

Регуляризующие алгоритмы на основе методов Ньютоновского типа и
нелинейных аналогов α -процессов

Алия Фиргатовна Скурыдина

01.01.07 — Вычислительная математика

Научный руководитель: д. ф.-м. н., вед. н. с. ИММ УрО РАН Е. Н. Акимова

2018

Актуальность темы. Теория некорректно поставленных задач и методы их решения относятся к важнейшим направлениям исследования современной вычислительной математики, что обусловлено потребностями различных областей естествознания, техники и медицины, где эти проблемы возникают в форме обратных задач.

Основы теории некорректно поставленных задач были заложены в 50–60 годы прошлого века в работах выдающихся российских математиков А. Н. Тихонова, В. К. Иванова, М. М. Лаврентьева и дальнейшее ее развитие было продолжено в работах их учеников и последователей. В этих работах исследования относились, главным образом, к линейным уравнениям, но и для нелинейных задач были сформулированы базовые принципы регуляризации.

В дальнейшем получили развитие устойчивые (регулярные) методы решения нелинейных некорректных задач на основе принципа итеративной регуляризации и иных подходах в работах А. Б. Бакушинского, Б. Т. Поляка, А. В. Гончарского, М. Ю. Кокурина, В. В. Васина, В. Г. Романова, С. И. Кабанихина, Ф. П. Васильева, В. А. Морозова, А. Г. Яголы, А. С. Леонова, А. Л. Агеева, В. П. Тананы, В. И. Максимова, А. И. Короткого, А. Б. Смирновой, A. Neubauer, V. Kaltenbacher, H. W. Engl, M. Hanke, C. Boeckmann.

Структурные задачи гравиметрии и магнитометрии — важный класс нелинейных некорректных задач. Если исходные данные о геофизических полях измеряются на большой площади, то это приводит к необходимости решать системы нелинейных уравнений большой размерности с использованием параллельных вычислений. Для их решения широко использовались регуляризованные методы Ньютона, Левенберга –Марквардта и процессы градиентного типа (А. Б. Бакушинский, М. Ю. Кокурин, В. В. Васин, Е. Н. Акимова, Л. Ю. Тимерханова, Г. Я. Пересторонина, В. Е. Мислов), а также экономичный метод локальных поправок (П. С. Мартышко, И. Л. Пруткин).

Целью диссертационной работы является построение новых устойчивых и экономичных по времени и памяти алгоритмов на основе методов ньютоновского типа и α -процессов для решения нелинейных операторных уравнений и исследование их сходимости; реализация параллельных алгоритмов в виде комплекса программ на многоядерных и графических процессорах (видеокартах) для вычислений на сетках большого размера.

Глава 1. Решение уравнений с монотонным оператором

В первой главе рассматриваются методы решения некорректных задач с монотонным оператором. Дано обоснование двухэтапного метода на основе регуляризованного метода Ньютона. Построены методы минимальной ошибки, наискорейшего спуска и минимальных невязок решения нелинейных уравнений и доказывается их сходимость к регуляризованному решению. Приводится оценка погрешности регуляризованного решения.

1.1. Регуляризованный метод Ньютона

Рассматривается нелинейное уравнение I рода с неизвестной функцией u

$$A(u) = f. \quad (1.1)$$

Регуляризация по схеме Лаврентьева

$$A(u) + \alpha(u - u^0) - f_\delta = 0, \quad (1.2)$$

где $\alpha > 0$ — параметр регуляризации, $\|f - f_\delta\| \leq \delta$, u_0 — приближение к u_α ;

Итерационный процесс *:

$$u^{k+1} = u^k - \gamma(A'(u^k) + \bar{\alpha}I)^{-1}(A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_\delta) \equiv T(u^k), \quad (1.3)$$

где $A'(u^k)$ — производная по Фреше оператора A уравнения (1.1), γ — демпфирующий множитель, $\bar{\alpha} \geq \alpha > 0$ — параметры регуляризации, T — оператор шага.

* А. Б. Бакушинский. Регуляризирующий алгоритм на основе метода Ньютона – Канторовича ... // ЖВМиМФ, 16:6 (1976). С. 1397–1604.

** В. В. Васин, Е. Н. Акимова, А. Ф. Минахметова. Итерационные алгоритмы ньютоновского типа и их приложения к обратной задаче гравиметрии // Вестник ЮУрГУ, 6:3 (2013). С. 26–37.

1.1. Оценка скорости сходимости РМН с монотонным оператором

Теорема 1.1.

Пусть A — монотонный оператор, для которого выполнены условия

$$\|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|,$$

$$\|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|, \quad \forall u, v \in S_r(u^0),$$

известна оценка для нормы производной в точке u^0 , т.е.

$$\|A'(u^0)\| \leq N_0 \leq N_1, \quad \|u^0 - u_\alpha\| \leq r \quad u^0 \in S_r(u_\alpha),$$

$$r \leq \alpha/N_2, \quad 0 < \alpha \leq \bar{\alpha}.$$

Тогда для процесса (1.3) с $\gamma = 1$ имеет место линейная скорость сходимости метода при аппроксимации единственного решения u_α регуляризованного уравнения (1.2)

$$\|u^k - u_\alpha\| \leq q^k r, \quad q = \left(1 - \frac{\alpha}{2\bar{\alpha}}\right).$$

В. В. Васин, А. Ф. Скурыдина. Двухэтапный метод построения регуляризующих алгоритмов для нелинейных некорректных задач // Труды ИММ УрО РАН Т.23 В.1 (2017), С. 57–74.

Определение

Усиленное свойство Фейера (*) для оператора T означает, что для некоторого $\nu > 0$ выполнено соотношение

$$\|T(u) - z\|^2 \leq \|u - z\|^2 - \nu \|u - T(u)\|^2, \quad (1.4)$$

где $z \in \text{Fix}(T)$ —множество неподвижных точек оператора T . Это влечет для итерационных точек u^k , порождаемых процессом $u^{k+1} = T(u^k)$, выполнение неравенства

$$\|u^{k+1} - z\|^2 \leq \|u^k - z\|^2 - \nu \|u^k - u^{k+1}\|^2. \quad (1.5)$$

Применимость фейеровских операторов:

- построение гибридных методов;
- учет априорных ограничений на решение в виде систем неравенств;

* В. В. Васин, И. И. Еремин. Операторы и итерационные процессы фейеровского типа. Теория и приложения. Екатеринбург: УрО РАН, 2005.

