

Регуляризованные алгоритмы на основе методов типа Ньютона и
нелинейных аналогов α -процессов для решения нелинейных
операторных уравнений

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. Построение итеративно регуляризованных алгоритмов востребовано для решения широкого круга некорректных прикладных задач. Например, решение структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии сводится к решению нелинейных интегральных уравнений Урысона первого рода.

Теорию решения некорректных задач развивали А. Н. Тихонов, М. М. Лаврентьев, В. К. Иванов, А. Б. Бакушинский, Б. Т. Поляк, А. В. Гончарский, В. В. Васин, А. Л. Агеев, В. П. Танана, А. Г. Ягола, A. Neubauer, O. Scherzer, B. Kaltenbacher, U. Tautenhahn и др.

Для решения систем нелинейных уравнений проводились исследования в работах Л. В. Канторовича, Б. Т. Поляка, J. M. Ortega и W. C. Rheinboldt, A. Neubauer, M. J. D. Powell, J. C. Gilbert, J. Nocedal, S. J. Wright. L. Landweber, M. Hanke. Градиентные методы с применением метода Ландвебера исследовались М. Ю. Кокуриным. Методы решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии предложены в работах В. Б. Гласко, В. Н. Страхова. Алгоритмы решения обратных задач математической физики на основе регуляризованных градиентных методов и методов Ньютона разрабатывались в ИММ УрО РАН В. В. Васиным, Е. Н. Акимовой, Г. Я. Пересторониной и В. Е. Мисиловым, на основе метода локальных поправок разрабатывались в ИГФ УрО РАН И. Л. Пруткиным, П. С. Мартышко, А. Г. Цидаевым.

Целью диссертационной работы является построение новых устойчивых и экономичных по времени и памяти алгоритмов на основе методов типа Ньютона, α -процессов и Левенберга – Марквардта 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. Первый параграф главы посвящен вопросам сходимости регуляризованного метода Ньютона. Второй параграф содержит схемы построения итерационных процессов градиентного типа — нелинейных α -процессов и доказывается их сходимость. В третьем параграфе иллюстрируются особенности применения рассмотренных в данной главе итерационных методов к нелинейному интегральному уравнению и приводятся результаты численного моделирования.

1.1. Регуляризованный метод Ньютона (Васин)

Рассматривается нелинейное уравнение с неизвестной функцией u

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

с нелинейным непрерывно дифференцируемым по Фреше оператором A , действующим на паре гильбертовых пространств, для которого обратные операторы $A'(u)^{-1}$, A^{-1} в общем случае разрывны в окрестности решения, что влечет некорректность задачи (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 — некоторое приближение к u_α ;

Итерации производятся по формуле:

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

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.

1.1. Регуляризованный метод Ньютона (монотонный оператор)

Теорема 1.1.

Пусть A — монотонный оператор, для которого выполнены условия

$$\|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|, \quad \forall u, v \in U,$$

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

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 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.

Определение

Усиленное свойство Фейера (Васин, Еремин, 2009) 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

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

Теорема 1.2.

Пусть для монотонного оператора A выполнены условия

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

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

$A'(u^0)$ — самосопряженный оператор,

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

Тогда для оператора

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

справедлива оценка снизу

$$\langle F(u), u - u_\alpha \rangle \geq \frac{\alpha}{4\bar{\alpha}} \|u - u_\alpha\|^2 \quad \forall u \in S_r(u_\alpha).$$

Теорема 1.3.

Пусть выполнены условия теоремы 1.2. 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)

Альфа-процессы для линейных задач с самосопряженным положительно определенным оператором были предложены **М. А. Красносельским и др. (1969)**.

