arXiv:2304.02926v1 [math.NA] 6 Apr 2023

一种求解一维逆散射问题的数据驱动方法

Tristan vanLeeuwen[1,2] **and Andreas Tataris**[1]

[1]乌得勒支大学，荷兰乌得勒支。[2]数学与计算机科学研究中心，荷兰阿姆斯特丹。

E-mail: T.van.Leeuwen@cwi.nl

摘要。 本文将 Druskin 等人提出的、用于诺伊曼边界条件下逆散射的基于降阶模型的方法（Inverse Problems 37, 2021）扩展到具有阻抗（罗宾）边界条件的一维 Schr¨odinger 方程。我们还提出了一种基于降阶模型方法的新型数据同化（数据同化）反演方法，从而避免了兰索斯正交化步骤的需要。此外，我们对数据同化和兰索斯正交化方法的准确性与稳定性进行了详细的数值研究和比较。

关键词：逆散射、降阶模型、薛定谔方程

1. 引言

逆散射应用于许多领域，包括医学成像、无损检测和地球物理勘探 [1]。尽管数据采集设置各不相同，但这些反问题的核心都是涉及一个波动方程，并需要根据边界数据估计其可变系数。求解由此产生的非线性反问题的方法可分为直接方法和间接方法。直接方法源自经典逆散射理论，其依据是建立散射数据与介质参数之间的线性关系，参见例如 [2]。间接方法则建立一个非线性数据拟合问题，并通过迭代求解 [3]。

近年来，直接方法重新受到关注，尤其是在地球物理学界 [4]。一项最新进展是使用数据驱动的降阶模型来求解反问题 [5]。下面我们将概述这一过程。

1.1. 方法

状态方程表示为

$$\left(A_q + k^2 I\right) u(k) = s,$$

其中 u 表示波数为 k时的状态， s 表示源项，而 q 表示包含在微分算子 A_q. 中的变系数。测量值表示为$f_i = \langle s, u_i \rangle = \left\langle s, (A_q + k_i^2 I)^{-1} s \right\rangle$，其中 $i = 0, \mathbf{1}, \ldots, m-1$。该方法首先根据测量值估计状态 u_i，随后利用状态方程从这些状态中估计 q。

估计状态的第一步是通过一个降阶模型来实现的：该模型通过将状态方程投影到 $\mathcal{U} = \text{span}\big(\{u_i\}_{i=0}^{m-1}\big)$ 上，寻求状态方程在该子空间中的解。这需要计算 $\langle u_i, u_j \rangle$ 和 $\langle u_i, A_q u_j \rangle$。值得注意的是，这可以直接根据测量值完成，而无需明确引用状态 u_i。因此，为了近似状态，我们求解投影后的状态方程，并在给定 q_0 时，将解表示在由解 $u_i^{(0)}$ 构成的基 $\mathcal{U}^{(0)}$ 中。最后这一步较为复杂，需要进行 Lanczos正交化，详情请参见 [5] 。

从近似状态 $\widetilde{u}_i$ 中恢复 q 的下一步可以通过不同方式实现。我们可以采用方程误差方法（例如参见 [6]），并求解 q，其形式为

$$\left(A_q + k_i^2 I\right) \widetilde{u}_i = s.$$

或者，我们可以通过 Lippmann-Schwinger 积分方程求解它（参见，例如 [7]）

$$f_i - f_i^{(0)} = -\left\langle u_i^{(0)}, (A_q - A_0)\, \widetilde{u}_i \right\rangle.$$

1.2. 研究贡献与内容概述

基于降阶模型的方法已应用于各种场景，包括时域波传播，参见例如[8]，以及频域扩散过程，参见 [5]。作为将这一过程扩展到频域波动问题的第一步，我们将该方法扩展到带有阻抗边界条件的一维薛定谔方程。事实证明，需要反射测量和透射测量才能根据数据计算基于降阶模型的方法矩阵。此外，我们提出了一种替代方法，用于取代 [5]所描述的基于Lanczos的状态估计方法。为研究所得方法的准确性和稳定性特性，我们进行了数值实验。

本文组织如下。首先，我们回顾正问题，并给出边界数据与所需 ROM 矩阵之间的关系。然后，我们讨论求解反问题的两步方法：状态估计，以及随后根据状态对散射势进行估计。接着，我们通过数值实验说明这两种方法在含噪数据下的准确性和稳定性。最后，我们对主要发现进行简要总结，并讨论进一步的工作。

2. 正向问题

考虑一个薛定谔方程

$$-u''(x;k) + q(x)u(x;k) - k^2 u(x;k) = 0, \quad x \in (0,1) \tag{1}$$

带边界条件

$$u'(0;k)+\imath k u(0;k)=2\imath k, u'(1;k)-\imath k u(1;k)=0, \tag{2}$$

这对应于来自 $-\infty$的入射平面波。假设散射势在 (0,1) 内具有紧支撑。测量数据为

$$f(k)=u(0;k), \quad g(k)=u(1;k). \tag{3}$$

这个正问题的适定性已得到充分确立（至少当 q 连续时），因为边值问题可以转化为 Lippmann-Schwinger 积分方程。因此，只需研究该积分方程，参见例如[9]。

2.1. 降阶模型

基于降阶模型的方法以方程的弱形式为出发点
(1)

$$\langle u',\phi'\rangle+\langle qu,\phi\rangle-k^2\langle u,\phi\rangle-\imath k\left(f(k)\overline{\phi(0)}+g(k)\overline{\phi(1)}\right)=-2\imath k\overline{\phi(0)}, \tag{4}$$

其中， $\langle\cdot,\cdot\rangle$ 表示 $L^2(0,1)$ 上的标准内积， $\cdot$ 表示复共轭。

使用由 $\{u_i\}_{i=0}^{m-1}$ 构成、满足 $u_i\equiv u(\cdot;k_i)$ 的解基，相应地定义所得的系统矩阵

$$S_{ij}=\langle u_j',u_i'\rangle+\langle qu_j,u_i\rangle, \tag{5}$$
$$M_{ij}=\langle u_j,u_i\rangle, \tag{6}$$
$$B_{ij}=f_j\overline{f_i}+g_j\overline{g_i}, \tag{7}$$

