições estabelecidas, tem sua parada bem definida no caso com ruídos. Isto é, no cenário $\delta > 0$, o critério de parada é atingido e a execução do algoritmo pode ser encerrada obtendo uma aproximação com a tolerância estabelecida. Vemos ainda que as condições são essencialmente restrições sobre a sequência (α_k).

Já no caso sem ruídos, isto é, quando $\delta = 0$, outra situação ocorre: já não temos a garantia de parada do algoritmo. Porém, veremos que conseguimos garantir outros dois fatos: que o algoritmo não termina, a menos que já inicie pela solução; e outro é que o algoritmo converge para a solução x^{\dagger} . Tome $\delta = 0$. Primeiramente, vejamos por que a parada só ocorre se x_0 já atende o critério de parada, ou seja, já é uma solução. Lembrando, o critério de parada estabelecido é que

$$\|Ax_k - y^\delta\| \le \tau \delta.$$

Porém, como estamos supondo $\delta = 0$, para qualquer $\tau > 1$ essencialmente o critério de parada se torna

$$\|Ax_k - y\| = 0.$$

Isso implicaria, supondo que existe um índice k_{δ} bem definido, que $Ax_{k_{\delta}} - y = 0$. Com isso, por (2.1.8), teríamos:

$$x_{k_{\delta}} - x_{k_{\delta}-1} = \frac{1}{\alpha_k} \left[A^* (Ax_{k_{\delta}} - y) \right] = \frac{1}{\alpha_k} A^* 0 = 0$$

ou seja, $x_{k_{\delta}} - x_{k_{\delta}-1} = 0$, logo $x_{k_{\delta}} = x_{k_{\delta}-1}$. Assim, temos $Ax_{k_{\delta}-1} - y = 0$ e o mesmo raciocínio pode ser usado para obter que $x_{k_{\delta}-1} = x_{k_{\delta}-2}$.

Indutivamente, observamos que $x_{k_{\delta}} = x_{k_{\delta}-1} = x_{k_{\delta}-2} = \cdots = x_0$. Isto é, $x_0 = x_{k_{\delta}}$, nos mostrando que $Ax_0 = y$. Portanto, o algoritmo só teria sua parada se x_0 já fosse uma solução do Problema Inverso. Caso contrário, o critério de parada nunca é atingido se os dados não contém ruídos.

Vejamos então a convergência do método no caso $\delta = 0$. Para isso, vamos notar inicialmente que $Ax_k \rightarrow y$ através da proposição abaixo.

Proposição 2.1.3. Dada a sequência $(x_k)_{k\in\mathbb{N}}$ do Método de Tikhonov Iterado, se $\delta = 0$ $e \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} = \infty$, então $||Ax_k - y|| \to 0$, ou seja, $Ax_k \to y$.

Demonstração. (Ideia) A partir da identidade (2.1.6) e que no caso $\delta = 0$ obtemos a identidade $\langle x_{k+1} - x_k, x_{k+1} - x^{\dagger} \rangle = -\frac{1}{\alpha_k} ||Ax_k - y||^2$, podemos obter que

$$\frac{2}{\alpha_k} \|Ax_k - y\|^2 \le \|x^{\dagger} - x_k\|^2 - \|x^{\dagger} - x_{k+1}\|^2.$$

Disso, dado $n \in \mathbb{N}^*$ qualquer,

$$2\sum_{j=0}^{n-1} \frac{1}{\alpha_k} \|Ax_k - y\|^2 \le \sum_{j=0}^{n-1} \left(\|x^{\dagger} - x_k\|^2 - \|x^{\dagger} - x_{k+1}\|^2 \right)$$
$$= \|x^{\dagger} - x_0\|^2 - \|x^{\dagger} - x_n\|^2$$
$$\le \|x^{\dagger} - x_0\|^2.$$

observando a soma telescópica no lado direito.

A partir dessa desigualdade, analisando o limite do somatório por comparação, temos $\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} \|Ax_k - y\|^2 \le \|x^{\dagger} - x_0\|^2 < \infty.$ Supondo por absurdo que $\|Ax_k - y\| \ne 0$,

teríamos que $||Ax_k - y|| \ge c$, para algum c > 0, visto que a sequência é monótona decrescente.

Desse modo,

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} \|Ax_k - y\|^2 \ge \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} c^2 = c^2 \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{\alpha_k} = \infty$$

o que é um absurdo. Portanto, $||Ax_k - y|| \to 0$, isto é, $Ax_k \to y$.

Essa proposição nos garante que ao menos a sequência Ax_k converge para o vetor imagem y. Resta agora analisar a convergência de x_k por si só, a qual será garantida pela proposição abaixo.

Proposição 2.1.4. A sequência $(x_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset X$, definida pelo Método de Tikhonov Iterado, é de Cauchy. (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023, Exercício B.7)

A partir do fato da sequência (x_k) ser de Cauchy, dado que X é um espaço de Hilbert, isto é, completo com a norma induzida pelo produto interno, temos pela definição de espaço completo que x_k converge em X. Ou seja, existe um limite em X para a sequência. Denotemos então $\hat{x} := \lim_k x_k$ o limite. Veja que

$$y = \lim_{k} Ax_k = A\hat{x}$$

concluindo pela unicidade do limite que $A\hat{x} = y$. Portanto, \hat{x} é de fato uma solução para o problema inverso. Mostremos a seguir que \hat{x} corresponde à solução de norma mínima x^{\dagger} , através da seguinte proposição.

Proposição 2.1.5 (Convergência do Tikhonov Iterado sem ruído). Dada a sequência (x_k) de Tikhonov Iterado, se $\delta = 0$, $\sum \frac{1}{\alpha_k} = \infty$ e estabelecendo o passo inicial $x_0 = 0$, tem-se que:

$$\lim_{k} x_k = x^{\dagger}.$$

Demonstração. Por (2.1.8), temos que $x_{k+1} - x_k \in \mathcal{R}(A^*)$. Em especial, por propriedade de operadores lineares em espaços de Hilbert, sabemos que $\mathcal{R}(A^*) \subset \mathcal{N}(A)^{\perp}$. Assim, $x_{k+1} - x_k \in \mathcal{N}(A)^{\perp}$, e sendo esse um espaço vetorial, segue que qualquer soma dos termos pertence ao espaço, de onde podemos ter que $\sum_{j=0}^{n-1} x_{k+1} - x_k \in \mathcal{N}(A)^{\perp}$. Mas, vendo que ao estabelecer $x_0 = 0$ obtemos

$$\sum_{j=0}^{n-1} x_{k+1} - x_k = x_{k+1} - x_0 = x_{k+1},$$

concluímos que $x_k \in \mathcal{N}(A)^{\perp}$ para todo k. Ainda, por propriedade de complemento ortogonal, $\mathcal{N}(A)^{\perp}$ é um espaço fechado, logo, $\lim_k x_k = \hat{x} \in \mathcal{N}(A)^{\perp}$.

$$A(\hat{x} - x^{\dagger}) = A\hat{x} - Ax^{\dagger} = y - y = 0,$$

isto é, $\hat{x} - x^{\dagger} \in \mathcal{N}(A)$. Com $\hat{x} - x^{\dagger} \in \mathcal{N}(A) \cap \mathcal{N}(A)^{\perp}$, obtemos $\hat{x} - x^{\dagger} = 0$, ou seja, $\hat{x} = x^{\dagger}$, como queríamos.

Essa proposição mostra que, em um caso ideal sem ruído, o algoritmo converge para a solução desejada. Esse fato ajudará ainda a demonstrar que o algoritmo consiste em um método de regularização. Para isso, veremos antes a chamada Estabilidade do método.

Voltemos a considerar $\delta > 0$. A ideia da estabilidade é verificar que, conforme o nível de ruído se aproxima de 0, os passos intermediários do algoritmo ficam próximos o bastante do caso sem ruído. Ou seja, mesmo que haja um certo nível de ruído, a sequência gerada não se afasta tanto daquela obtida caso ideal.

Lembrando que a sequência é definida em termos do minimizador de um funcional $T_k(x)$, o qual depende de y^{δ} , teremos uma sequência diferente para cada nível de ruído. Em outros termos, para cada $\delta > 0$ fixado, obtemos uma sequência diferente que denotaremos $(x_k^{\delta})_k$. A sequência gerada no caso sem ruídos $\delta = 0$ denotaremos simplesmente $(x_k)_{k \in \mathbb{N}}$. Essencialmente, a estabilidade do algoritmo diz que, dado um k fixo, para todo $m \in \{0, \ldots, k\}$ tem-se que:

$$\lim_{\delta \to 0} x_m^\delta = x_m$$

Isso se traduz na seguinte proposição.

Proposição 2.1.6 (Estabilidade do Tikhonov Iterado). Seja $(\delta_j) \subset \mathbb{R}^+$ tal que $\delta_j \to 0$. Para cada δ_j , construímos a sequência $(x_k^{\delta_j})_k$ definida pelo Tikhonov Iterado, convencionando para $\delta = 0$ que $(x_k^0) = (x_k)$ e estabelecendo como ponto inicial $x_0^{\delta_j} = 0$, para qualquer δ_j . Dado $k \in \mathbb{N}$ fixo, segue que para todo $m \in \mathbb{N}$ tal que $0 \leq m \leq k$, obtém-se:

$$\lim_{j \to \infty} x_m^{(\delta_j)} = x_m$$

Demonstração. A prova desse resultado é feita por indução. Para o caso k = 0, temos $x_0^{\delta_j} = 0$ para qualquer δ_j , logo $\lim x_0^{\delta_j} = x_0$. Suponha agora que vale para um $k \in \mathbb{N}$ arbitrário, ou seja, que

$$\lim_{j} x_m^{\delta_j} = x_m, \forall m \in \{0, \dots, k\}.$$

Por (2.1.7), segue que

$$x_{k+1}^{\delta_j} = (A^*A + \alpha_k I)^{-1} (A^* y^{\delta} + \alpha_k x_k^{\delta_j})$$

Como $(A^*A + \alpha_k I)^{-1}$ é contínuo, podemos obter:

$$\lim_{j} x_{k+1}^{\delta_j} = \lim_{j} (A^*A + \alpha_k I)^{-1} (A^*y^{\delta} + \alpha_k x_k^{\delta_j})$$
$$= (A^*A + \alpha_k I)^{-1} (A^*y^{\delta} + \alpha_k \lim_j x_k^{\delta_j})$$
$$= (A^*A + \alpha_k I)^{-1} (A^*y^{\delta} + \alpha_k x_k)$$
$$= x_{k+1},$$

tendo por hipótese de indução que $\lim_{j} x_{k}^{\delta_{j}} = x_{k}$. Ou seja, $\lim_{j} x_{k+1}^{\delta_{j}} = x_{k+1}$. Além disso, já temos por hipótese que o limite vale para $0 \le m \le k$, portanto vale para todo $0 \le m \le k+1$, como queríamos.

Vimos que dado um $\delta > 0$, sob determinadas condições o método atinge o critério de parada estabelecido. Assim, para cada sequência $(x_k^{\delta})_{k \in \mathbb{N}}$ gerada com o nível de ruído δ , existe um índice $k_{\delta} \in \mathbb{N}$ que faz o termo $x_{k_{\delta}}^{\delta}$ atingir o critério do Princípio da Discrepância, o qual é tratado como a aproximação buscada. Nosso intuito a seguir, dadas as proposições listadas nessa seção, é provar que o método de Tikhonov Iterado se trata, de fato, de um método de regularização. Ou seja, que:

$$x_{k_{\delta}}^{\delta} \to x^{\dagger}$$
, conforme $\delta \to 0$.

Esse fato pode ser expresso através da proposição abaixo.

Proposição 2.1.7. Seja $(\delta_j) \subset \mathbb{R}_+$ tal que $\delta_j \to 0$. Então, nas condições elencadas nas proposições anteriores, tem-se que:

$$\lim_{j \to \infty} x_{k_{\delta_j}}^{\delta_j} = x^{\dagger}.$$

Isto é, o Tikhonov-Iterado é um método de regularização.

Demonstração. (Ideia) Fixe $\varepsilon > 0$. Como para $\delta = 0$ temos $x_k \to x^{\dagger}$, segue que para algum $M \in \mathbb{N}$,

$$\|x_M - x^{\dagger}\| < \frac{\varepsilon}{2}.$$

Ainda, pela estabilidade, existe $N_1 \in \mathbb{N}$ tal que

$$\|x_M^{\delta_j} - x_M\| < \frac{\varepsilon}{2}, \forall j \ge N_1.$$

Devemos avaliar duas possibilidades da sequência k_{δ_j} . Para o caso $k_{\delta_j} \to \infty$, existe N_2 tal que $k_{\delta_j} \ge M$, e pela monotonia do erro tem-se $||x_{k_{\delta_j}}^{\delta_j} - x^{\dagger}|| \le ||x_M^{\delta_j} - x^{\dagger}||$. Logo, para j suficientemente grande:

$$\|x_{k_{\delta_j}}^{\delta_j} - x^{\dagger}\| \le \|x_M^{\delta_j} - x^{\dagger}\| \le \|x_M^{\delta_j} - x_M\| + \|x_M - x^{\dagger}\| \le \varepsilon.$$

Ou seja, $x_{k_{\delta_j}}^{\delta_j} \to x^{\dagger}$.

Pode-se mostrar que o caso $k_{\delta_i} \not\to \infty$ só ocorre se x_0 já for solução.

Observação 2.1.3. Note que nesse caso não explicitamos o operador de reconstrução R_t envolvido, apenas as aproximações $x_{k_{\delta}}^{\delta}$ geradas. De todo modo, conforme discutido anteriormente, cada vetor y^{δ} e nível de ruído $\delta > 0$ gerarão uma sequência x_k^{δ} e um índice de parada k_{δ} correspondente. Com isso, pode-se definir um operador R_k que faz a associação $R_k y^{\delta} = x_k^{\delta}$. Nessas condições, o par $\left(R_{\frac{1}{\beta}}, \beta = \frac{1}{k_{\delta}}\right)$ corresponde ao método de regularização de Tikhonov Iterado.

Uma observação importante é que ao longo dessa seção estabelecemos essencialmente duas condições sobre a sequência (α_k) para garantir a regularização do método: $\sum \frac{1}{\alpha_k} = \infty \ e \ \alpha_k \ge \frac{\|A\|^2}{c-1}$. Como vimos, essas duas condições garantem a convergência no caso sem ruídos e a parada no caso de ruído positivo. Porém, prova-se também que o método atende a Propriedade de Regularização estabelecendo α_k dada por

$$\alpha_k = \alpha_0 q^k,$$

fixado $\alpha_0 > 0$ e 0 < q < 1 suficientemente próximo de 1 (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023).

O método de Tikhonov-Iterado será um dos métodos para problemas lineares amplamente utilizado ao longo dos experimentos executados nesse trabalho. Portanto, buscou-se compreender mais a fundo alguns aspectos sobre a propriedade de regularização. Veremos em seções posteriores como esse método pode ser aliado a métodos para problemas não lineares, avaliando no capítulo final como se comporta com o problema inverso da TIE.

2.2 Método de regularização do gradiente

O método de regularização do gradiente é outro dos principais métodos para problemas inversos lineares. Ele se utiliza do princípio de um dos métodos clássicos de otimização: o chamado método de otimização do gradiente. Porém, no caso do método de regularização, são exploradas algumas condições próprias no contexto da solução de problemas inversos.

Novamente, estamos interessados em buscar uma solução de mínimos quadrados para o problema Ax = y conhecendo um vetor y^{δ} . Isto é, queremos encontrar um $x^{\dagger} \in X$ tal que

$$||Ax^{\dagger} - y|| \le ||Ax - y||, \forall x \in X.$$

Assim, o método se baseia novamente em achar um argumento mínimo para o funcional $F: X \to \mathbb{R}$ dado por

$$F(x) = \frac{1}{2} ||Ax - y^{\delta}||^2.$$

A estratégia utilizada pelo método em questão se trata de gerar uma sequência iterativa 'andando' em uma direção de decrescimento de F. Isto é, na iteração $x_k \in X$, queremos uma direção $v_k \in X$ e um coeficiente $\lambda_k > 0$, chamado tamanho de passo, tais que

$$F(x_k + \lambda_k v_k) \le F(x_k)$$

Tendo uma direção v_k e um tamanho de passo λ_k a cada iteração, determina-se $x_{k+1} = x_k + \lambda_k v_k$, seguindo iterativamente até atingir um determinado critério. Em especial, podemos usar o critério da discrepância $||Ax_k - y^{\delta}|| \leq \tau \delta$ como parada.

No Método do Gradiente, se utiliza justamente a direção oposta ao gradiente do funcional F no ponto corrente, que se trata da direção que fornece o maior decrescimento. Em particular, sendo A um operador linear e limitado entre espaços de Hilbert, o método é bastante conveniente, pois, conforme veremos, o gradiente do funcional F em um ponto x é nesse caso dado por:

$$\nabla F(x) = A^*(Ax - y^{\delta})$$

Com isso, conseguimos analisar as condições e estabelecer restrições adequadas para o método utilizando as propriedades da linearidade e continuidade de A, a fim de determinar uma aproximação apropriada para o Problema Inverso.

2.2.1 Definição do algoritmo

Antes de definir propriamente o método, vamos estabelecer algumas definições importantes, em especial do conceito central do método: o gradiente. Esse se relaciona basicamente com a ideia de derivada de um operador, a qual introduzimos a partir da seguinte definição.

Definição 2.2.1 (Derivada Direcional). Dados espaços normados X, Y, um operador $F: X \to Y$, e dois vetores $x, v \in X$ chamamos de *derivada direcional de F no ponto x na direção v* o limite

$$DF(x,v) = \lim_{t \to 0^+} \frac{F(x+tv) - F(x)}{t}.$$

Trata-se do conceito tradicional de derivada direcional, que expressa como a função está se alterando localmente em um ponto x analisando a direção específica v. Fixado um certo ponto x, podemos tentar estabelecer uma correspondência entre uma direção e sua derivada direcional em x, de onde se tem a ideia de uma "função derivada", expressa na definição a seguir.

Definição 2.2.2 (Derivada de Gâteaux). Se no ponto x a derivada direcional existe para qualquer direção $v \in X$, e se existe um operador linear limitado $\mathcal{T} : X \to Y$ tal que

$$\mathcal{T}v = DF(x, v), \forall v \in X,$$

dizemos que F é Gâteaux-Diferenciável em x. Chamamos \mathcal{T} a derivada de F em x, denotando $\mathcal{T} = F'(x)$.

Observação 2.2.1. No caso particular de $F : X \to \mathbb{R}$ ser um operador com contradomínio em \mathbb{R} , chamamos a derivada de Gâteaux de F em um ponto x de **gradiente** de F em x, denotando:

$$F'(x) = \nabla F(x).$$

O gradiente de um funcional $F: X \to \mathbb{R}$ em um ponto x nada mais é do que sua derivada $\nabla F(x): X \to \mathbb{R}$, que relaciona cada direção à derivada direcional em x. Veja que pela definição apresentada, $\nabla F(x)$ é um funcional, uma função com contradomínio real. Porém, na apresentação da seção trazemos o gradiente como uma direção, um vetor em X. Ocorre que em espaços de Hilbert é possível fazer uma correspondência entre funcionais lineares e limitados com vetores no próprio espaço, dada pelo Teorema da Representação de Riesz.

O Teorema da Representação de Riesz estabelece que, dado X espaço de Hilbert, para qualquer $f : X \to \mathbb{R}$ funcional linear e limitado, existe um único vetor $w \in X$ tal que $f(x) = \langle x, w \rangle$ para todo $x \in X$, tendo ainda que ||w|| = ||f|| (KREYSZIG, 1991, Teorema 3.8-1). Ou seja, f é representado por um vetor w, sendo possível calcular f(x)em um ponto x qualquer simplesmente através do produto interno $\langle x, w \rangle$.

Com isso, sendo X um espaço de Hilbert, sendo $\nabla F(X) : X \to \mathbb{R}$ um funcional linear e limitado, existe um vetor de representação $w \in X$ tal que $\nabla F(x)v = \langle v, w \rangle$. Portanto, podemos fazer essa correspondência do gradiente com o vetor que o representa, se referindo na maior parte do tempo simplesmente por $\nabla F(x) = w$.

Em particular, a proposição a seguir nos informa qual o vetor $\nabla F(x)$ em um ponto x qualquer, para o funcional F apresentado anteriormente.

Proposição 2.2.1. Sejam X, Y espaço de Hilbert, $A : X \to Y$ operador linear e limitado, $y \in Y \ e \ F : X \to \mathbb{R}$ funcional dado por $F(x) = ||Ax - y^{\delta}||^2$. Então, F é Gâteauxdiferenciável em qualquer ponto $x \in X$ e seu gradiente é dado por:

$$\nabla F(x) = A^* (Ax - y^{\delta}),$$

conforme (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023, Exercício B.3)

Esse teorema expressa que o gradiente do funcional pode simplesmente ser calculado usando o resíduo $Ax - y^{\delta}$ e o operador adjunto A^* . Esse gradiente nos é de especial interesse, pois, por resultado conhecido da otimização em espaços de Hilbert, a direção oposta ao gradiente $-\nabla F(x)$ é uma direção de decrescimento para F. Ou seja, existe t > 0 tal que

$$F(x - \lambda \nabla F(x)) \le F(x), \forall \lambda \in [0, t].$$

Em particular, prova-se que o gradiente num ponto x é a direção que fornece o maior decrescimento em torno desse ponto. Isso motiva a definição do algoritmo do método do gradiente, conforme será feito na descrição a seguir.

Definição 2.2.3 (Sequência do Método do Gradiente). Sejam X, Y espaços de Hilbert e $A: X \to Y$ operador linear e limitado. Considere o Problema Inverso Ax = y, conhecendo $y^{\delta} \in Y$ tal que $||y - y^{\delta}|| \leq \delta$, com $\delta > 0$. Defina o funcional $F: X \to \mathbb{R}$ dado por $F(x) = \frac{1}{2} ||Ax - y^{\delta}||^2$.

A sequência do método de regularização do Gradiente, ou simplesmente Método do Gradiente, é construída pelo seguinte procedimento: a partir de um ponto inicial x_0 , construa a sequência iterativa definida por:

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k \nabla F(x_k) \tag{2.2.1}$$

$$= x_k - \lambda_k A^* (A x_k - y^{\delta}),$$
 (2.2.2)

estabelecendo uma sequência de tamanhos de passo $(\lambda_k)_{k\in\mathbb{N}}\subset\mathbb{R}_+$.