Пусть для монотонного оператора A выполнены условия

$$\|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|, \|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|, \quad \forall u, v \in S_r(u^0), \quad (1.6)$$

$$\|A'(u^0)\| \leq N_0 \leq N_1, \quad \|u^0 - u_\alpha\| \leq r, \quad (1.7)$$

$A'(u^0)$ — самосопряженный оператор,

$$\|u_\alpha - u^0\| \leq r \quad 0 \leq \alpha \leq \bar{\alpha}, \quad \bar{\alpha} \geq 4N_1, \quad r \leq \alpha/8N_2. \quad (1.8)$$

Теорема 1.2.

Пусть выполнены условия (1.6)–(1.8). Тогда при $\gamma < \frac{\alpha\bar{\alpha}}{2(N_1+\alpha)^2}$ оператор шага T процесса (1.3) при

$$\nu = \frac{\alpha\bar{\alpha}}{2\gamma(N_1+\alpha)^2} - 1$$

удовлетворяет неравенству (1.4), для итераций u^k справедливо соотношение (1.5) и имеет место сходимость

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u^k - u_\alpha\| = 0.$$

Если параметр γ принимает значение $\gamma_{opt} = \frac{\alpha\bar{\alpha}}{4(N_1+\alpha)^2}$, то справедлива оценка

$$\|u^k - u_\alpha\| \leq q^k r, \quad q = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{16(N_1+\alpha)^2}}.$$

1.2. Нелинейные аналоги альфа-процессов (new)

Впервые α -процессы для линейного самосопряженного положительно определенного оператора были предложены М. А. Красносельским и др. (1969). Для нелинейного оператора итерационный процесс запишем в виде:

$$u^{k+1} = u^k - \beta_k(A(u^k) + \alpha(u - u^0) - f_\delta).$$

Используя разложение Тейлора в точке u^k исходного уравнения, переходим к линейному уравнению в фиксированной итерационной точке, получаем последовательность линейных задач

$$A'(u^k)u^k = F^k, \quad F^k = f_\delta + A'(u^k)u^k - A(u^k)$$

и параметр β_k находим из условия минимума соответствующих функционалов

М. А. Красносельский, Г. М. Забрейко, П. П. Забрейко и др. Приближенное решение операторных уравнений // М.: Наука, 1969.

- регуляризованный метод минимальной ошибки (ММО):

$$\min_{\beta} \|u^k - \beta(A(u^k) - f_{\delta}) - z\|^2, \quad u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\langle B^{-1}(u^k)S_{\alpha}(u^k), S_{\alpha}(u^k) \rangle}{\|S_{\alpha}(u^k)\|^2} S_{\alpha}(u^k),$$

- регуляризованный метод наискорейшего спуска (МНС):

$$\min_{\beta} \{ \langle A'(u^k)u^{k+1}, u^{k+1} \rangle - 2 \langle u^{k+1}, F(u^k) \rangle \},$$

$$u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\langle S_{\alpha}(u^k), S_{\alpha}(u^k) \rangle}{\langle B(u^k)S_{\alpha}(u^k), S_{\alpha}(u^k) \rangle} (A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_{\delta})$$

- регуляризованный метод минимальных невязок (ММН):

$$\min_{\beta} \{ \|A'(u^k)(u^k - \beta(A(u^k) - f_{\delta}) - F(u^k))\|^2 \},$$

$$u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\langle B(u^k)S_{\alpha}(u^k), S_{\alpha}(u^k) \rangle}{\|B(u^k)S_{\alpha}(u^k)\|^2} (A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_{\delta}),$$

где $B(u^k) = A'(u^k) + \bar{\alpha}I$, $S_{\alpha}(u^k) = A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_{\delta}$,

γ — демпфирующий множитель.

Модифицированные варианты на основе α -процессов (new)

Рассматривается случай модификации итерационных методов, когда производная оператора задачи вычисляется в фиксированной точке:

- ММО:

$$u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\langle (A'(u^0) + \bar{\alpha}I)^{-1} S_\alpha(u^k), S_\alpha(u^k) \rangle}{\|S_\alpha(u^k)\|^2} S_\alpha(u^k),$$

- МНС:

$$u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\|S_\alpha(u^k)\|^2}{\langle (A'(u^0)) S_\alpha(u^k), S_\alpha(u^k) \rangle} S_\alpha(u^k),$$

- ММН:

$$u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\langle (A'(u^0)) S_\alpha(u^k), S_\alpha(u^k) \rangle}{\|(A'(u^0)) S_\alpha(u^k)\|^2} S_\alpha(u^k).$$

Данный прием является более экономичным с точки зрения численной реализации, так как позволяет снизить вычислительные затраты по времени.

1.2. Оценка скорости сходимости нелинейных α -процессов

Пусть для монотонного оператора A выполнены условия

$$\|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|, \forall u, v \in S_r(u^0), \|A'(u^0)\| \leq N_0 \leq N_1,$$

$$\|u^0 - u_\alpha\| \leq r \quad (*)$$

и $A'(u^0)$ — самосопряженный оператор,

для ММО $\alpha \leq \bar{\alpha}$, $r \leq \alpha/8N_2$, $\bar{\alpha} \geq N_0$.

Теорема 1.3.

Пусть выполнены условия (*). Тогда при

$$\gamma_\varkappa < \frac{2}{\mu_\varkappa} \quad (\varkappa = -1, 0, 1)$$

для последовательности $\{u^k\}$, порождаемой α -процессом при соответствующем \varkappa , имеет место сходимость $\lim_{k \rightarrow \infty} \|u^k - u_\alpha\| = 0$, а при $\gamma_\varkappa^{opt} = \frac{1}{\mu_\varkappa}$ справедлива оценка $\|u^k - u_\alpha\| \leq q_\varkappa^k r$, где

$$q_{-1} = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{16(N_1 + \alpha)^2}}, \quad q_0 = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2 \bar{\alpha}^2}{(N_1 + \alpha)^2 (N_1 + \bar{\alpha})^2}},$$

$$q_1 = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2 \bar{\alpha}^4}{(N_1 + \bar{\alpha})^4}}.$$

1.3. Оценка погрешности двухэтапного метода для монотонного оператора

В работе* приводится оптимальная по порядку оценка погрешности двухэтапного метода с монотонным оператором:

$$\|u_{\alpha(\delta)}^{\delta,k} - \hat{u}\| \leq 4\sqrt{k_0\delta},$$

где приближение $u_{\alpha(\delta)}^{\delta,k}$ зависит от δ , \hat{u} — решение исходного уравнения, $k_0 = (1 + N_2\|v\|/2)\|v\|$ ($u^0 - \hat{u} = A'(\hat{u})v$ — истокообразная представимость решения**).