以及右端项

$$b_i=-2\imath k\overline{f_i}. \tag{8}$$

使这种方法适用于求解反问题的主要特点是，可以直接根据数据计算系统矩阵，如下述引理所示。

引理1. *ROM*系统矩阵 S、M （方程 *(5)* 和*(6)*）根据边界数据 $\{f_i\}_{i=0}^{m-1}$ 和 $\{g_i\}_{i=0}^{m-1}$（方程 *(3)*）表示为

$$S_{ij}=\imath\left(\frac{k_ik_jB_{ij}}{k_i-k_j}-2\frac{k_j^2k_if_j+k_i^2k_j\overline{f}_i}{k_i^2-k_j^2}\right), \quad i\neq j$$

$$S_{ii}=k_i^2\left(\Re(f_i)\Im(f_i')-\Im(f_i)\Re(f_i')+\Re(g_i)\Im(g_i')-\Im(g_i)\Re(g_i')\right)-\Im(f_i')-\Im(f_i)/k_i.$$

$$M_{ij}=\imath\left(\frac{B_{ij}}{k_i-k_j}-2\frac{k_if_j+k_j\overline{f}_i}{k_i^2-k_j^2}\right), \quad i\neq j$$

$$M_{ii}=\Re(f_i)\Im(f_i')-\Im(f_i)\Re(f_i')+\Re(g_i)\Im(g_i')-\Im(g_i)\Re(g_i')-\Im(f_i')+\Im(f_i)/k_i.$$

该引理的证明可在附录中找到。

相应地，近似解随后给出为

$$\widetilde{u}(x;k)=\sum_{i=0}^{m-1}c_i(k)u_i(x), \tag{9}$$

with

$$\left(S-k^2M-\imath kB\right)\mathbf{c}(k)=\mathbf{b}(k).$$

注 1。 从引理 *1* 的证明中可知， $c_i(k_j)=\delta_{ij}$。因此， $\widetilde{u}$ 将与边界数据匹配。

请读者参阅 [10, 11, 12, 13]，以了解有关此类降阶模型近似的近似误差的讨论。

3. 反问题

现在的反问题是根据波数$\{k_i\}_{i=0}^{m-1}$ 处的边界测量来求取 q。如引言中所述，这通过两步程序实现。首先根据数据估计态 $\{u_i\}_{i=0}^{m-1}$，随后根据这些近似态估计散射势。

3.1. 估计状态

如上一节所述，我们可以按照基于降阶模型的方法直接从数据计算方程（9）中的系数。然而，由于计算方程（9）所需的基 $\{u_i\}_{i=0}^{m-1}$ 未知，我们需要使用另一组基。基本思路是改用与给定 $q^{(0)}$ 对应的状态 $\{u_i^{(0)}\}_{i=0}^{m-1}$。我们很容易想到直接用以下内容替换方程（9）：

$$\widetilde{u}(x;k)=\sum_{i=0}^{m-1}c_i(k)u_i^{(0)}(x),$$

然而，这样行不通，因为会得到 $\widetilde{u}(x;k_i)=u_i^{(0)}(x)$，见注释 1。下面我们讨论两种替代方案。

*3.1.1. Lanczos*正交化 [5] 的作者提出采用如下正交化过程。他们首先对$M^{-1}S$应用 M-正交 Lanczos 过程，得到矩阵 $Q\in\mathbb{C}^{m\times r}$ 和 $T\in\mathbb{C}^{r\times r}$，其中 $r\le m$，满足

$$Q^*SQ=T,\quad Q^*MQ=I.$$

状态的降阶模型近似随后表示为

$$\widetilde{u}(x;k)=\sum_{i=0}^{m-1}c_i(k)v_i(x), \tag{10}$$

其中**c** 满足

$$\left(T - k^2 I - \imath k Q^* B Q\right) \mathbf{c}(k) = Q^* \mathbf{b}(k),$$

以及相对于定义为 的正则 L^2 内积的正交基 $\{v_i\}_{i=0}^{r-1}$

$$v_j = \sum_{i=0}^{m-1} Q_{ij} u_i.$$

方程 (10) 中的表达式等价于方程 (9)（尽管系数不同）。由于我们无法访问状态 $\{u_i\}_{i=0}^{m-1}$，也无法构造正交基 $\{v_i\}_{i=0}^{r-1}$，因此我们将其替换为 $\{v_i^{(0)}\}_{i=0}^{r-1}$，其获得方式为

$$v_j^{(0)} = \sum_{i=0}^{m-1} Q_{ij}^{(0)} u_i^{(0)},$$

其中，态 $u_i^{(0)}$ 是参考散射势 $q^{(0)}$ 的解，而 $Q^{(0)}$是通过对相应的系统矩阵应用 Lanczos 过程获得的。

注释2。在实践中，我们将 M 替换为某个 $\epsilon > 0$ 的 $M + \epsilon I$，以确保其可逆并稳定 *Lanczos* 过程。

3.1.2. 数据同化 另一种方法受到 [14] 的启发，建立了一个超定方程组，以确保得到的内部解估计与数据高度吻合。我们直接用参考解来定义近似状态

$$\widetilde{u}(x;k) = \sum_{i=0}^{m-1} c_i(k) u_i^{(0)}(x),$$

其中，co 系数 **c**(*k*) 通过求解以下最小二乘问题得到

$$\min_{\mathbf{c}} \left\| \begin{pmatrix} S - k^2 M - \imath k B \\ \rho \mathbf{f}^{(0)^T} \\ \rho \mathbf{g}^{(0)^T} \end{pmatrix} \mathbf{c} - \begin{pmatrix} \mathbf{b}(k) \\ \rho f(k) \\ \rho g(k) \end{pmatrix} \right\|_2, \tag{11}$$

其中，$\rho > 0$ 是一个惩罚参数，用于控制数据拟合与模型拟合之间的权衡。所需的数据 $f(k)$和 $g(k)$ 可通过求解方程（9），并利用所得系数对其进行插值得到。