Итерационный процесс запишем в виде:

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

Выбирая параметр β_k из условия

$$\min_{\beta_k} \|u^k - \beta_k (A(u^k) - f_\delta) - z\|^2,$$

где z — решение уравнения $A'(u^k)z = y^k$, $y^k = f_\delta + A'(u^k)u^k - A(u^k)$ (используем разложение Тейлора в точке u^k), получим **регуляризованный метод минимальной ошибки (ММО)**

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

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

Если использовать экстремальные принципы

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

либо

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

то получаем нелинейные **регуляризованные методы наискорейшего спуска (МНС)**

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

и **минимальных невязок (ММН)**

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

В общем виде итерационную последовательность обозначим

$$u^{k+1} = u^k - \gamma \frac{\langle (A'(u^k) + \bar{\alpha}I)^\varkappa S_\alpha(u^k), S_\alpha(u^k) \rangle}{\langle (A'(u^k) + \bar{\alpha}I)^{\varkappa+1} S_\alpha(u^k), S_\alpha(u^k) \rangle} S_\alpha(u^k) \equiv T(u^k) \quad (1.6)$$

при соответствующем $\varkappa = -1, 0, 1$, γ — демпфирующий множитель.

Модифицированные варианты на основе α -процессов (new)

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

- 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.

Теорема 1.4.

Пусть для монотонного оператора A выполнены условия

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

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

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

Кроме того, для ММО параметры α , $\bar{\alpha}$, r , N_2 , N_0 удовлетворяют дополнительным соотношениям:

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

Тогда справедливы соотношения

$$\|F^\varkappa(u)\|^2 \leq \mu_\varkappa \langle F^\varkappa(u), u - u_\alpha \rangle, \quad \varkappa = -1, 0, 1,$$

где

$$\begin{aligned} \mu_{-1} &= \frac{4(N_1 + \alpha)^2}{\alpha \bar{\alpha}}, \quad \mu_0 = \frac{(N_1 + \alpha)^2 (N_1 + \bar{\alpha})}{\alpha \bar{\alpha}^2}, \\ \mu_1 &= \frac{(N_1 + \alpha)^2 (N_1 + \bar{\alpha})^2}{\alpha \bar{\alpha}^3}, \end{aligned}$$

соответственно для ММО, МНС, ММН.

Теорема 1.5.

Пусть выполнены условия теоремы 1.4. 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. Численные эксперименты

Рассматривается ДУ с $x(t)$, $y(t)$, $t \in [0, 1]$ с заданной константой $c_0 > 0$

$$\frac{dy}{dt} = x(t)y(t), \quad y(0) = c_0,$$

где $x(t), y(t) \in L^2[0, 1]$. Интегрируя ДУ, приходим к нелинейному операторному уравнению

$$F(x) = y,$$

где

$$[F(x)](t) = c_0 e^{\int_0^t x(\tau) d\tau}$$

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

Правая часть задана с шумом

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

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

Цель: проверить глобальную сходимость методов для задачи с возмущенной правой частью.

$\delta = 0.1$, $\|y - y^\delta\| = 0.07 < \delta$. Точное решение — функция $z(t) = t^2$. Начальное приближение $x^0(t) = 0$, $\gamma = 1$, $\bar{\alpha} = 1$, $\alpha = 10^{-3}$, критерий останова $\frac{\|x^k - z\|}{\|z\|} \leq \varepsilon = 0.25$, где x^k — приближение на k -й итерации.

Табл.1. Результаты для задачи с шумом

Метод	Δ	Число итераций, N
ММО	0.042	9
ММО модиф.	0.042	9
МНС	0.041	9
МНС модиф.	0.040	9
ММН	0.045	9
ММН модиф.	0.045	9
РМН	0.042	9
РМН модиф.	0.042	8

Вывод: удалось достигнуть точности $\varepsilon < \|u^\delta - \hat{u}\|$, относительная норма невязки уменьшается с каждой итерацией.

Глава 2. Решение операторных уравнений в случае положительного спектра

Во второй главе показано, что есть возможность ослабить условие монотонности оператора A исходного уравнения и обосновать сходимость итераций РМН, ММО, МНС, ММН.

В первом параграфе представлены доказательства сходимости метода Ньютона с регуляризацией, во втором параграфе сформулированы теоремы сходимости для нелинейных α -процессов, в третьем параграфе представлены следствия для модифицированных аналогов α -процессов, в четвертом приведены результаты численных расчетов.