Determinar uma sequência apropriada de tamanhos de passo λ_k é essencial para o bom funcionamento do método, sendo nosso objetivo ao longo da seção estabelecer as restrições adequadas. Escolhas diferentes podem ser feitas, tanto *a priori* como *a posteriori*. Algumas variações do Método do Gradiente são definidas essencialmente pela escolha da sequência (λ_k), recebendo nomes próprios. Listamos algumas delas.

Definição 2.2.4 (Variações do Método Gradiente). A partir da sequência do Método do Gradiente descrita na Definição 2.2.3, a depender da escolha da sequência (λ_k) denominamse as seguintes variações:

- Método de Landweber (LW) Uso de sequência de passos constante $\lambda_k = \lambda_{LW}$, para um $\lambda_{LW} \in \mathbb{R}_+$ tal que $0 < \lambda_{LW} < \frac{2}{\|A\|^2}$;
- Método de Máxima Descida (SD) Constrói-se uma sequência (λ_k) tal que em cada passo x_{k+1} obtenha-se o menor valor possível para a norma do resíduo ||Ax_{k+1}-y^δ||². Isto é, λ_k deve ser tal que

$$||A(x_k - \lambda_k \nabla F(x_k)) - y^{\delta}||^2 \le ||A(x_k - \lambda \nabla F(x_k)) - y^{\delta}||^2, \forall \lambda \in \mathbb{R}.$$

Prova-se que a cada passo é possível determinar um único λ_k com essa propriedade, dado por

$$\lambda_{SD,k} = \frac{\|A^*(Ax_k - y^{\delta})\|^2}{\|AA^*(Ax_k - y^{\delta})\|^2}$$

Veja (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023).

• Método de Erro Mínimo (ME) A sequência (λ_k) é construída de forma que $x_{k+1} = x_k - \lambda_k \nabla F(x_k)$ tenha o menor erro $||x_{k+1} - x^{\dagger}||^2$ a cada iteração. A princípio, construir essa sequência dependeria da solução x^{\dagger} desconhecida. Porém, no caso $\delta = 0$ e com $y \in \mathcal{R}(A)$ prova-se que existe um único λ_{ME} que fornece esse valor mínimo, dado por

$$\lambda_{ME,k} = \frac{\|Ax_k - y^{\delta}\|^2}{\|A^*(Ax_k - y^{\delta})\|^2}$$

As variações listadas acima são apenas algumas das possibilidades mais comuns de sequências para o Método do Gradiente. Outras sequências são possíveis, seguindo apenas algumas condições que serão discutidas mais adiante.

Veja que a Definição 2.2.3 apenas descreve a sequência iterativa utilizada no algoritmo, não se tratando método de regularização em si. O método de regularização do Gradiente consiste em utilizar a sequência descrita até que se atinja o Princípio da Discrepância

$$\|Ax_k - y^\delta\| \le \tau \delta,$$

para algum $\tau > 1$ fixado, definindo o primeiro x_k que atinja esse critério como a solução aproximada procurada.

Com isso, precisamos estabelecer condições para que o método seja bem definido e que as aproximações obtidas sejam satisfatórias. Portanto, a seção a seguir é dedicada a discutir sob quais condições o método descrito atende à propriedade de regularização.

2.2.2 Análise de convergência

Nesta seção, discutimos as condições e propriedades do Método do Gradiente que o fazem, de fato, um método de regularização. Iniciamos verificando que o algoritmo atinge a parada para $\delta > 0$ sob determinadas condições. Em seguida, verificamos que na ausência de ruído, o algoritmo converge para a solução x^{\dagger} caso não atinja a parada. Ao final, utilizamos as propriedades e condições para provar a estabilidade e consequentemente a regularização do método.

Primeiramente, vamos discutir a parada do algoritmo no caso de ruído nos dados. Sejam $y \in \mathcal{R}(A), y^{\delta} \in Y$ tais que $||y - y^{\delta}|| \leq \delta$ para $\delta > 0$, e seja também $x^{\dagger} = A^{\dagger}y$. Considere ainda a sequência (x_k) gerada pelo algoritmo descrito na Definição 2.2.3, a partir do y^{δ} informado.

Relembrando, dado $\tau>1$ fixo, o critério de parada é dado para o primeiro x_k que satisfaça

$$\|Ax_k - y^{\delta}\| \le \tau \delta, \tag{2.2.3}$$

retornando-o como aproximação para a solução. Para que o algoritmo atinja o critério de parada, queremos essencialmente verificar que o índice de parada k_{δ} dado por

$$k_{\delta} = \inf\{k \in \mathbb{N} : \|Ax_k - y^{\delta}\| \le \tau\delta\}.$$

$$(2.2.4)$$

está bem definido.

Para isso, começamos verificando que a sequência definida pelo erro da iteração $||x_k - x^{\dagger}||$ é monótona não-crescente, o que faremos verificando quando temos o ganho da iteração $||x_{k+1} - x^{\dagger}||^2 - ||x_k - x^{\dagger}||^2 \leq 0$. Assuma que $k < k_{\delta}$. Então, x_{k+1} está bem definido. Pelas propriedades do Produto Interno e a norma induzida, temos a seguinte identidade:

$$\|x_{k+1} - x^{\dagger}\|^{2} - \|x_{k} - x^{\dagger}\|^{2} = \|x_{k+1} - x_{k}\|^{2} + 2\langle x_{k+1} - x_{k}, x_{k} - x^{\dagger}\rangle.$$
(2.2.5)

Com ela, pelos fatos de que $x_{k+1} - x_k = -\lambda_k A^* (Ax_k - y^{\delta})$ e $Ax^{\dagger} = y$, pode-se chegar a partir do Princípio da Discrepância na seguinte estimativa:

$$\|x_{k+1} - x^{\dagger}\|^{2} - \|x_{k} - x^{\dagger}\|^{2} \le \lambda_{k}^{2} \|A^{*}(Ax_{k} - y^{\delta})\|^{2} - 2\lambda_{k}\|^{2} - 2\lambda_{k}\left(1 - \frac{1}{\tau}\right) \|Ax_{k} - y^{\delta}\|^{2}.$$

Assim, se o lado direito da inequação acima for menor ou igual a 0, teremos $||x_{k+1} - x^{\dagger}||^2 - ||x_k - x^{\dagger}||^2 \leq 0$. Dado que $\tau > 1$, para que essa desigualdade ocorra é suficiente que para cada $k \in \{k : ||Ax_k - y^{\delta}|| > \tau \delta\}$

$$\lambda_k \le 2\left(1 - \frac{1}{\tau}\right) \frac{\|Ax_k - y^{\delta}\|^2}{\|A^*(Ax_k - y^{\delta})\|^2} =: \lambda_k^{\max},$$
(2.2.6)

definindo essa cota superior para cada λ_k como λ_k^{\max} . Ou seja, se para cada termo da sequência que não atingiu o critério de parada tivermos $\lambda_k \leq \lambda_k^{\max}$, poderemos concluir que $||x_{k+1} - x^{\dagger}||^2 - ||x_k - x^{\dagger}||^2 \leq 0$, de onde podemos concluir $||x_{k+1} - x^{\dagger}|| \leq ||x_k - x^{\dagger}||$, como queríamos.

Se estabelecermos uma constante tal que $0 < c_0 < 1$ e definirmos

$$\hat{\lambda}_k^{\max} := (1 - c_0)\lambda_k^{\max} = 2(1 - c_0)\left(1 - \frac{1}{\tau}\right)\frac{\|Ax_k - y^\delta\|^2}{\|A^*(Ax_k - y^\delta)\|^2},\tag{2.2.7}$$

notamos que $\hat{\lambda}_k^{\max} < \lambda_k^{\max}$. Além disso, limitando $\lambda_k \leq \hat{\lambda}_k^{\max}$ conseguimos estimar o ganho da iteração por:

$$\|x_{k+1} - x^{\dagger}\|^{2} - \|x_{k} - x^{\dagger}\|^{2} \le -2c_{0}\lambda_{k}(1 - \frac{1}{\tau})\|Ax_{k} - y^{\delta}\|^{2}.$$
 (2.2.8)

Estabelecemos acima um limitante superior para cada λ_k , o que garante um ganho em cada passo. Para obter o término da iteração, é preciso agora utilizar uma limitação inferior para o tamanho do passo. Note que pela desigualdade da norma, visto que $||A^*|| = ||A||$, temos

$$||A^*(Ax_k - y^{\delta})|| \le ||A^*|| ||Ax_k - y^{\delta}|| = ||A|| ||Ax_k - y^{\delta}||.$$

Desse modo, de (2.2.7) obtemos

$$\begin{split} \hat{\lambda}_{k}^{\max} &= 2(1-c_{0})\left(1-\frac{1}{\tau}\right)\frac{\|Ax_{k}-y^{\delta}\|^{2}}{\|A^{*}(Ax_{k}-y^{\delta})\|^{2}}\\ &\geq 2(1-c_{0})\left(1-\frac{1}{\tau}\right)\frac{\|Ax_{k}-y^{\delta}\|^{2}}{\|A\|^{2}\|(Ax_{k}-y^{\delta})\|^{2}}\\ &= 2(1-c_{0})\left(1-\frac{1}{\tau}\right)\frac{1}{\|A\|^{2}} > 0. \end{split}$$

Isso nos indica que é possível estabelecer um limitante inferior não nulo para a sequência.

Com essas observações, chega-se na seguinte proposição, que estabelece que sob determinadas condições o algoritmo tem sua parada garantida.

Proposição 2.2.2. Considere o algoritmo do método do gradiente da Definição 2.2.3, estabelecendo o critério de parada (2.2.3). Se a sequência λ_k for tal que $\lambda_k \in [\lambda_{\min}, \hat{\lambda}_k^{\max}]$ para todo k, sendo $\hat{\lambda}_k^{\max}$ conforme (2.2.7) e λ_{\min} é uma constante tal que

$$2(1-c_0)\left(1-\frac{1}{\tau}\right)\frac{1}{\|A\|^2} \ge \lambda_{\min} > 0,$$

então o algoritmo atinge o critério de parada (2.2.3). Isto é, o índice k_{δ} conforme (2.2.4) está bem definido.

Demonstração. Ver Margotti, Hafemann e Santana (2023).

Note que as restrições são essencialmente sobre a sequência λ_k . Isso mostra a importância de escolher uma sequência adequada para garantir o bom funcionamento do método. Além disso, as restrições são dadas apenas em termos da norma do operador ||A||, da constante τ fixada e do resíduo a cada iteração $Ax_k - y^{\delta}$.

Agora, passamos a verificar que no caso ideal sem ruídos $\delta = 0$ não conseguimos a princípio garantir sua parada. Mas, caso a parada não ocorra, a sequência gerada pelo método converge à solução x^{\dagger} sob determinadas condições. Lembrando, aqui consideramos ainda o método do gradiente com a sequência definida em (2.2.2), denotando agora $y^{\delta} = y$.

Iniciamos mais uma vez verificando de que forma temos no ganho da iteração $||x_{k+1} - x^{\dagger}||^2 - ||x_k - x^{\dagger}||^2 \le 0$. Usando agora a identidade (2.2.5) e tendo $\delta = 0$, chegamos na seguinte estimativa:

$$||x_{k+1} - x^{\dagger}||^{2} - ||x_{k} - x^{\dagger}||^{2} \le \lambda_{k}^{2} ||Ax_{k} - y||^{2} - 2\lambda_{k} ||Ax_{k} - y||^{2}.$$

Portanto, para garantir a desigualdade $||x_{k+1} - x^{\dagger}||^2 - ||x_k - x^{\dagger}||^2 \leq 0$, podemos impor que o lado direito da inequação acima seja menor ou igual a 0. Pode-se observar que isso ocorre quando:

$$\lambda_k \le 2 \frac{\|Ax_k - y\|^2}{\|A^*(Ax_k - y)\|^2} =: \lambda_k^{\max},$$
(2.2.9)

denotando essa cota superior para cada λ_k como λ_k^{\max} .

De forma similar ao caso com ruídos, fixando uma constante 0 < $c_0 < 1$ e definindo

$$\hat{\lambda}_k^{\max} := (1 - c_0)\lambda_k^{\max} = 2(1 - c_0)\frac{\|Ax_k - y\|^2}{\|A^*(Ax_k - y)\|^2},$$
(2.2.10)

podemos garantir que ao limitar $\lambda_k \leq \hat{\lambda}_k^{\max}$ o ganho da iteração satisfaz

$$\|x_{k+1} - x^{\dagger}\|^{2} - \|x_{k} - x^{\dagger}\|^{2} \le -2\lambda_{k}c_{0}\|Ax_{k} - y\|^{2}.$$
(2.2.11)

Ainda, análogo a uma observação feita anteriormente, podemos notar que

$$\hat{\lambda}_k^{\max} = 2(1-c_0) \frac{\|Ax_k - y\|^2}{\|A^*(Ax_k - y)\|^2} \ge \frac{2(1-c_0)}{\|A\|^2}$$

A partir dessas observações e usando as condições listadas, conseguiremos provar que caso o algoritmo não pare, temos a convergência para a solução procurada. Veremos inicialmente que $Ax_k \rightarrow y$.

Proposição 2.2.3. Dada a sequência $(x_k)_k$ do método do gradiente na Definição 2.2.3, se $\delta = 0$ e $k_{\delta} = \infty$, isto é, se o critério de parada (2.2.3) nunca é atingido, então

$$\lim_{k \to \infty} Ax_k = y,$$

se $\lambda_k \in [\lambda_{\min}, \hat{\lambda}_k^{\max}]$, com $\hat{\lambda}_k^{\max}$ conforme (2.2.10) e λ_{\min} é tal que

$$\frac{2(1-c_0)}{\|A\|^2} \ge \lambda_{\min} > 0.$$

Isso nos mostra que, sob condições similares às impostas para o caso com ruídos, no caso do algoritmo seguir infinitamente com $\delta = 0$ a imagem Ax_k converge para o vetor y. Para chegar na convergência desejada, usaremos inicialmente a proposição abaixo, listada por Margotti, Hafemann e Santana (2023).

Proposição 2.2.4. Nas condições da proposição anterior, a sequência $(x_k)_{k \in \mathbb{N}} \subset X$ é de Cauchy.

Agora, estamos nas condições de verificar que a sequência definida pelo Método do Gradiente converge para x^{\dagger} quando não atinge o critério de parada.

Proposição 2.2.5. Dadas as hipóteses das proposições listadas anteriormente, sendo (x_k) a sequência definida pelo Método do Gradiente com $\lambda_k \in [\lambda_{\min}, \hat{\lambda}_k^{\max}]$ e $x_0 = 0$, tem-se que

$$\lim_{k} x_k = x^{\dagger},$$

onde $x^{\dagger} = A^{\dagger}y$ é a solução de norma mínima procurada.

Demonstração. Análogo à Proposição 2.1.5, vendo que para a sequência do Método do Gradiente

$$x_{k+1} - x_k = -\lambda_k A^* (Ax_k - y^{\delta}) \in \mathcal{R}(A^*)$$

Observação 2.2.2. Perceba que todas as variações listadas em na Definição 2.2.4 atendem as condições discutidas até aqui, bastando escolher as constantes adequadas. Para o método de Landweber, basta tomar

$$\lambda_{LW} \le \frac{2(1-c_0)}{\|A\|^2} = \hat{\lambda}_k^{\min} < \frac{2}{\|A\|^2}$$

Já no Método de Erro Mínimo, $c_0 = \frac{1}{2}$, temos

$$\hat{\lambda}_k = \frac{\|Ax_k - y\|^2}{\|A^*(Ax_k - y)\|^2} = \lambda_{ME,k}.$$

Além disso, é possível demonstrar que $\lambda_{SD,k} \leq \lambda_{ME,k}$.

Tendo então a garantia de parada do algoritmo no caso com ruídos e a convergência no caso sem ruído, conseguimos verificar que o Método do Gradiente é um método de regularização. Para isso, veremos antes a condição de estabilidade do método.

Note que a sequência do Método do Gradiente, conforme definido em (2.2.3), depende do y^{δ} e o nível de ruído δ respectivo. Assim, vamos denotar $(x_k^{\delta})_k$ a sequência gerada a partir de um certo ruído δ , e simplesmente $(x_k)_k$ a sequência gerada no caso $\delta = 0$. Na estabilidade, queremos mostrar que para cada k da sequência, $x_k^{\delta} \to x_k$ à medida que $\delta \to 0$. Tal fato é mostrado na seguinte proposição.

Proposição 2.2.6 (Estabilidade do Método Gradiente). Seja $(\delta_j)_j \subset \mathbb{R}_+$ tal que $\delta_j \to 0$ e $(y^{\delta_j})_j \subset Y$ sequência tal que

$$\|y - y^{\delta_j}\| \le \delta_j, \forall j \in \mathbb{N}.$$

Suponha que $k_{\delta_j} \to \infty$, e que para cada $k \in \mathbb{N}$ temos que $\lambda_k^{\delta_j} \to \lambda_k$ quando $\delta_j \to 0$, onde $\lambda_k \in [\lambda_{\min}, \hat{\lambda}_k^{\max}]$, conforme (2.2.10) e Proposição (2.2.3). Além disso, para cada δ_j suponha $\lambda_k^{\delta_j} \in [\lambda_{\min}, \hat{\lambda}_k^{\delta_j, \max}]$, sendo $\hat{\lambda}_k^{\delta_j, \max}$ conforme (2.2.7) tendo por referência y^{δ_j} . Nessas condições, tem-se que:

$$\lim_{j \to \infty} x_k^{\delta_j} = x_k, \forall k \in \mathbb{N}.$$

Demonstração. (Ideia) Similar à prova da estabilidade do método Tikhonov Iterado feita na Proposição 2.1.6, vendo no caso do Método do Gradiente que

$$x_{k+1} = x_k - \lambda_k A^* (Ax_k - y^{\delta}).$$

Com isso, pela continuidade da subtração e de $A^*(Ax_k - y^{\delta})$, o resultado segue com o mesmo raciocínio.

Com isso, prova-se finalmente que o método do gradiente, com o critério da discrepância, atende à propriedade regularização.

Proposição 2.2.7 (Regularização do método do gradiente). Seja $(\delta_j)_j \subset \mathbb{R}^*_+$ tal que $\delta_j \to 0$. Nas condições das proposições anteriores, tem-se que:

$$\lim_{j\to\infty} x_{k_{\delta_j}}^{\delta_j} = x^\dagger$$

Demonstração. Análogo à Proposição 2.1.7.

Observação 2.2.3. Nesse caso, perceba que não explicitamos o operador de reconstrução e o parâmetro e regularização. Porém, assim como no método de Tikhonov Iterado, é possível representar a aproximação $x_{k_{\delta}}$ dada em função de y^{δ} através de um operador. Tomando, por exemplo, uma sequência constante $\lambda_k = \lambda \leq \lambda_{\min}, \forall k \in \mathbb{N}$, caso do algoritmo Landweber, pode-se mostrar que o iterado x_k satisfaz

$$x_k = R_k(y^{\delta}) = \lambda \sum_{j=0}^{k-1} (I - \lambda A^* A)^j A^* y^{\delta},$$

denotando I o operador identidade em Y. Assim, podemos encarar o índice k_{δ} como o parâmetro de regularização, o qual é bem definido conforme a discussão feita ao longo desse capítulo. Para mais detalhes, veja (KIRSCH, 2011).

Discutimos ao longo dessa seção as condições para tornar o Método do Gradiente um método de regularização, o qual se faz de grande interesse em Problemas Inversos Lineares. Sua vantagem se dá especialmente por depender apenas de calcular um termo na forma $A^*(Ax - y^{\delta})$ a cada passo, sem precisar determinar minimizadores ou resolver sistemas lineares a cada iteração. Sua desvantagem é que, em muitos casos, pode demorar bastante para atingir a parada a depender da escolha dos tamanhos de passo utilizados, que nem sempre é trivial.

Veremos que se trata de um método interessante especialmente para auxiliar em Métodos de Regularização para Problemas Não-Lineares. Em especial, nos métodos de Newton-Inexato, que resolvem um problema linear auxiliar, conforme discutido no capítulo a seguir.

3 Métodos de regularização para problemas inversos não lineares

Nesta seção, buscamos apresentar e explorar os aspectos teóricos de alguns dos métodos de regularização existentes para problemas inversos não lineares, ou seja, aqueles onde não temos a hipótese do operador que define o problema ser linear.

Para as seções a seguir, consideramos X, Y espaços de Hilbert e um operador $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ contínuo, não necessariamente linear. Estamos interessados no problema F(x) = y, com y na imagem de F e conhecendo um vetor com ruído $y^{\delta} \in Y$ satisfazendo $||y - y^{\delta}|| \leq \delta$, para algum $\delta > 0$. O objetivo dos métodos que serão descritos na seção é aproximar uma \hat{x} -solução de norma mínima $x^{\dagger} \in \mathcal{D}(F)$, isto é, que satisfaça $F(x^{\dagger}) = y$ e que tenha menor distância a um vetor $\hat{x} \in X$ pré-estabelecido, conforme detalhado no Capítulo 1.

3.1 Adaptações dos métodos lineares

Em alguns casos, é possível tentar utilizar adaptações dos métodos para problemas lineares, explorados no Capítulo 2, como o método de Tikhonov e o método do gradiente. Esses métodos podem apresentar funcionamento em situações particulares, porém, como os operadores F que estamos interessados não são lineares, não temos mais algumas garantias que podíamos obter no caso anterior.

O método de Tikhonov adaptado para o problema inverso não linear F(x) = y, de forma similar ao trabalhado no caso linear, consiste em retornar como solução aproximada um minimizador $x_{\alpha} \in X$ para o funcional $T_{\alpha} : X \to \mathbb{R}$ dado por

$$T_{\alpha}(x) = \frac{1}{2} \|F(x) - y^{\delta}\|^2 + \frac{\alpha}{2} \|x\|^2.$$
(3.1.1)

O funcional é similar ao apresentado na Definição 2.1.2, seguindo o mesmo princípio de funcionamento, apenas substituindo pelo operador F. Porém, visto que F é não linear, já não é possível garantir a existência de um único minimizador, ou mesmo garantir que os métodos convencionais de otimização possam atingir um mínimo global desejado (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). Desse modo, já não conseguimos determinar que o método funciona de forma esperada sem adições de restrições mais fortes. Adaptações ainda podem ser feitas de forma análoga aos métodos de Tikhonov-Phillips, como comentado ao final da Seção 2.1.1, e Tikhonov-Iterado 2.1.2. A adaptação do método do gradiente para problemas não lineares consiste da mesma forma em minimizar o funcional $G: X \to \mathbb{R}$ definido como

$$G(x) = \frac{1}{2} \|F(x) - y^{\delta}\|^2, \qquad (3.1.2)$$

por um processo iterativo, andando a cada passo na iteração oposta ao gradiente de G, conforme abordado na Seção 2.2.1. Nesse caso, sendo F não linear, porém supondo que é diferenciável, mostra-se que o gradiente $\nabla G(x)$ em um ponto $x \in int(\mathcal{D}(F))$ qualquer é dado por:

$$\nabla G(x) = F'(x)^* (F(x) - y^{\delta}), \qquad (3.1.3)$$

sendo F'(x) a derivada de Fréchet ou Gâteaux de F em x.