3.2. 估计散射势

利用微分方程的弱形式，我们得到一个 Lippmann-Schwinger 型方程，

$$f(k) - f^{(0)}(k) = -\frac{1}{2\imath k} \int_0^1 u^{(0)}(x;k) u(x;k) (q(x) - q_0(x)) \mathrm{d}x. \tag{12}$$

将 q 表示为适当的基，并对波数$\{k_i\}_{i=0}^{m-1}$ 施加该方程，可得到一个方程组。在实际应用中，我们用其近似值 $\widetilde{u}$替代 u，并通过最小二乘法求解，以获得 q的估计值：

$$\min_{\mathbf{q}} \|K\mathbf{q} - (\mathbf{f} - \mathbf{f}^{(0)})\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{q}\|_2^2. \tag{13}$$

注 3. 请注意，在方程 *(12)* 中用 $\widetilde{u}$ 替代 u 会在 K中引入误差。为明确考虑这一点，采用全最小二乘（*TLS*）形式可能会有所帮助（例如，参见 *[15]*，了解其在逆散射中的应用）。

4. 数值结果

反演过程包括两个步骤：状态估计，以及根据这些态估计散射势。对于第一步，我们使用参数为 ϵ 的Lanczos正交化方法（LO），或参数为 ρ的数据同化方法（DA）。利用近似态，随后通过求解参数为 α的正则化Lippmann–Schwinger方程来估计散射势。该两步算法概述于算法1中。所述方法的实现相当直接。用于生成这些结果的代码可在`https://github.com/ucsi-consortium/1DInverseScatteringROM`获取。

算法1 从边界数据估计态和散射势的两步反演流程概述。**输入：** 参考 $q^{(0)}$，数据 f，g，波数为 $\{k_i\}_{i=0}^{m-1}$，正则化参数 **(**(ϵ，α) 或 (ρ，α)**)输出：** 重构的态 $\{\widetilde{u}_i\}_{i=0}^{m-1}$ 和散射势 $\widetilde{q}$。步骤 *1*：状态估计根据引理 1 计算降阶模型矩阵 M，S，B。计算与 $q^{(0)}$ 对应的参考态 $\{u_i^{(0)}\}_{i=0}^{m-1}$。根据 LO 或数据同化流程（分别见第 3.1.1、3.1.2 节）计算波数为 $\{k_i\}_{i=0}^{m-1}$ 时的近似态 $\{\widetilde{u}_i\}_{i=0}^{m-1}$ 步骤 *2*：估计散射势根据第 3.1.3 节所述流程重构散射势 $\widetilde{q}$。

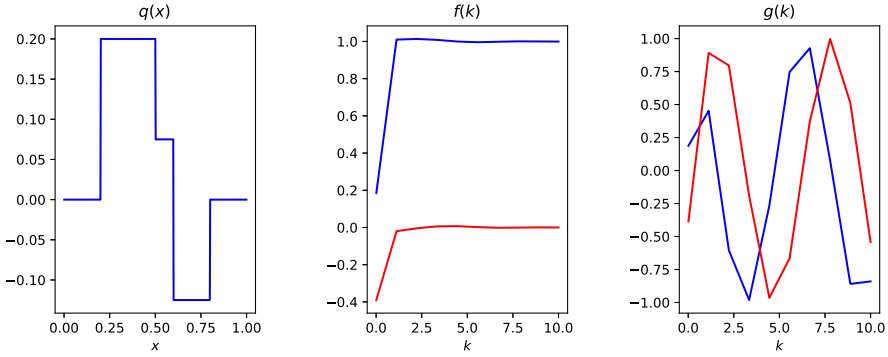


图 1. 从左到右依次为散射势 q、反射数据的实部（蓝色）和虚部（红色），f，以及透射数据的实部和虚部，g，。

4.1. 实验设置

为说明这些方法，我们使用图1所示的散射势。数据是通过对薛定谔方程进行数值求解获得的，针对区间(0,10) 内对 $m = 10$ 等间隔的波数。

4.2. 基准测试结果

作为基准，我们使用第3.1.3 节所述的方法，利用真实态（作为理想设置）和$q^{(0)} = 0$的参考态（对应于玻恩近似）重建散射势。结果如图 2和图3所示。即使使用真实态，由于数据的带限特性，我们也无法完美重建散射势。此外，使用玻恩近似得到的较差结果进一步凸显了进行非线性反演的必要性。

