

**МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ**
Федеральное государственное автономное образовательное учреждение
высшего образования
«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»
(Новосибирский государственный университет, НГУ)

**Физический факультет
Кафедра биомедицинской физики**



УТВЕРЖДАЮ
Декан ФФ, д.ф.-м.н
В.Е.Блинов
2022 г.

Рабочая программа дисциплины

ОБРАТНЫЕ ЗАДАЧИ: ТЕОРИЯ И ПРАКТИКА

Направление подготовки **03.04.02 Физика**

Направленность (профиль): **Общая и фундаментальная физика**

Форма обучения

Очная

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)					
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем				
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен	
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	
2	72	32			18	18	2				2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы											
-контактная работа 36 часов											
Компетенции ПК-1											

Руководитель программы
д.ф.-м.н.

И. Б. Логашенко

Новосибирск, 2022

Содержание

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.	3
2. Место дисциплины в структуре образовательной программы	5
3. Трудоёмкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу	6
4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.	7
5. Перечень учебной литературы.	11
6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.	12
7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.	13
8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.	13
9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.	13
10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.	13

1. Перечень планируемых результатов обучения по дисциплине, соотнесённых с планируемыми результатами освоения образовательной программы.

Дисциплина «Обратные задачи: теория и практика» имеет своей целью: знакомство обучающихся с современным состоянием дел в области решения обратных задач и применение этих знаний на практике. Это включает в себя, в частности, знакомство с общей теорией линейной и нелинейной регрессии, а также с методами решения линейных интегральных уравнений и их применения в томографии, практическое знакомство с методами линейной и нелинейной регрессии на примерах, и применение полученных знаний в собственной научной работе.

Дисциплина нацелена на формирование у обучающегося профессиональной компетенции:

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
<p>ПК-1 Способен использовать специализированные знания в области физики при решении поставленных задач в научно-исследовательской деятельности в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p> <p>ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.</p>	<p>Знать основные предположения и формулы, используемые для решения задач линейной и нелинейной регрессии, а именно для нахождения наилучших параметров модели и оценки погрешностей этих значений; общие методы решения интегральных уравнений, лежащие в основе вычислительной томографии и других практических приложений.</p> <p>Уметь на основе конкретного эксперимента или исходных экспериментальных данных правильно поставить задачу линейной или нелинейной регрессии и определить наиболее подходящий метод её решения, включая построение доверительных интервалов на модельные параметры; проверить исходные предположения о свойствах экспериментальных погрешностей и применимости методов оценки погрешностей на основе линеаризации модельной функции; при необходимости использовать более общие методы оценки погрешностей, основанные на контурах правдоподобия и Байесовском подходе, а также обобщённый метод наименьших квадратов; численно оптимизировать функции одной или нескольких переменных с использованием метода Левенберга-Марквардта; уметь использовать хотя бы один из распространённых математических программных пакетов для решения задач регрессии и численной оптимизации, вычисления квантилей стандартных распределений</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		<p>вероятности и построения простейших графиков. Также обучающийся должен уметь применять полученные знания для практических задач, в том числе в собственной научной работе.</p> <p>Владеть представлениями о корректности и некорректности обратных задач и их общей классификации; линейной и нелинейной регрессии, а также о правильной постановке этих задач в терминах математической статистики, включая статистическую обработку эксперимента; о стандартных предположениях, используемых в задачах регрессии и способах их проверки; о стандартных распределениях вероятности, включая распределения хи-квадрат, Стюдента и Фишера; о сведении обратной задачи к методу наименьших квадратов, владеть представлениями о прямом решении задачи минимизации в случае линейной регрессии и оценке погрешностей определяемых параметров; о различных усложнениях линейной регрессии, включая регрессию при наличии погрешности в переменных (регрессия Деминга); о классификации различных алгоритмов локальной и глобальной численной оптимизации, включая методы Нельдера-Мида, сопряжённых градиентов, (квази) Ньютоновские, Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno, методы мультистрата, DiRect, многоточечные методы; об упрощении задачи минимизации в случае разделяемых параметров, иметь представление об использовании информации о поверхности целевой функции, полученной в ходе минимизации, или метода Монте-Карло для надёжного определения доверительных интервалов на модельные параметры; о вычислении матрицы ковариаций экспериментального шума по множественным измерениям; о методах определения выпадающих точек; о методах статистически-достоверного учёта</p>

Результаты освоения образовательной программы (компетенции)	Индикаторы	Результаты обучения по дисциплине
		<p>повторных измерений и об одновременной регрессии нескольких наборов данных при одинаковых значениях части параметров; об использовании предварительно рассчитанной таблицы значений целевой функции для ускорения решения многих однотипных задач; об автоматических методах обучения, включая нейронные сети,</p> <p>иметь представление о регуляризации Тихонова, сингулярном разложении и обобщённом сингулярном разложении, и о методах выбора параметра регуляризации; об функциональных обратных задачах и общих методах решения линейных интегральных уравнений; о физических основах и основных видах томографии, а также об используемых в томографии численных методах и аналитических формулах обращения, включая обратные преобразования Абеля и Радона; об оптических принципах и методах построения изображения в оптической когерентной томографии, и её возможных применениях; об обратной задаче рассеяния и основных методах её решения, включая приближение Борна, восстановления поля внутри частицы, и качественные методы определения формы объекта (метод линейных проб).</p>

2. Место дисциплины в структуре образовательной программы

Курс «Обратные задачи: теория и практика» читается в весеннем семестре для студентов 1 курса магистратуры, обучающихся по направлению подготовки 03.04.02 Физика. Курс является одной из профессиональных дисциплин по выбору, реализуемых кафедрой биомедицинской физики.