* В. В. Васин, А. Ф. Скурыдина. Двухэтапный метод построения регуляризующих алгоритмов для нелинейных некорректных задач // Труды ИММ УрО РАН Т.23 В.1 (2017), С. 57–74.

** U. Tautenhahn. On the method of Lavrentiev regularization for nonlinear ill-posed problems // Inverse Problem. 2002. Vol. 91, №1. P. 191–207.

1.3. Пример

Рассматривается нелинейное операторное уравнение

$$F(u) = y, \quad [F(u)](t) = c_0 e^{\int_0^t u(\tau) d\tau},$$

F действует из $L^2[0, 1]$ в $L^2[0, 1]$.

Правая часть задана с шумом

$$y^\delta(t) = y(t) e^{\frac{\delta}{5} \sin(t/\delta^2)},$$

При $y^\delta \rightarrow y$ в $L^2[0, 1]$, $\|u - u^\delta\| = \|\frac{1}{\delta} \cos(t/\delta^2)\| \rightarrow \infty$ при $\delta \rightarrow 0$.

Данные: $\delta = 0.1$, $\|y - y^\delta\| = 0.07 < \delta$. Точное решение — функция $z(t) = t^2$.

Начальное приближение $u^0(t) = 0$, $\gamma = 1$, $\bar{\alpha} = 1$, $\alpha = 10^{-3}$, критерий останова

$\frac{\|u^k - z\|}{\|z\|} \leq \varepsilon = 0.25$, где u^k — приближение на k -й итерации.

Результаты: относительные погрешности методов достигают ε за 8–9 итераций.

Tautenhahn U. On the method of Lavrentiev regularization for nonlinear ill-posed problems // Inverse Problems. 2002. pp. 191–207.

Глава 2. Решение уравнений с немонотонным оператором

Во второй главе обоснована сходимость итераций РМН, ММО, МНС, ММН к регуляризованному решению в конечномерном случае без требования монотонности оператора A исходного уравнения.

Приведены результаты расчетов.

2.1. Скорость сходимости РМН с немонотонным оператором

Для $\lambda_i \neq \lambda_j, i \neq j, A'(u) + \bar{\alpha}I = S(u)\Lambda(u)S^{-1}(u), \mu(S(u)) = \|S(u)\| \cdot \|S^{-1}(u)\|,$

Имеется оценка:

$$\|(A'(u) + \bar{\alpha}I)^{-1}\| \leq \frac{\mu(S(u))}{\bar{\alpha} + \lambda_{\min}} \leq \frac{\mu(S(u))}{\bar{\alpha}}, \quad (*)$$

Теорема 2.1.

Пусть выполнены условия (*), а также:

$$\sup\{\mu(S(u)) : u \in S_r(u_\alpha)\} \leq \bar{S} < \infty,$$

$$\|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|, \quad \|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|, \quad \forall u, v \in S_r(u^0),$$

$$\|A'(u^0)\| \leq N_0 \leq N_1, \quad \|u^0 - u_\alpha\| \leq r,$$

$A'(u^0)$ — симметричная матрица, $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}, \bar{\alpha} \geq 4N_0, r \leq \alpha/8N_2\bar{S}$.

Тогда для метода (1.3) справедливо заключение теоремы (1.3), где

$$\gamma < \frac{\alpha\bar{\alpha}}{2(N_1 + \alpha)^2\bar{S}^2}, \quad \gamma_{opt} = \frac{\alpha\bar{\alpha}}{4(N_1 + \alpha)^2\bar{S}^2},$$

$$\|u^k - u_\alpha\| \leq q^k r, \quad q = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{16(N_1 + \alpha)^2\bar{S}^2}}.$$

2.2. Скорость сходимости α -процессов с немонотонным оператором

Теорема 2.2.

Пусть выполнены условия (*), для ММО: $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $r \leq \alpha/6\bar{S}N_2$, $\bar{\alpha} \geq N_0$,

МНС: $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $r \leq \alpha/3N_2$, ММН: $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $r \leq \alpha/6N_2$.

Тогда при $\gamma_{\varkappa} < 2/\mu_{\varkappa}$, $\varkappa = -1, 0, 1$, с соответствующими μ_k , последовательности u^k , порождаемые процессом (1.6) при $\varkappa = -1, 0, 1$, сходятся к u_{α} , т.е.,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|u^k - u_{\alpha}\| = 0,$$

а при $\gamma_{\varkappa}^{opt} = \frac{1}{\mu_{\varkappa}}$ справедлива оценка

$$\|u^{k+1} - u_{\alpha}\| \leq q_{\varkappa}^k r,$$

где

$$q_{-1} = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2}{64\bar{S}^2(N_1 + \alpha)^2}}, \quad q_0 = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2\bar{\alpha}^2}{36(N_1 + \alpha)^2(N_1 + \bar{\alpha})^2}},$$
$$q_1 = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2\bar{\alpha}^6}{36(N_1 + \alpha)^2(N_1 + \bar{\alpha})^6}}.$$

2.2. Сходимость модифицированных α -процессов с немонотонным оператором

Пусть выполнены условия:

$$\begin{aligned} \|A(u) - A(v)\| &\leq N_1 \|u - v\|, \quad \|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|, \quad \forall u, v \in S_r(u^0), \\ \|A'(u^0)\| &\leq N_0 \leq N_1, \quad \|u^0 - u_\alpha\| \leq r, \quad A'(u^0) - \text{симметричная матрица,} \\ &\text{спектр которого состоит из неотрицательных различных собственных} \\ &\text{значений, } 0 \leq \alpha \leq \bar{\alpha}, \quad \bar{\alpha} \geq N_0, \quad r = \alpha/6N_2. \quad (**) \end{aligned}$$