Com isso, o método do gradiente consiste na sequência iterativa onde, dado um ponto $x_0 \in int(\mathcal{D}(F))$ inicial e um tamanho de passo $\lambda_n \in \mathbb{R}$, define-se:

$$x_{n+1} = x_n - \lambda_n \nabla G(x_n) \tag{3.1.4}$$

$$= x_n - \lambda_n F'(x_n)^* (F(x_n) - y^{\delta}).$$
(3.1.5)

Ao final, retorna-se como aproximação o primeiro $x_{n_{\delta}}$ que satisfaça o Princípio da Discrepância para um certo $\tau > 1$ fixado:

$$\|F(x_{n_{\delta}}) - y^{\delta}\| \le \tau \delta.$$

É possível garantir sobre determinadas restrições que o método converge para uma solução procurada. Porém, por natureza, é um método que costuma ser lento e pouco eficiente. Ainda assim, conforme observação que veremos mais adiante na Seção 3.2.4, sob certas condições é possível garantir que o erro decresce nas iterações. Com isso, pode-se esperar que sob situações controladas a solução aproximada $x_{n_{\delta}}$ se aproxime da solução de norma mínima x^{\dagger}

Nessa seção, buscamos apenas introduzir as ideias de como os métodos para problemas inversos lineares podem ser adaptados para não lineares, não sendo explorados a fundo por serem esses métodos pouco eficientes e/ou difíceis de implementar. Na próxima seção, veremos alguns métodos que se aproveitam dos casos em que F é diferenciável, que possuem um grau maior de garantias e restrições que garantem seu funcionamento em uma variedade maior de casos.

3.2 Métodos de Newton-Inexato

Os métodos de Newton-Inexato se baseiam, como sugere o nome, no Método de Newton para resolução de equações não lineares. Tanto no método original como no

Newton-Inexato, trabalhamos com operadores $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ diferenciáveis, onde se deseja resolver uma equação da forma

$$F(x) = y_{t}$$

Sendo F diferenciável, para cada ponto $x \in int(D(F))$ existe um operador $F'(x) : X \to Y$ linear e contínuo chamado derivada de F em x, o qual pode ser utilizado para uma aproximação linear de F em torno de um ponto $\overline{x} \in int(\mathcal{D}(F))$ na forma:

$$F(x) \approx F'(\overline{x})(x - \overline{x}) + F(\overline{x}). \tag{3.2.1}$$

O Método de Newton original se baseia em gerar uma sequência iterativa $(x_n) \subset X$, onde a cada passo a equação $F(x) = y^{\delta}$ é linearizada em torno do ponto x_n , ficando na forma

$$F'(x_n)(x_{n+1} - x_n) + F(x_n) = y^{\delta}$$

obtendo o iterado x_{n+1} como solução da equação acima. Observe que, denotando $A_n = F'(x_n)$, $s_n = x_{n+1} - x_n \in b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$, a equação acima pode ser transformada no sistema linear

$$A_n s_n = b_n^\delta$$

o qual se trata de um problema inverso linear, dado que $A_n = F'(x_n)$ é um operador linear. Assim, dada uma solução s_n , atualiza-se $x_{n+1} = x_n + s_n$, repetindo o procedimento iterativamente até atingir um critério de parada.

Ocorre que sob determinadas condições, conforme discutido no Capítulo 1, o problema inverso $A_n s_n = b_n^{\delta}$ é mal posto. Com isso, obter uma solução s_n pode ser complicado, ou mesmo podem não existir soluções.

Nesse sentido, os métodos de Newton-Inexato se baseiam em determinar uma solução aproximada, ou "inexata", s_n para o problema inverso $A_n s_n = b_n^{\delta}$, a qual é obtida utilizando métodos de regularização. Em especial, pelo fato de A_n ser linear, podemos utilizar os métodos de regularização para problemas lineares, já discutidos anteriormente.

A escolha de cada método de regularização para resolver esse problema linear auxiliar resulta em uma variação do Newton-Inexato. No restante da seção, introduzimos a definição precisa dos métodos de Newton-Inexato e o procedimento geral utilizado, bem como exploramos algumas das variações existentes a partir dos métodos utilizados.

3.2.1 Definição e procedimento geral

A definição a seguir estabelece o conceito geral dos métodos de Newton-Inexato, conforme motivação apresentada.

Definição 3.2.1 (Métodos de Newton-Inexato). Sejam X, Y espaços de Hilbert, F : $\mathcal{D}(F) \subset X \to Y$ operador diferenciável e $x_0 \in \mathcal{D}(F) \subset$. Considere o problema inverso F(x) = y dados $y \in \mathcal{R}(F)$ e $y^{\delta} \in Y$ tais que $||y - y^{\delta}|| \leq \delta$, para algum $\delta > 0$.

Um método de regularização baseada em Newton-Inexato, ou simplesmente Método de Newton-Inexato, consiste em um método que utiliza uma sequência $(x_n) \subset X$ definida a partir de um ponto inicial x_0 iterativamente por

$$x_{n+1} = x_n + s_n,$$

onde s_n é solução aproximada do problema inverso

$$A_n s_n = b_n^\delta,$$

obtida com uso de métodos de regularização, denotando $A_n = F'(x_n) \in b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$.

Assim como os demais métodos iterativos já explorados, os métodos de Newton-Inexato fornecem como aproximação o primeiro termo da sequência descrita que atinja determinada condição, o que chamamos de critério de parada. No geral, se utiliza como critério de parada para x_n o princípio da discrepância, da mesma forma que nos métodos de problemas lineares, nesse caso dado por

$$\|F(x_n) - y^{\delta}\| \le \tau \delta, \tag{3.2.2}$$

dado um nível de ruído $\delta > 0$ e um certo $\tau > 1$ fixado. Em outras palavras, retorna-se como solução aproximada o vetor $x_{n_{\delta}}$, onde o índice $n_{\delta} \in \mathbb{N}$ é definido por

$$n_{\delta} = \inf\{n \in \mathbb{N} : \|F(x_n) - y^{\delta}\| \le \tau\delta\}.$$
(3.2.3)

Com esse critério de parada, os métodos de Newton-Inexato podem ser expressos de modo geral através do Algoritmo 1. No geral, todas as variações seguem esse mesmo procedimento, apenas incrementando o método específico utilizado para solução do problema inverso auxiliar.

Entrada: $F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y, y^{\delta} \in Y, x_0 \in \mathcal{D}(F), \tau > 1, \delta > 0$ 1 $n \leftarrow 0$ 2 enquanto $||F(x_n) - y^{\delta}|| > \tau \delta$ faça 3 | Defina $A_n = F'(x_n) \in b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$ 4 | Resolva $A_n s_n = b_n^{\delta}$ usando um método de regularização 5 | Defina $x_{n+1} = x_n + s_n$ 6 | $n \leftarrow n + 1$ 7 fim

Algoritmo 1: Procedimento geral do Método de Newton-Inexato

Uma observação importante é que em muitas situações, o método escolhido para resolver $A_n s_n = b_n^{\delta}$ resulta em outro processo iterativo. Caso escolhermos, por exemplo, o método de Tikhonov-Iterado ou o método do gradiente, para cada passo x_n será preciso construir outra sequência $(s_{n,k})_{k\in\mathbb{N}}$ a fim de determinar a solução s_n desejada.

Nessas situações, dizemos que a sequência $(x_n)_{n \in \mathbb{N}}$ definida pelo Método de Newton-Inexato é a **iteração externa** do método. Para cada *n* dessa iteração externa, gera-se uma sequência $(s_{n,k})_{k \in \mathbb{N}}$ a partir de um $s_{n,0}$, nesse caso chamada **iteração interna**.

Um caso particular desse tipo de método é o chamado *REGularization based on INexact Newton method*¹ (REGINN) (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023). O método segue um procedimento geral, podendo ser utilizadas algumas variações para gerar a sequência da iteração interna. Nesse método, utiliza-se um critério de parada próprio para a iteração interna. Inicia-se estabelecendo uma sequência $(\mu_n)_{n\in\mathbb{N}} \subset (0,1)$, chamada *sequência de tolerâncias*. O critério de parada consiste em retornar como solução s_n o primeiro termo $s_{n,k}$ que satisfaça

$$||A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}|| < \mu_n ||b_n^{\delta}||.$$
(3.2.4)

Em outros termos, para cada n define-se $s_n = s_{n,k_n}$, definindo o índice k_n como

$$k_n := \inf\{k \in \mathbb{N} : \|A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}\| < \mu_n \|b_n^{\delta}\|\}.$$
(3.2.5)

Perceba que o critério de parada em questão é dado em termos do resíduo atual da iteração externa, visto que $||b_n^{\delta}|| = ||F(x_n) - y^{\delta}||$, estabelecendo ainda um certo coeficiente de tolerância μ_n que reduza esse limitante. A ideia é que nos primeiros passos a aproximação s_n possa ser um pouco mais imprecisa, mas à medida que é diminuída a norma do resíduo $||F(x_n) - y^{\delta}||$, os resíduos do sistema linearizado devem ser igualmente reduzidos. Isto é, conforme se aumente a precisão na iteração externa, a iteração interna deve ter soluções igualmente mais precisas.

Nessas condições, o método REGINN segue com o procedimento descrito no Algoritmo 2. No caso dos métodos explorados, irá se alterar apenas o procedimento utilizado para determinar $s_{n,k+1}$ a partir de $s_{n,k}$. Além disso, é dada a escolha particular de ponto inicial $s_{n,0} = 0 \in X$.

¹ Em tradução livre: "método de regularização baseado em Newton-Inexato".

Entrada: $F: \mathcal{D}(F) \subset X \to Y, y^{\delta} \in Y, x_0 \in \mathcal{D}(F), \tau > 1, \delta > 0, (\mu_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset (0, 1)$ $\mathbf{1} \ n \leftarrow 0$ 2 enquanto $||F(x_n) - y^{\delta}|| > \tau \delta$ faça Defina $A_n = F'(x_n) \in b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$ 3 Estabeleça $s_{n,0} = 0$ $\mathbf{4}$ $k \leftarrow 0$ 5 enquanto $||A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}|| \ge \mu_n ||b_n^{\delta}||$ faça 6 Calcule $s_{n,k+1}$ 7 $k \leftarrow k + 1$ 8 fim 9 Defina $x_{n+1} = x_n + s_n$ 10 $n \leftarrow n+1$ 11 12 fim

Algoritmo 2: Método REGINN

Nas próximas seções, veremos algumas variações dos métodos de Newton-Inexato, que serão utilizadas posteriormente nos experimentos numéricos, sendo elas: Newton-Inexato com Tikhonov, REGINN com Tikhonov-Iterado e REGINN com método do gradiente.

3.2.2 Newton-Inexato com Tikhonov (Levenberg-Marquardt)

O método baseado em Newton-Inexato que utiliza o método de Tikhonov Clássico para resolver o problema linear $A_n s_n = b_n^{\delta}$ corresponde a um método conhecido como Levenberg-Marquardt. Esse é um método originalmente construído para estimar parâmetros do problema de quadrados mínimos, identificado posteriormente como método de regularização, podendo-se observar que se trata de um método de Newton-Inexato com uso de Tikhonov na solução do sistema auxiliar (RIEDER, 1999).

Relembrando, estamos interessados no problema F(x) = y dado $y^{\delta} \in Y$ tal que $||y - y^{\delta}|| < \delta$, onde $\delta > 0$. Nesse método, iniciamos considerando a sequência (x_n) do método de Newton-Inexato, onde a cada iterado x_n definimos $A_n = F'(x_n)$ e $b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$, conforme a Definição 3.2.1.

Usamos o método descrito na Seção 2.1.1, considerando agora o problema inverso dado por $A_n s_n = b_n^{\delta}$. Dado um parâmetro α_n a solução aproximada s_n obtida pelo método de Tikhonov é dada por

$$s_n = \underset{s \in X}{\arg\min} T_{\alpha_n}(s) = \underset{s \in X}{\arg\min} \frac{1}{2} \|A_n s - b_n^{\delta}\|^2 + \alpha_n \frac{1}{2} \|s\|^2.$$
(3.2.6)

Ou seja, para cada n-ésimo passo, escolhendo um parâmetro de regularização $\alpha_n \in \mathbb{R}_+$ devemos obter um minimizador para T_{α_n} , o qual será utilizado como solução s_n . Assim, definimos $x_{n+1} = x_n + s_n$, repetindo o procedimento até atingir o princípio da discrepância (3.2.2). Ao ter que escolher um parâmetro α_n a cada iteração, acabamos por definir uma sequência $(\alpha_n) \subset \mathbb{R}_+$ de parâmetros de regularização, cuja escolha pode ser feita tanto *a priori* como *a posteriori* (MARGOTTI; HAFEMANN; SANTANA, 2023).

Conforme observação na Seção 2.1.1, obter o minimizador s_n da Equação (3.2.6) equivale a resolver o sistema

$$(A_n^*A_n + \alpha_n I)s_n = A_n^*b_n^{\delta}$$

Sendo $(A_n^*A_n + \alpha_n I)$ inversível, como comentado nessa mesma observação, podemos obter s_n explicitamente na forma:

$$s_n = (A_n^* A_n + \alpha_n I)^{-1} (A_n^* b_n^\delta).$$
(3.2.7)

A partir da descrição realizada e as observações acima, o método Levenberg-Marquardt com o critério de parada do Princípio da Discrepância pode ser resumido através do Algoritmo 3.

```
Entrada: F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y, y^{\delta} \in Y, x_0 \in \mathcal{D}(F), \tau > 1, \delta > 0

1 n \leftarrow 0

2 enquanto ||F(x_n) - y^{\delta}|| > \tau \delta faça

3 | Defina A_n = F'(x_n) e b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)

4 | Determine s_n = (A_n^*A_n + \alpha_n I)^{-1}(A_n^*b_n^{\delta})

5 | Defina x_{n+1} = x_n + s_n

6 | n \leftarrow n + 1

7 fim
```

Algoritmo 3: Método de Levenberg-Marquardt

Sob condições apropriadas para F e uma escolha adequada de α_n , conforme detalha Rieder (1999), o método de Levenberg-Marquardt consiste em um método de regularização.

3.2.3 REGINN Tikhonov-Iterado

Uma das escolhas possíveis para a iteração interna do algoritmo REGINN é o uso do método de regularização de Tikhonov-Iterado, o qual foi abordado na Seção 2.1.2. Nesse método, usamos uma variação do método de Tikhonov com um processo iterativo, gerando uma sequência $(s_{n,k})_k$ para obter uma solução aproximada da equação linearizada. Considerando o problema inverso $A_n s_n = b_n^{\delta}$ com o Tikhonov-Iterado, utilizamos a sequência detalhada na Definição 2.1.3, gerando nesse caso uma sequência diferente para cada n-ésimo passo da iteração externa do REGINN.

A cada passo n da iteração externa, estabelecemos uma sequência $(\alpha_{n,k})_k \subset \mathbb{R}_+$ de parâmetros de regularização e o passo inicial $s_{n,0} = 0$. Dados o operador A_n e o resíduo $b_n^\delta,$ a cada passo k definimos o operador $T_k:X\to \mathbb{R}$ dado por

$$T_k(s) = ||A_n s - b_n^{\delta}||^2 + \alpha_{n,k} ||s - s_{n,k}||^2.$$

O próximo termo $s_{n,k+1}$ é obtido iterativamente por

$$s_{n,k+1} = \underset{s \in X}{\operatorname{arg\,min}} T_k(s)$$

Isto é, queremos que $s_{n,k+1}$ seja tal que $T_k(s_{n,k+1}) \leq T_k(s)$ para todo $s \in X$. Assim, gera-se uma sequência $(s_{n,k})$, na qual o processo é repetido para cada iterado seguinte, até atingir o critério de parada (3.2.4), dada $(\mu_n) \subset (0,1)$ uma sequência de tolerâncias pré-estabelecida. Ao atingir o índice k_n que atende esse critério, definimos $s_n = s_{n,k_n}$ e estabelecemos $x_{n+1} = x_n + s_n$. A sequência prossegue para o iterado x_{n+1} , parando no primeiro termo que atender o critério da discrepância (2.2.3).

Nota-se que com as mesmas observações feitas na Seção 2.1.2, tem-se que $T_k(s)$ admite um minimizador global a cada iteração, estando a sequência bem definida. Além disso, a partir da observação na Equação 2.1.7, vê-se que $s_{n,k+1}$ e $s_{n,k}$ seguem a seguinte relação:

$$(A_n^*A_n + \alpha_{n,k}I)s_{n,k+1} = A_n^*y^{\delta} + \alpha_{n,k}s_{n,k}.$$

Sabendo ainda que $(A_n^*A_n + \alpha_{n,k}I)$ é inversível, podemos ter $s_{n,k+1}$ explicitamente dado por

$$s_{n,k+1} = (A_n^* A_n + \alpha_{n,k} I)^{-1} (A_n^* y^{\delta} + \alpha_{n,k} s_{n,k}).$$

Com isso, adaptando o Algoritmo 2, podemos resumir o método REGINN com iteração interna de Tikhonov-Iterado através do Algoritmo 4. Note que o procedimento, se alterando essencialmente na escolha dos parâmetros $\alpha_{n,k}$ e com o cálculo do $s_{n,k+1}$ seguindo a observação feita acima.

Entrada:
$$F : \mathcal{D}(F) \subset X \to Y, y^{\delta} \in Y, x_0 \in \mathcal{D}(F), \tau > 1, \delta > 0, (\mu_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset (0, 1)$$

1 $n \leftarrow 0$
2 enquanto $||F(x_n) - y^{\delta}|| > \tau \delta$ faça
3 Defina $A_n = F'(x_n) e b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$
4 Estabeleça $s_{n,0} = 0 \in X$ e escolha $(\alpha_{n,k})_{k \in \mathbb{N}} \subset \mathbb{R}_+$.
5 $k \leftarrow 0$
6 enquanto $||A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}|| \ge \mu_n ||b_n^{\delta}||$ faça
7 $||s_{n,k+1} = (A_n^*A_n + \alpha_{n,k}I)^{-1}(A_n^*y^{\delta} + \alpha_{n,k}s_{n,k})|$
8 $||k \leftarrow k+1|$
9 fim
10 Defina $x_{n+1} = x_n + s_n$
11 $n \leftarrow n + 1$
12 fim

Algoritmo 4: Método REGINN com iteração interna Tikhonov-Iterado.

A escolha da sequência $(\alpha_{n,k})$ pode ser tanto *a priori* como *a posteriori*. As escolhas mais costumeiras são a sequência constante $\alpha_{n,k} = \alpha$, para um determinado $\alpha > 0$, e a sequência $\alpha_{n,k} = \alpha_{n,0}q^k$ dados $\alpha_{n,0} > 0$ e 0 < q < 1.

Uma análise similar à apresentada na Seção 2.1.2 pode ser feita para mostrar a convergência do método. Note, porém, que aqui, o que desejamos aproximar é uma direção e_n tal que $x_n + e_n = x^{\dagger}$. ou seja, $e_n = x^{\dagger} - x_n$. Com isso, podemos fazer uma análise quanto ao erro na iteração interna dado por

$$\|s_{n,k} - e_n\|.$$

que representa o quão distante o iterado atual está da direção "ideal", que leva o x_n direto à solução x^{\dagger} .

Pode-se provar de forma similar ao desenvolvido na seção referida que o erro $||s_{n,k} - e_n||$ obtido é monótono, isto é, que

$$||s_{n,k+1} - e_n|| \le ||s_{n,k} - e_n||, \forall k < k_n \in \mathbb{N}.$$
(3.2.8)

A partir disso, conseguimos obter ainda a monotonia do erro na iteração externa. Isso pode-se obter notando que, dado $s_{n,0} = 0$ e $s_n = s_{n,k_n}$, temos

$$x_{n+1} - x^{\dagger} = (x_n + s_{n,k_n}) - x^{\dagger} = s_{n,k_n} - (x^{\dagger} - x_n) = s_{n,k_n} - e_n,$$

е

$$x_n - x^{\dagger} = x_n + s_{n,0} - x^{\dagger} = s_{n,0} - (x^{\dagger} - x_n) = s_{n,0} - e_n$$

Assim, visto por (3.2.8) que $||s_{n,k_n} - e_n|| \le ||s_{n,k_n-1} - e_n|| \le \dots \le ||s_{n,0} - e_n||$, temos

$$|x_{n+1} - x^{\dagger}|| = ||s_{n,k_n} - e_n|| \le ||s_{n,0} - e_n|| = ||x_n - x^{\dagger}||.$$

Ou seja, $||x_{n+1} - x^{\dagger}|| \le ||x_n - x^{\dagger}||$, mostrando que o erro também é monótono na iteração externa.

Note que nesse caso, usamos como referência o índice k_n para atualizar s_n , dado pelo critério de parada (3.2.4). Porém, em muitas situações podemos querer parar antes a iteração, em especial para evitar esforço computacional excessivo. A partir da monotonia sinalizada em (3.2.8), se pararmos em qualquer índice k anterior a k_n , a monotonia da iteração externa ainda se mantém.

Observação 3.2.1. Com essa observação de poder estabelecer uma parada antecipada, algo que podemos notar é que o REGINN com iteração interna Tikhonov-Iterado limitado a apenas uma iteração, $s_n = s_{n,1}$, corresponde a uma variação do método Levenberg-Marquardt. Isso pode ser visto dado que, sendo $s_{n,0} = 0$, o funcional T_0 obtido é da forma

$$T_0(s) = \frac{1}{2} \|A_n s - b_n^{\delta}\|^2 + \frac{\alpha_{n,0}}{2} \|s - s_{n,0}\|^2 = \frac{1}{2} \|A_n s - b_n^{\delta}\|^2 + \frac{\alpha_{n,0}}{2} \|s\|^2,$$

sendo exatamente o funcional dado em (3.2.6) com $\alpha_n = \alpha_{n,0}$. Assim, limitando a apenas k = 1 passo, temos

$$s_n = s_{n,1} = \arg\min_{s \in X} T_{\alpha_n}(s)$$

e $x_{n+1} = x_n + s_n$, sendo o mesmo procedimento do Levenberg-Marquardt. Disso, observase então a monotonia do erro na iteração também no método citado.