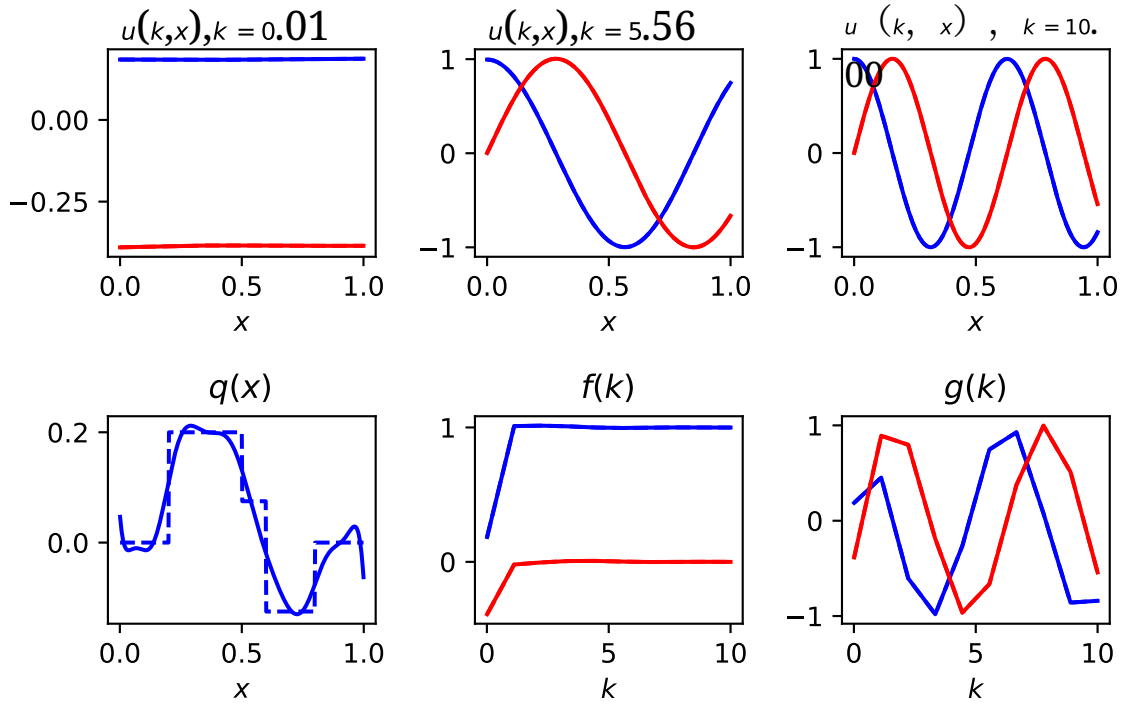


图2。 使用真实态重建散射势的结果。顶行显示了用于后续步骤估计散射势的（重建）态（实线）以及真实态（虚线）。第二行显示了重建散射势（实线）及其对应的数据。各量的实部以蓝色显示，虚部以红色显示。

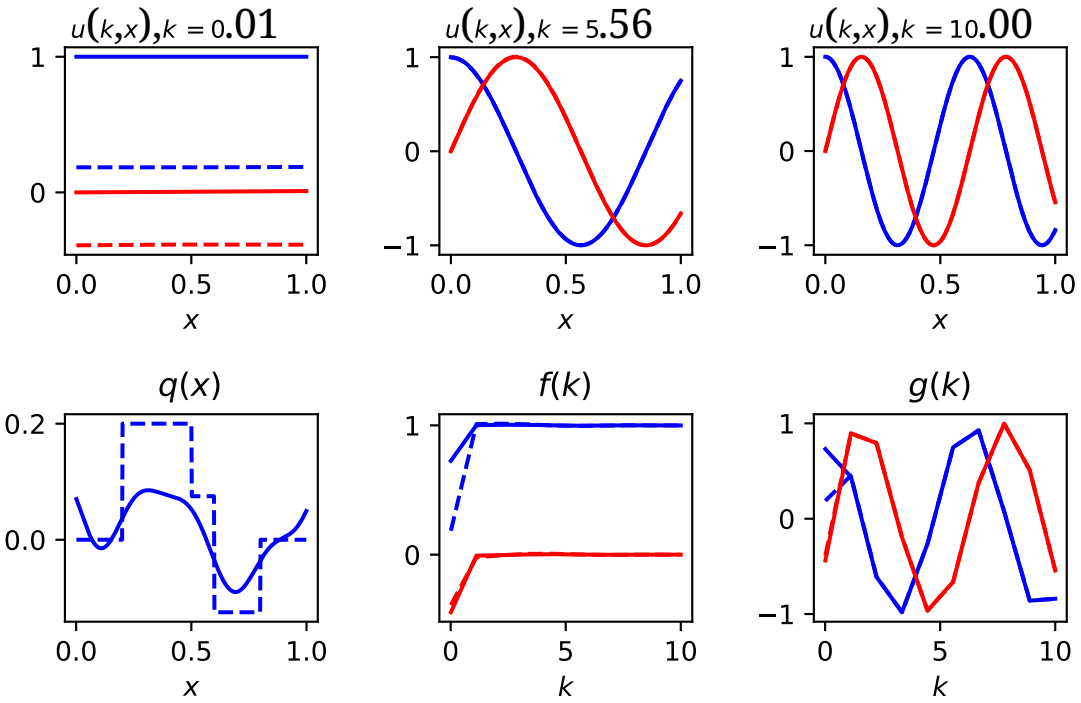


图 3. 使用参考态重建散射势（即玻恩近似）的结果。第一行显示后续用于估计散射势的（重建）状态（实线）以及真实态（虚线）。第二行显示重建散射势（实线）及相应数据。实部以蓝色显示，虚部以红色显示。

4.3. 无噪声数据

接下来，我们分别在图 4 和图 5 中展示 LO 和数据同化方法对无噪声数据得到的结果。我们观察到，数据同化方法对态的重建略为准确。相应的重建散射势略有不同，但重建精度似乎差别不大。