Теорема 2.3

Пусть выполнены условия (**). Тогда при

$$\gamma_\varkappa < \frac{2}{\mu_\varkappa} \quad (\varkappa = -1, 0, 1)$$

для последовательности $\{u^k\}$, порождаемой модифицированным α -процессом при соответствующем \varkappa , имеет место сходимость $\lim_{k \rightarrow \infty} \|u^k - u_\alpha\| = 0$, а при $\gamma_\varkappa^{opt} = \frac{1}{\mu_\varkappa}$ справедлива оценка

$$\|u^k - u_\alpha\| \leq q_\varkappa^k r,$$

где

$$q_\varkappa = \sqrt{1 - \frac{9\alpha^2}{64(N_1 + \alpha)^2}}$$

Замечание 2.1

Предложенный подход к получению оценок скорости сходимости итерационных процессов полностью переносится на случай, когда спектр матрицы $A'(u^k)$, состоящий из различных вещественных значений, содержит набор малых по абсолютной величине отрицательных собственных значений. Пусть λ_1 — наименьшее отрицательное собственное значение с модулем $|\lambda_1|$ и $\bar{\alpha} - |\lambda_1| = \bar{\alpha}_1 < \alpha^*$. Тогда оценка

$$\|(A'(u) + \bar{\alpha}I)^{-1}\| \leq \frac{\mu(S(u))}{\bar{\alpha} + \lambda_{min}} \leq \frac{\mu(S(u))}{\bar{\alpha}},$$

трансформируется в неравенство

$$\|(A'(u^k) + \bar{\alpha}I)^{-1}\| \leq \frac{\mu(S(u^k))}{\bar{\alpha}^*} \leq \frac{\bar{S}}{\bar{\alpha}^*}$$

Все теоремы остаются справедливыми при замене $\bar{\alpha}$ на $\bar{\alpha}^*$.

2.3. Оценка невязки двухэтапного метода с немонотонным оператором

В конечномерном случае для оператора $A'(u)$ с положительным спектром можно установить оценку для невязки — основной характеристики точности метода при решении задачи с реальными данными.

$$\|A(u_{\alpha(\delta)}^{\delta,k}) - f_\delta\| \leq \|A(u_{\alpha(\delta)}^{\delta,k}) - A(u_{\alpha(\delta)}^\delta)\| + \|A(u_{\alpha(\delta)}^\delta) - f(\delta)\| \leq N_1 r q^k(\delta) + \alpha(\delta)m,$$

где $u_{\alpha(\delta)}^\delta$ — регуляризованное решение, для $\alpha(\delta)$ ограничена величина $\|u_{\alpha(\delta)}^\delta - u^0\| \leq m < \infty$.

Приравнивая слагаемые в правой части, получаем правило выбора числа итерации $k(\delta) = \lfloor \ln(m\delta^p/N) / \ln q(\delta) \rfloor$, при котором справедлива оценка для невязки двухэтапного метода

$$\|A(u_{\alpha(\delta),k}^\delta) - f_\delta\| \leq 2m\delta^p, \quad \alpha(\delta) = \delta^p.$$

В. В. Васин, А. Ф. Скурыдина. Двухэтапный метод построения регуляризующих алгоритмов для нелинейных некорректных задач // Труды ИММ УрО РАН Т.23 В.1 (2017), С. 57–74.

2.4. Решение модельной задачи магнитометрии

$$[A(u)](x, y) = \frac{\mu_0}{4\pi} \Delta J \left\{ \iint_D \frac{H}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + H^2]^{3/2}} dx' dy' - \iint_D \frac{u(x', y')}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + u^2(x', y')]^{3/2}} dx' dy' \right\} = B_z(x, y, 0),$$

где $\mu_0/4\pi = 10^{-7}$ Гн/м — магнитная постоянная, ΔJ — скачок z -компоненты вектора намагниченности, $z = H$ — асимптотическая плоскость, $B_z(x, y, 0)$ — функция аномального поля, $z = u(x, y)$ — искомая функция

Точное решение уравнения магнитометрии задается формулой*

$$\hat{u}(x, y) = 5 - 2e^{-(x/10-3.5)^6 - (y/10-2.5)^6} - 3^{-(x/10-5.5)^6 - (y/10-4.5)^6} \quad (\text{км}),$$

Результаты. Число обусловленности $\mu(A'_n(u_n^k)) \approx 1.8 \cdot 10^7$, спектр неотрицательный, состоящий из различных собственных значений, $\bar{\alpha} = 10^{-2}$, $\alpha = 10^{-4}$, $\gamma = 1$, относительная погрешность $\varepsilon < 10^{-2}$. Итерационные методы сходятся за 4–5 итераций, у модифицированных меньше время счета.

* Е. Н. Акимова, В. Е. Мислов, А. Ф. Скурыдина. Параллельные алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии ... // Вестник УГАТУ, Т.18, №2 (2014). С. 208–217.

Глава 3. Покомпонентные методы ньютоновского типа решения обратных структурных задач гравиметрии и магнитометрии

В третьей главе предложены покомпонентные методы типа Ньютона и типа Левенберга – Марквардта, а также вычислительная оптимизация методов типа Ньютона.

Параллельные алгоритмы реализованы в виде комплекса программ на многоядерных и графических процессорах (видеокартах) для вычислений на сетках большого размера. Приводятся результаты расчетов модельных задач на многоядерных процессорах и графических ускорителях.