Лемма (Васин, 2017)

Пусть $n \times n$ матрица $A'(u)$ не имеет кратных собственных значений λ_i и числа λ_i ($i = 1, 2, \dots, n$) различны и неотрицательны. Тогда при $\bar{\alpha} > 0$ матрица имеет представление $A'(u) + \bar{\alpha}I = S(u)\Lambda(u)S^{-1}(u)$ и справедлива оценка

$$\|(A'(u) + \bar{\alpha}I)^{-1}\| \leq \frac{\mu(S(u))}{\bar{\alpha} + \lambda_{\min}} \leq \frac{\mu(S(u))}{\bar{\alpha}}, \quad (2.1)$$

где столбцы матрицы $S(u)$ составлены из собственных векторов матрицы $A'(u) + \bar{\alpha}I$, Λ — диагональная матрица, ее элементы — собственные значения матрицы $A'(u) + \bar{\alpha}I$,

$$\mu(S(u)) = \|S(u)\| \cdot \|S^{-1}(u)\|,$$

$\mu(S(u))$ — число обусловленности $S(u)$.

2.1. Метод Ньютона

Теорема 2.1.

Пусть выполнены условия леммы, а также:

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

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

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

$A'(u^0)$ — 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. Нелинейные альфа-процессы

Теорема 2.2.

Пусть выполнены условия леммы, $\|A(u) - A(v)\| \leq N_1\|u - v\|$,
 $\|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2\|u - v\|$, $\forall u, v \in U$, $\|A'(u^0)\| \leq N_0 \leq N_1$, $\|u^0 - u_\alpha\| \leq r$,

$$ММО: \quad 0 < \alpha \leq \bar{\alpha}, \quad r \leq \alpha/6\bar{S}N_2, \quad \bar{\alpha} \geq N_0$$

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

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

справедливо соотношение

$$\|F^\varkappa(u)\|^2 \leq \mu_\varkappa \langle F^\varkappa(u), u - u_\alpha \rangle, \quad \varkappa = -1, 0, 1,$$

где

$$\mu_{-1} = \frac{8\bar{S}^2(N_1 + \alpha)^2}{\alpha\bar{\alpha}}, \quad \mu_0 = \frac{18(N_1 + \alpha)^2(N_1 + \bar{\alpha})}{\alpha\bar{\alpha}^2},$$
$$\mu_1 = \frac{18(N_1 + \alpha)^2(N_1 + \bar{\alpha})^4}{\alpha\bar{\alpha}^5}.$$

Теорема 2.3.

Пусть выполнены условия леммы.

Тогда при $\gamma_{\varkappa} < 2/\mu_{\varkappa}$, $\varkappa = -1, 0, 1$, где значения μ_k определяются из теоремы 2.2, 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

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

$$q_1 = \sqrt{1 - \frac{\alpha^2 \bar{\alpha}^6}{36(N_1 + \alpha)^2(N_1 + \bar{\alpha})^6}}.$$

Теорема 2.4

Пусть выполнены условия

$$\|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|, \quad \forall u, v \in U,$$

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

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

$A'(u^0)$ — самосопряженный оператор, спектр которого состоит из неотрицательных различных собственных значений, параметры удовлетворяют условиям:

$$0 \leq \alpha \leq \bar{\alpha}, \quad r = \alpha/6N_2, \quad \bar{\alpha} \geq N_0.$$

Тогда имеет место неравенство

$$\|F^\varkappa(u)\|^2 \leq \frac{8(N_1 + \alpha)^2}{3\alpha\bar{\alpha}} \langle F^\varkappa(u), u - u_\alpha \rangle,$$

где $\varkappa = -1, 0, 1$, для модифицированных вариантов ММО, МНС и ММН соответственно (см. слайд 13).