Mais do que a monotonia do erro, podemos estender a análise para mostrar a parada do algoritmo, bem como sua propriedade de regularização. Para isso, há uma condição importante para tal, chamada Condição do Cone Tangencial (CCT), apresentada no Capítulo 1.

Na seção seguinte, a respeito do método REGINN com iteração interna do Gradiente, discutiremos alguns detalhes particulares que aparecem na análise de convergência do método. Algumas das estratégias e análises utilizadas podem ser feitas de maneira similar no método de Tikhonov-Iterado, bem como para outras iterações internas do algoritmo REGINN.

3.2.4 REGINN Gradiente

Outra opção para a iteração interna no método REGINN é o método do gradiente, tratado anteriormente na Seção 2.2. Nele, construímos um processo iterativo que busca minimizar a norma do resíduo a cada iteração, utilizando um método de otimização do gradiente.

Dado o problema inverso F(x) = y conhecendo y^{δ} vetor com ruído, geramos uma sequência x_n seguindo o processo do Método de Newton-Inexato: a cada passo definimos $A_n = F'(x_n) e b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n) e$ queremos resolver o problema linearizado dado por $A_n s_n = b_n^{\delta}$, processo que faremos utilizando o método de regularização do Gradiente.

Assim como apresentado anteriormente, o método se baseará em buscar um vetor s_n que minimize a norma do resíduo agora dado por $||A_n s_n - b_n^{\delta}||$, considerando o problema inverso $A_n s_n = b_n^{\delta}$. Isso se traduz em minimizar o funcional $G_n : X \to \mathbb{R}$ dado por

$$G_n(s) = \frac{1}{2} ||A_n s - b_n^{\delta}||^2.$$

Note que a cada passo da iteração externa, definimos um A_n e um b_n^{δ} diferentes, consequentemente um G_n próprio daquele passo da iteração. Ou seja, queremos minimizar um funcional G_n distinto para cada n-ésimo passo.

A estratégia utilizada nesse caso consiste em gerar uma sequência que a cada passo $s_{n,k}$ "ande" na direção do gradiente $\nabla G_n(s_{n,k})$, a qual fornece um decrescimento para G_n . Dado um $s \in X$ qualquer pode-se mostrar que o gradiente de G_n nesse ponto é dado por

$$\nabla G_n(s) = A_n^* (A_n s - b_n^\delta). \tag{3.2.9}$$

Mais detalhes a respeito do gradiente e sua contextualização são abordados na Seção 2.2.1.

Em outras palavras, para cada x_n da iteração externa, partimos do ponto inicial $s_{n,0} = 0 \in X$ e definimos a sequência $(s_{n,k})_k \subset X$, na qual é seguida a recorrência

$$s_{n,k+1} = s_{n,k} - \lambda_{n,k} \nabla G_n(s_{n,k}) \tag{3.2.10}$$

$$= s_{n,k} - \lambda_{n,k} A_n^* (A_n s_{n,k} - b_n^{\circ}), \qquad (3.2.11)$$

dada uma sequência de tamanhos de passo $(\lambda_{n,k})_k \subset \mathbb{R}_+$, similar ao procedimento apresentado na Definição 2.2.3.

A sequência é repetida até se cumprir o critério de parada (3.2.4) definindo como solução s_n o primeiro termo s_{n,k_n} a atingir esse critério. Com isso, definimos $x_{n+1} = x_n + s_n$, repetindo o procedimento para x_{n+1} , e assim sucessivamente até que o critério da discrepância (2.2.3) seja atingido. O procedimento descrito pode ser resumido através do Algoritmo 5. Trata-se de uma adaptação do Algoritmo 2, acrescentando essencialmente a escolha dos coeficientes $\lambda_{n,k}$ e a determinação do passo $s_{n,k+1}$.

Entrada: $F: \mathcal{D}(F) \subset X \to Y, y^{\delta} \in Y, x_0 \in \mathcal{D}(F), \tau > 1, \delta > 0, (\mu_n)_{n \in \mathbb{N}} \subset (0, 1)$ $n \leftarrow 0$ 2 enquanto $||F(x_n) - y^{\delta}|| > \tau \delta$ faça Defina $A_n = F'(x_n) \in b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$ 3 Estabeleça $s_{n,0} \in X$ e . $\mathbf{4}$ $k \leftarrow 0$ 5 enquanto $\|A_n s_{n,k} - b_n^\delta\| \ge \mu_n \|b_n^\delta\|$ faça 6 Escolha $\lambda_{n,k} \in \mathbb{R}^*_+$ 7 $s_{n,k+1} = s_{n,k} - \lambda_{n,k} A_n^* (A_n s_{n,k} - b_n^\delta)$ 8 $k \leftarrow k + 1$ 9 fim 10 $x_{n+1} = x_n + s_n$ 11 $n \leftarrow n+1$ $\mathbf{12}$

13 fim

Algoritmo 5: Método REGINN com método do gradiente para Iteração Interna.

Diferentes escolhas dos $\lambda_{n,k}$ podem ser realizadas, inclusive as variações apresentadas na Definição 2.2.4. De todo modo, algumas restrições particulares devem ser estabelecidas para garantir o bom funcionamento, as quais devem levar em conta agora as características do operador F não linear.

Seguindo uma análise similar à desenvolvida na Seção 2.2, pode-se mostrar a monotonia do erro da iteração interna, consequentemente garantindo da iteração externa. A seguir, dá-se uma ideia de como essa análise pode ser feita considerando as particularidades advindas da não linearidade de F.

No caso, fixado um passo $n \in \mathbb{N}$ e gerando a sequência $(s_{n,k})_{k \in \mathbb{N}}$, estamos inte-

ressados em determinar a direção $e_n = x^{\dagger} - x_n$, onde x^{\dagger} é a solução de norma mínima procurada. Assim, queremos em especial provar a monotonia do erro na iteração interna, que consiste em

$$||s_{n,k+1} - e_n|| \le ||s_{n,k} - e_n||, \forall k < k_n.$$

Utilizando a identidade (2.2.5), agora com a iteração $(s_{n,k})$, temos inicialmente uma estimativa para o ganho da iteração na forma

$$||s_{n,k+1} - e_n||^2 - ||s_{n,k} - e_n||^2 = ||s_{n,k+1} - s_{n,k}||^2 + 2\langle s_{n,k+1} - s_{n,k}, s_{n,k} - e_n\rangle \quad (3.2.12)$$

$$\leq \lambda_{n,k}^2 \|A_n^* (A_n s_{n,k} - b_n^{\delta})\|^2 + \lambda_{n,k} \|A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}\| (\|A_n e_n - b_n^{\delta}\| - \|A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}\|).$$
(3.2.13)

Perceba aqui a presença do termo $||A_n e_n - b_n^{\delta}||$, o qual depende da solução do problema inverso, portanto, deve ser estimado. Lembrando que $A_n = F'(x_n)$, $e_n = x^{\dagger} - x_n$ e $b_n^{\delta} = y^{\delta} - F(x_n)$, obtemos

$$\begin{aligned} \|A_n e_n - b_n^{\delta}\| &= \|F'(x_n)(x^{\dagger} - x_n) - b_n^{\delta}\| = \|F'(x_n)(x^{\dagger} - x_n) + F(x_n) - y^{\delta}\| \\ &= \|F'(x_n)(x^{\dagger} - x_n) + F(x_n) - F(x^{\dagger}) + F(x^{\dagger}) - y^{\delta}\| \\ &\leq \|F'(x_n)(x^{\dagger} - x_n) + F(x_n) - F(x^{\dagger})\| + \|F(x^{\dagger}) - y^{\delta}\|. \end{aligned}$$

Notando que $F(x^{\dagger}) = y$, temos no segundo termo $||F(x^{\dagger}) - y^{\delta}|| \leq \delta$, nos permitindo fazer essa estimativa. Já no termo $||F'(x_n)(x^{\dagger} - x_n) + F(x_n) - F(x^{\dagger})||$, podemos notar que se trata do erro da aproximação linear de F em torno de x_n no ponto x^{\dagger} . Apesar de saber que a derivada fornece uma boa aproximação para pontos próximos de x_n , a princípio não conhecemos um limitante para essa aproximação, não nos permitindo realizar uma estimativa dessa maneira.

Todavia, se F atende à Condição do Cone Tangencial (CCT), apresentada na Definição 1.3.3, podemos obter uma estimativa satisfatória. Lembrando, a condição expressa que dados $x, y \in \mathcal{D}(F)$ numa vizinhança de um x_0 , existe uma constante $0 \leq \eta < 1$ tal que

$$||F'(x)(y-x) + F(x) - F(y)|| \le \eta ||F(y) - F(x)||.$$

Com isso, se F atende à CCT para uma vizinhança que contém $x_n \in x^{\dagger}$, então:

$$||A_n e_n - b_n^{\delta}|| \le ||F'(x_n)(x^{\dagger} - x_n) + F(x_n) - F(x^{\dagger})|| + ||F(x^{\dagger}) - y^{\delta}||.$$

$$\le \eta ||F(x_n) - F(x^{\dagger})|| + \delta$$

$$\le \eta (||F(x_n) - y^{\delta}|| + ||y^{\delta} - F(x^{\dagger})||) + \delta$$

$$= \eta ||b_n^{\delta}|| + \eta \delta + \delta.$$

Ou seja,

$$||A_n e_n - b_n^{\delta}|| \le \eta ||b_n^{\delta}|| + \delta(1+\eta) = \mu_{\min,n} ||b_n^{\delta}||,$$

definindo

$$\mu_{\min,n} := \frac{1+\eta}{\|b_n^\delta\|} \delta + \eta.$$

Se supormos ainda que a iteração k não atingiu o critério de parada dado em (3.2.4), obtemos:

$$||b_n^{\delta}|| \le \frac{1}{\mu_n} ||A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}||.$$

Logo,

$$||A_n e_n - b_n^{\delta}|| \le \mu_{\min,n} ||b_n^{\delta}|| \le \frac{\mu_{\min,n}}{\mu_n} ||A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}||.$$

Usando agora essas informações em (3.2.12), dado que podemos obter $\mu_{\min,n} < 1$ e estabelecendo a restrição $\mu_n \in (\mu_{\min,n}, 1)$ para cada $n \in \mathbb{N}$, pode-se chegar em uma estimativa para o ganho apenas em termos do resíduo e das constantes envolvidas. Assim, com um processo análogo ao desenvolvido no caso linear conseguimos estabelecer um limitante para $\lambda_{n,k}$ a fim de garantir a monotonia do erro. Em particular, se a constante do princípio da discrepância for tal que $\tau > \frac{1+\eta}{1-\eta}$, tendo

$$\lambda_{n,k} \le 2\left(1 - \frac{\mu_{\min,n}}{\mu_n}\right) \frac{\|A_n s_{n,k} - b_n^{\delta}\|^2}{\|A_n^* (A_n s_{n,k} - b_n^{\delta})\|^2}, \forall k < k_n$$

garante-se que $||s_{n,k+1} - e_n||^2 - ||s_{n,k} - e_n||^2 \le 0$, ou seja, $||s_{n,k+1} - e_n|| \le ||s_{n,k} - e_n||$, como desejado. Com o mesmo raciocínio aplicado na seção anterior com o método de Tikhonov-Iterado, conseguimos ainda observar a monotonia do erro na iteração externa, visto que

$$||x_{n+1} - x^{\dagger}|| = ||s_{n,k_n} - e_n|| \le ||s_{n,0} - e_n|| = ||x_n - x^{\dagger}||, \forall n < n_{\delta}.$$

Observação 3.2.2. Assim como no REGINN com uso do Tikhonov-Iterado, devido à monotonia do erro na iteração podemos parar $(s_{n,k})$ em um termo de índice anterior a k_n , garantindo ainda um erro inferior na iteração seguinte. Isso nos permite evitar um número excessivo de iterações internas.

No caso do REGINN com Método Gradiente, se pararmos no primeiro passo, estabelecendo índice de parada $k_n = 1$, o método corresponde ao método do gradiente não linear. Note que, estabelecendo $s_{n,0} = 0$ e $s_n = s_{n,1}$, temos

$$s_{n,1} = -\lambda_{n,0} A_n^* (-b_n^{\delta}) = -\lambda_{n,0} F'(x_n)^* (F(x_n) - y^{\delta}).$$

Logo,

$$x_{n+1} = x_n + s_n = x_n - \lambda_{n,0} F'(x_n)^* (F(x_n) - y^{\delta})$$

sendo justamente a iteração do Método Gradiente não linear, discutido anteriormente. Isso nos mostra que com as condições apresentadas para os parâmetros $\lambda_{n,0}$, conseguimos garantir ao menos a monotonia nesse método. Para além da monotonia do erro, pode-se provar ainda a parada das duas iterações, interna e externa, dada uma sequência apropriada de $\lambda_{n,k}$ em cada iteração interna. Isto é, para cada $n < n_{\delta}$ existe um k_n tal que $||A_n s_{n,k_n} - b_n^{\delta}|| < \mu_n ||b_n^{\delta}||$. Além disso, existe um índice n_{δ} tal que o princípio da discrepância $||F(x_n) - y^{\delta}|| \leq \tau \delta$ é atingido.

Pode-se mostrar ainda que no caso sem ruído, com $\delta = 0$, a sequência x_n da iteração externa converge para uma solução do problema inverso F(x) = y. Ou seja, existe $\hat{x} \in X$ tal que

$$x_n \to \hat{x} \in F(\hat{x}) = y.$$

Em geral, no caso não linear não é possível garantir a convergência para a solução de norma mínima x^{\dagger} , apenas em casos específicos com condições mais restritas (MARGOTTI, 2015). De todo modo, com essa convergência, aliado à garantia de parada das duas iterações, pode-se provar a propriedade de regularização do método. Ou seja, temos que

$$\lim_{\delta \to 0} x_{n_{\delta}} = x^{\dagger},$$

dadas escolhas de parâmetros apropriados.

Note que, novamente, não explicitamos os operadores de reconstrução envolvidos. Todavia, as mesmas observações feitas ao final das Seções 2.1.2 e 2.2 podem ser feitas nesse caso, para concordar com a definição de métodos de regularização apresentados, onde o índice de parada n_{δ} corresponde ao parâmetro de regularização empregado.

Ao longo desse capítulo, tratamos de alguns métodos de regularização utilizados em problemas inversos não lineares. Buscamos apenas trazer uma ideia inicial de como analisar a regularização desses métodos, com um detalhamento maior para o REGINN com iteração interna do método do gradiente. O caso não linear traz muitas particularidades e necessita de alguns resultados mais específicos, tornando sua análise um pouco mais detalhada, não sendo foco deste trabalho. Mais detalhes dos métodos abordados podem ser vistos em trabalhos como Margotti (2015) e Rieder (1999).

No Capítulo 5, exploraremos alguns dos métodos abordados através de experimentos numéricos, buscando observar as características listadas, em particular a convergência no caso sem ruído, a monotonia do resíduo e do erro nas iterações, bem como a obtenção de aproximações satisfatórias. Para tanto, exploraremos no Capítulo seguinte o problema inverso foco desse trabalho: a Tomografia por Impedância Elétrica.

4 Tomografia por Impedância Elétrica

A Tomografia por Impedância Elétrica $(TIE)^1$, tal como explicam Somersalo, Cheney e Isaacson (1992), Cheney, Isaacson e Newell (1999) e Borcea (2002), consiste no seguinte problema: algumas correntes elétricas são aplicadas na superfície de um corpo, e, a partir dos potenciais elétricos resultantes medidos em sua superfície, tenta-se reconstruir uma imagem de seu interior, com base em sua impedância ou condutividade elétrica.

Esse problema possui uma grande variedade de aplicações, que vão desde exame médico de imagem, análise de fluido multifásico, localização de minérios e materiais no interior da Terra, controle de processos industriais, entre muitas outras (CHENEY; ISA-ACSON; NEWELL, 1999). Devido a sua relevância, é um tema de grande interesse, amplamente estudado há algumas décadas, com diversos estudos buscando modelagens e soluções para o problema.

As principais descrições para a TIE na literatura trazem sua modelagem como um problema inverso. Dentre os principais modelos matemáticos que tentam descrever o problema da Tomografia Elétrica, neste trabalho focaremos nos chamados Modelo Contínuo e Modelo Completo de Eletrodos. Não será nosso objetivo entrar nos detalhes formais da formulação matemática envolvida, apresentando-a apenas de forma intuitiva. Nas seguintes seções, trazemos uma descrição de cada modelo, buscando descrever brevemente a interpretação física em torno dos conceitos abordados, relacionando com a formulação matemática, descrevendo desde a boa definição do problema direto até a formulação do problema inverso em si.

4.1 Modelo Contínuo

Nesta seção, descrevemos o chamado Modelo Contínuo, o qual consiste no primeiro modelo proposto para a Tomografia por Impedância Elétrica. Foi trazido inicialmente pelo matemático Alberto Calderón em 1980, num artigo denominado "On an inverse boundary problem"² (CALDERÓN, 2006). Trazemos a seguir uma descrição do modelo, junto a uma breve descrição e interpretações dos conceitos físicos envolvidos.

4.1.1 Hipóteses do Modelo Contínuo

No contexto deste trabalho, consideramos o caso da Tomografia respectiva a uma seção transversal do corpo, uma "fatia horizontal", destacando, entretanto, que o

¹ Em inglês, Electrical Impedance Tomography (EIT).

² "Sobre um problema inverso de fronteira" (Tradução Livre)
problema pode ser aplicado também para o caso tridimensional. Assim, consideramos o domínio como um conjunto $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ aberto conexo e com fronteira do tipo Lipschitz, tendo uma superfície consistindo na fronteira $\partial \Omega$.

Como descrevem Halliday, Walker e Resnick (2016), correntes elétricas consistem essencialmente no fluxo de cargas elétricas, partículas, atravessando um meio. Ocorre que cada corpo, dependendo dos materiais que o compõem, tem uma propensão a permitir mais ou menos essa passagem de cargas, afetando como elas o atravessam. Uma das medidas para essa característica é a chamada condutividade elétrica, grandeza que indica o quanto um material é suscetível à condução de eletricidade. Como cada material possui uma condutividade própria, dado um corpo Ω heterogêneo composto de diferentes materiais, podemos modelá-la como uma função $\gamma : \Omega \to \mathbb{R}$, indicando a condutividade em cada ponto.

Ao ter um corpo eletricamente carregado, temos outras duas medidas importantes: a corrente elétrica g, que consiste na taxa de cargas que atravessam cada ponto, e o potencial elétrico u, que consiste na energia potencial referente a uma certa quantidade de carga em um dado ponto em relação a um referencial. Podemos modelar o potencial como uma função $u : \Omega \to \mathbb{R}$, representando o potencial elétrico em cada ponto de Ω , e a corrente elétrica, uma função $g : \partial\Omega \to \mathbb{R}$ restrita à superfície, sendo ela o domínio de interesse para tal grandeza nesse modelo.

O Modelo Contínuo é composto basicamente de duas equações-base. A primeira, conforme mostra Borcea (2002), pode ser obtida a partir das leis do eletromagnetismo. Ela estabelece que:

$$\nabla \cdot (\gamma(x)\nabla u(x)) = 0, \ x \in \Omega.$$
(4.1.1)

O termo $-\gamma(x)\nabla u(x)$ é conhecido como fluxo elétrico no ponto x, indicando a direção e a densidade de cargas passando nesse ponto. A Equação (4.1.1) informa que o fluxo elétrico não é gerado nem se perde ao longo do corpo, indicando que o balanço do fluxo de cargas é nulo.

Outra das equações do Modelo Contínuo estabelece que a corrente g em cada ponto da superfície corresponde ao fluxo normal da corrente elétrica (o quanto de corrente está atravessando para fora do corpo) dando a relação:

$$\gamma(x)\frac{\partial u}{\partial \eta}(x) = g(x), \ x \in \partial\Omega, \tag{4.1.2}$$

onde $\eta : \partial \Omega \to \mathbb{R}^2$ é o campo vetorial normal unitário externo a Ω , que representa o vetor normal $\eta(x)$ a cada ponto $x \in \partial \Omega$.

4.1.2 Formulação do problema direto

Nossa ideia, até o final dessa seção, é descrever o problema inverso da TIE. Porém, antes disso, precisamos compreender se a associação entre correntes e os potenciais medidos está bem definida. Isto é, dada uma certa corrente aplicada sobre um corpo com determinada condutividade, existe um único potencial resultante?

Juntando as Equações (4.1.1) e (4.1.2), temos a formulação do problema direto a partir do Modelo Contínuo da Tomografia por Impedância Elétrica, que consiste em: aplicando uma corrente elétrica $g: \partial \Omega \to \mathbb{R}$ em um determinado corpo de condutividade $\gamma: \Omega \to \mathbb{R}$, obter o potencial elétrico gerado $u: \Omega \to \mathbb{R}$ satisfazendo

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\gamma(x)\nabla u(x)) = 0, \ x \in \Omega\\ \gamma(x)\frac{\partial u}{\partial \eta}(x) = g(x), \ x \in \partial\Omega. \end{cases}$$
(4.1.3)

Aqui supõe-se que g é inteiramente conhecida ao longo da superfície, sendo característica principal do Modelo Contínuo. Nesse contexto, outra condição obtida pelo princípio da conservação de carga é dada por:

$$\int_{\partial\Omega} g \,\mathrm{d}s = 0,\tag{4.1.4}$$

condição conhecida como Princípio da Conservação de Energia.

Conforme descrito em (SANTANA, 2022), para dadas $g \in \gamma$, uma solução u de (4.1.3) será também uma solução u para a equação

$$\iint_{\Omega} \gamma(x) \nabla u(x) \nabla v(x) \, \mathrm{d}x = \int_{\partial \Omega} gv \, \mathrm{d}s, \text{ para toda } v \text{ suave t.q.} \int_{\partial \Omega} v \, \mathrm{d}s = 0, \qquad (4.1.5)$$

com u e v nos espaços de funções apropriados, chamada formulação fraca do problema. Apesar desta equação admitir soluções que não são suportadas no modelo (4.1.3), para funções regulares o suficiente, os dois problemas se tornam equivalentes. Além disso, como explica Santana (2022), para g, γ nos conjuntos de funções adequados, a Equação (4.1.5) admite solução única. Desse modo, temos a garantia que dadas certas correntes aplicadas num corpo de condutividade fixada, há um único potencial elétrico associado.