Постановка обратной задачи гравиметрии

восстановления поверхности раздела сред

Рассмотрим уравнение гравиметрии в декартовой системе координат с осью z , направленной вниз

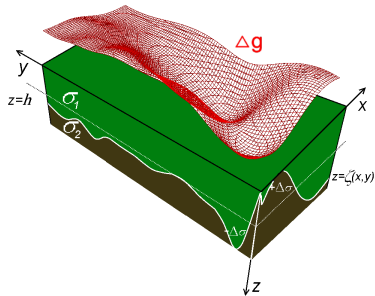
$$A(u) = f\Delta\sigma \left\{ \iint_D \frac{1}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + H^2]^{1/2}} dx' dy' - \iint_D \frac{1}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + u^2(x', y')]^{1/2}} dx' dy' \right\} = \Delta g(x, y, 0),$$

где f — гравитационная постоянная,
равная $6.67 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{г} \cdot \text{с}^2$,

$\Delta\sigma = \sigma_2 - \sigma_1$ — скачок плотности на
поверхности раздела сред $u(x, y)$,

$\Delta g(x, y, 0)$ — аномальное
гравитационное поле,

$$D = \{c \leq x \leq d, a \leq y \leq b\}$$



3.1. Покомпонентный метод типа Ньютона (new)

В уравнении гравиметрии

$$A(u) = f,$$

обозначим $A(u) = \int_a^b \int_c^d K(x, y, x', y', u^k(x, y)) dx dy$ — интегральный оператор.

Итерации в методе Ньютона строятся по схеме

$$A'(u^k)(\Delta u^k) = -(A(u^k) - f),$$

где $\Delta u^k = u^{k+1} - u^k$. Для задачи гравиметрии

$$f \Delta \sigma \int_a^b \int_c^d K'_u(x, y, x', y', u^k(x, y)) \Delta u^k(x, y) dx dy = A(u(x', y')) - f(x', y').$$

Заменим $\Delta u^k(x, y) = \Delta u^k(x', y') = \text{const}$ относительно переменных

интегрирования, т.к. изменение в правой части в основном зависит от значений $\Delta u^k(x', y')$, и вынесем за знак интеграла $\Delta u^k(x', y')$

$$f \Delta \sigma (\Delta u^k(x', y')) \int_a^b \int_c^d K'_u(x, y, x', y', u^k(x, y)) dx dy \approx A(u(x', y')) - f(x', y').$$

$$f \Delta \sigma \Delta u_{m,l}^k \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \Delta x \Delta y K'_u(x_j, y_i, x_k, y_l, u_{m,l}) \approx \{A[u^k]\}_{m,l} - f_{m,l}.$$

Регуляризованный метод Ньютона:

$$u^{k+1} = u^k - \gamma(A'(u^k) + \bar{\alpha}I)^{-1}(A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_\delta).$$

Покомпонентный метод типа Ньютона имеет вид:

$$u^{k+1}(x', y') = u^k(x', y') - \gamma \frac{1}{\Psi(x', y')} ([A(u^k)](x', y') - f(x', y')),$$

где

$$\Psi(x', y') = f \Delta \sigma \int_a^b \int_c^d K'_u(x, y, x', y', u^k(x, y)) dx dy.$$

Регуляризованный покомпонентный метод типа Ньютона имеет вид:

$$u^{k+1}(x', y') = u^k(x', y') - \gamma \frac{1}{\Psi(x', y') + \bar{\alpha}} ([A(u^k)](x', y') + \\ + \alpha(u^k(x', y') - u^0(x', y')) - f_\delta(x', y')),$$

где $\alpha, \bar{\alpha}$ — положительные параметры регуляризации.

В дискретной записи

$$u_{m,l}^{k+1} = u_{m,l}^k - \frac{1}{\psi_{m,l}^k + \bar{\alpha}} ([A_n(u^k)]_{m,l} + \alpha(u^k - u^0) - f_{m,l}), \quad 1 \leq m \leq M, \quad 1 \leq l \leq N,$$

где

$$\psi_{m,l}^k = f \Delta \sigma \sum_{i=1}^M \sum_{j=1}^N \Delta x \Delta y \frac{u_{ij}}{[(x_k - x'_j)^2 + (y_l - y'_i)^2 + (u_{ij})^2]^{3/2}}.$$

Akimova E., Skurydina A. A componentwise Newton type method for solving the structural inverse gravity problem // EAGE Geoinformatics 2015

3.2. Вычислительная оптимизация метода Ньютона (new)

Производная оператора A в точке $u^0(x, y)$ определяется формулой:

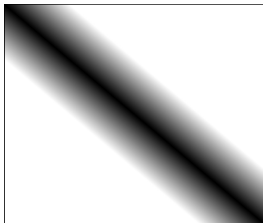
- в задаче гравиметрии

$$[A'(u^0)]h = \iint_D \frac{u^0(x', y')h(x', y')}{[(x - x')^2 + (y - y')^2 + (u^0(x', y'))^2]^{3/2}} dx' dy',$$

- в задаче магнитометрии

$$[A'(u^0)]h = \iint_D \frac{(x - x')^2 + (y - y')^2 - 2(u^0(x', y'))^2}{[(x - x')^2 + (y - y')^2 + (u^0(x', y'))^2]^{5/2}} h(x', y') dx' dy'.$$

Матрица $A'_n(u^0)$ имеет диагональное преобладание. При расчетах используется лента матрицы $A'_n(u^k)$.



Замечание 3.2.

В структурных обратных задачах грави- магнитометрии при решении методом Ньютона без существенной потери точности можно не учитывать значения элементов, отстоящих от диагонали далее, чем на β -ю часть размерности матрицы производной, то есть те значения a_{ij} , для которых $j \in \{i - h(\beta), ..i + h(\beta)\}$, где $h(\beta)$ — полуширина ленты матрицы, i, j — индекс элемента.

Akimova E., Miniakhmetova A., Martyshko M. Optimization and parallelization of Newton type methods for solving structural gravimetry and magnetometry inverse problems // EAGE Geoinformatics 2014

Постановка обратной задачи гравиметрии

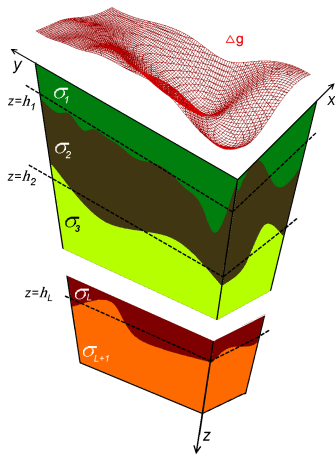
восстановления нескольких поверхностей раздела

Суммарное гравитационное поле получаем путем сложения гравитационных полей от каждой поверхности:

$$A(u) = \sum_{l=1}^L f \Delta \sigma_l \frac{1}{4\pi} \times \\ \times \iint_D \left\{ \frac{1}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + u_l^2(x,y)]^{1/2}} - \frac{1}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + H_l^2]^{1/2}} \right\} = \Delta g(x', y'),$$

где L — число границ раздела,

$f = 6.67 \cdot 10^{-8} \text{ см}^3/\text{г} \cdot \text{с}^2$, $\Delta \sigma_l = \sigma_l - \sigma_{l-1}$ — скачок плотности на l -й поверхности раздела
среди $u_l(x, y)$, $\Delta g(x, y, 0)$ — аномальное гравитационное поле.