Студенты, приступающие к изучению этой дисциплины, должны иметь общую базовую подготовку по физико-математическим дисциплинам, в том числе:

– знание математического анализа, линейной алгебры, основ функционального анализа, математической статистики, и векторного анализа, а также умение применять эти знания при решении задач. Знание линейной алгебры и математического анализа необходимо для понимания и вывода формул, используемых в линейной и нелинейной регрессии. А знание математической статистики необходимо для понимания используемых понятий, особенно связанных с погрешностями измерений и решения обратной задачи. Знание функционального анализа необходимо во второй части курса при решении интегральных уравнений, и связанных с ними обратных задач.

– курсам «Введение в технику физического эксперимента» и «Электродинамика и оптика», поскольку они необходимы для понимания физических методов, на примере которых построены несколько глав курса, посвящённые томографии и обратной задаче светорассеяния.

Обратные задачи, включая анализ экспериментальных погрешностей, встречаются практически в любой экспериментальной работе, а также и в некоторых теоретических разделах физики. Поэтому материал, изучаемый в рамках данного курса, найдёт прямое и непосредственное применение в собственной научной работе магистрантов, а именно при прохождении научной практики в лабораториях академических институтов.

3. Трудоемкость дисциплины в зачётных единицах с указанием количества академических часов, выделенных на контактную работу обучающегося с преподавателем (по видам учебных занятий) и на самостоятельную работу

Семестр	Общий объем	Виды учебных занятий (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)				
		Контактная работа обучающихся с преподавателем			Самостоятельная работа, не включая период сессии	Самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации	Контактная работа обучающихся с преподавателем			
		Лекции	Практические занятия	Лабораторные занятия			Консультации	Зачет	Дифференцированный зачет	Экзамен
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
2	72	32			18	18	2			2
Всего 72 часа / 2 зачетных единицы										
-контактная работа 36 часов										
Компетенции ПК-1										

Реализация дисциплины предусматривает практическую подготовку при проведении следующих видов занятий, предусматривающих участие обучающихся в выполнении отдельных элементов работ, связанных с будущей профессиональной деятельностью: лекции, консультации, самостоятельная работа студента и её контроль преподавателями с помощью заданий, экзамен.

Программой дисциплины предусмотрены следующие виды контроля:

- **Текущий контроль:** опрос в начале каждой лекции по материалам предыдущей лекции
- **Промежуточная аттестация:** экзамен.

Общая трудоемкость дисциплины составляет **2** зачетных единицы, **72** академических часа.

- занятия лекционного типа – 32 часа;
- самостоятельная работа обучающегося в течение семестра, не включая период сессии – 18 часов;
- самостоятельная подготовка к промежуточной аттестации – 18 часов
- консультация – 2 часа

Объём контактной работы обучающегося с преподавателем (занятия лекционного типа, консультация, экзамен) составляет 36 часов.

4. Содержание дисциплины, структурированное по темам (разделам) с указанием отведённого на них количества академических часов и видов учебных занятий.

Дисциплина «Обратные задачи: теория и практика» читается на 1 курсе магистратуры физического факультета НГУ во 2 семестре. Общая трудоемкость дисциплины составляет 2 зачетных единицы, 72 академических часа.

№ п/п	Раздел дисциплины	Неделя семестра	Виды учебных занятий, включая самостоятельную работу студентов и трудоемкость (в часах)				Промежуточная аттестация (в часах)
			Всего	Аудиторные часы		Сам. работа во время занятий (не включая период сессии)	
				Лекции	Практические занятия		
1	2	3	4	5	6	7	8
1	Введение	1	2	2			
2	Задача регрессии при анализе экспериментальных данных	2	3	2		1	
3	Линейная регрессия	3	3	2		1	
4	Задача минимизации при нелинейной регрессии	4	3	2		1	
5	Оценка погрешности определения параметров	5	3	2		1	
6	Проверка изначальных предположений и модификация стандартной процедуры регрессии	6	3	2		1	
7	Решение обратной задачи с предварительным обучением	7–8	5	4		1	
8	Регуляризация	9	3	2		1	
9	Основы томографии	10–11	5	4		1	
10	Оптическая когерентная томография	12–13	5	4		1	
11	Обратная задача рассеяния	14	3	2		1	
12	Обобщающая лекция с обсуждением актуальных задач, возникающих в научно-исследовательской работе студентов	15-16	12	4		8	
12	Групповая консультация		2				2
13	Самостоятельная подготовка обучающегося к экзамену		18				18
14	Экзамен		2				2
	Всего		72	32		18	24

Программа и основное содержание лекций (32 часа)

Раздел 1. Введение (2 часа)

Цели и структура курса. Важность анализа погрешностей на всех этапах обработки экспериментальных данных. Определение и общая классификация обратных задач (количество параметров, линейность целевой функции по параметрам, сложность решения). Примеры линейной и нелинейной ре-

грессии, характеристика частиц (определение нескольких параметров модели) по измеренной индикатрисе светорассеяния. Примеры функциональных обратных задач: интегральные преобразования (в частности, Фурье и Радона), метод разложения по базису. Пример обратной задачи светорассеяния. Корректность обратной задачи по Адамару: существование, единственность и устойчивость. Обсуждение конкретных примеров обратных задач в дипломных работах студентов.