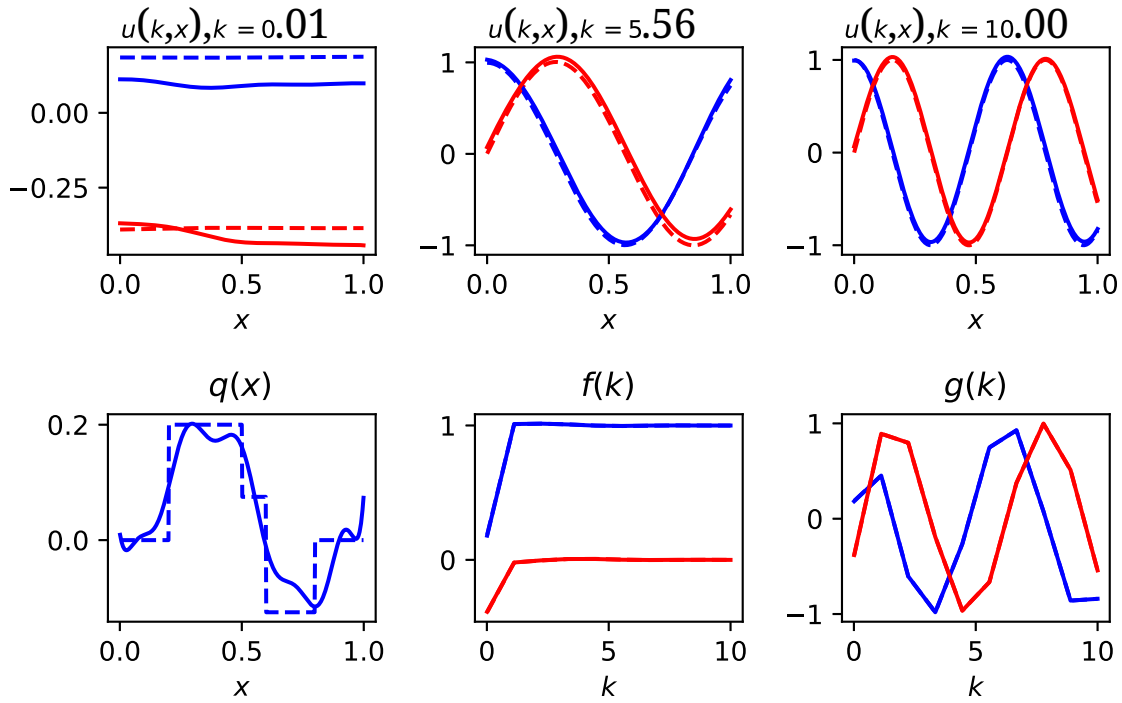


图 4. 使用 LO方法处理无噪声数据的结果。顶行显示了在后续步骤中用于估计散射势的（重建）态（实线）以及真实态（虚线）。第二行显示了重建散射势（实线）及其对应的数据。蓝色表示各量的实部，红色表示虚部。

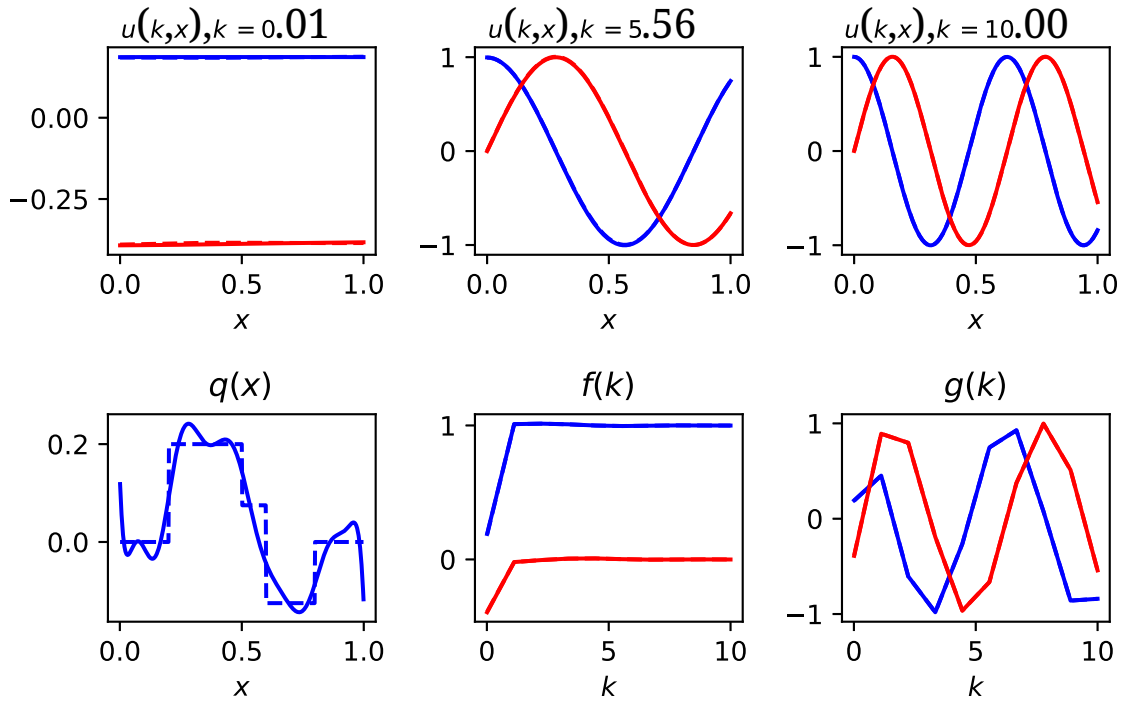


图 5. 在无噪声数据上使用 DA方法的结果。第一行显示了用于后续步骤中估计散射势的（重建）态（实线）以及真实态（虚线）。第二行显示了重建散射势（实线）及其对应的数据。各量的实部以蓝色表示，虚部以红色表示。

4.4. 含噪数据

在本小节中，我们比较各方法在含噪数据上的表现。具体而言，我们在数据中加入均值为零、方差为 σ^2 的独立同分布正态噪声。选择参数 ϵ, ρ, α，使其得到最佳近似（以重建结果与真实值之间的 L^2 误差衡量，并对 100 次噪声实现取平均）。展示误差随参数变化关系的相应图表收录于附录中。表 1 总结了不同 σ 下的结果。相应图表见图 6。正如预期，噪声会影响状态的重建，进而影响散射势的重建。总体而言，数据同化方法对状态的估计更为准确。对于散射势，两种方法之间没有显著差异；不过，在中等噪声水平下，数据同化方法的结果更稳定，误差方差也小得多。