Para fins do problema da TIE, temos conhecimento apenas do potencial $u|_{\partial\Omega}$ restrito à superfície, o qual denotamos por $f = u|_{\partial\Omega}$. Uma observação é que o conjunto Ω é aberto, e essa restrição à fronteira deve ser entendida no sentido do operador do traço (SANTANA, 2022).

Em especial, pela discussão no parágrafo anterior, para cada corrente g aplicada num corpo de condutividade γ , teremos um único potencial sobre a fronteira $f = u \Big|_{\partial \Omega}$

associado. Podemos traduzir isso, definindo para cada γ fixa o operador Λ_{γ} , chamado operador Neumann para Dirichlet (NtD), que associa cada corrente elétrica g ao potencial sobre a superfície $f = \Lambda_{\gamma}g$ correspondente, o qual prova-se ser um operador linear, limitado, auto-adjunto e inversível (MARGOTTI, 2015).

Desse modo, Margotti (2015) descreve que é possível definir um operador F que associa cada γ a um operador NtD $\Lambda_{\gamma} = F(\gamma)$ correspondente, o qual prova-se ainda ser injetivo e diferenciável. Ou seja, cada condutividade define um comportamento específico na associação de correntes e potenciais. Define-se, portanto, o problema direto do Modelo Contínuo como sendo o processo de obter o operador Λ_{γ} a partir da condutividade γ conhecida. Isto é, queremos calcular

$$F(\gamma) = \Lambda_{\gamma},\tag{4.1.6}$$

dado $\gamma : \Omega \to \mathbb{R}$. No caso, F é o Operador Direto do problema da TIE. A seguir, veremos então como formular o problema inverso.

4.1.3 Formulação do problema inverso

A partir da discussão feita acima, o problema inverso da TIE pode ser interpretado como recuperar γ dado o conhecimento do Operador NtD Λ_{γ} . Isto é, queremos determinar γ tal que

$$F(\gamma) = \Lambda_{\gamma}.$$

A questão que se apresenta é: como exatamente conhecer Λ_{γ} ? Uma das desvantagens do Modelo Contínuo é justamente que, por trabalhar com $g \in f$ sendo funções em espaços de dimensão infinita, não é possível obter de forma exata o operador Λ_{γ} a partir dos potenciais f medidos.

Apesar de sabermos calcular $\Lambda_{\gamma}g$ conhecendo $\gamma \in g$, que consiste basicamente em obter $f = u|_{\partial\Omega}$, não podemos garantir que uma determinada γ é a única responsável por gerar um certo número finito de potenciais f a partir de um número finito de correntes g. Ainda assim, pode-se tentar uma aproximação para esse operador, aplicando uma série de correntes distintas g_1, g_2, \ldots, g_n , obtendo os potenciais correspondentes f_1, f_2, \ldots, f_n , conforme descrito por Margotti (2015).

O Modelo Contínuo possui sua importância teórica, principalmente por ter sido o primeiro modelo proposto para o problema e serve como boa base para compreensão das hipóteses envolvidas. Entretanto, ele possui suas desvantagens. Uma delas, já comentada, é a dificuldade em determinar o operador Λ_{γ} . Além disso, em situações práticas não se tem um conhecimento preciso das funções $g \in f$ que definem respectivamente a corrente e o potencial ao longo da superfície. Normalmente, os aparelhos usados para aplicação e medição de correntes não fornecem informação de cada ponto específico, mas sim de uma certa região onde estão instalados. Ainda que se possa contornar essas situações usando técnicas para discretização e aproximação das funções, as reconstruções obtidas acabam sendo mais imprecisas e tendo maior grau de erro (SOMERSALO; CHENEY; ISAACSON, 1992).

Desse modo, diferentes modelos foram sendo elaborados, refinando as hipóteses disponíveis a partir dos aspectos práticos que se apresentam na configuração da TIE. Na seção a seguir, descrevemos alguns desses modelos, em especial um que reúne boa parte das características dos demais: o chamado Modelo Completo de Eletrodos.

4.2 Modelo Completo de Eletrodos

Nesta seção, descrevemos o Modelo Completo de Eletrodos, que reúne hipóteses e formulações de outros modelos como o *Gap Model* e o *Shunt Model*, os quais também serão descritos brevemente. Esses modelos surgem como complementos para o Modelo Contínuo descrito na seção anterior, trazendo mais hipóteses a partir de mais conceitos do eletromagnetismo e das situações observadas em testes com a TIE, buscando tornar o modelo mais preciso. Novamente, trazemos uma descrição das formulações matemáticas e interpretações físicas respectivas para cada hipótese dos modelos abordados.

4.2.1 Hipóteses do Modelo Completo de Eletrodos

Para a descrição dos modelos desta seção, utilizamos principalmente as hipóteses e modelagens descritas por Somersalo, Cheney e Isaacson (1992), bem como por Borcea (2002). Novamente consideramos o corpo como um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ aberto simplesmente conexo e fronteira Lipschitz, com uma superfície consistindo na fronteira $\partial\Omega$, munido de uma condutividade $\gamma : \Omega \to \mathbb{R}$, conforme descrito na seção anterior.

Além disso, passamos a considerar agora a existência dos eletrodos, componentes em contato com o corpo responsáveis pela aplicação das correntes elétricas e realização das medições necessárias. Supõe-se que os eletrodos estão dispostos ao longo da superfície, disjuntos entre si. Com isso, consideramos um número de L eletrodos $e_1, \ldots, e_L \subset \partial \Omega$ como subconjuntos da superfície, tendo a hipótese que $\overline{e_i} \cap \overline{e_j} = \emptyset$, para todo $1 \leq i, j \leq L$ e $i \neq j$, tendo ainda cada e_i conexo e com medida positiva $|e_i| > 0$.

Continuamos tendo como hipótese a Equação (4.1.1), que se trata essencialmente da equação diferencial parcial que descreve o problema em todos os modelos. Dada agora a presença dos eletrodos, temos a hipótese de que fora dos eletrodos não há corrente na superfície. Além disso, inicialmente pode-se dar a hipótese de que cada eletrodo e_i tem uma corrente constante $I_i \in \mathbb{R}$ aplicada. Assim, valendo ainda que

$$g(x) = \gamma(x) \frac{\partial u}{\partial \eta}(x) = \gamma(x) (\nabla u(x) \cdot \eta(x))$$

temos $g:\partial\Omega\to\mathbb{R}$ portanto dada por:

$$g(x) = \begin{cases} \frac{I_i}{|e_i|}, & \text{se } x \in e_i, \forall i \in \{1, \dots, L\} \\ 0, & \text{se } x \in \partial\Omega \setminus \bigcup_{j=1}^{L} e_j, \end{cases}$$
(4.2.1)

onde $|e_i|$ denota a área ou comprimento do *i*-ésimo eletrodo. O modelo composto das Equações (4.1.1),(4.1.2) e (4.2.1) é chamado de *Gap Model*, justamente por considerar a ausência de corrente nos vãos, em inglês "*gaps*", entre eletrodos.

Ocorre que o Gap Model também apresenta certa imprecisão, devido principalmente à hipótese dos eletrodos terem corrente constante (SOMERSALO; CHENEY; ISA-ACSON, 1992), ainda distanciando as reconstruções obtidas das soluções reais buscadas. Com isso, a hipótese é alterada, considerando que sobre cada eletrodo e_i se conhece apenas uma corrente média $I_i \in \mathbb{R}$ correspondendo à integral do fluxo elétrico sobre o eletrodo. Isso se traduz na equação:

$$\int_{e_i} g \, \mathrm{d}s = I_i, \forall i \in \{1, \dots, L\}.$$
(4.2.2)

Todavia, ainda se mantém a hipótese de que a corrente elétrica é nula nas parcelas da superfície fora dos eletrodos, ou seja, que:

$$g(x) = 0, \forall x \in \partial\Omega \setminus \bigcup_{j=1}^{L} e_j.$$
(4.2.3)

Considerando a presença dos eletrodos, podem ser adicionadas ainda algumas hipóteses relacionadas ao potencial elétrico. Dada a distribuição de potencial gerada sobre o corpo, também modelada como uma função $u : \Omega \to \mathbb{R}$, teremos em cada eletrodo e_i um potencial $u|_{e_i}(x)$. Com a hipótese que os eletrodos são condutores perfeitos, para cada $i \in \{1, \ldots, L\}$ vale a relação

$$u\Big|_{e_i}(x) = u_i \in \mathbb{R}, \forall x \in e_i.$$

Unindo a equação acima com as Equações (4.1.1), (4.2.2) e (4.2.3) obtemos o chamado *Shunt Model*, recebendo esse nome por considerar o efeito conhecido como "*shunting*", causado pelos eletrodos na corrente elétrica (SOMERSALO; CHENEY; ISAAC-SON, 1992).

Há ainda um aperfeiçoamento que pode ser feito nesse modelo. Geralmente na interface entre a superfície do corpo e os eletrodos ocorre um fenômeno chamado impedância de contato, causado pela formação de uma fina camada resistiva no contato do eletrodo com o objeto, no qual há uma certa discrepância entre o potencial elétrico no corpo e o medido nos eletrodos (SOMERSALO; CHENEY; ISAACSON, 1992). Essa discrepância é proporcional à corrente elétrica passando sobre o eletrodo. Com isso, denotando $U_i \in \mathbb{R}$ o potencial medido em cada eletrodo e_i , e denotando $z_i \in \mathbb{R}_+$ a chamada *impedância de contato* no *i*-ésimo eletrodo respectivo, tal diferença pode ser descrita pela equação:

$$u|_{e_i}(x) + z_i g(x) = U_i, \forall x \in e_i, \forall i \in \{1, \dots, L\}.$$
(4.2.4)

Em resumo, consideramos um corpo representado no domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ suficientemente regular, com superfície descrita pela fronteira $\partial\Omega$, onde são atrelados L eletrodos $e_1, \ldots, e_L \subset \partial\Omega$, com $1 \leq i < j \leq L$. Representamos a condutividade desse corpo como uma distribuição $\gamma : \Omega \to \mathbb{R}$. Em cada eletrodo e_j é aplicada uma corrente elétrica $I_j \in \mathbb{R}$, resultando em uma distribuição de potencial elétrico $u : \Omega \to \mathbb{R}$, a qual medida em cada eletrodo e_j resulta num potencial aparente $U_j \in \mathbb{R}$. Por fim, em cada eletrodo e_j existe uma impedância de contato, a qual é representada por uma constante $z_j \in \mathbb{R}_+$ correspondente.

Juntando as Equações (4.1.1), (4.2.2), (4.2.3) e (4.2.4), usando ainda que a corrente elétrica g sobre a superfície segue a relação dada pela Equação (4.1.2), temos o denominado Modelo Completo de Eletrodos, dado por:

$$\begin{cases} \nabla \cdot (\gamma(x)\nabla u(x)) = 0, \ x \in \Omega \\ \int_{e_i} \gamma \nabla u \cdot \eta \, \mathrm{d}s = I_i, \forall i \in \{1, \dots, L\} \\ \gamma(x)\nabla u(x) \cdot \eta(x) = 0, \ x \in \partial\Omega \setminus \bigcup_{j=1}^L e_j. \\ u\big|_{e_i}(x) + z_i \gamma(x)\nabla u(x) \cdot \eta(x) = U_i, \forall i \in \{1, \dots, L\}, \end{cases}$$
(4.2.5)

Note que não trabalhamos com uma única função g descrevendo a corrente, nem uma única f descrevendo o potencial medido sobre a fronteira, mas sim com L correntes $I_1, \ldots, I_L \in \mathbb{R}$ e L potenciais $U_1, \ldots, U_L \in \mathbb{R}$ medidos sobre os eletrodos. Chamamos cada conjunto de correntes aplicadas numa certa configuração de *padrão de correntes*, representando por um vetor $I = (I_1, \ldots, I_L) \in \mathbb{R}^L$. Da mesma forma, cada conjunto de potenciais medidos é chamado *padrão de potenciais*, representado por um vetor $U = (U_1, \ldots, U_L) \in \mathbb{R}^L$.

Ainda, pode-se obter conforme descrito por Borcea (2002) outras duas condições estabelecidas a partir de propriedades do eletromagnetismo, consistindo essencialmente nos princípios de conservação de carga e aterramento do potencial, representadas respectivamente nas equações:

$$\sum_{j=1}^{L} I_j = 0, \tag{4.2.6}$$

е

$$\sum_{j=1}^{L} U_j = 0, \tag{4.2.7}$$

tomando para a segunda equação um potencial terra como referência para os potenciais medidos.

4.2.2 Formulação do problema direto

Assim como na seção anterior, antes de descrever o problema inverso neste modelo, discutiremos se o problema direto está bem definido. Isto é, se para um corpo com condutividade $\gamma : \Omega \to \mathbb{R}$ fixada e aplicado um padrão de corrente $I = (I_1, \ldots, I_L)$, fixadas impedâncias de contato $z_1, \ldots, z_L \in \mathbb{R}_+$ sobre os eletrodos, existe um único potencial $u : \Omega \to \mathbb{R}$ e padrão de potenciais medidos $U = (U_1, \ldots, U_L)$ associados.

Conforme mostrado por Somersalo, Cheney e Isaacson (1992) e descrito em Santana (2022), o modelo com as restrições apresentadas pode ser transformado na seguinte equação variacional, chamada formulação fraca do problema:

$$\iint_{\Omega} \gamma(x) \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) \, \mathrm{d}x + \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{z_l} \int_{e_l} (u - U_l) (v - V_l) \, \mathrm{d}s = \sum_{l=1}^{L} I_l V_l, \tag{4.2.8}$$

dados $v : \Omega \to \mathbb{R}$ e $V = (V_1, \dots, V_L) \in \mathbb{R}^L$ quaisquer sendo v suficientemente suave e $\sum_{j=1}^L V_j = 0.$

Somersalo, Cheney e Isaacson (1992) demonstram que tal formulação é equivalente ao Modelo Completo de Eletrodos, no sentido de que dado um par (u, U) que satisfaz (4.2.5), então para qualquer par (v, V) nos espaços apropriados, o par (u, U) é solução para a Equação (4.2.8), valendo também a recíproca para γ suficientemente regular.

Santana (2022) descreve como, sob determinadas condições, para cada condutividade γ , conhecidas as impedâncias de contato z_1, \ldots, z_L e um padrão de correntes Iaplicado, existe um único par de potenciais resultantes (u, U) que resolve o problema. Desse modo, como explica Margotti (2015), essa unicidade dos potenciais nos garante que dado um corpo com condutividade γ podemos definir o operador Neumann para Dirichlet (NtD):

$$\Lambda_{\gamma} : \mathbb{R}^L_{\diamond} \to \mathbb{R}^L_{\diamond}, \tag{4.2.9}$$

sendo $\mathbb{R}^{L}_{\diamond} = \left\{ (x_{1}, \dots, x_{L}) \in \mathbb{R}^{L} : \sum_{j=1}^{L} x_{j} = 0 \right\}$, operador que associa cada padrão de correntes $I \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$ aplicado ao padrão de potenciais medidos $U \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$, garantindo ainda que o operador NtD é linear. Esse é o operador que traduz a noção que para um certo corpo com uma condutividade específica, cada padrão de correntes aplicado resultará em um único padrão de potenciais medidos sobre a fronteira.

De fato, como descreve Margotti (2015), novamente pode-se definir um operador F que associa cada γ ao operador $\Lambda_{\gamma} = F(\gamma)$ correspondente. Justamente F que consiste no operador do problema direto que queremos trabalhar. Isto é, o problema direto da TIE consiste em determinar Λ_{γ} conhecendo γ , ou seja, calcular $F(\gamma)$. Vejamos a seguir como formular o problema inverso.

4.2.3 Formulação do problema inverso

Essencialmente, o problema inverso trata de reconstruir γ a partir das informações de Λ_{γ} , ou seja, resolver

$$F(\gamma) = \Lambda_{\gamma}.\tag{4.2.10}$$

Mais uma vez, o procedimento para conhecer Λ_{γ} consistirá em aplicar diferentes padrões de correntes $I^{(i)} \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$, medindo os padrões de potenciais $U^{(i)} \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$ associados. Diferente do Modelo Contínuo, aqui os padrões de corrente e de potenciais não são mais funções, mas sim vetores em \mathbb{R}^{L} . Isso, aliado ao fato de Λ_{γ} ser um operador linear, a princípio torna a reconstrução desse operador muito mais simples e precisa.

De fato, sabendo que \mathbb{R}^{L} é um espaço vetorial de dimensão finita, se os padrões $I^{(1)}, \ldots, I^{(L)} \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$ formam uma base para esse espaço, pode-se determinar Λ_{γ} se for conhecido que $\Lambda_{\gamma}I^{(j)} = U^{(j)}$, para todo $j \in \{1, \ldots, L\}$. Desse modo, aplica-se um número ℓ de padrões de correntes $I^{(1)}, \ldots, I^{(\ell)} \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$, os quais agrupamos por um vetor $\mathfrak{I} \in \mathbb{R}^{\ell L}$ dado por $\mathfrak{I} = (I^{(1)}, \ldots, I^{(\ell)})$. Ainda, sendo $U^{j} = \Lambda_{\gamma}I^{(j)}$ o padrão de potenciais gerado respectivamente pelo padrão de correntes $I^{(j)}$, com $j \in \{1, \ldots, \ell\}$, temos também um vetor $\Gamma_{\gamma} \in \mathbb{R}^{\ell L}$ composto pelos potenciais medidos respectivos $\Gamma_{\gamma} = (U^{(1)}, \ldots, U^{(\ell)})$.

Conforme discutido, cada vetor de padrões de correntes \mathfrak{I} irá gerar um vetor de potenciais Γ_{γ} distinto, dependendo do operador Λ_{γ} responsável pela associação. Sob outra perspectiva, dado um conjunto de correntes \mathfrak{I} fixadas, cada condutividade γ irá resultar em um vetor de potenciais Γ_{γ} respectivo. Isso nos permite, fixando um vetor de padrões de correntes \mathfrak{I} definir o operador $F_{\mathfrak{I}}$ que associa cada condutividade γ ao vetor de padrões de potenciais $F_{\mathfrak{I}}(\gamma) = \Gamma_{\gamma} \in \mathbb{R}^{\ell L}$ correspondente.

Desse modo, a solução "na prática" para o problema inverso da TIE no Modelo

Completo de Eletrodos pode ser modelado matematicamente da seguinte maneira: dado um vetor de padrões de corrente $\mathfrak{I} = (I^{(1)}, \ldots, I^{(\ell)}) \in \mathbb{R}^{\ell L}$ fixo, obtendo o vetor de potenciais medidos $\Gamma_{\gamma} = ((U^{(1)}, \ldots, U^{(\ell)}) \in \mathbb{R}^{\ell L}$, determinar γ tal que:

$$F_{\mathfrak{I}}(\gamma) = \Gamma_{\gamma}. \tag{4.2.11}$$

No restante deste trabalho, estaremos interessados em resolver o problema inverso descrito pela Equação (4.2.11). Este, conforme descrito por Margotti (2015), trata-se um problema inverso "severamente mal posto", sendo então interessante buscar soluções aproximadas através do uso de métodos de regularização apropriados.

4.2.4 Derivada do operador direto

Margotti (2015) relata que $F_{\mathfrak{I}}$ é um operador diferenciável, porém não linear. Isso descarta a possibilidade de utilizar métodos de regularização para problemas inversos lineares, mas nos permite usar métodos como os do tipo Newton-Inexato, conforme discutidos no Capítulo 3. Para isso, precisamos, a princípio, saber determinar a derivada de $F_{\mathfrak{I}}$ para uma dada γ , ou pelo menos as derivadas direcionais para uma direção qualquer. Isto é, saber calcular $F'_{\mathfrak{I}}(\gamma)\eta$, para uma η informada.

Inicialmente, fixamos um conjunto de ℓ padrões de correntes $I^{(1)}, \ldots, I^{(\ell)} \in \mathbb{R}^L_\diamond$ linearmente independentes. A partir disso, definimos para cada corrente $I^{(j)}$, com $j \in \{1, \ldots, \ell\}$, o operador F_j , que pode ser visto como a *i*-ésima componente de $F_{\mathfrak{I}}$, dado por

$$F_j(\gamma) = F(\gamma)I^{(j)}.$$

Desse modo, a partir do vetor de padrões de correntes $\mathfrak{I} = (I^{(1)}, \ldots, I^{(\ell)}) \in \mathbb{R}^{\ell L}$, temos que:

$$F_{\mathfrak{I}}(\gamma) = \begin{pmatrix} F(\gamma)I^{(1)} \\ \vdots \\ F(\gamma)I^{(\ell)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} F_{1}(\gamma) \\ \vdots \\ F_{\ell}(\gamma) \end{pmatrix}.$$
(4.2.12)

Como detalhado por Santana (2022), é possível obter as derivadas direcionais de cada F_j a partir da solução de uma equação variacional. Dada uma condutividade γ , consideramos $u^{(j)}$ a solução obtida na Equação (4.2.8) com a γ especificada e a corrente $I^{(j)}$. Dada uma função η no mesmo espaço de γ , existe um único par $(\omega^{(i)}, \mathcal{W}^{(i)})$ que resolve a equação variacional

$$\iint_{\Omega} \gamma(x) \nabla \omega^{(j)}(x) \cdot \nabla v(x) \,\mathrm{d}x + \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{z_l} \int_{e_l} (\omega^{(i)} - \mathcal{W}_l^{(j)}) (v - V_l) \,\mathrm{d}s = -\int_{\Omega} \eta \nabla u^{(j)} \cdot \nabla v \,\mathrm{d}x$$
(4.2.13)

para todo par (v, V), sendo $v : \Omega \to \mathbb{R}$ suave o suficiente e $V = (V_1, \dots, V_L) \in \mathbb{R}^L_\diamond$ tal que e $\sum_{j=1}^L V_j = 0$. Mais ainda, verifica-se que para cada j, tem-se

$$F'_{i}(\gamma)\eta = \mathcal{W}^{(j)}.\tag{4.2.14}$$

Ou seja, com relação a cada componente de $F_{\mathfrak{I}}$, podemos calcular $F'_{j}(\gamma)\eta$, a derivada direcional de F_{j} em γ na direção η , a partir do termo $\mathcal{W}^{(j)} \in \mathbb{R}^{L}_{\diamond}$ obtido na solução da equação variacional.