Раздел 2. Задача регрессии при анализе экспериментальных данных (2 часа)

Правильная постановка задачи регрессии в терминах мат. статистики – залог достоверного результата обработки экспериментальных данных. Сведение задачи обработки зашумлённых данных к регрессии. Компоненты регрессии: входные данные, модель и погрешности экспериментальных данных. Линейные и нелинейные модели. Регрессия – частный случай оценки параметров модели по выборке. Стандартные предположения о погрешностях экспериментальных данных – нормальное распределение и независимость. Задача сравнения моделей. Пример неоднородных погрешностей и замены переменных. Важность грамотного планирования эксперимента. Сведение к методу наименьших квадратов. Использование ожидаемых погрешностей экспериментальных данных в качестве веса. Функция правдоподобия. Стандартные распределения вероятности: нормальное, хи-квадрат, Фишера, Стьюдента. Квантили и доверительные интервалы. Многомерное нормальное распределение.

Раздел 3. Линейная регрессия (2 часа)

Простейший пример: один параметр. Прямое решение задачи минимизации. Геометрический смысл метода наименьших квадратов. Проектор. Случай вырожденных исходных данных. Оценка погрешности определения параметров на основе прямого статистического анализа: стандартные ошибки, корреляции и доверительные интервалы. Совместные доверительные интервалы (эллипсы) на несколько параметров. Доверительные интервалы на модельную (теоретическую) кривую. Формулы для известной погрешности экспериментальных данных и в случае, когда эта погрешность оценивается непосредственно по невязке, полученной при регрессии. Способ оценки погрешностей на основе функции правдоподобия, может быть легко обобщён на нелинейную регрессию. Байесовский подход, используя универсальную (неинформативную) априорную плотность вероятности по амплитуде экспериментального шума. Разные подходы к оценке погрешностей – один и тот же результат. Усложнение линейной регрессии, в частности, регрессия при наличии погрешности переменных. Ортогональная регрессия (Деминга). Обобщение на случай нескольких функций – частный случай взвешенного полного метода наименьших квадратов.

Раздел 4. Задача минимизации при нелинейной регрессии (2 часа)

Сведение общей задачи регрессии к задаче минимизации (оптимизации). При этом минимизация может быть, как суммы квадратов, так и функций других видов (устойчивая регрессия). Минимизация квадратичной функции в случае линейной регрессии, градиент и Гесссиан. Приближение более сложной минимизируемой функции квадратичной – линеаризация модели. Наличие многих локальных минимумов в общем случае, локальная и глобальная минимизация. Общая структура итерационного метода локальной оптимизации: направление движения и величина шага. Проблемы с простейшим методом наискорейшего спуска. Классификация алгоритмов по использованию ими производной от целевой функции. Метод Ньютона и его модификации. Метод доверенной области. Квазиньютоновские методы – построение приближения к Гесссиану по ходу итераций. Метод Broyden–Fletcher–Goldfarb–Shanno. Метод сопряжённых градиентов, аналогия с решением систем линейных уравнений. Метод амёбы (Нельдера-Мида), применимость для негладких функций. Классификация методов глобальной оптимизации, метод мултистарта. Метод имитации отжига. Многоточечные методы, генетический алгоритм. Исследование всего пространства параметров, метод Direct. Алгоритмы, непосредственно использующую структуру минимизируемой функции в виде суммы квадратов. Метод Гаусса-Ньютона и его модификации. Метод Левенберга-Марквардта. Численное вычисление производных. Необходимость исследования целевой функции (зависимость

суммы квадратов отклонений от параметров) для конкретной задачи. Проверка применимости используемого алгоритма. Разделяемые параметры (частично-линейная модель). Псевдообратная матрица и производная от неё по параметру.

Раздел 5. Оценка погрешности определения параметров (2 часа)

Линейное приближение модели. Асимптотическая корректность линейного приближения. Оценка погрешностей на основе контуров правдоподобия. Одномерный пример. Сравнение линейного приближения и контуров правдоподобия. Байесовский подход. Неинформативный выбор априорного распределения плотности вероятности по параметрам пропорционально коэффициенту растяжения модельной функции. Инвариантность относительно замены переменных в пространстве параметров. Построение области наибольшей апостериорной вероятности. Сравнение байесовского подхода с контурами правдоподобия. Построение доверительных интервалов на параметры (один или совместный интервал на несколько параметров) по вычисленной плотности вероятности. Определение поверхности суммы квадратов как функции параметров. Использование информации о поверхности целевой функции, полученной в ходе минимизации. Метод Монте-Карло для оценки погрешностей параметров. Применимость линейного приближения. Кривизна модельной функции: неотъемлемая и обусловленная параметризацией. Формулы для вычисления кривизны. Критерии применимости линейного приближения на основе величины кривизны.

Раздел 6. Проверка изначальных предположений и модификация стандартной процедуры регрессии (2 часа)

Обобщённый метод наименьших квадратов. Разложение Холецкого положительно-определённой матрицы. Сведение обобщённого метода наименьших квадратов к стандартному. Проверка одинаковости погрешностей разных экспериментальных точек. Студентизированные погрешности. Стандартные веса: относительные ошибки или Пуассоновские. Определение выпадающих точек. Критерии Шовене и Граббса. Проверка нормальности распределения погрешностей. Тест Шапиро-Вилка. Использование других (ненормальных) распределений экспериментальных погрешностей. Устойчивая регрессия. Проверка независимости погрешностей разных точек между собой. Критерий серий (Вальда-Вольфовица). Автокорреляционная функция и доверительные интервалы на неё. Критерий Дурбина-Ватсона. Примеры характеристики микрочастиц и лимфоцитов крови человека по индикатрисам светорассеяния. Регрессия при зависимых погрешностях. Модели автокорреляционной функции: авторегрессионный процесс и скользящее среднее. Пример коррекции авторегрессии. Эффективное число степеней свободы для зависимых погрешностей. Итерационная оценка ковариационной матрицы погрешностей, используя повторные (или множественные) измерения. Пример характеристики бактерий *E. Coli* по индикатрисам светорассеяния. Общая адекватность модели. Сравнение разных моделей, F-тест. Учёт повторных измерений. Количественная оценка адекватности подгонки с использованием повторных измерений. Одновременная регрессия нескольких наборов данных при одинаковых значениях части параметров.