Теорема 2.5

Пусть выполнены условия теоремы 2.4. 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 — отрицательное собственное значение с наименьшим 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

$$\|(A'(u^k) + \bar{\alpha}I)^{-1}\| \leq \frac{\mu(S(u^k))}{\bar{\alpha}^*} \leq \frac{\bar{S}}{\bar{\alpha}^*} \quad (3.2)$$

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

2.3. Решение модельной задачи магнитометрии

Уравнение магнитометрии в декартовой системе координат имеет вид

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

где ΔJ — скачок z -компоненты вектора намагниченности, $z = H$ — асимптотическая плоскость, $B_z(x, y, 0)$ — функция, описывающая аномальное поле, $z = u(x, y)$ — искомая функция, описывающая поверхность раздела сред с различными свойствами намагниченности.

Точное решение уравнения магнитометрии, определяющее поверхность раздела сред, задается формулой (Акимова, Мисиллов, 2014-2016)

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

Цель: проверить заключения теорем главы 2 на примере решения обратной задачи магнитометрии. Число обусловленности $\mu(A'_n(u_n^k)) \approx 1.8 \cdot 10^7$, спектр неотрицательный, состоящий из различных собственных значений, $\bar{\alpha} = 10^{-2}$, $\alpha = 10^{-4}$, $\gamma = 1$, $\varepsilon < 10^{-2}$

Табл.2. Относительные нормы невязок, числа итераций и времена счета в задаче магнитометрии

Методы	ММО	МНС	ММН	РМН
Δ	0.0636	0.0699	0.0802	0.0368
	0.0569	0.0575	0.0595	0.0369
N	4	4	4	5
	4	4	4	5
T (сек)	10	6	6	22
	5	3	3	3

Вывод: число итераций для модифицированных методов больше, чем для немодифицированных, но затраты машинного времени меньше.

Глава 3. Покомпонентные методы и вычислительные оптимизации для решения обратных структурных задач гравиметрии и магнитометрии

В третьей главе предлагаются покомпонентные методы типа Ньютона и Левенберга – Марквардта. Покомпонентный метод типа Ньютона используется для решения обратной задачи гравиметрии для модели двухслойной среды, а покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта — для модели многослойной среды. Кроме того, предлагается вычислительная оптимизация методов типа Ньютона.

Параллельные алгоритмы реализованы в виде комплекса программ на многоядерных и графических процессорах (видеокартах) для вычислений на сетках большого размера. Обсуждаются результаты численного моделирования. Для модельных задач, имеющих большой размер данных, приводятся результаты расчетов с использованием параллельных вычислений на многоядерных процессорах и графических ускорителях.

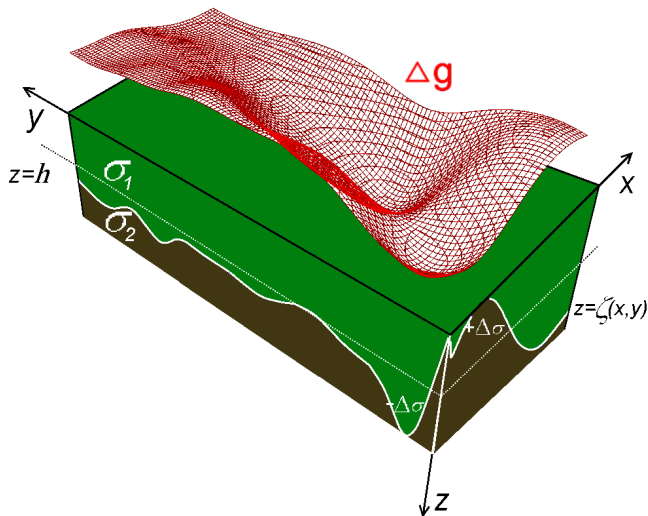
3.1. Оптимизация метода Ньютона для обратных задач гравиметрии и магнитометрии

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

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

где γ — 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, описываемой функцией $u(x, y)$ и подлежащей определению, $\Delta g(x, y)$ — аномальное гравитационное поле, вызванное отклонением поверхности от асимптотической плоскости $z = H$ для искомого решения $u(x, y)$.

Уравнение задачи магнитометрии приводилось на слайде 26.



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

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

Как видим, элементы матрицы $A'(u^0)$ принимают наибольшие значения при малых значениях $(x - x')$ и $(y - y')$.