Sabendo calcular a derivada direcional em cada componente, podemos calcular a derivada direcional $F'_{\mathfrak{I}}(\gamma)\eta$ visto que

$$F'_{\mathfrak{I}}(\gamma)\eta = \begin{pmatrix} F'_{1}(\gamma)\eta\\ \vdots\\ F'_{\ell}(\gamma)\eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{W}^{(1)}\\ \vdots\\ \mathcal{W}^{(\ell)} \end{pmatrix}, \qquad (4.2.15)$$

observando que $F_{\Im}'(\gamma)\eta\in\mathbb{R}^{\ell L}$ dado cada $\mathcal{W}^{(j)}\in\mathbb{R}^{L}_\diamond.$

Nesse Capítulo, tratamos dos principais modelos que descrevem o problema da Tomografia por Impedância Elétrica, buscando trazer uma descrição mais intuitiva em torno dos conceitos envolvidos. Detalhes mais técnicos dos resultados comentados podem ser encontrados nos trabalhos citados, como no de Santana (2022), Somersalo, Cheney e Isaacson (1992) e Borcea (2002), bem como nos trabalhos de Kirsch (2011) e Margotti (2015).

Até então, foram discutidos apenas os aspectos teóricos dos modelos, em especial focando em definir os operadores envolvidos e descrever que de fato estão bem definidos. Todavia, não descrevemos como de fato calcular esses operadores, ou seja, como trabalhar na prática com esse problema inverso. No geral, esse problema é tratado numericamente, pois, para as equações e modelos apresentados, não se conhece maneiras de obter soluções analíticas, isto é, em termos de funções ou expansões em séries elementares. Por exemplo, ainda que se tenha a informação exata da função γ , não se conhece como obter de forma exata uma solução u para o modelo na EDP (4.2.5) ou um par (u, U) para a Equação Variacional (4.2.8). Com isso, algumas técnicas de discretização e métodos numéricos são aplicados para poder trabalhar com o problema em questão.

Portanto, no capítulo a seguir, descrevemos brevemente como trabalhar computacionalmente com esse problema, focando em particular no Modelo Completo de Eletrodos, além de relatar os experimentos numéricos feitos com os diferentes métodos de regularização explorados.

5 Experimentos Numéricos

Neste capítulo, iremos apresentar alguns experimentos envolvendo a resolução numérica do problema inverso da Tomografia por Impedância Elétrica. Nosso intuito é avaliar como os Métodos de Regularização estudados ao longo do trabalho se comportam aplicados ao problema da TIE, analisando e comparando os resultados obtidos em cada cenário. Focaremos na realização de experimentos com a implementação computacional do Modelo Completo de Eletrodos, detalhado na Seção 4.2, descrevendo como esse pode ser tratado numericamente. Nossos experimentos se restringirão ao uso de dados sintéticos, gerados a partir de procedimentos descritos ao longo do capítulo.

Os experimentos serão executados na linguagem Python, com apoio de uma biblioteca desenvolvida por Hafemann (2023) que dispõe de diferentes recursos para resolução da TIE, tanto do problema direto como do problema inverso. Os códigos utilizados para os experimentos que iremos executar estão disponíveis para consulta em um repositório aberto ¹.

Na primeira seção do capítulo, iremos descrever as técnicas de discretização utilizadas para trabalhar numericamente com o Modelo Completo de Eletrodos. Na seção seguinte, descrevemos a realização de diferentes experimentos envolvendo o uso de dados gerados sinteticamente, onde serão explicados os procedimentos de geração de dados, bem como as análises desenvolvidas.

5.1 Implementação computacional da Tomografia por Impedância Elétrica

Descreveremos a seguir os procedimentos utilizados para trabalhar numericamente com o problema da TIE, em particular do Modelo Completo de Eletrodos descrito na Seção 4.2. Tratando-se de um problema modelado como uma Equação Diferencial Parcial, se fazem necessários certos métodos numéricos específicos. No nosso contexto, o conjunto de técnicas utilizadas será essencialmente do chamado Método de Elementos Finitos, descrito por Galvis e Versieux (2011). Não será nosso objetivo trabalhar os aspectos teóricos e de análise de erro de tal método, nos focando apenas em apresentar de que maneira os cálculos são montados e efetuados computacionalmente.

Começamos a seção descrevendo a discretização do problema, isto é, de que forma conseguimos tratar o domínio e funções utilizadas como vetores de tamanhos finitos para trabalhar computacionalmente com eles. Na sequência, descrevemos algumas técnicas

¹ Disponível em: $\langle https://github.com/felipekriffel/TCC-Regularizacao-EIT \rangle$

utilizadas para cálculo tanto do Operador Direto do problema como de sua derivada em determinado ponto, a partir das funções devidamente discretizadas.

5.1.1 Discretização do problema

Na descrição do modelo realizada na Seção 4.2, consideramos uma seção do corpo um domínio $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. Inicialmente, ao longo de Ω é feita uma denominada triangulação, isto é, uma subdivisão do domínio em um conjunto de triângulos cujas arestas não contém vértices de outros triângulos em seu interior. Gera-se uma malha composta por N triângulos T_1, \ldots, T_N , definidos por K vértices P_1, \ldots, P_K . A Figura 5.1.1 ilustra uma triangulação feita em um disco unitário, que consiste do conjunto $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x^2 + y^2 < 1\}.$

Figura 5.1.1 – Exemplo de triangulação do disco unitário $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 | x^2 + y^2 < 1\},$ com N = 594 e K = 378



Fonte: Elaborado pelo autor.

No método de discretização utilizado, baseado no chamado Método de Elementos Finitos (GALVIS; VERSIEUX, 2011), as funções serão aproximadas por espaços de funções com dimensão finita, gerados por tipos de funções especiais. Desse modo, as funções a princípio definidas em um domínio com infinitos pontos, podem ser representadas como um vetor de coeficientes de uma combinação linear. Em particular, para a TIE são utilizados dois espaços: o gerado por funções características, e o gerado por funções afim por partes.

Para o primeiro tipo, consideramos as funções características χ_{T_j} de cada triângulo T_j , as quais indicam se os pontos estão no triângulo T_j correspondente, tendo valor 1 caso afirmativo e valor 0 caso contrário. Estas são definidas em Ω e dadas por:

$$\chi_{T_j}(x) = \begin{cases} 1, x \in T_j, \\ 0, x \notin T_j. \end{cases}$$
(5.1.1)

No problema específico da TIE, trataremos as condutividades reconstruídas γ como funções do espaço gerado por funções características dos triângulos que compõem a triangulação. Isto é, dadas as funções características $\chi_{T_1}, \ldots, \chi_{T_N}$ de cada triângulo da malha construída, consideramos uma aproximação da condutividade procurada como uma função $\gamma \in V_1 = span\{\chi_{T_1}, \ldots, \chi_{T_N}\}$ no espaço gerado pelas funções características, podendo assim ser representada na forma:

$$\gamma = \gamma_1 \chi_{T_1} + \dots + \gamma_N \chi_{T_N}, \qquad (5.1.2)$$

onde $\gamma_1, \ldots, \gamma_N \in \mathbb{R}$ são coeficientes específicos para cada função γ .

O segundo espaço consiste em funções contínuas afins em cada triângulo. Uma base para esse espaço é composto das funções v_i tais que para cada vértice P_j

$$v_i(P_j) = \begin{cases} 1, i = j, \\ 0, i \neq j \end{cases}$$
(5.1.3)

e são afins dentro de cada triângulo. Essencialmente, é definida uma função para cada vértice, atingindo valor 1 no vértice correspondente e assumindo valores intermediários linearmente em torno dele. A Figura 5.1.2 traz um exemplo de uma função no espaço gerado pelas funções v_i , onde pode se observar que a função é contínua, e em cada triângulo do domínio discretizado a função corresponde a um plano.

Figura 5.1.2 – Gráfico de uma função no espaço V_2 a partir uma triangulação do disco unitário.



Fonte: Elaborado pelo autor.

No contexto da TIE, esse espaço de funções será utilizado para aproximação das funções de distribuição do potencial. De mesma forma, consideramos a função $u \in V_2 =$ $span\{v_1,\ldots,v_n\}$ no espaço gerado V_2 por essas funções, de forma que:

$$u = u_1 v_1 + \dots + u_K v_K, \tag{5.1.4}$$

sendo $u_1, \ldots, u_K \in \mathbb{R}$ coeficientes próprios de cada função u.

Dadas as funções presentes nos espaços de dimensão finita V_1 e V_2 , podemos representá-las a partir de vetores contendo as respectivas coordenadas nesses espaços. Isto é, dada γ com coordenadas $\gamma_1, \ldots, \gamma_N$ como na Equação (5.1.2), podemos tratar γ como um vetor $\overline{\gamma} \in \mathbb{R}^N$ dado por

$$\overline{\gamma} = (\gamma_1, \dots, \gamma_N) \,. \tag{5.1.5}$$

Similarmente, trataremos u como um vetor $\overline{u} \in \mathbb{R}^{K}$ formado por suas coordenadas no espaço de funções V_2 , como na Equação (5.1.4).

5.1.2 Cálculo do operador direto

A seguir, descrevemos como pode ser realizado o cálculo do Operador Direto descrito na Seção 4.2 a partir das técnicas de discretização utilizadas. Conforme descrito na seção citada, dados um domínio Ω contendo L eletrodos, o operador F associa cada condutividade γ a um operador Λ_{γ} , o qual leva cada padrão de correntes $I \in \mathbb{R}^{L}$ a um padrão de potenciais medidos $U \in \mathbb{R}^{L}$ correspondentes. Vimos que este é definido a partir da Equação (4.2.8), dada por:

$$\iint_{\Omega} \gamma(x) \nabla u(x) \cdot \nabla v(x) \,\mathrm{d}x + \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{z_l} \int_{e_l} (u - U_l) (v - V_l) \,\mathrm{d}s = \sum_{l=1}^{L} I_l V_l,$$

para todo par (v, V) onde $v : \Omega \to \mathbb{R}$ é uma função suficientemente suave e $I \in \mathbb{R}^L$ um vetor tal que $\sum_{i=0}^{L} V_i = 0$. Conforme discutido, para cada γ e cada padrão de correntes I existe um único par (u, U) que soluciona a equação.

Conforme detalhado por Santana (2022), dada γ no espaço V_1 e u no espaço V_2 tendo respectivamente vetores de coordenadas $\overline{\gamma} \in \mathbb{R}^N$ e $\overline{u} \in \mathbb{R}^K$, como apresentado na subseção anterior, obter a solução (u, U) para a Equação (4.2.8) equivale a solucionar um sistema linear

$$A\hat{u} = \overline{I},\tag{5.1.6}$$

onde $\hat{u} \in \mathbb{R}^{K+L}$ é um vetor formado pelo "empilhamento" do vetor de coordenadas \overline{u} e

do padrão de potenciais U, na forma:

$$\hat{u} = \begin{pmatrix} \overline{u} \\ U \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_1 \\ \vdots \\ u_K \\ U_1 \\ \vdots \\ U_L \end{pmatrix}.$$
(5.1.7)

A matriz A e o vetor \overline{I} são formados a partir de cada lado da Equação (4.2.8), usando as impedâncias de contato, comprimento dos eletrodos, o vetor de correntes I e o vetor $\overline{\gamma}$ (SANTANA, 2022). Em especial, cada entrada $A_{i,j}$ é dada por:

$$A_{i,j} = \sum_{k=1}^{N} \gamma_k \int_{T_k} \nabla v_i \cdot \nabla v_j \, \mathrm{d}x,$$

sendo v_i, v_j funções-base do espaço $V_2 \in T_k$ o conjunto correspondente ao k-ésimo triângulo na discretização de Ω .

Desse modo, a partir da versão discretizada de γ , podemos obter o padrão de correntes $U = F(\gamma)I = \Lambda_{\gamma}I$ a partir da solução \hat{u} do sistema linear (5.1.6).

Com isso, fixando um conjunto de padrões de correntes $\mathfrak{I} = (I^{(1)} \dots, I^{(\ell)})$, o operador $F_{\mathfrak{I}}$ conforme definido na Seção 4.2 pode ser calculado simplesmente a partir da relação:

$$F_{\mathfrak{I}}(\gamma) = \begin{pmatrix} F(\gamma)I^{(1)} \\ \vdots \\ F(\gamma)I^{(\ell)} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^{(1)} \\ \vdots \\ U^{(\ell)} \end{pmatrix}, \qquad (5.1.8)$$

onde o cálculo de cada $F(\gamma)I^{(j)}$ para todo $j \in \{1, \ldots, \ell\}$ é realizado através do método descrito acima.

5.1.3 Cálculo da derivada do operador direto

Como descrito na Seção 4.2, o operador F do Modelo Completo de Eletrodos é Frechét-diferenciável, o que faz também o Operador Direto $F_{\mathfrak{I}}$ diferenciável. Isso se torna de grande interesse para alguns dos métodos discutidos no Capítulo 3, em especial os de Newton-Inexato. Com isso, podemos tentar obter métodos de trabalhar computacionalmente com a derivada do operador, ou ao menos as derivadas direcionais. Descrevemos a seguir como é realizado o cálculo da derivada desse operador, a partir das funções discretizadas. Conforme comentado na Seção 4.2.4, calcular a derivada direcional em cada componente $F'_i(\gamma)\eta$ equivale a resolver a equação variacional dada por

$$\iint_{\Omega} \gamma(x) \nabla \omega^{(j)}(x) \cdot \nabla v(x) \, \mathrm{d}x + \sum_{l=1}^{L} \frac{1}{z_l} \int_{e_l} (\omega^{(i)} - \mathcal{W}_l^{(j)}) (v - V_l) \, \mathrm{d}s = -\int_{\Omega} \eta \nabla u^{(j)} \cdot \nabla v \, \mathrm{d}x,$$

para todo par (v, V), sendo $V : \Omega \to \mathbb{R}$ suficientemente suave e $V \in \mathbb{R}^L$ tal que $\sum V_l = 0$

Com as funções devidamente discretizadas, análogo ao desenvolvido para cálculo do Operador Direto, essa equação variacional é transformada em um sistema linear da forma

$$A\hat{\omega} = b, \tag{5.1.9}$$

onde a matriz A é a mesma do sistema (5.1.6) e o vetor b é obtido a partir da versão discretizada da direção η . A solução $\hat{\omega} \in \mathbb{R}^{K+L}$ é dada na forma

$$\hat{\omega} = \begin{pmatrix} \omega_1 \\ \vdots \\ \omega_K \\ \mathcal{W}_1 \\ \vdots \\ \mathcal{W}_L \end{pmatrix}, \qquad (5.1.10)$$

onde o bloco $\mathcal{W}^{(j)} = (\mathcal{W}_1, \dots, \mathcal{W}_L) \in \mathbb{R}^L$ corresponde justamente a $F'_j(\gamma)\eta$. Isto é,

$$F'_{i}(\gamma)\eta = \mathcal{W}^{(j)}.\tag{5.1.11}$$

Com isso, podemos calcular ainda $F'_{\mathfrak{I}}(\gamma)\eta$ visto que:

$$F'_{\mathfrak{I}}(\gamma)\eta = \begin{pmatrix} F'_{1}(\gamma)\eta \\ \vdots \\ F'_{\ell}(\gamma)\eta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathcal{W}^{(1)} \\ \vdots \\ \mathcal{W}^{(\ell)} \end{pmatrix}.$$
 (5.1.12)

Portanto, dada uma função η com a mesma discretização utilizada para γ descrita no início da seção, podemos calcular a derivada de $F_{\mathfrak{I}}$ em um ponto γ na direção η resolvendo sistemas lineares, obtidos a partir de determinadas equações variacionais.

Utilizando esse método, Santana (2022) mostra ainda que é possível calcular a Jacobiana de $F_{\mathfrak{I}}(\gamma) \in \mathbb{R}^{\ell \times N}$ no caso discretizado para uma γ qualquer, a qual é dada por

$$F'_{\mathfrak{I}}(\gamma) = \begin{pmatrix} F'_{1}(\gamma)\chi_{T_{1}} & \cdots & F'_{1}(\gamma)\chi_{T_{1}} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ F'_{\ell}(\gamma)\chi_{T_{1}} & \cdots & F'_{\ell}(\gamma)\chi_{T_{N}} \end{pmatrix}, \qquad (5.1.13)$$

sendo χ_{T_j} a função característica em cada triângulo T_j , mostrando ainda um método otimizado para cálculo de cada componente nessa matriz, necessitando de poucas soluções de sistemas lineares.

Nesta seção, descrevemos de que forma o Modelo Completo de Eletrodos da TIE pode ser tratado computacionalmente e implementado por meio de métodos numéricos. Conforme comentado anteriormente, este trabalho não possui o intuito de explorar os aspectos teóricos da implementação computacional, sendo, portanto, tratada mais brevemente. Desse modo, recomenda-se para mais detalhes em torno da implementação computacional a consulta dos trabalhos já citados, em especial o de Santana (2022). Por fim, para os experimentos executados no restante deste capítulo, será utilizada uma biblioteca desenvolvida em Python por Hafemann (2023) que provém ferramentas para realizar as operações e cálculos descritos acima, cujos detalhes em torno da implementação podem ser vistos em sua documentação 2 .

5.2 Experimentos com dados sintéticos

Na presente seção, realizamos diferentes experimentos utilizando dados sintéticos, gerados por funções pré-definidas. Em situações práticas, não se conhece precisamente a função da condutividade elétrica $\gamma : \Omega \to \mathbb{R}$ que se quer reconstruir. Logo, pode-se ter apenas uma estimativa do erro cometido por uma aproximação γ_n gerada pelos métodos de regularização, não se tendo o erro exato.

Entretanto, nosso intuito nessa seção é justamente definir algumas funções de condutividade, gerar os dados de potenciais através delas para, a seguir, resolver o problema inverso e ter uma medição precisa do erro obtido em cada método. Com isso, conseguimos, ao menos na situação controlada, medir o quão precisas são as aproximações obtidas por cada Método de Regularização.

Começamos inicialmente gerando os dados de potenciais, a partir de algumas funções que serão definidas como solução conhecida que se deseja reconstruir. Em seguida, comparamos as soluções obtidas por diferentes métodos através de alguns cenários diferentes. Os métodos selecionados para comparação serão os métodos de Landweber (LW), Levenberg - Marquardt (LM), REGINN com iteração interna Gradiente (NG), e REGINN com iteração interna de Tikhonov (NT).

Dada uma condutividade γ , para cada seção de experimentos vamos construir um vetor com ruídos artificiais U_{γ}^{δ} para o vetor de padrões de potenciais U_{γ} respectivo. O procedimento adotado consiste em adotar um nível de ruído relativos $\delta_r > 0$ tal que para

² Disponível em: $\langle https://hafemanne.github.io/FEIT_CBM34/ \rangle$

um vetor de padrões de potenciais U_{γ} fornecido, tenhamos

$$\delta_r = \frac{\|U_{\gamma}^{\delta} - U_{\gamma}\|}{\|U_{\gamma}\|},\tag{5.2.1}$$

sendo $\|\cdot\|$ a norma euclidiana usual de $\mathbb{R}^{L \cdot l}$. Isso pode ser feito gerando um vetor $\Delta \in \mathbb{R}^{L \cdot l}$ tal que $\|\Delta\| = 1$, que pode ser obtido com entradas aleatórias em uma distribuição normal, e definindo:

$$U_{\gamma}^{\delta} = U_{\gamma} + \delta_r \Delta \|U_{\gamma}\|. \tag{5.2.2}$$

Aqui, vamos considerar um critério de parada adaptado do princípio da discrepância. Sendo γ_n a condutividade na *n*-ésima iteração e $U^{\delta}_{\gamma_n}$ o vetor de potenciais que dela resulta, e fixada uma constante $\tau > 1$, estabelecemos a parada:

$$\frac{\|U_{\gamma_n}^{\delta} - U_{\gamma}^{\delta}\|}{\|U^{\delta}\|} < \tau \delta_{\eta}$$

Nos métodos REGINN, implementamos a sequência de tolerâncias (μ_n) do critério de parada (3.2.4) da seguinte forma, descrita em (MARGOTTI; HAFEMANN; SAN-TANA, 2023): fixados $\mu_{\text{max}} \in (0, 1]$, R > 0 uma proporção máxima de decrescimento, $\nu > 0$ um parâmetro de decrescimento, e dado k_n o número de passos da iteração interna tomados no passo n, definimos:

$$\mu_{n} = \begin{cases} \mu_{\max} \cdot \max\left\{1 - \frac{k_{n-2}}{k_{n-1}} \left(1 - \mu_{n-1}\right), R\mu_{n-1}\right\}, \text{ se } k_{n-1} > k_{n-2} \\ \nu\mu_{n-1}, \text{ caso contrário }. \end{cases}$$
(5.2.3)

Essencialmente, tal procedimento constrói a sequência controlando sua variação conforme o número de iterações internas executadas e o decréscimo anterior.

Vamos trabalhar com as seguintes métricas relativas para a *n*-ésima iteração dos métodos utilizados. Primeiramente, para cada γ e a condutividade iterada γ_n , consideramos o *resíduo percentual relativo*, denotado res_n definido como

$$res_n = 100 \cdot \frac{\|U_{\gamma}^{\delta} - U_{\gamma_n}\|}{\|U_{\gamma}^{\delta}\|}$$
(5.2.4)

Ainda, dada γ a solução exata do problema, definimos o *erro percentual relativo* da iteração E_n como

$$E_n = 100. \frac{\|\gamma_n - \gamma\|_{L^2}}{\|\gamma\|_{L^2}}.$$
(5.2.5)

Aqui, $\|\cdot\|_{L^2}$ consiste na norma do espaço de funções $L^2(\Omega)$ definida por

$$||f||_{L^2} = \left(\int_{\Omega} [f(x,y)]^2 \,\mathrm{d}x \,\mathrm{d}y\right)^{\frac{1}{2}},$$

onde $L^2(\Omega)$ é o espaço de funções com domínio em Ω cuja norma acima é finita. Com as funções devidamente discretizadas, a integral que compõe a norma L^2 pode ser calculada via técnicas de elementos finitos, as quais são desempenhadas no nosso caso por funções pré-definidas nas bibliotecas utilizadas.