Раздел 7. Решение обратной задачи с предварительным обучением (4 часа)

Общие замечания. Обратная задача как обращение конечномерного отображения. Целесообразность исследования всего отображения при необходимости много раз решать обратную задачу (регрессию). Предварительно насчитанная таблица значений целевой функции. Интерполяция ближайших соседей. Использование расстояния (суммы квадратов) до всех элементов таблицы для оценки погрешностей значений параметров. Вычисление любых интегралов от плотности вероятности методом Монте-Карло. Уточнение минимума (значений параметров) с помощью локальной оптимизации. Дополнительные возможности исследования предварительно-насчитанной таблицы. Кластеризация для ускорения нахождения ближайшего элемента из таблицы. Адаптивная дискретизация для исключения больших ошибок при решении обратной задачи с помощью таблицы. Аналитическое обращение, пример линейной регрессии. Автоматическое обучение, т.е. подстройка свободных параметров алгоритма для наилучших результатов на обучающей выборке. Нейронные сети. Типы функций отклика. Многослойные нейронные сети прямого распространения. Рекуррентные сети,

комитет машин. Подбор весов – задача минимизации. Алгоритм обратного распространения ошибок для сетей без циклов. Общие свойства нейронных сетей. Пример – характеристика шаров по измеренным индикатрисам.

Раздел 8. Регуляризация (2 часа)

Корректность обратной задачи по Адамару. Частный случай для линейного оператора. Фундаментальные подпространства линейного оператора: образ и ядро. Сингулярное разложение, его свойства. Построение псевдо-обратной матрицы. Влияние сингулярных значений на увеличение ошибок при решении обратной задачи. Бесконечномерные линейные операторы, дискретизация по базису. Непрерывность обратного оператора. Компактность оператора. Связь компактности бесконечномерного оператора с неограниченностью обратного оператора. Пример – интегральные уравнения Фредгольма 1-го и 2-го рода. Регуляризация Тихонова, условие Морозова. Выбор матрицы регуляризации. Различные дискретные приближения для первой и второй производной. Объединение нескольких матриц регуляризации, используя разложение Холецкого. Вывод регуляризации на основе Байесовского подхода. Связь между параметром регуляризации и погрешностью экспериментальных данных. Использование корреляций, например, экспоненциальных. Обобщенное сингулярное разложение, сведение к стандартному сингулярному разложению в случае квадратной матрицы регуляризации. Представление регуляризованного решения в виде суммы по сингулярным значениям. Фильтрующие множители – общее представление для разных типов регуляризации. Итерационная регуляризация Тихонова. Вектор невязки и ограничивающий вектор, зависимость нормы обоих этих векторов от уровня экспериментального шума. L-кривая. Методы выбора параметра регуляризации. Принцип невязки Морозова и принцип обобщенной невязки. Методы, основанные на L-кривой и кривой нормы невязки. Оценка максимального правдоподобия.

Раздел 9. Основы томографии (4 часа)

Виды томографии. Магнитно-резонансная томография – обратная задача сводится к нахождению обратного преобразования Фурье. Рентгеновская компьютерная томография. Просвечивающая томография. Другие примеры – электронная и оптическая томография, УЗИ. Эмиссионная томография, преобразование Радона. Однофотонная эмиссионная томография с использованием радионуклидов. Позитронно-эмиссионная (двухфотонная) томография. Преобразование Абеля. Аналитические формулы для обратного преобразования Абеля. Теорема о проекции и сечении. Цикл Фурье-Ханкеля-Абеля. Аналитические формулы для обратного преобразования Радона. Физические проблемы в томографии: пренебрежение рассеянием и непрозрачные включения. Технические проблемы: ограниченное количество исходных данных, большое время измерения, недостаточная оптическая плотность объекта, шумы и аппаратные искажения. Практическая реализация обратного преобразования Радона: дискретизация, фильтрация, интерполяция. Фильтры Ram-Lak и Шеппа-Логана. Различные конфигурации сбора данных: параллельные проекции, многодетекторная система, веерная проекция. Шаговое или плавное движение пациента (спиральная томография). Коническая проекция. Алгоритм ART (algebraic reconstruction technique) на основе разложения по базисным функциям. Решение системы линейных уравнений в ART с использованием регуляризации. Эквивалентность ART методу Качмаша решения разреженных систем линейных уравнений. Выбор релаксационного параметра. Мультипликативный ART. Дополнительная информация о томографии.

Раздел 10. Оптическая когерентная томография (4 часа)

Использование эха. Аналогия между радаром, УЗИ и оптической когерентной томографией. Интерферометр Майкельсона, влияние когерентности. Когерентность в оптике. Продольная и поперечная когерентностью. Временная (спектральная) когерентность. Простейшая схема оптической когерентной томографии. Принцип построения изображения по распределению коэффициента рассеяния назад. Двумерное сканирование камерой. Продольное разрешение, частный случай Гауссова спектра. Типичные источники излучения для оптической когерентной томографии: ксеноновая лампа, суперлюминисцентный диод, волоконный лазер на фотонных кристаллах. Функция рассея-

ния точки. Место оптической когерентной томографии среди других методов. Применения: медицина, материаловедение, оптическая запись. Пример медицинского датчика диаметром 1 мм. Классификация по используемой числовой апертуре. Оптическая когерентная микроскопия. Использование аппаратных средств из телекоммуникационной промышленности: оптоволокно и источники излучения в (ближнем) ИК-диапазоне. Деконволюция изображений и её применение в оптической когерентной томографии. Деконволюция через преобразование Фурье и итерационное улучшение. Временная и спектральная оптическая когерентная томография. Принципиальные схемы оптической когерентной томографии в спектральной области с использованием спектрометра или источника излучения с перестраиваемой длины волны.