3.3. Покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта(**new**)

Регуляризованный метод Левенберга – Марквардта

$$u^{k+1} = u^k - \gamma [A'(u^k)^T A'(u^k) + \alpha I]^{-1} \Lambda [A'(u^k)^T (A(u^k) - f_\delta)]$$

По аналогии с ПМН, имеем покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта:

$$u_l^{k+1} = u_l^k - \gamma \frac{1}{\varphi_l(x', y') + \bar{\alpha}} \Lambda [A'(u_l^k)^T (A(u^k) - f_\delta)],$$

где l — номер границы раздела, $l = 1, \dots, L$, Λ — диагональный весовой оператор,

$$\begin{aligned} \varphi_l(x', y') = & \left[f \Delta \sigma \int_c^d \int_a^b K'_u(x, y, x', y', u_l^k(x', y')) dy dx \right] \\ & \times \left[f \Delta \sigma \int_a^b \int_c^d K'_u(x, y, x', y', u_l^k(x, y)) dx dy \right]. \end{aligned}$$

где $K'_u(x', y', x, y, u_l^k(x', y'))$ — ядро интегрального оператора.

Skurydina A. F. Regularized Levenberg — Marquardt Type Method Applied to the Structural Inverse Gravity Problem ... // Bulletin of South Ural State University.

2017. V.6, N.3. pp. 5–15

Перепишем в дискретной форме

$$u_{l,i}^{k+1} = u_{l,i}^k - \gamma \frac{1}{\varphi_{l,i} + \bar{\alpha}} w_{l,i} \left[\{A'(u_l^k)^T (A(u^k) - f_\delta)\}_i \right],$$

где $w_{l,i}$ — i -й весовой множитель, зависящий от l -й границы раздела (Акимова, Мисилев 2015),

$$\begin{aligned} \varphi_{l,i} = & \left[f \Delta \sigma \sum_{k=1}^N \sum_{m=1}^M K'_u(x'_k, y'_m, \{x, y\}_i, u_{l,i}^k) \Delta x' \Delta y' \right] \\ & \times \left[f \Delta \sigma \sum_{k=1}^N \sum_{m=1}^M K'_u(x_k, y_m, \{x', y'\}_i, u_l^k(x_k, y_m)) \Delta x \Delta y \right]. \end{aligned}$$

Е. Н. Акимова, В. Е. Мисилев, А. Ф. Скурыдина, А. И. Третьяков.

Градиентные методы решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии на суперкомпьютере “Уран” // Вычислительные методы и программирование, 2015. Т. 16, 155–164.

3.4. Описание комплекса параллельных программ

- на основе предложенных методов разработаны параллельные алгоритмы для вычислений на многоядерных процессорах и графических ускорителях;
- используются инструменты: OpenMP, CUDA;
- библиотеки Intel MKL, Cublas;
- при больших размерах сеток вычисления производились «на лету»: необходимый элемент матрицы вычисляется в момент умножения его на элемент вектора.

Для оценки производительности параллельных алгоритмов используются показатели **ускорения и эффективности**

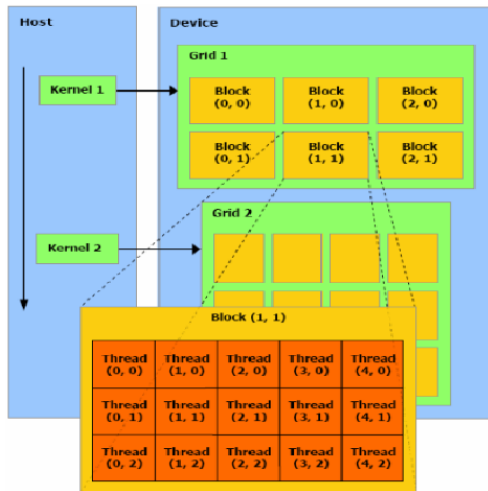
$$S_m = \frac{T_1}{T_m}, \quad E_m = \frac{S_m}{m},$$

где T_1 — время выполнения последовательного алгоритма, T_m — время выполнения параллельного алгоритма на m ($m > 1$) ядрах процессора.



Принцип работы потоков в OpenMP.

Технология CUDA

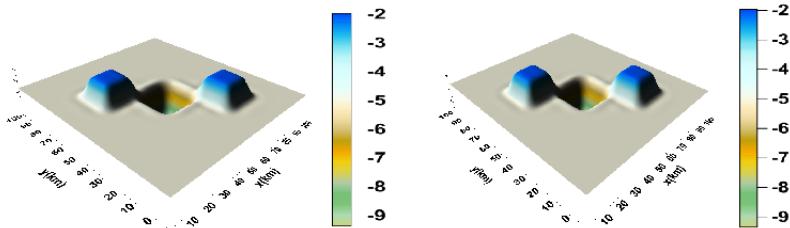


Иерархия компонентов вычислительной сетки GPU.