Cabe ainda uma observação sobre a estimativa do erro. Para evitar o chamado "crime inverso", procuramos por uma aproximação para a solução do problema inverso numa malha menos refinada do que aquela utilizada para geração dos dados sintéticos. De modo geral, a solução do problema inverso pertence a um espaço de dimensão infinita, porém, para gerar os dados sinteticamente, é preciso aproximá-la num subespaço de dimensão finita, o que é realizado usando uma malha fina. Sendo assim, é preciso utilizar agora uma malha diferente e menos refinada para a reconstrução dessa solução, para evitar que se conheça a priori o subespaço ao qual ela pertence. Se usarmos a mesma malha, teremos uma vantagem "ilícita", a qual chamamos de crime inverso. Desse modo, na geração dos dados sintéticos utilizamos uma malha Θ , mais refinada que a malha \mathcal{T} utilizada para resolução do problema inverso. Portanto, tomamos como referência para cálculo do erro uma interpolação de γ na malha \mathcal{T} .

Os experimentos serão todos executados com uso da linguagem de programação Python, em particular usando ferramentas da biblioteca desenvolvida para tal linguagem implementada por Hafemann (2023), que dispõe de funções para controle das malhas, geração dos dados e cálculos referentes ao Método de Elementos Finitos. Ainda, vamos analisar o tempo t dado em segundos, estimado com ferramentas do próprio Python, o número de iterações externas n_{δ} tomadas pelos métodos, bem como o número de iterações internas k_n em cada iteração externa. Os códigos foram todos executados na ferramenta Google Colab, versão de 2023, que oferece um ambiente virtual de execução do Python na versão 3.10. Esse ambiente conta com um processador de dois núcleos AMD EPYC 7B12 de 2.2GHz e 512kb de memória *cache*, contendo ainda 13 GB de memória RAM.

5.2.1 Geração dos dados sintéticos

Para todos os experimentos desenvolvidos a seguir, consideramos nosso domínio Ω um disco unitário centrado na origem de raio 1, isto é,

$$\Omega = \{ (x, y) \in \mathbb{R}^2 : x^2 + y^2 \le 1 \}.$$

Ao longo da fronteira $\partial \Omega$, definimos L = 16 eletrodos, cobrindo ao todo 50% de seu comprimento.

Definimos primeiramente uma triangulação \mathcal{T} de Ω , gerando uma malha mais grossa, que será utilizada para os cálculos na resolução do problema inverso. A Figura 5.2.1 ilustra a triangulação, composta por um número K = 569 de vértices e N = 912 de triângulos, sinalizando ainda os eletrodos nas devidas posições ao longo da fronteira. Figura 5.2.1 – Triangulação \mathcal{T} de Ω , com K = 569 vértices e N = 912 triângulos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

A seguir, realizamos uma triangulação Θ mais refinada de Ω , ilustrada na Figura 5.2.2. Esta, que contém K = 3182 vértices e N = 5690 triângulos, será utilizada na geração dos dados sintéticos, a fim de uma aproximação mais precisa das condutividades utilizadas, gerando consequentemente dados de potenciais mais precisos.

Perceba que em ambas as triangulações $\mathcal{T} \in \Theta$ apresentam um refinamento maior em torno dos eletrodos. Trata-se de uma estratégia para melhorar a precisão das soluções, visto que tais regiões são onde costumam ocorrer os maiores saltos de descontinuidade nas funções trabalhadas (SANTANA, 2022). Assim, uma triangulação mais fina nesse entorno pode representar melhor e gerar menores erros.

A seguir, definimos quatro funções de condutividade sobre Ω , as quais utilizaremos para avaliação nos experimentos numéricos. Como o problema da TIE geralmente consiste em identificar corpos que contém objetos ou componentes bem delimitados em seu interior, isso gera várias regiões de descontinuidade na condutividade. Ou seja, observamse saltos bem marcados na condutividade, representando cada objeto ou cada parte no interior do corpo.

Ainda, tentamos simular a situação comum nos experimentos da TIE. No geral, os experimentos são feitos em um recipiente com água e sal, onde são colocados objetos de condutividades diferentes no seu interior. Chamamos de *inclusões* as regiões delimitadas Figura 5.2.2 – Triangulação Θ de Ω , com K = 3182 vértices e N = 5690 triângulos.



Fonte: Elaborado pelo autor.

pelos objetos inseridos e background a região que permanece somente com água.

A primeira função $\gamma^{(1)}: \Omega \to \mathbb{R}$ tem condutividade 2 no círculo de raio 0,3, centro (0,3,0,3); e condutividade 1 no restante de Ω ;. Isto é,

$$\gamma^{(1)}(x,y) = \begin{cases} 2, \text{ se } (x-0,3)^2 + (y-0,3)^2 \le 0, 3^2\\ 1, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
(5.2.6)

A segunda função $\gamma^{(2)}: \Omega \to \mathbb{R}$ é definida tendo condutividade 2 no círculo definido com raio 0, 4 e centro (-0, 25, 0, 3), condutividade 5 no círculo de centro (0, 3, -0, 4) e raio 0, 2, e condutividade 1 no restante de Ω . Assim,

$$\gamma^{(2)}(x,y) = \begin{cases} 2, \text{ se } (x+0,25)^2 + (y-0,3)^2 \le 0,4^2 \\ 5, \text{ se } (x-0,3)^2 + (y+0,4)^2 \le 0,2^2 \\ 1, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
(5.2.7)

A terceira função $\gamma^{(3)}: \Omega \to \mathbb{R}$ define-se tendo condutividade 2 no triangulo T definido pelos vértices: A = (0, 4, 0, 5), B = (0, 6, -0, 2), C = (-0, 3, 0, 3), condutividade 4 no círculo de raio 0,3 centrado em (-0, 3, -0, 3) e condutividade 1 no restante de Ω .

Desse modo,

$$\gamma^{(3)}(x,y) = \begin{cases} 2, \text{ se } (x,y) \in T \\ 4, \text{ se } (x+0,3)^2 + (y-0,3)^2 \le 0, 3^2 \\ 1, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
(5.2.8)

Por fim, define-se a função $\gamma^{(4)} : \Omega \to \mathbb{R}$, que tem condutividade 10 na coroa circular centrada na origem com raios 0, 55 e 0, 7, e condutividade 1 no restante do corpo. Ou seja,

$$\gamma^{(4)}(x,y) = \begin{cases} 10, \text{ se } 0,55^2 \le x^2 + y^2 \le 0,7^2, \\ 1, \text{ caso contrário.} \end{cases}$$
(5.2.9)

Na Figura 5.2.3 estão os gráficos das funções $\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, \gamma^{(3)} \in \gamma^{(4)}$ discretizadas através da triangulação Θ , conforme descrito anteriormente. Nesse caso, as funções são avaliadas no baricentro de cada triângulo da malha, considerando este valor para o coeficiente da discretização, consequentemente no triângulo inteiro, conforme (5.1.2).

Figura 5.2.3 – Gráficos das funções $\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, \gamma^{(3)}, \gamma^{(4)}$ na triangulação Θ . (a) $\gamma^{(1)}$ (b) $\gamma^{(2)}$



Fonte: Elaborado pelo autor.

A partir de suas versões discretizadas, geramos os dados de potenciais para cada uma dessas funções, conforme o procedimento descrito na Seção 5.1.2. Para todas elas, vamos considerar que todos os 16 eletrodos contém uma mesma impedância de contato $z = 2, 5 \times 10^{-5}$. Além disso, vamos utilizar em todas um mesmo conjunto de correntes $I^{(1)}, \ldots, I^{(15)}$ definidas da seguinte forma: cada $I^{(j)}$ tem valor 1 na entrada j, valor -1na entrada j + 1 e 0 nas demais. Isto é,

$$I^{(1)} = (1, -1, 0, \dots, 0, 0)$$
$$I^{(2)} = (0, 1, -1, \dots, 0, 0)$$
$$\vdots$$
$$I^{(15)} = (0, 0, 0, \dots, 1, -1)$$

Com essas correntes estabelecidas, geramos os dados de potenciais respectivos para cada condutividade e corrente. Lembrando que, cada uma das correntes $I^{(j)}$ gerará um padrão de potenciais do espaço \mathbb{R}^{16} em cada condutividade. Portanto, dada a corrente $I^{(j)}$ e uma condutividade γ , denotamos $U_{\gamma}^{(j)}$ o respectivo potencial gerado. Vamos denotar ainda simplesmente $U_{\gamma} = (U_{\gamma}^{(1)}, \ldots, U_{\gamma}^{(15)}) \in \mathbb{R}^{240}$ o vetor que agrupa todos os vetores de potenciais gerados pela condutividade γ . A Figura 5.2.4 traz os gráficos com dados dos vetores de potenciais $U_{\gamma^{(i)}}$, para cada uma das $\gamma^{(i)}$ estabelecidas. Nela, cada cor representa o padrão de potencial $U_{\gamma}^{(j)}$ gerado pelo padrão de corrente $I^{(j)}$, e cada ponto corresponde a cada eletrodo.

5.2.2 Experimento 1: Dados sem ruído ($\delta = 0$)

Para o primeiro experimento, consideramos o caso $\delta = 0$, ou seja, dados sem ruído. Essencialmente, vamos utilizar os dados gerados por cada condutividade sem adição de ruído artificial. Os métodos utilizados serão o Landweber (LW), o Levenberg-Marquardt (LM), o método REGINN com Gradiente (NG) e método REGINN com Tikhonov Iterado (NT), conforme detalhados no Capítulo 3.

Nossa expectativa é observar primeiramente a monotonia do erro da iteração, em particular que seja decrescente ou ao menos não-crescente. Isto é, que para cada iteração de índice n tenhamos

$$E_{n+1} \le E_n$$

Além disso, um dos aspectos que gostaríamos de observar é a convergência dos métodos. Ou seja, que sendo γ a condutividade exata e γ_n a condutividade da *n*-ésima iteração, tenha-se $\lim_{n} \gamma_n = \gamma$. Tentaremos observar tais características em cada método, analisando as soluções finais obtidas, comparando ainda o desempenho entre eles, vendo as métricas obtidas por cada um ao longo das iterações.



Figura 5.2.4 – Gráfico com os dados de potenciais gerados a partir de cada condutividade.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Em todos os experimentos nesta seção, para considerar as limitações computacionais e não sobrecarregar com tempo excessivo execução, estabelecemos um limite de iterações externas e internas, $n_{\rm max}$ e $k_{\rm max}$, respectivamente. Para cada um dos métodos, fixamos $n_{\rm max} = 2000$ iterações. Nos métodos REGINN, consideramos $k_{\rm max} = 200$.

No método LW configuramos o tamanho de passo constante $\lambda_n = 20$, e no método NG para a iteração interna o tamanho de passo constante $\lambda_{n,k} = 20$, para todo n e todo k. Já no método LM consideramos o caso estacionário $\alpha_n = 0,001$ e na iteração interna do NT consideramos também o caso estacionário $\alpha_{n,k} = 0,001$ em toda iteração. Tais sequências foram escolhas similares às feitas em trabalhos anteriores, como no feito por Margotti, Hafemann e Santana (2023).

Começamos as análises com a condutividade $\gamma^{(1)}$, explicitada na seção anterior. Na Tabela 1 estão os resultados para cada algoritmo ao final das 2000 iterações, constando o erro relativo percentual final $E_{n_{\text{max}}}$, resíduo relativo percentual $res_{n_{\text{max}}}$ e o tempo t em segundos.

Tabela 1 – Resultados para $\gamma^{(1)}$ com $\delta_r = 0$ e $n_{\text{max}} = 2000$ em todos os experimentos

Método	$E_{n_{\max}}$ (%)	$res_{n_{\max}}$ (%)	t (s)
LW	17,209889	0,165673	1444,093170
LM	14,715546	$0,\!035864$	$1498,\!601376$
NG	13,039023	0,007165	$1605,\!439397$
NT	$12,\!419335$	0,000360	15692,768235

Fonte: Elaborado pelo autor.

A Figura 5.2.5 mostra ainda as imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ obtidas em cada método. Visualmente, as quatro imagens obtidas são similares e apresentam algumas características comuns. Primeiramente, observamos que todos os métodos conseguiram fazer uma reconstrução aproximada do formato de $\gamma^{(1)}$. Nas quatro imagens há o círculo delimitado no interior da malha representando a inclusão com localização e diâmetros esperados, bem como valores da condutividade próximos ao da função original.

Todavia, nas quatro imagens observa-se uma certa variação tanto na inclusão como no *background*, não conseguindo reconstruir de forma precisa o comportamento constante da função nas duas regiões. Isso é mais intensificado no método Landweber (LW), onde há certas variações ao longo do *background* e uma transição mais suave para a região de inclusão. Nesse aspecto, os métodos REGINN (NG e NT) desempenharam melhor, tendo uma demarcação mais acentuada, ainda que apresentando um certo grau de erro. Outro ponto é que as faixas de valores obtidas tem uma certa diferença para a estabelecida na função $\gamma^{(1)}$, atingindo valores inferiores a 1 em todas as reconstruções, não atingindo o valor máximo de 2 no método LW, e atingindo alguns valores extremos no caso do NG e NT.



Figura 5.2.5 – Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ com $\delta_r = 0$

A precisão das imagens é quantificada ainda pelo erro obtido em cada reconstrução, conforme a Tabela 1. Podemos observar que os 4 métodos obtiveram um erro percentual relativamente elevado mesmo após o grande número de iterações, ficando acima dos 10%. De todo modo, vemos que todos os métodos foram capazes de permanecer com erro inferior a 20%, tendo o maior erro no método LW, em torno de 17,2%, e o menor erro no NT, com cerca de 12,41%.

O gráfico da Figura 5.2.6 mostra ainda a evolução do erro de iteração de cada método. Observamos que todos os métodos apresentam a monotonia do erro de iteração indicado pelo comportamento decrescente das curvas, conforme esperado pelos resultados teóricos. Ainda assim, todos ficaram distantes da faixa do erro de 0%, que representaria a convergência a uma solução.

Nota-se que os quatro métodos apresentam um decréscimo mais acentuado no início, dando uma redução no erro cada vez menor ao passar das iterações. O método Landweber (LW) foi o mais lento nesse sentido, terminando com o maior erro devido à lenta taxa de decréscimo. Já os métodos REGINN-Gradiente (NG) e REGINN-Tikhonov (NT) apresentam o decréscimo mais acentuado em poucas iterações e terminaram com o menor erro, porém, acabam atingindo um *plateau* a partir de certo ponto e apresentam uma variação diminuta nas iterações finais.



Figura 5.2.6 – Erro relativo E_n por iteração

Quanto ao resíduo, uma característica diferente ocorre, conforme mostra o gráfico da Figura 5.2.7. Tanto pelo gráfico, como pelos dados da Tabela 1, vemos que os métodos sucederam em obter um resíduo relativo próximo de 0, obtendo o maior percentual no método Landweber (LW) e o menor no REGINN-Tikhonov (NT), respectivamente em torno de 0, 16% e 0,003%. Apesar da escala de valores distinta, nota-se um comportamento similar ao erro na variação do resíduo, notando que em todos os métodos há um comportamento decrescente, uma queda acentuada no início seguido de uma variação mais lenta.

Figura 5.2.7 – Resíduo relativo res_n por iteração



Fonte: Elaborado pelo autor.

Já sobre o desempenho, notamos pela Tabela 1 que todos os métodos levam um tempo considerável, tomando cada um deles mais de 20 minutos para execução das 2000 iterações, chegando à marca de 4 horas no caso do REGINN-Tikhonov (NT). Isso se deve essencialmente ao fato de que a cada passo é necessário resolver diferentes sistemas lineares de dimensões consideráveis, tanto para cálculo das derivadas como para o operador $F_{\mathfrak{I}}$ em si, conforme descrito na seção anterior. No método NT isso se intensifica conforme se tornam necessárias mais iterações internas, pois nele cada passo da iteração interna $s_{n,k}$ requer também a solução de um sistema linear.

Na Figura 5.2.8, podemos observar o número de iterações internas necessárias a cada *n*-ésima iteração externa dos métodos NG e NT. Nesse gráfico, limitou-se apenas até a iteração externa n = 50, pois em todas as seguintes foi atingindo o limite $k_{\text{max}} = 200$, mantendo-se um gráfico constante. Podemos notar que nessas primeiras iterações os dois métodos acabam necessitando de mais iterações internas para atingir a parada k_n conforme o avanço de n, sendo o NG a apresentar o crescimento de forma mais acelerada. De todo modo, ambos seguem um comportamento similar, atingindo o limite máximo estabelecido já nas primeiras 30 iterações. Mesmo seguindo com o mesmo número de iterações internas, o método NT acaba sendo muito mais demorado devido a cada iteração interna ser mais custosa, conforme discutido acima.

Figura 5.2.8 – Número de iterações internas dos métodos REGINN para cada iteração externa na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ dado $\delta = 0$, até n = 50.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Alguns fatores podem contribuir para os resultados observados. Um deles é a escolha das sequências de parâmetros dos métodos de regularização utilizados. Conforme discutido nos Capítulos 2 e 3, escolher as sequências adequadas é essencial para garantir o bom funcionamento e convergência dos métodos. Desse modo, as escolhas realizadas podem não ter sido ideais, levando aos erros 'estacionarem' ou diminuir muito lentamente. Outro fator é a aproximação numérica característica do Método de Elementos Finitos, usada no cálculo dos potenciais em cada condutividade, principalmente ao utilizar uma

malha mais grossa na resolução do problema inverso. Em experimentos futuros, pode-se explorar tanto o ajuste de parâmetros como o uso de malhas mais refinadas.

5.2.3 Experimento 2: Nível de ruído fixo $\delta_r = 1,0\%$

Nesta seção de experimentos, buscaremos avaliar como os métodos se comportam com um nível de ruído fixo. Em particular, queremos observar: se os algoritmos atingem a parada para o nível de ruído estabelecido, o desempenho no processo, se ocorre a monotonia do erro, analisar as imagens geradas. A partir dos potenciais definidos por $\gamma^{(1)}$, geramos um vetor com ruído conforme o processo descrito na Seção5.2, estabelecido um ruído relativo de $\delta_r = 1,0\%$. O gráfico na Figura 5.2.9 mostra os dados de potenciais em comparação com os dados com ruído, juntamente com o ruído de cada uma das entradas.

Figura 5.2.9 – À esquerda, comparação entre os potenciais medidos $U_{\gamma^{(1)}}$ originais e com ruído adicionado $U^{\delta}_{\gamma^{(1)}}$. À direita, gráfico com o ruído presente em cada entrada. O ruído relativo adicionado é de $\delta_r = 1,0\%$.



Fonte: Elaborado pelo Autor

A partir desses dados ruidosos, resolvemos o problema inverso. Novamente, para o método LW configuramos o tamanho de passo constante $\lambda_n = 20$, e no método NG para a iteração interna o tamanho de passo constante $\lambda_{n,k} = 20$, para todo n e todo k. No método LM consideramos o caso estacionário $\alpha_n = 0,001$ e na iteração interna do NT consideramos também o caso estacionário $\alpha_{n,k} = 0,001$. Estabelecemos para todos a constante de parada $\tau = 1,005$ do Princípio da Discrepância, tornando então $\tau \delta_r = 1,005\%$. Estabelecemos ainda um limite $n_{\text{max}} = 200$ de iterações externas e nos métodos REGINN um limite de iterações internas de $k_{\text{max}} = 400$.

A Tabela 2 mostra os resultados obtidos em cada método. Vemos que apenas o método LW chegou ao limite de iterações externas, tendo justamente o maior tempo de execução. Os demais métodos sucederam em atingir o critério de parada, novamente dando indícios de que o método LW tende a convergir mais lentamente. Notamos pela Tabela que o erro percentual permanece na faixa dos 20%, sendo o melhor resultado obtido pelo método LW, com $E_{n_{\delta}} = 21\%$. Em segundo lugar, temos o método NT que obteve um erro de 1 ponto percentual acima, porém chegando nesse resultado em apenas 2 iterações externas e um tempo consideravelmente menor. Em comparação com os dados sem ruído já notamos que há um erro consideravelmente maior, porém, considerando as limitações, permanece numa faixa razoável.

Método	Erro (%)	Resíduo (%)	$\mathbf{N}^{\underline{\mathbf{o}}}$ de Iterações Externas	Tempo de Execução (s)
LW	21,004540	1,009562	200	151,243831
LM	22,551276	0,903425	6	4,924633
NG	22,859096	1,004556	14	$11,\!141442$
NT	22,031267	0,780945	2	1,934855

Tabela 2 – Resultados de cada método para $\gamma^{(1)}$ com $\delta_r = 1\%$, $\tau = 1,005$ e $n_{\text{max}} = 200$.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Podemos notar como esse erro se reflete nas imagens reconstruídas conforme a Figura 5.2.10. Notamos que todos os métodos geraram imagens não tão precisas, mas que ainda tem um formato aproximadamente circular na região original demarcada. Vemos ainda que as figuras com uma imagem mais precisa são aquelas geradas pelos métodos LW e NT. Nenhuma das condutividades reconstruídas atingiu o valor esperado de 2 dentro da inclusão, e todas acabaram obtendo valores inferiores a 1 no *background*, o que acaba por refletir no erro.

Já na Figura 5.2.11 vemos os gráficos referentes ao resíduo e ao erro relativo em cada iteração externa em cada método. Notamos que tanto o resíduo como o erro no método LW são os que mais demoram a decrescer, não sendo atingido o princípio da discrepância sinalizado pela reta pontilhada no gráfico do res_n . Em comparação, os outros 3 métodos sucedem em decrescer rapidamente para a faixa estabelecida, atingindo o critério de parada em menos de 20 iterações.

Conseguimos observar pelos gráficos na Figura 5.2.11 novamente uma monotonia tanto do resíduo como do erro das iterações, tendo em todos os métodos um comportamento decrescente. Além disso, vemos que o decrescimento do resíduo acompanha o decrescimento do erro, vendo que nos métodos onde o resíduo mais reduziu aceleradamente foram os que refletiram o mesmo comportamento no erro.

Quanto ao esforço computacional, notoriamente o método LW trata-se do que teve pior desempenho. Além do elevado número de iterações necessárias, trata-se de um método relativamente custoso devido à necessidade de calcular a derivada do operador em cada iteração, procedimento que envolve um gasto computacional elevado. Todos os métodos possuem essa característica, porém, como atingem o princípio da discrepância em poucas iterações, o tempo de execução acaba sendo reduzido. O método NT obteve o melhor desempenho nesse sentido, apresentando tanto um reduzido número de iterações

Figura 5.2.10 – Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ pelos métodos LW, LM, NG e NT, dados $\delta_r=1,0\%$ e $\tau=1,005$



Fonte: Elaborado pelo autor.

como um consequente tempo de execução menor, gerando ainda o segundo menor erro em um tempo inferior a 2 segundos.