Раздел 11. Обратная задача рассеяния (2 часа)

Общая постановка задачи рассеяния. Доступность измеряемых величин только вдали от объекта. Линейность рассеяния по падающему полю. Нелинейность по свойствам (форме и плотности) объекта. Упругое и неупругое рассеяние, флуоресценция и комбинационное рассеяние света. Скалярное и векторное волновое уравнение. Разные режимы в зависимости от соотношения размера рассеивателя и длины волны. Инвариантность относительно масштабирования. Обратная задача светорассеяния – определение распределения плотности (показателя преломления) во всём пространстве. Частные случаи: непрерывная функция, заданная форма объекта, однородный объект (функция плотности кусочно-постоянная), форма объекта задаётся несколькими неизвестными параметрами. Линеаризация оператора рассеяния. Интегральное уравнение на электрическое поле. Аналогия с преобразованием Фурье. Сфера Эвальда. Информативность схемы сбора экспериментальных данных в спектральном пространстве. Использование нескольких длин волн. Возможность восстановления фильтрованной функции плотности. Обратное преобразование Фурье и ряд Фурье. Альтернативное выражение через интеграл по направлениям падения и рассеяния излучения. Аналогия с (дифракционной) томографией. Возможность использования алгоритмов типа ART для неполных данных. Метод дискретных диполей для решения прямой задачи рассеяния. Прямое решение нелинейной обратной задачи через вектор поляризации. Объединение разных направлений падающего поля при вычислении поляризации внутри объекта. Проверка на синтетических данных. Проблемы и улучшения данного подхода, итерационный метод. Восстановление функции плотности по реальным экспериментальным данным, полученным на установке по измерению рассеяния микроволнового излучения. Гибридный итерационный метод для той же задачи (комбинация метода сопряжённых градиентов и обращение на основе контраста источника). Восстановление формы объекта методом линейных проб. Обращение линейного оператора дальнего поля с помощью регуляризации Тихонова. Метод факторизации. Спектральное разложение.

Отчёты по заданиям для самостоятельного решения (4 часа)

Отчёты о самостоятельном решении актуальной обратной задачи. Обычно, это является обработкой экспериментальных данных, полученных в ходе работы студента. При проверке основное внимание уделяется статистической достоверности полученных результатов и выводов.

Самостоятельная работа студентов (36 часов)

Перечень занятий на СРС	Объем, час
Выполнения задания для самостоятельного решения	12
Подготовка к опросу	6
Подготовка к экзамену	18

5. Перечень учебной литературы.

1. Алексеева, Екатерина Вячеславовна. Численные методы оптимизации: учебное пособие / Е.В. Алексеева, О.А. Кутненко, А.В. Плясунов ; Новосибирск: Новосибирский государственный университет, 2008, 127 с., ISBN 978-5-94356-765-0 (47 экз.)

2. Лихачев, Алексей Валерьевич. Алгоритмы томографической реконструкции: учебное пособие. / А. В. Лихачев; Новосибирск : Издательско-полиграфический центр НГУ, 2017.(5 экз.)
3. Борен, Крэг Ф. Поглощение и рассеяние света малыми частицами / К. Ф. Борен, Д. Р. Хафмен ; пер. с англ. З. И. Фейзулина и др.; с предисл. В. И. Татарского Москва : Мир, 1986.-660 с. (2 экз.)
4. Агранович З.С. Обратная задача теории рассеяния / З.С. Агранович, В.А. Марченко, Харьков : Изд-во Харьк. ун-та, 1960268 с. ; 23 см.(4 экз.)

6. Перечень учебно-методических материалов по самостоятельной работе обучающихся.

Самостоятельная работа студентов поддерживается следующим учебными материалами:

1. D.M. Bates and D.G. Watts, *Nonlinear regression analysis and its applications*, Wiley, New York (1988).
2. G.A.F. Seber and C.J. Wild, *Nonlinear regression*, Wiley–Interscience, Hoboken, N.J. (2003).
3. A. Doicu, T. Trautmann, and F. Schreier, *Numerical regularization for atmospheric inverse problems*, Springer, Heidelberg (2010).
4. R. Cierniak, *X-ray computed tomography in biomedical engineering*, Springer, London (2011).
5. B.E. Bouma and G.J. Tearney, Eds., *Handbook of optical coherence tomography*, Marcel Dekker, New York (2002).
6. D. Colton and R. Kress, *Inverse Acoustic and Electromagnetic Scattering Theory*, 3rd ed., Springer, New York (2013).
7. H.J. Motulsky and A. Christopoulos, *Fitting models to biological data using linear and nonlinear regression. A practical guide to curve fitting*, San Diego, GraphPad Software Inc. (2003).
8. F. Cakoni and D. Colton, *Qualitative Methods in Inverse Scattering Theory: an Introduction*, Springer, Berlin (2006).
9. G.H. Golub and V. Pereyra, “The differentiation of pseudo-inverses and nonlinear least squares problems whose variables separate,” *SIAM J. Num. Anal.* 10, 413–432 (1973).
10. A. Ruhe and P. Wedin, Algorithms for separable nonlinear least squares problems, *SIAM Rev.*, 22 (1980), pp. 318-337.
11. V.V. Berdnik and V.A. Loiko, “Retrieval of size and refractive index of spherical particles by multian-gle light scattering: neural network method application,” *Appl. Opt.* 48, 6178–6187 (2009).
12. A.J. Devaney “Inversion formula for inverse scattering within the Born approximation,” *Opt. Lett.* 7:111–112 (1982).
13. D.I. Strokotov, M.A. Yurkin, K.V. Gilev, D.R. van Bockstaele, A.G. Hoekstra, N.B. Rubtsov, and V.P. Maltsev, “Is there a difference between T- and B-lymphocyte morphology?,” *J. Biomed. Opt.* 14, 064036 (2009).
14. A.I. Konokhova, M.A. Yurkin, A.E. Moskalensky, A.V. Chernyshev, G.A. Tsvetovskaya, E.D. Chikova, and V.P. Maltsev, “Light-scattering flow cytometry for identification and characterization of blood microparticles,” *J. Biomed. Opt.* 17, 057006 (2012).
15. A.E. Moskalensky, M.A. Yurkin, A.I. Konokhova, D.I. Strokotov, V.M. Nekrasov, A.V. Chernyshev, G.A. Tsvetovskaya, E.D. Chikova, and V.P. Maltsev, “Accurate measurement of volume and shape of resting and activated blood platelets from light scattering,” *J. Biomed. Opt.* 18, 017001 (2013).
16. G.V. Dyatlov, K.V. Gilev, M.A. Yurkin, and V.P. Maltsev, “An optimization method with pre-computed starting points for solving the inverse Mie problem,” *Inv. Probl.* 28, 045012 (2012).
17. K.V. Gilev, M.A. Yurkin, G.V. Dyatlov, A.V. Chernyshev, and V.P. Maltsev, “An optimization method for solving the inverse Mie problem based on adaptive algorithm for construction of interpolating database,” *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer* 131, 202–214 (2013).
18. P.C. Chaumet, K. Belkebir, and A. Sentenac, “Three-dimensional subwavelength optical imaging using the coupled dipole method,” *Phys. Rev. B* 69, 245405 (2004).

19. P.C. Chaumet and K. Belkebir, "Three-dimensional reconstruction from real data using a conjugate gradient-coupled dipole method," *Inv. Probl.* 25, 024003 (2009).
20. E. Mudry, P.C. Chaumet, K. Belkebir, and A. Sentenac, "Electromagnetic wave imaging of three-dimensional targets using a hybrid iterative inversion method," *Inv. Probl.* 28, 065007 (2012).
21. Г.К. Вороновский, К.В. Махотило, С.Н. Петрашев и С.А. Сергеев. Генетические алгоритмы, искусственные нейронные сети и проблемы виртуальной реальности, Харьков, Основа (1997).

7. Перечень ресурсов информационно-телекоммуникационной сети «Интернет», необходимых для освоения дисциплины.

Для освоения дисциплины используются следующие ресурсы:

- электронная информационно-образовательная среда НГУ (ЭИОС);
- образовательные интернет-порталы;
- информационно-телекоммуникационная сеть Интернет.
- закрытая образовательная группа в социальной сети «VK».

7.1. Современные профессиональные базы данных

Не используются.

7.2. Информационные справочные системы

Не используются.

8. Перечень информационных технологий, используемых при осуществлении образовательного процесса по дисциплине.

Для обеспечения реализации дисциплины используется стандартный комплект программного обеспечения (ПО), включающий регулярно обновляемое лицензионное ПО Windows и MS Office.

Использование специализированного программного обеспечения для изучения дисциплины не требуется.

9. Материально-техническая база, необходимая для осуществления образовательного процесса по дисциплине.

Для реализации дисциплины «Обратные задачи: теория и практика» используются специальные помещения:

1. Учебные аудитории для проведения занятий лекционного типа, практических занятий, курсового проектирования (выполнения курсовых работ), групповых и индивидуальных консультаций, текущего контроля, промежуточной и итоговой аттестации.

2. Помещения для самостоятельной работы обучающихся.

Учебные аудитории укомплектованы специализированной мебелью и техническими средствами обучения, служащими для представления учебной информации большой аудитории.

Помещения для самостоятельной работы обучающихся оснащены компьютерной техникой с возможностью подключения к сети "Интернет" и обеспечением доступа в электронную информационно-образовательную среду НГУ.

Материально-техническое обеспечение образовательного процесса по дисциплине для обучающихся из числа лиц с ограниченными возможностями здоровья осуществляется согласно «Порядку организации и осуществления образовательной деятельности по образовательным программам для инвалидов и лиц с ограниченными возможностями здоровья в Новосибирском государственном университете».

10. Оценочные средства для проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине.

10.1 Порядок проведения текущего контроля и промежуточной аттестации по дисциплине

Текущий контроль

Текущий контроль в ходе семестра: опрос в начале каждой лекции по материалам предыдущей лекции.

Промежуточная аттестация

Освоение компетенций оценивается согласно шкале оценки уровня сформированности компетенции. Положительная оценка по дисциплине выставляется в том случае, если заявленная компетенция ПК-1 сформирована не ниже порогового уровня в части, относящейся к формированию способности использовать специализированные знания в области биохимии в профессиональной деятельности.

Окончательная оценка работы студента в течение семестра происходит во время экзамена. Экзамен проводится в конце семестра в устной форме по билетам. Билет содержит два вопроса, которые подбираются таким образом, чтобы проверить уровень сформированности компетенции ПК-1.