3.5. Задача 1 (сравнение методов типа Ньютона решения задачи гравиметрии в двухслойной среде)

Точное решение уравнения гравиметрии, определяющее поверхность раздела сред, задается формулой

$$\hat{u}(x, y) = 5 - 3.21e^{-(x/10.13-6.62)^6-(y/9.59-2.93)^6} - 2.78e^{-(x/9.89-4.12)^6-(y/8.63-7.435)^6} + 3.19e^{-(x/9.89-4.82)^6-(y/8.72-4.335)^6},$$



Модельная поверхность (слева) и приближенное решение (справа):

$$D = \{0 \leq x \leq 270, 0 \leq y \leq 300\},$$

$$H = 5, \Delta x = \Delta y = 0.58, \Delta \sigma = 0.2 \text{ г/см}^3.$$

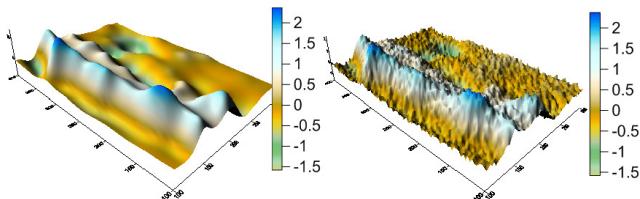
- критерий останова итераций $\delta = \frac{\|u_e - u_a\|}{\|u_e\|} \leq 0.025$,
- параметр регуляризации $\alpha = \bar{\alpha} = 10^{-3}$,
- полуширина ленты матрицы производной $\beta = 1/4$, $\gamma = 1.2$ для ПМН,
- $\Delta = \|A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_\delta\| / \|f_\delta\|$,
- размер $A'_n(u^k) \approx 2.6 * 10^5 \times 2.6 * 10^5$.

Табл. Сравнение методов решения задачи гравиметрии на сетке 512×512

| Метод | N | Δ | T_1 | T_8 | T_{GPU} | S_8 | S_{GPU} |
|---------------------------------------|-----|----------|--------|-----------|-----------|-------|-----------|
| 1. Метод Ньютона | 3 | 0.041 | 64 мин | 8,82 мин | 1 мин | 7.25 | 65 |
| 2. Модиф. метод Ньютона | 5 | 0.042 | 55 мин | 7,5 мин. | 45 сек | 7.33 | 73 |
| 3. Метод Ньютона с ленточной матрицей | 4 | 0.041 | 43 мин | 6,8 мин. | 30 сек | 7.41 | 86 |
| 4. Покомпонентный метод Ньютона | 6 | 0.041 | 20 мин | 2,82 мин. | 11 сек | 7.14 | 100 |

Вывод: покомпонентный метод типа Ньютона является самым экономичным по вычислительным затратам: в 3 раза быстрее методов 1–2 и в 2 раза быстрее метода 3.

3.5. Задача 2 (сравнение методов Левенберга – Марквардта решения задачи гравиметрии в многослойной среде

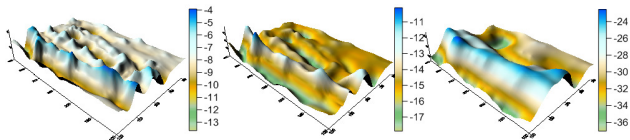


Суммарное поле и поле с шумом 22% (мГал), $\mu = 1$, $\sigma = 1.15$.

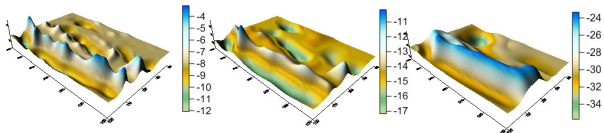
Модельные поверхности схожи с границами раздела из работы*.

$H_1 = 8$ км, $H_2 = 15$ км и $H_3 = 30$ км. Скачки плотности $\Delta\sigma_1 = 0.2$ г/см³, $\Delta\sigma_2 = 0.1$ г/см³, $\Delta\sigma_3 = 0.1$ г/см³. Шаги сетки $\Delta x = 2$ км, $\Delta y = 3$ км.

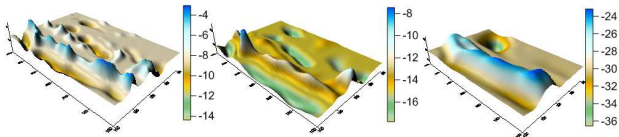
* П. С. Мартышко, Е.Н. Акимова, В. Е. Мислов. О решении структурной обратной задачи гравиметрии модифицированными методами градиентного типа // Физика земли. 2016. № 5. С. 82–86.



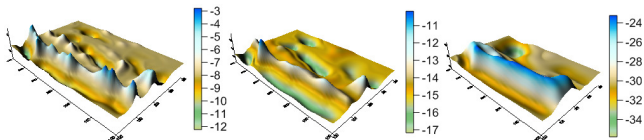
Точные решения $u_0(x, y)$, $u_1(x, y)$, $u_2(x, y)$.



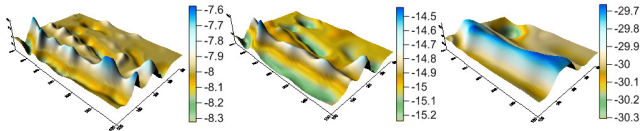
Границы, восстановленные ЛМ $\tilde{u}_0(x, y)$, $\tilde{u}_1(x, y)$, $\tilde{u}_2(x, y)$.



Границы, восстановленные ПЛМ $\hat{u}_0(x, y)$, $\hat{u}_1(x, y)$, $\hat{u}_2(x, y)$.



Границы, восстановленные ЛМ для данных с шумом $\tilde{u}_0(x, y)$, $\tilde{u}_1(x, y)$, $\tilde{u}_2(x, y)$.



Границы, восстановленные ПЛМ для данных с шумом $\hat{u}_0(x, y)$, $\hat{u}_1(x, y)$, $\hat{u}_2(x, y)$.

- сетка 1000×1000 , матрица производных $10^6 \times 3 * 10^6$,
- параметр регуляризации $\alpha = 10^{-3}$ и демпфирующий множитель $\gamma = 1$,
- $\varepsilon = \frac{\|A(u_a) + \alpha u_a - f_\delta\|}{\|f_\delta\|} = 0.1$,
- относительные погрешности $\delta_i = \|u_a - u_e\| / \|u_e\|$,
- T_1 — Intel Xeon (1 ядро), T_8 — Intel Xeon (8 ядер),
- T_{GPU} — NVIDIA Tesla M2050.

Табл. Результаты расчетов в задаче гравиметрии в многослойной среде

| Метод | N | δ_1 | δ_2 | δ_3 | T_1 | T_8 | T_{GPU} |
|-------|-----|------------|------------|------------|-----------|----------|-----------|
| ЛМ | 60 | 0.052 | 0.026 | 0.051 | 11.7 часа | 1.4 часа | 35 мин. |
| ПЛМ | 20 | 0.051 | 0.035 | 0.06 | 1.2 часа | 10 мин. | 3 мин. |

Вывод: покомпонентный метод Левенберга – Марквардта решает задачу в 10 раз быстрее.