表 1。两种方法重构态和散射势的相对误差比较。我们报告了 100 次噪声实现的平均值和标准差。

σ	方法	参数	u 中的错误	q 中的错误
10^{-6}	Lanczos正交化(ϵ, α)	$(10^{-3}, 10^{-3})$	$1.5 \cdot 10^{-1}(1.6 \cdot 10^{-3})$	$4.7 \cdot 10^{-1}(3.2 \cdot 10^{-3})$
	数据同化(ρ, α)	$(10^{-2}, 10^{-4})$	$6.1 \cdot 10^{-3}(1.4 \cdot 10^{-5})$	$3.9 \cdot 10^{-1}(2.3 \cdot 10^{-3})$
10^{-5}	Lanczos正交化(ϵ, α)	$(10^{-2}, 10^{-3})$	$1.5 \cdot 10^{-1}(5.3 \cdot 10^{-4})$	$4.6 \cdot 10^{-1}(2.3 \cdot 10^{-3})$
	数据同化(ρ, α)	$(10^{-1}, 10^{-3})$	$6.1 \cdot 10^{-3}(3.0 \cdot 10^{-5})$	$4.5 \cdot 10^{-1}(2.8 \cdot 10^{-3})$
10^{-4}	Lanczos正交化(ϵ, α)	$(10^{-2}, 10^{-2})$	$1.8 \cdot 10^{-1}(1.5 \cdot 10^{-1})$	$5.7 \cdot 10^{-1}(1.4 \cdot 10^{-1})$
	数据同化(ρ, α)	$(10^{-1}, 10^{-2})$	$6.2 \cdot 10^{-3}(3.4 \cdot 10^{-4})$	$5.3 \cdot 10^{-1}(3.2 \cdot 10^{-3})$
10^{-3}	Lanczos正交化(ϵ, α)	$(10^{-1}, 10^{-2})$	$2.1 \cdot 10^{-1}(1.2 \cdot 10^{-1})$	$6.2 \cdot 10^{-1}(1.3 \cdot 10^{-1})$
	数据同化(ρ, α)	$(10_0, 10^{-2})$	$6.4 \cdot 10^{-3}(7.0 \cdot 10^{-4})$	$6.0 \cdot 10^{-1}(5.9 \cdot 10^{-2})$
10^{-2}	Lanczos正交化(ϵ, α)	$(10^{-1}, 10^{-1})$	$2.6 \cdot 10^{-1}(7.1 \cdot 10^{-1})$	$9.2 \cdot 10^{-1}(9.4 \cdot 10^{-2})$
	数据同化(ρ, α)	$(10_1, 10^{-1})$	$1.4 \cdot 10^{-2}(4.4 \cdot 10^{-3})$	$9.2 \cdot 10^{-1}(9.0 \cdot 10^{-2})$

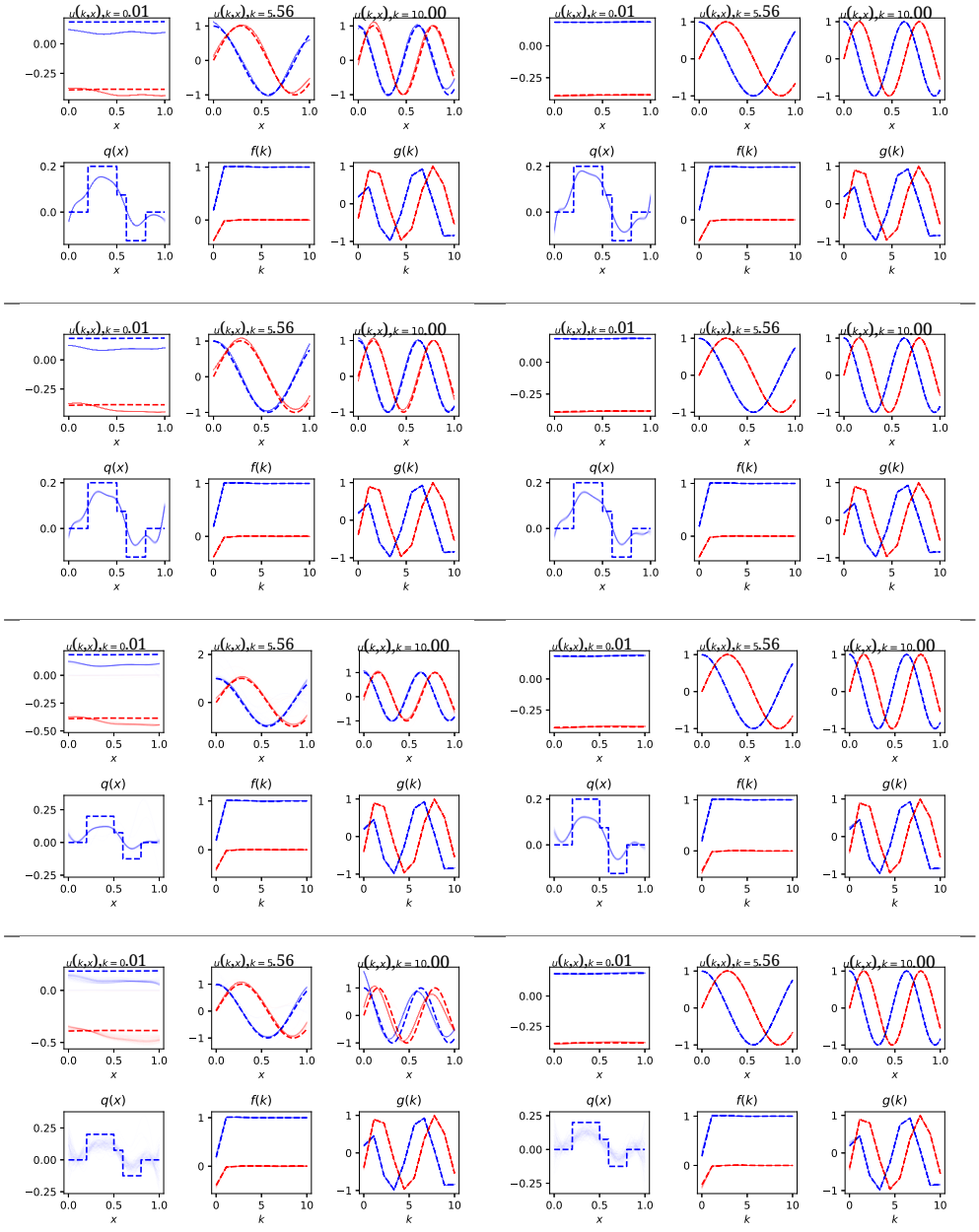


图 6. LO（左）和 DA（右）方法在不同噪声水平下的结果（从上到下分别对应 $\sigma = 10^{-6},\ 10^{-5},\ 10^{-4},\ 10^{-3}$ ）。子图的布局与前几幅图相同。将噪声不同实现下的单独结果叠加显示，以清楚呈现其变化。

5. 讨论与结论

我们研究从边界数据中反演一维薛定谔方程的散射势这一反问题。为此，我们提出一种受先前发表的基于降阶模型的方法启发的两步法。我们将这种先前用于具有诺伊曼边界条件的一维扩散问题的方法，扩展到具有阻抗边界条件的一维薛定谔方程。具体而言，我们给出了从边界数据中求取降阶模型矩阵的显式表达式，并提出了一种利用这些矩阵近似状态的新方法。这种基于数据同化思想的方法，是先前提出的基于兰索斯正交化的方法的一种替代方案。得到态的估计值后，通过求解积分方程获得散射势。