Вывод об уровне сформированности компетенций принимается преподавателем. Ответ оценивается от 0 до 5 баллов. Положительная оценка ставится, когда все компетенции освоены не ниже порогового уровня. Оценки «отлично», «хорошо», «удовлетворительно» означают успешное прохождение промежуточной аттестации.

Соответствие индикаторов и результатов освоения дисциплины

Таблица 10.1

Индикатор	Результат обучения по дисциплине	Оценочные средства
ПК 1.1 Применяет специализированные знания в области физики при решении конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Знать основные предположения и формулы, используемые для решения задач линейной и нелинейной регрессии, а именно для нахождения наилучших параметров модели и оценки погрешностей этих значений; общие методы решения интегральных уравнений, лежащие в основе вычислительной томографии и других практических приложений.	Опрос в начале каждой лекции, экзамен
ПК 1.2 Выбирает наиболее эффективные методы решения конкретных задач в области научных исследований в соответствии с профилем подготовки в зависимости от специфики объекта исследования.	Уметь на основе конкретного эксперимента или исходных экспериментальных данных правильно поставить задачу линейной или нелинейной регрессии и определить наиболее подходящий метод её решения, включая построение доверительных интервалов на модельные параметры; проверить исходные предположения о свойствах экспериментальных погрешностей и применимости методов оценки погрешностей на основе линеаризации модельной функции; при необходимости использовать более общие методы оценки погрешностей, основанные на контурах правдоподобия и Байесовском подходе, а также обобщённый метод наименьших квадратов; численно оптимизировать функции одной или нескольких переменных	Опрос в начале каждой лекции, экзамен

	<p>с использованием метода Левенберга-Марквардта; уметь использовать хотя бы один из распространённых математических программных пакетов для решения задач регрессии и численной оптимизации, вычисления квантилей стандартных распределений вероятности и построения простейших графиков. Также обучающийся должен уметь применять полученные знания для практических задач, в том числе в собственной научной работе.</p> <p>Владеть представлениями о корректности и некорректности обратных задач и их общей классификации; линейной и нелинейной регрессии, а также о правильной постановке этих задач в терминах математической статистики, включая статистическую обработку эксперимента; о стандартных предположениях, используемых в задачах регрессии и способах их проверки; о стандартных распределениях вероятности, включая распределения хи-квадрат, Стюдента и Фишера; о сведении обратной задачи к методу наименьших квадратов, владеть представлениями о прямом решении задачи минимизации в случае линейной регрессии и оценке погрешностей определяемых параметров; о различных усложнениях линейной регрессии, включая регрессию при наличии погрешности в переменных (регрессия Деминга); о классификации различных алгоритмов локальной и глобальной численной оптимизации, включая методы Нельдера-Мида, сопряжённых градиентов, (квази) Ньютоновские, Broyden-Fletcher-Goldfarb-Shanno, методы мультистрата, DiRect, многоточечные методы; об упрощении задачи минимизации в случае разделяемых параметров, иметь представление об использовании информации о поверхности целевой функции, полученной в ходе минимизации, или метода Монте-Карло для надёжного определения доверительных интервалов на модельные параметры; о вычислении матрицы ковариаций экспериментального шума по множественным измерениям; о методах определения выпадающих точек; о методах статистически-достоверного учёта повторных измерений и об одновременной регрессии нескольких наборов данных при одинаковых значениях части параметров; об использовании предварительно насчитанной таблицы значений целевой функции для</p>	
--	--	--

	<p>ускорения решения многих однотипных задач; об автоматических методах обучения, включая нейронные сети, иметь представление о регуляризации Тихонова, сингулярном разложении и обобщённом сингулярном разложении, и о методах выбора параметра регуляризации; об функциональных обратных задачах и общих методах решения линейных интегральных уравнений; о физических основах и основных видах томографии, а также об используемых в томографии численных методах и аналитических формулах обращения, включая обратные преобразования Абеля и Радона; об оптических принципах и методах построения изображения в оптической когерентной томографии, и её возможных применениях; об обратной задаче рассеяния и основных методах её решения, включая приближение Борна, восстановления поля внутри частицы, и качественные методы определения формы объекта (метод линейных проб).</p>	
--	--	--

10.2 Описание критериев и шкал оценивания индикаторов достижения результатов обучения по дисциплине «Обратные задачи: теория и практика».

Критерии оценивания результатов обучения	Планируемые результаты обучения (показатели достижения заданного уровня освоения компетенций)	Уровень освоения компетенции			
		Не сформирован (0 баллов)	Пороговый уровень (3 балла)	Базовый уровень (4 балла)	Продвинутый уровень (5 баллов)
1	2	3	4	5	6
Полнота знаний	ПК 1.1	Уровень знаний ниже минимальных требований. Имеют место грубые ошибки.	Демонстрирует общие знания базовых понятий по темам/разделам дисциплины. Допускается значительное количество негрубых ошибок.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Допускается несколько негрубых/несущественных ошибок. Не отвечает на дополнительные вопросы.	Уровень знаний соответствует программе подготовки по темам/разделам дисциплины. Свободно и аргументированно отвечает на дополнительные вопросы.
Наличие умений	ПК 1.2	Отсутствие минимальных умений. Не умеет решать стандартные задачи. Имеют место грубые ошибки.	Продемонстрированы частично основные умения. Решены типовые задачи. Допущены негрубые ошибки.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания с негрубыми ошибками или с недочетами.	Продемонстрированы все основные умения. Решены все основные задания в полном объеме без недочетов и ошибок.