1. Для нелинейного уравнения с монотонным оператором дано обоснование двухэтапного метода на основе регуляризованного метода Ньютона. Построены нелинейные аналоги α -процессов: регуляризованные методы градиентного типа для решения нелинейного уравнения с монотонным оператором: метод минимальной ошибки, метод наискорейшего спуска, метод минимальных невязок. Доказаны теоремы сходимости и сильная фейеровость итерационных процессов при аппроксимации регуляризованного решения. Для задачи с немонотонным оператором, производная которого имеет неотрицательный спектр, доказаны теоремы сходимости для метода Ньютона и нелинейных α -процессов к регуляризованному решению.

2. Для решения нелинейных интегральных уравнений обратных задач гравиметрии предложены экономичные покомпонентные методы типа Ньютона и типа Левенберга – Марквардта. Предложена вычислительная оптимизация метода Ньютона и его модифицированного варианта при решении задач с матрицей производной с диагональным преобладанием.
3. Разработан комплекс параллельных программ для многоядерных и графических процессоров (видеокарт) решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии на сетках большой размерности методами ньютоновского типа и покомпонентными методами.

Основные результаты по материалам диссертационной работы докладывались на конференциях:

1. XIV и XV Уральская молодежная научная школа по геофизике (Пермь, 2013 г., Екатеринбург 2014 г.);
2. Международная конференция "Параллельные вычислительные технологии" (Ростов-на-Дону, 2014 г., Екатеринбург, 2015 г., Казань, 2017 г.);
3. Международная конференция "Геоинформатика: теоретические и прикладные аспекты" (Киев 2014, 2015, 2016 г.)
4. Международная конференция "Актуальные проблемы вычислительной и прикладной математики" (Новосибирск, 2014 г.)
5. Международный научный семинар по обратным и некорректно поставленным задачам (Москва, 2015 г.)

- ❶ Васин В.В., Скурыдина, А.Ф. Двухэтапный метод построения регуляризующих алгоритмов для нелинейных некорректных задач // Труды ИММ УрО РАН Т.23 В.1 (2017), С. 57–74.
- ❷ Васин В.В., Акимова Е.Н., Миниахметова А.Ф. Итерационные алгоритмы ньютоновского типа и их приложения к обратной задаче гравиметрии // Вестник ЮУрГУ. Т.6 В.3 (2013), С. 26–37.
- ❸ Акимова Е. Н., Мисиллов В. Е., Скурыдина А. Ф. Параллельные алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии на МВС // Вестник УГАТУ. 2014. Т.18, № 4 (65). С. 206-215.
- ❹ Skurydina A. F. Regularized Levenberg — Marquardt Type Method Applied to the Structural Inverse Gravity Problem in a Multilayer Medium and its Parallel Realization // Bulletin of South Ural State University. Series: Computational Mathematics and Software Engineering. 2017. V.6, N.3. pp. 5–15.
- ❺ Акимова, Е. Н., Мисиллов, В. Е., Скурыдина, А. Ф., Третьяков, А. И. Градиентные методы решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии на суперкомпьютере “Уран” // Вычислительные методы и программирование, 2015. Т. 16, 155–164.

- 6 Akimova E., Miniakhmetova A., Martyshko M. Optimization and parallelization of Newton type methods for solving structural gravimetry and magnetometry inverse problems // EAGE Geoinformatics 2014 – 13th Intern. Conference on Geoinformatics – Theoretical and Applied Aspects. Kiev, Ukraine. 12–15 May 2014
- 7 Akimova E., Skurydina A. A componentwise Newton type method for solving the structural inverse gravity problem // EAGE Geoinformatics 2015 – 14th Intern. Conference on Geoinformatics – Theoretical and Applied Aspects. Kiev, Ukraine. 11–14 May 2015.
- 8 Akimova E., Skurydina A. On solving the three-dimensional structural gravity problem for the case of a multilayered medium by the componentwise Levenberg-Marquardt method // EAGE Geoinformatics 2016 – 15th Intern. Conference on Geoinformatics – Theoretical and Applied Aspects. Kiev, Ukraine. 10–13 May 2016.

- 9 Мисиллов В.Е., Миниакхметова А.Ф., Дергачев Е.А. Решение обратной задачи гравиметрии итерационными методами на суперкомпьютере «Уран» // Труды XIV Уральской молодежной научной школы по геофизике. Пермь: ГИ УрО РАН. 2013. С. 187–190
- 10 Миниакхметова А.Ф. Сравнение быстрых методов решения структурной обратной задачи магнитометрии // Труды XV Уральской молодежной научной школы по геофизике. Екатеринбург: ИГФ УрО РАН. 2014. С. 160–162
- 11 E. N. Akimova, A. F. Miniakhmetova, V. E. Misilov. Fast stable parallel algorithms for solving gravimetry and magnetometry inverse problems // The International conference "Advanced mathematics, computations and applications – 2014". Institute of Computational Mathematics and Mathematical Geophysics of Siberian Branch of RAS, Novosibirsk, Russia. June 8–11, 2014.

- 11 Акимова Е.Н., Мисилов В.Е., Миниухметова А.Ф. Параллельные алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии на многопроцессорных вычислительных системах // Труды межд. конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2014)», Ростов-на-Дону, 31 мар. – 4 апр. 2014 г. Челябинск: ЮУрГУ. 2014. С. 19–29.
- 12 В.В. Васин, А.Ф. Скурыдина. Регуляризованные модифицированные процессы градиентного типа для нелинейных обратных задач // Международный научный семинар по обратным и некорректно поставленным задачам. Москва, 19 – 21 ноября 2015 г.
- 13 Акимова, Е. Н., Мисилов, В. Е., Скурыдина, А. Ф., Третьяков, А. И. Градиентные методы решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии на суперкомпьютере “Уран” // Труды межд. конференции «Параллельные вычислительные технологии (ПАВТ'2015)», Екатеринбург, 31 мар. – 2 апр. 2015 г. Челябинск: ЮУрГУ. 2015. С. 8–18.

Спасибо за внимание!