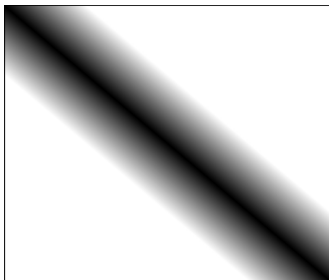


Схема матрицы производной оператора A

Замечание 3.1.

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 – 13th Intern. Conference on Geoinformatics – Theoretical and Applied Aspects. Kiev, Ukraine. 12–15 May 2014

3.2. Покомпонентный метод типа Ньютона для решения задач гравиметрии (new)

Запишем исходное операторное уравнение (1.1) в виде:

$$P(u) = A(u) - f,$$

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

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

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

В задаче гравиметрии на изменение гравитационного поля в правой части наибольшее значение оказывает отклонение от асимптотической плоскости в точке (x', y') . Тогда можем записать

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

Итерации осуществляются по схеме:

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

где

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

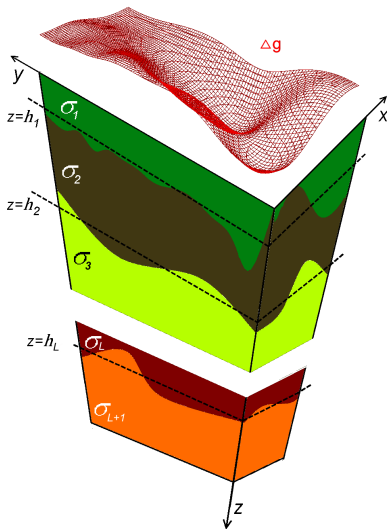
Регуляризованный вариант:

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

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

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

Модель многослойной среды



Постановка задачи

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

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

где L — число границ раздела.

3.3. Покомпонентный метод типа Левенберга Марквардта для решения задач гравиметрии для модели многослойной среды (new)

По аналогии с покомпонентным методом Ньютона предложен покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта:

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

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

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

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

Перепишем в дискретной форме

$$u_{l,i}^{k+1} = u_{l,i}^k - \gamma \frac{1}{\varphi_{l,i} + \bar{\alpha}} w_{l,i} \left[\{A'(u_l^k)^T (A(u^k) - f_\delta)\}_i \right], \quad (2)$$

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

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

Акимова, Е. Н., Мисилов, 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.

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

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

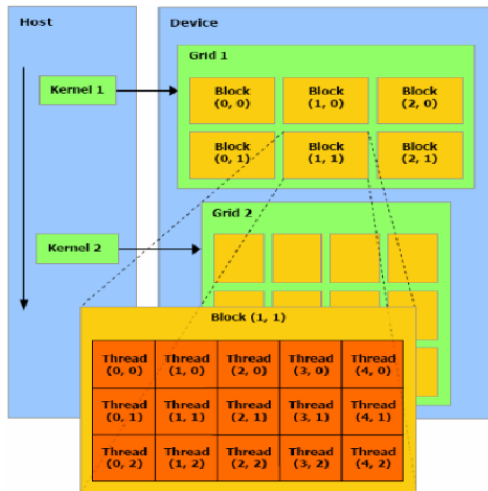
где T_1 — время выполнения последовательного алгоритма, T_m — время выполнения параллельного алгоритма на m ($m > 1$) ядрах процессора.

Технология OpenMP



Принцип работы потоков в OpenMP.

Технология CUDA

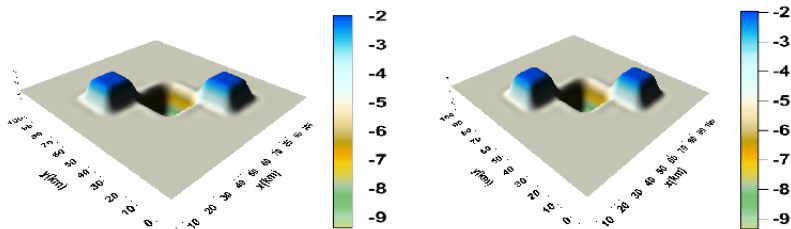


Иерархия компонентов вычислительной сетки GPU.