我们在一个噪声水平各异的模拟示例上对这两种方法进行了数值比较。这些实验表明，在中等噪声水平下，采用数据同化方法估计状态更准确、更稳定，并且能够得到更稳定的散射势估计。

本研究是将基于降阶模型的方法拓展到频域波动类问题（例如亥姆霍兹方程）以及二维/三维问题的第一步。其他有待进一步研究的开放问题包括近似误差、稳定性估计，以及更实际的方面，例如采用迭代方法不断更新参考势。

致谢

本研究　　由乌得勒支地下成像联盟（UCSI）提供支持。

附录 A. 证明

引理 *1* 的证明。 由弱形式可得

$$S_{ij} - k_j^2 M_{ij} - \imath k_j B_{ij} = -2\imath k_j \overline{f}_i,$$

and

$$S_{ji} - k_i^2 M_{ji} - \imath k_i B_{ji} = -2\imath k_i \overline{f}_j,$$

由此可得（对两边取共轭转置，并利用所涉及的矩阵均为厄米矩阵这一事实）

$$S_{ij} - k_i^2 M_{ij} + \imath k_i B_{ij} = 2\imath k_i f_j.$$

将这些结果合并可得

$$(k_i^2 - k_j^2) M_{ij} - \imath(k_i + k_j) B_{ij} = -2\imath(k_i f_j + k_j \overline{f}_i),$$

and

$$(k_i^2 - k_j^2) S_{ij} - \imath(k_j^2 k_i + k_i^2 k_j) B_{ij} = -2\imath(k_j^2 k_i f_j + k_i^2 k_j \overline{f_i}),$$

由此我们可以计算 M_{ij} 和 S_{ij}:

$$M_{ij} = \imath \left(\frac{B_{ij}}{k_i - k_j} - 2\frac{k_i f_j + k_j \overline{f}_i}{k_i^2 - k_j^2} \right).$$

$$S_{ij} = \imath \left(\frac{k_i k_j B_{ij}}{k_i - k_j} - 2\frac{k_j^2 k_i f_j + k_i^2 k_j \overline{f}_i}{k_i^2 - k_j^2} \right).$$

对于对角元素，我们需要对上述两个关系取极限。我们先计算 M的对角元素。令 $\lambda = k_j^2$，并令 $k_i^2 = \lambda + h$。我们还定义$f(k_j) = \phi(\lambda) = \phi_1 + \imath\phi_2$ 和 $\phi(\lambda + h) = \phi_1^h + \imath\phi_2^h$，类似地定义 $\gamma(\lambda) = g(k_j)$。由于$\Im(M_{jj}) = 0$，我们得到

$$M_{jj} = \lim_{h\to 0} \Big\{ -2\frac{\sqrt{\lambda}\phi_2^h - \sqrt{\lambda+h}\phi_2}{h} - \frac{\gamma_2\gamma_1^h - \gamma_1\gamma_2^h + \phi_2\phi_1^h - \phi_1\phi_2^h}{\sqrt{\lambda+h} - \sqrt{\lambda}} \Big\} =$$

$$-2\Big(\sqrt{\lambda}\frac{d\phi_2}{d\lambda}(\lambda) - \frac{1}{2}\lambda^{-1/2}\phi_2(\lambda)\Big) - \gamma_2(\lambda)2\sqrt{\lambda}\frac{d\gamma_1}{d\lambda}(\lambda) + \gamma_1(\lambda)2\sqrt{\lambda}\frac{d\gamma_2(\lambda)}{d\lambda} -$$

$$\phi_2(\lambda)2\sqrt{\lambda}\frac{d\phi_1}{d\lambda}(\lambda) + \phi_1(\lambda)2\sqrt{\lambda}\frac{d\phi_2(\lambda)}{d\lambda}. \tag{A.1}$$

乘积法则　表明 $\frac{d\phi}{d\lambda} = \frac{df}{dk}\frac{dk}{dk^2} = f'(k)(2k)^{-1}$。对于 $\gamma.$，同理。结合可得　s,

$$M_{jj} = \Big\{ -2\Big(k\frac{1}{2k}\Im(f') - \frac{1}{2k}\Im(f)\Big) -$$

$$\Im(g)2k\frac{1}{2k}\Re(g) + \Re(g)2k\frac{1}{2k}\Im(g) - \Im(f)2k\frac{1}{2k}\Re(f) + \Re(f)2k\frac{1}{2k}\Im(f)\Big\}\Big|_{k=k_j},$$

由此可得

$$M_{jj} = \Re(f_j)\Im(f_j') - \Im(f_j)\Re(f_j') + \Re(g_j)\Im(g_j') - \Im(g_j)\Re(g_j') - \Im(f_j') + \Im(f_j)/k_j.$$

类似地，我们得到 S 对角线的关系。 □

附录 B。正则化参数选择

LO 和数据同化方法都有两个用于正则化问题的正则化参数。我们选择这些参数，以使给定噪声水平下的期望重建误差最小。我们通过对 100 次噪声实现下的误差取平均，来近似期望误差。表 1 以及图 4、5 和 6 所示结果对应的曲线见图 B1。