No gráfico da Figura 5.2.12, vemos ainda o número de iterações internas k_n dos métodos NT e NG em cada n—ésima iteração externa. Como o uso do Tikhonov atinge a parada em apenas duas iterações, a comparação não fica tão direta. Apesar disso, vemos que além de serem necessárias apenas 2 iterações externas, apenas 1 iteração é feita em cada uma delas, requerendo poucos passos no total. Já com o uso do método do Gradiente, vemos que além de necessitar de mais iterações externas, o número de iterações internas vai se tornando maior, requerendo uma quantidade superior de iterações ao todo, o que reflete no seu tempo de execução.

Os resultados mostram que todos os métodos, em geral, conseguem obter resultados próximos a partir de um mesmo nível de ruído, com relação ao nível de erro e as imagens reconstruídas, mas possuem um desempenho computacional bastante distinto. Além disso, em comparação com os resultados obtidos no experimento anterior ($\delta_r = 0$), vemos um erro bastante superior, na faixa de 10 pontos percentuais acima, com apenas 1,0% de ruído nos dados. Tal fator ilustra a sensibilidade presente na obtenção de soluções (a) Resíduo relativo res_n por iter. externa

Figura 5.2.11 – Gráficos de Erro e Resíduo percentuais por iteração na reconstrução de $\gamma^{(1)}$, dados $\delta_r = 1,0\%$ e $\tau = 1,005$.

(b) Erro relativo E_n por iter. externa.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Figura 5.2.12 – Número de iterações internas dos métodos REGINN para cada iteração externa na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ dado $\delta = 1,0\%$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

nesse problema. Apesar disso, considerando que com dados exatos os erros percentuais obtidos foram superiores a 12%, a precisão obtida foi razoável mesmo com a presença de ruído.

5.2.4 Experimento 3: Diferentes níveis de ruído δ_r

Nos experimentos desta seção, fixamos uma das condutividades e geramos dados com diferentes níveis de ruído artificial. Na sequência, aplicamos o método de REGINN-Tikhonov com dois critérios de parada: o princípio da discrepância, e um critério arbitrário. O objetivo nessa análise é comparar o comportamento de diferentes níveis de ruído dos dados, juntamente com a influência do princípio da discrepância nas soluções. Para tanto, iremos analisar as métricas e imagens geradas dado cada ruído, juntamente com o comportamento do erro comparado com o do resíduo.

Para os seguintes experimentos, utilizamos apenas o método REGINN com Tikhonov (NT), que apesar de não ter o menor dos erros nos experimentos anteriores, apresentou um erro percentual muito próximo ao menor obtido com um esforço computacional muito inferior. Os parâmetros utilizados são os mesmos da seção anterior. Além disso, nos focaremos novamente na análise da reconstrução da imagem apenas de $\gamma^{(1)}$. Os níveis de ruído percentuais selecionados para análise são de 0, 1%, 0, 5%, 1, 0%, 1, 5%, 2, 0% e 3, 0%. Os dados com ruído foram gerados utilizando o processo descrito na Seção 5.2.

Inicialmente, vejamos os resultados usando o princípio da discrepância como critério de parada, fixando $\tau = 1,005$. A Tabela 3 traz os resultados obtidos para cada nível de ruído com uso do método NT na reconstrução de $\gamma^{(1)}$. Inicialmente, observamos que o método sucedeu em atingir o critério da discrepância para todos os níveis de ruído estabelecidos. Conforme esperado, nota-se que o resíduo decresce junto com o δ_r , referente justamente ao critério da discrepância que torna a tolerância menor. Além disso, o número de iterações externas se reduz com níveis de ruído mais elevados, levando em conta que o nível de resíduo consegue ser atingido mais rápido.

Quanto ao erro, notamos pela Tabela 3 que não se observa um comportamento monótono, no sentido que um ruído menor implica diretamente num menor erro obtido. Isso pode ser notado vendo, por exemplo, que o ruído de $\delta_r = 1,5\%$ traz um erro de $E_n = 18,9\%$, inferior ao obtido com nível de ruído $\delta_r = 1,0\%$. Tais diferenças podem ocorrer devido aos procedimentos numéricos utilizados, bem como a própria aleatoriedade na geração dos ruído, podendo influenciar de maneira distinta a depender de quais parcelas dos dados são afetadas. De todo modo, nota-se que os dois maiores erros obtidos são referentes aos dois maiores níveis de ruído, tendo também os dois menores erros obtidos com os dois menores níveis de ruído.

Tabela 3 – Resultados do método NT na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ com diferentes níveis de ruído relativos δ_r , usando critério de parada do princípio da discrepância e $\tau = 1,005$.

$\delta_r(\%)$	Erro $(\%)$	Resíduo (%)	N ^o de Iterações Externas	Tempo de Execução (s)
0,1 %	14,954821	0,094412	21	$27,\!934599$
0,5~%	$18,\!252036$	0,493886	9	7,865030
1,0%	20,768095	0,998051	4	2,459703
1,5 %	$18,\!948817$	$1,\!375530$	4	$3,\!448066$
2,0 %	22,111920	1,989739	3	1,799311
3,0%	21,710165	2,748895	3	2,142047

Fonte: Elaborado pelo autor

Esse comportamento do erro se observa ainda pelas imagens obtidas, conforme Figura 5.2.13. Notamos que as imagens mais definidas foram dadas justamente para os ruídos de 0,1% e 0,5%, onde é possível observar a região definida pela inclusão de forma mais delimitada e uma menor variação ao longo das duas regiões. Além disso, para $\delta_r = 0,1\%$ foi possível obter valores muito próximos da condutividade original tanto na inclusão como no *background*. Um comportamento próximo, porém já menos preciso, observa-se na reconstrução da imagem com $\delta_r = 1,0\%$ e $\delta_r = 1,5\%$. Já nos dados com níveis de ruído mais elevados, notamos que as imagens obtidas possuem uma definição muito inferior, apresentando maior variação ao longo do *background* e uma região não tão delimitada para a inclusão, ainda que possa-se reconhecer que há uma condutividade mais elevada na área em torno dela.

Figura 5.2.13 – Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ utilizando método NT a partir de dados com diferentes δ_r , usando critério de parada do princípio da discrepância e $\tau = 1,005$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Já pelo gráfico da Figura 5.2.14, notamos novamente uma monotonia tanto no resíduo como no erro obtido em cada iteração. Nota-se que o resíduo tem uma queda acelerada em todos os caos, vendo que para quase todos os níveis de ruído o método atinge o critério de parada em algumas iterações. Já para os dados com δ_r inferior a 1,0%, notamos que o resíduo passa a decrescer de forma mais lenta, mas segue atingindo o critério de parada. O erro, por sua vez, mantém um decréscimo mais moderado, em geral.

Os resultados obtidos ilustram que, apesar de não poder se garantir uma relação

Figura 5.2.14 – Gráficos de Erro e Resíduo percentuais por iteração na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ com método NT, dados diferentes δ_r , usando critério de parada do princípio da discrepância e $\tau = 1,005$.



(a) Resíduo relativo res_n por iter. externa (b) Erro relativo E_n por iter. externa.

Fonte: Elaborado pelo autor.

totalmente direta, o uso do método empregado consegue obter aproximações mais precisas à medida que o ruído presente é inferior. Além disso, vemos que com um nível de ruído na faixa de 0, 1% a 1%, o erro obtido passa a ser da faixa de 3 a 8 pontos percentuais acima do obtido com os dados sem ruído, os quais podem ser comparados com o resultado do método NT na Tabela 1. Tal fato mostra que pequenas perturbações nos dados podem levar a um erro superior. Apesar disso, o método consegue se manter nesses casos com uma faixa de erro razoável, com um desempenho computacional satisfatório.

Vejamos agora os resultados obtidos com um critério de parada arbitrário. O critério de parada estabelecido foi interromper a iteração após um número de $n_{\text{max}} = 20$ iterações, independente do resíduo obtido. Notamos pelos resultados na Tabela 4 que o erro obtido agora com os ruído mais elevados se torna muito superior. Para $\delta_r = 0, 1\%$ e $\delta_r = 0, 5\%$ o método sucede em obter um erro relativo reduzido, abaixo dos 20%, ainda próximos dos obtidos com o princípio da discrepância. Já nos dados com ruído acima de 1,0%, vemos que o erro fica alto, chegando a faixa de 50%, embora o resíduo obtido não seja tão superior em comparação aos resultados observados Tabela 3.

Tal comportamento do erro se observa novamente nas imagens reconstruídas, conforme a Figura 5.2.15. Vemos que para $\delta_r = 0, 1\%$ a imagem obtida corresponde ao resultado usando o princípio da discrepância, dado que o número de iterações obtido é próximo. Algo similar se observa na reconstrução com os dados de $\delta_r = 0, 5\%$, embora haja mais fragmentos ao longo do *background* e uma transição mais suave da inclusão. Já para os dados com δ_r a partir de 1,0%, vemos que a imagem obtida apresenta uma precisão muito inferior, contendo vários fragmentos ao longo do domínio, com a região da inclusão muito pouco delimitada.

$\delta_r(\%)$	Erro (%)	Resíduo (%)	Tempo de Execução (s)
0,1%	15,052326	0,095908	28,450092
0,5%	17,179512	$0,\!424650$	42,405082
1,0%	29,142996	$0,\!845050$	$67,\!973903$
1,5%	43,604234	$1,\!580627$	79,039397
2,0%	51,445113	$2,\!676568$	$70,\!123980$
$3{,}0\%$	$53,\!190726$	2,849443	44,261827

Tabela 4 – Resultados do método NT na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ com diferentes níveis de ruído relativos δ_r , usando critério de parada $n_{\text{max}} = 20$.

Fonte: Elaborado pelo autor

Figura 5.2.15 – Imagens reconstruídas de $\gamma^{(1)}$ utilizando método NT a partir de dados com diferentes δ_r , usando critério de parada $n_{\text{max}} = 20$.



Fonte: Elaborado pelo autor.

Outra característica importante é o comportamento do erro e do resíduo percentual ao longo das iterações, observado nos gráficos da Figura 5.2.16. Notamos que a monotonia do erro e do resíduo agora apenas se observa para $\delta_r = 0, 1\%$, considerando que o número de iterações está dentro do obtido com o uso do princípio da discrepância. Vemos que os dados com nível de ruído de 0, 5% e 0, 1% ainda apresentam um resíduo não-decrescente ao longo das iterações. Porém, nota-se que a partir de certo ponto o erro obtido passa a crescer, obtendo um erro superior àquele obtido no critério da discrepância. Já nos dados com ruído a partir de 1, 0%, nota-se que o resíduo de iteração também deixa de ser monótono, passando a crescer e ter um comportamento mais errático a partir de certas iterações, embora ainda permaneça num nível próximo ao final. Apesar disso, o erro nesses casos passa a crescer, chegando em uma faixa muito superior à encontrada nas
primeiras iterações.

Figura 5.2.16 – Gráficos de Erro e Resíduo percentuais por iteração na reconstrução de $\gamma^{(1)}$ com método NT, dados diferentes δ_r e critério de parada $n_{\text{max}} = 20$



(a) Resíduo relativo res_n por iter. externa (b) Erro relativo E_n por iter. externa.

Fonte: Elaborado pelo autor.

Os resultados obtidos podem ser explicados pois, nas análises de convergência dos métodos de regularização utilizados, em particular do NT, a monotonia pode ser garantida apenas enquanto o método não atinge o critério da discrepância. Ou seja, enquanto a sequência não atingir tal critério, tanto o resíduo como o erro das iterações são monótonos. Após o critério ser atingido, não há garantias de que se obtenha tal propriedade. Os resultados do experimento ilustram que nesses casos a solução obtida pode ser muito ruim.

Lembrando as discussões feitas ao longo do trabalho, o uso do princípio da discrepância equivale ao parâmetro de regularização utilizado nos métodos iterativos, em particular dos métodos REGINN e do NT. Escolher o índice em que a sequência gerada pelo método para de ser executada corresponde justamente a forma de controlar a precisão da aproximação utilizada, em função do nível de ruído presente. Os resultados numéricos, portanto, ilustram a importância de se usar parâmetro de regularização adequado, vendo que sem ele as aproximações obtidas podem ficar muito distantes do esperado.

5.2.5 Experimento 4: Comparando diferentes condutividades γ

Finalizando os experimentos com dados sintéticos, iremos comparar como diferentes configurações da condutividade são reconstruídas utilizando um dos Métodos de Regularização estudados. Nosso foco será analisar o erro obtido e as imagens reconstruídas para cada condutividade.

Para esses experimentos, vamos utilizar como referência as quatro condutividades $\gamma^{(1)}, \gamma^{(2)}, \gamma^{(3)}, \gamma^{(4)}$ definidas na Seção 5.2.1. Em cada um dos dados de potenciais gerados

a partir delas, vamos adicionar um ruído relativo de $\delta_r = 0,25\%$ a partir do procedimento explicado na seção referida.

Novamente, para o seguinte experimento, nos focamos apenas no uso do método REGINN-Tikhonov (NT), com os mesmos parâmetros utilizados nas seções anteriores. Estabelecemos o princípio da discrepância como critério de parada, fixando $\tau = 1,005$.

A Tabela 5 traz os resultados obtidos para cada uma das condutividades. Vemos que novamente o critério da discrepância é atingido nos 4 casos. Notamos que o erro da condutividade $\gamma^{(1)}$ foi consideravelmente inferior que nas demais, chegando à marca de quase 70% de erro relativo no caso de $\gamma^{(4)}$.

Tabela 5 – Reconstruções das diferentes condutividades γ estabelecidas com o método NT, dados $\delta_r = 0,25\%$ e $\tau = 1,005$.

γ	Erro (%)	Resíduo (%)	$\mathbf{N}^{\underline{0}}$ de Iterações Externas	Tempo de Execução (s)
$\gamma^{(1)}$	$16,\!322167$	0,245579	13	38,401034
$\gamma^{(2)}$	42,454521	$0,\!244165$	22	$27,\!844207$
$\gamma^{(3)}$	37,018210	0,244315	19	$27,\!145384$
$\gamma^{(4)}$	$68,\!625476$	0,235160	30	81,807624

Fonte: Elaborado pelo autor.

As imagens reconstruídas podem ser observadas na Figura 5.2.17, comparadas ainda com o gráfico da solução exata. A reconstrução de $\gamma^{(1)}$ segue o padrão observado nos experimentos anteriores, chegando a valores próximos da condutividade original tanto na inclusão como no *background*. Além disso, pode-se identificar uma condutividade acentuada na região próxima à inclusão, deixando delimitada a parcela do domínio onde esta se encontra.

Já na imagem reconstruída de $\gamma^{(2)}$, onde há originalmente duas circunferências, observamos também uma condutividade mais acentuada numa região próxima onde as duas inclusões foram estabelecidas. Ainda que a imagem não consiga representar nitidamente as circunferências com as medidas, pode-se identificar que há duas inclusões na região próxima aos locais exatos. Todavia, quanto ao valor da condutividade, vemos novamente que a condutividade mais alta, com valor igual a 5 na circunferência localizada mais abaixo, não é atingida. Além disso, a imagem reconstruída contém uma transição mais suave entre o *background* e as inclusões, não conseguindo estabelecer o comportamento da descontinuidade.

Na reconstrução de $\gamma^{(3)}$, observamos que a imagem obtida não foi capaz de identificar o triângulo presente na solução exata. Observa-se uma região com a condutividade mais acentuada à esquerda, na região onde se encontra uma circunferência na função original. Porém, a região respectiva ao triângulo, apesar de apresentar uma condutividade levemente mais elevada que o *backgound*, acaba ficando sem demarcação exata, não sendo possível identificar a presença de um objeto distinto nessa parte. Além disso, notamos que a condutividade máxima com valor igual a 5 não foi atingida dentro da inclusão localizada mais à esquerda, chegando apenas próximo a 4 no pico. Vemos que, apesar disso, o erro obtido foi o segundo menor dentre as condutividades analisadas.

Por fim, a reconstrução de imagem da $\gamma^{(4)}$ traz uma estrutura anular, com a localização próxima da função original. Notamos que a região onde a condutividade se acentua é condizente com a definida na função exata, apesar das dimensões serem maiores, considerando ainda o uso de uma malha mais grossa. Apesar disso, nota-se uma certa variação ao longo da inclusão e uma transição não tão demarcada entre ela e o *background*. Com respeito aos valores da condutividade, notamos que se chegou a praticamente menos da metade, não atingindo o valor de 10 definido originalmente ao longo do anel. Tal fator pode ser um dos preponderantes no erro obtido, vendo que foi o maior dentre as reconstruções analisadas.

Os resultados obtidos mostram que para condutividades mais complexas, a reconstrução acaba ficando menos precisa. O erro obtido acaba sendo elevado, dado também que a reconstrução atinge valores relativamente baixos comparados aos presentes nas soluções exatas. Apesar disso, nesses casos onde as inclusões têm dimensões consideráveis em relação ao tamanho do domínio, é possível em geral identificar nas imagens a presença de objetos com localização e dimensões próximas das originais.

Nesse Capítulo, desenvolvemos diferentes experimentos numéricos com dados sintéticos para avaliar como os Métodos de Regularização discutidos nos capítulos anteriores se comportam no problema da Tomografia por Impedância Elétrica. Por uma série de limitações, tanto teóricas quanto computacionais, os métodos não apresentaram um desempenho completamente satisfatório.

Vimos, por exemplo, que não foi possível atingir a convergência no caso livre de ruído nas medições. Além disso, em todos os casos foram obtidas reconstruções com um erro considerável, em nenhum momento obtendo um erro relativo inferior a 10%. Todavia, foi possível observar diferentes aspectos teóricos discutidos, como a monotonia do erro de iteração nos métodos iterativos, a precisão aumentada conforme redução no nível de ruído, bem como a influência dos parâmetros de regularização na obtenção de soluções satisfatórias. Quanto à comparação entre os métodos, notamos que os diferentes métodos analisados apresentam resultados similares com relação à precisão das reconstruções, tendo uma variação maior quanto ao esforço computacional empregado.

Cabe a observação que os Métodos de Regularização explorados neste trabalho, em particular os empregados nos experimentos numéricos, são métodos mais tradicionais. Trabalhos recentes buscam trazer tanto aprimoramentos como propostas de novos Métodos de Regularização, explorando técnicas mais refinadas e as particularidades da





Fonte: Elaborado pelo autor.

modelagem da TIE na construção das estratégias utilizadas. Para conhecimento de alguns deles, recomenda-se a consulta dos trabalhos de Margotti (2015) e Margotti, Hafemann e Santana (2023).

6 Conclusão

Neste trabalho, pudemos explorar diferentes aspectos referentes aos Métodos de Regularização e seu comportamento no problema da Tomografia por Impedância Elétrica. Vimos os principais conceitos que envolvem a teoria de Problemas Inversos, entendendo as dificuldades que surgem com a instabilidade inerente a essa classe de problemas. Exploramos ainda alguns Métodos de Regularização tradicionais, entendendo as principais propriedades que regem seus funcionamentos. Por fim, discutimos a formulação matemática da Tomografia por Impedância Elétrica e avaliamos com experimentos numéricos como os Métodos de Regularização se comportam nesse problema.

Nos experimentos numéricos, foi possível notar a dificuldade de obter soluções precisas para o problema. Conforme comentado, a TIE apresenta uma série de dificuldades. Primeiramente, o fato de ser mal posto e ter uma forte instabilidade o torna muito sensível a perturbações nos dados. Outra característica desse problema é que uma série de hipóteses e propriedades exigidas para garantir o bom funcionamento dos Métodos de Regularização são difíceis de serem obtidas na TIE, quando não desconhecidas.

Cabe ressaltar ainda que os métodos explorados nesse trabalho são procedimentos mais clássicos, sem grandes refinamentos com relação ao problema. Estudos e publicações mais recentes já abordam uma série de aprimoramentos e exploram técnicas mais modernas para elaboração dos Métodos de Regularização utilizados. Em trabalhos futuros, pode-se explorar o uso de alguns desses procedimentos e trabalhar com novos refinamentos, bem como o uso de outros modelos para TIE.

Referências

BORCEA, L. Electrical impedance tomography. *Inverse Problems*, Institute of Physics Publishing, v. 18, n. 6, p. 99–136, 2002.

CALDERÓN, A. P. On an inverse boundary value problem. *Computational and Applied Mathematics*, v. 25, n. 2-3, p. 133–138, 2006.

CHENEY, M.; ISAACSON, D.; NEWELL, J. C. Electrical impedance tomography. *SIAM Review*, v. 41, n. 1, p. 85–101, 1999. Disponível em: (https://doi.org/10.1137/S0036144598333613).

GALVIS, J.; VERSIEUX, H. Introdução à Aproximação Numérica de Equações Diferenciais Parciais Via o Método de Elementos Finitos. Rio de Janeiro: IMPA, 2011.

HAFEMANN, E. Biblioteca livre em python para o problema Inverso da tomografia por impedância elétrica baseado no FEniCS. 2023. Disponível em: (https://hafemanne.github.io/FEIT_CBM34/). Acesso em: agosto de 2023.

HALLIDAY, D.; WALKER, J.; RESNICK, R. Fundamentos de física: volume 3 : eletromagnetismo. 10. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2016.

KIRSCH, A. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems. Nova Iorque: Springer New York, 2011.

KREYSZIG, E. Introductory Functional Analysis with Applications. Nova Iorque: Wiley, 1991.

MARGOTTI, F. *EIT Prototype: Impedance Tomography for monitoring multiphase flows.* 2022. Disponível em: (https://fabiomargotti.paginas.ufsc.br/prototipo2/). Acesso em: Acesso em junho de 2023.

MARGOTTI, F.; HAFEMANN, E.; SANTANA, L. M. Implementação computacional da tomografia por impedância elétrica. Rio de Janeiro: IMPA, 2023.

MARGOTTI, F. J. On Inexact Newton Methods for Inverse Problems in Banach Spaces. Tese (Doutorado) — Karlsruher Instituts fur Technologie (KIT), Alemanha, 2015.

PAULETI, M. A. Método das Projeções Relaxadas com Penalização Uniformemente Convexa para Solução de Sistemas Lineares Mal-Postos em Espaços de Banach. Monografia (Mestrado em Matemática) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2021.

RIEDER, A. On the regularization of nonlinear ill-posed problems via inexact newton iterations. *Inverse Problems*, v. 15, p. 309–327, 1999.

SANTANA, L. M. Tomografia por Impedância Elétrica: Aspectos Teóricos e Implementação Computacional. Monografia (Bacharelado em Matemática) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2022. SOMERSALO, E.; CHENEY, M.; ISAACSON, D. Existence and uniqueness for electrode models for electric current computed tomography. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, v. 52, n. 4, 1992.