Наличие навыков (владение опытом)	ПК 1.2	Отсутствие владения материалом по темам/разделам дисциплины. Нет навыков в решении стандартных задач. Наличие грубых ошибок.	Имеется минимальный набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач с некоторыми недочетами.	Имеется базовый набор навыков при решении стандартных задач без ошибок и недочетов. Продемонстрированы знания по решению нестандартных задач.
-----------------------------------	--------	--	--	--	---

10.3 Типовые контрольные задания и материалы, необходимые для оценки результатов обучения

Задание для самостоятельного решения.

Студенту предлагается самостоятельное решение актуальной обратной задачи. Обычно это является обработкой экспериментальных данных, полученных в ходе работы студента. При проверке основное внимание уделяется статистической достоверности полученных результатов и выводов.

Образец вопросов для проведения устного опроса:

1. Задача регрессии при анализе экспериментальных данных. Компоненты регрессии.
2. Методы минимизации для задач нелинейной регрессии. Локальная и глобальная минимизация.
3. Байесовский подход для оценки погрешностей. Инвариантность относительно замены переменных в пространстве параметров.
4. Обобщённый метод наименьших квадратов. Сведение к стандартному.
5. Цикл Фурье-Ханкеля-Абеля. Аналитические формулы для обратного преобразования Радона.
6. Итерационный метод решения обратной задачи светорассеяния через поляризацию внутри частицы.

Перечень вопросов к экзамену.

1. Общая классификация обратных задач и сложности их решения. Определения основных терминов.
2. Корректность обратных задач по Адамару.
3. Задача регрессии при анализе экспериментальных данных. Компоненты регрессии.
4. Стандартные предположения о погрешностях экспериментальных данных.
5. Стандартные распределения вероятности. Квантили и доверительные интервалы.
6. Прямое решение задачи минимизации в линейной регрессии. Геометрический смысл метода наименьших квадратов.
7. Совместные доверительные интервалы (эллипсы) на несколько параметров.
8. Разные подходы к оценке погрешностей – один и тот же результат.
9. Ортогональная регрессия (Деминга).
10. Методы минимизации для задач нелинейной регрессии. Локальная и глобальная минимизация.
11. Метод Ньютона и его модификации.
12. Метод Гаусса-Ньютона и его модификации. Метод Левенберга-Марквардта.
13. Разделяемые параметры.
14. Псевдообратная матрица и производная от неё по параметру.
15. Линейное приближение модели в случае нелинейной регрессии.
16. Байесовский подход для оценки погрешностей. Инвариантность относительно замены переменных в пространстве параметров.
17. Метод Монте-Карло для оценки погрешностей параметров.
18. Кривизна модельной функции. Критерии применимости линейного приближения на основе величины кривизны.
19. Обобщённый метод наименьших квадратов. Сведение к стандартному.
20. Стьюдентизированные погрешности. Критерии Шовене и Граббса.

21. Проверка нормальности распределения погрешностей. Тест Шапиро-Вилка.
22. Критерий серий (Вальда-Вольфовица). Автокорреляционная функция.
23. Количественная оценка адекватности подгонки с использованием повторных измерений.
24. Обратная задача как обращение конечномерного отображения.
25. Интерполяция ближайших соседей по предварительно насчитанной таблице значений целевой функции.
26. Решение обратной задачи с предварительным автоматическим обучением. Нейронные сети.
27. Алгоритм обратного распространения ошибок для нейронных сетей без циклов.
28. Сингулярное разложение, его свойства. Построение псевдо-обратной матрицы.
29. Интегральные уравнения. Стандартные интегральные преобразования.
30. Регуляризация Тихонова, условие Морозова. Примеры матриц регуляризации.
31. Фильтрующие множители – общее представление для разных типов регуляризации. Итерационная регуляризации Тихонова.
32. Методы выбора параметра регуляризации.
33. Основы томографии. Схемы измерения.
34. Цикл Фурье-Ханкеля-Абея. Аналитические формулы для обратного преобразования Радона.
35. Практическая реализация обратного преобразования Радона. Алгоритм ART.
36. Оптическая когерентная томография. Схемы измерения и типичные источники излучения.
37. Сравнение временной и спектральной оптической когерентной томографии.
38. Метод деконволюции в оптической когерентной томографии с итерационным улучшением.
39. Обратная задача рассеяния. Общая классификация.
40. Линеаризация оператора рассеяния. Сфера Эвальда.
41. Итерационный метод решения обратной задачи светорассеяния через поляризацию внутри частицы.

Пример экзаменационного билета

1. Метод Гаусса-Ньютона и его модификации. Метод Левенберга-Марквардта.
2. Основы томографии. Схемы измерения.

Форма экзаменационного билета представлена на рисунке.

<p><i>МИНОБРНАУКИ РОССИИ</i></p> <p><i>Федеральное государственное автономное образовательное учреждение высшего образования</i></p> <p><i>«Новосибирский национальный исследовательский государственный университет»</i> <i>(Новосибирский государственный университет, НГУ)</i></p> <p><i>Физический факультет</i></p>	
<p>ЭКЗАМЕНАЦИОННЫЙ БИЛЕТ № _____</p>	
1.	
2.	
Составитель _____	/Ф.И.О. преподавателя/
	(подпись)
« _____ »	20 _____ г.

**Лист актуализации рабочей программы
по дисциплине «Обратные задачи: теория и практика»
по направлению подготовки 03.04.02 Физика
Профиль «Общая и фундаментальная физика»**

№	Характеристика внесенных изменений (с указанием пунктов документа)	Дата и № протокола Учёного совета ФФ НГУ	Подпись ответственного