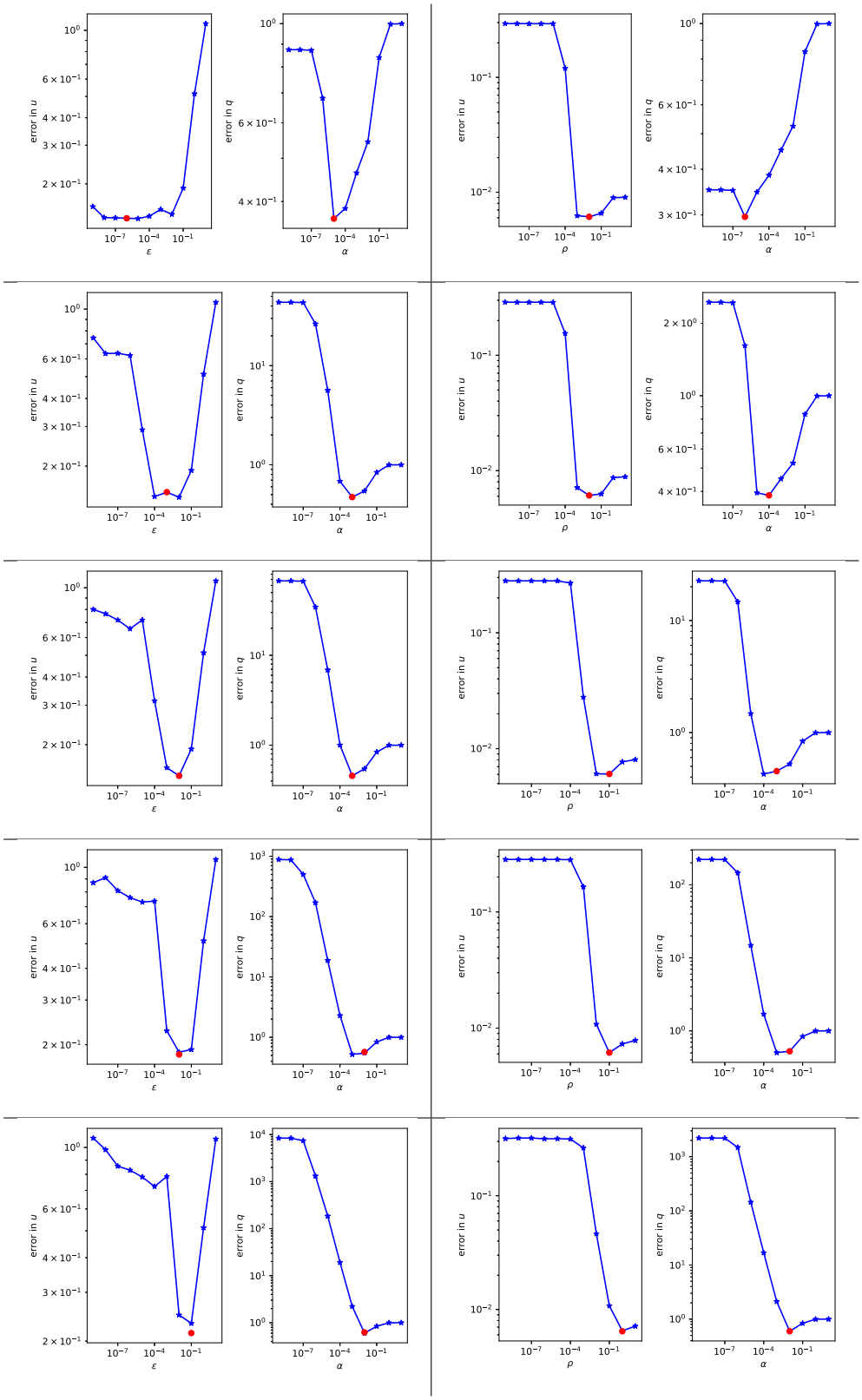


图 B1. 两种方法（左侧为 LO，右侧为 DA）在不同噪声水平下的平均误差（从上到下分别为 $0, 10^{-6}, 10^{-5}, 10^{-4}, 10^{-3}$）。

[1] Edward Roy Pike 和 Pierre C Sabatier. 散射，双卷本：纯科学与应用科学中的散射与逆散射. Elsevier, 2001.[2] Jerry A. Ware 和 Kehti Aki. 分层弹性介质中的连续与离散逆散射问题。I. 正入射平面波. 美国声学学会杂志, 45(4):911–921, 1969年4月.[3] Albert Tarantola. 声学近似下地震反射数据的反演. 地球物理学, 49(8):1259–1266, 1984.[4] Filippo Broggini 和 Roel Snieder. 散射原理的联系：一场可视化与数学之旅. 欧洲物理学杂志, 33(3):593–613, 2012.[5] Vladimir Druskin, Shari Moskow 和 Mikhail Zaslavsky. 用于逆散射问题的 Lippmann–Schwinger–Lanczos 算法. 反问题, 37, 2021.[6]Tommi K¨arkk¨ainen. 一种从分布式观测中恢复扩散过程的方程误差方法. 反问题, 13(4):1033, 1997.[7] Donald J Kouri 和 Amrendra Vijay. 逆散射理论：一维声散射中 Lippmann-Schwinger 方程的重整化. 物理评论 *E*, 67(4):046614, 2003.[8] Liliana Borcea, Josselin Garnier, Alexander V. Mamonov 和 J¨orn T. Zimmerling. 用于波成像的降阶模型方法. 反问题, 38, 2021.[9] Rainer Kress. 线性积分方程, 第82卷. Springer, 2014.[10] James P. Fink 和 Werner C. Rheinboldt. 关于非线性有限元近似中降阶基技术的误差行为. 应用数学与力学杂志, 63:21–28, 1983.[11] Yvon Maday, Anthony T. Patera 和 Gabriel Turinici. 单参数椭圆型偏微分方程降阶基近似的先验收敛理论. 科学计算杂志, 17:437–446, 2002.[12]Karen Veroy, Christophe Prud'Homme, Dimitrios Rovas 和 Anthony Patera. 参数化非强制与非线性椭圆型偏微分方程降阶基近似的后验误差界. 见 第*16*届 *AIAA* 计算流体动力学会议, 第3847页, 2003.[13] Sugata Sen, Karen Veroy, D. B. P. Huynh, Simone Deparis, Ngoc Cuong Nguyen 和 Anthony T. Patera. 降阶基近似的"自然范数"后验误差估计器. 计算物理学杂志, 217:37–62, 2006.[14] Tristan van Leeuwen 和 Felix J Herrmann. 一种用于反问题中 PDE 约束优化的惩罚方法. 反问题, 32(1):015007, 2015.[15] Andreas Tataris 和 Tristan van Leeuwen. 一种用于一维逆散射的正则化总最小二乘方法. 数学, 10(2):216, 2022.