3.5. Задача 1 (сравнение методов типа Ньютона при решении обратной задачи гравиметрии для двухслойной среды)

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

$$\hat{u}(x, y) = 5 + 4e^{-(x/10-3.5)^4-(y/10-2.5)^4} - 3e^{-(x/10-5.5)^4-(y/10-4.5)^4},$$



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

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

$$H = 5, \Delta x = \Delta y = 1, \Delta \sigma = 0.2 \text{ г/см}^3.$$

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 $\beta = 1/4$ для задачи гравиметрии. Коэффициент $\gamma = 1.2$ для покомпонентного метода Ньютона, $\Delta = \|A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_\delta\|/\|f_\delta\|$

Табл.3. Сравнение методов решения задачи гравиметрии

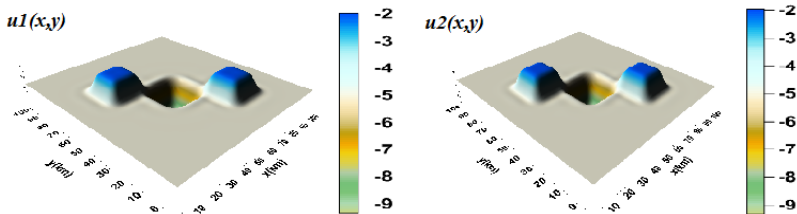
Метод	N	Δ	T_1	T_8	S_8	E_8
Метод Ньютона	3	0.041	22 мин	2 мин 40 сек	8	1
Модифицированный метод Ньютона	5	0.042	32 мин	4 мин	8	1
Метод Ньютона с ленточной матрицей	4	0.041	24 мин	3 мин	8	1
Покомпонентный метод Ньютона	6	0.041	17 мин	2 мин	8	1

Вывод: покомпонентный метод типа Ньютона является самым экономичным по вычислительным затратам. Исключение из матрицы производной оператора элементов практически не влияет на сходимость метода Ньютона.

3.5. Задача 2 (сравнение методов типа Ньютона на больших сетках)

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

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



Решение, полученное модиф. методом Ньютона (слева) и решение, полученное покомпонентным методом (справа).

Параметры регуляризации $\alpha = \bar{\alpha} = 10^{-3}$, $\gamma = 1.8$ для покомпонентного метода Ньютона, критерий останова $\varepsilon = \frac{\|u_e - u_a\|}{\|u_e\|} = 10^{-2}$.

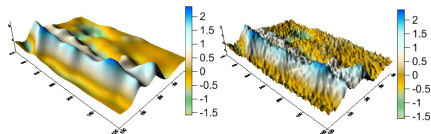
Табл.5. Сравнение ММН и ПМН

Показатели	Модифицированный метод Ньютона	Покомпонентный метод типа Ньютона
Число итераций, N	16	21
Отн. норма невязки, Δ	0.002	0.002
Время, T_1 на сетке 512×512	61 мин	19 мин
Время, T_8 на сетке 512×512	7 мин 50 сек	2 мин 33 сек
Ускорение, S_8	7.82	7.45
Эффективность, E_8	0.97	0.93

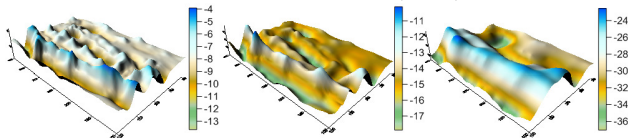
Вывод. Покомпонентный метод Ньютона снижает время решения задачи в три раза по сравнению с модифицированным методом Ньютона.

Разработанные параллельные алгоритмы демонстрируют высокую эффективность.

3.5. Задача 3 (методы типа Левенберга – Марквардта для решения задачи гравиметрии для многослойной среды)

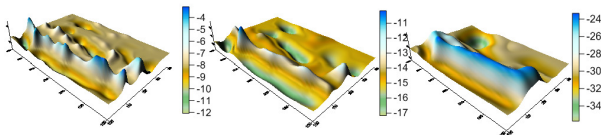


Суммарное поле и поле с шумом 22% (мГал), $\mu = 1$, $\sigma = 1.15$.

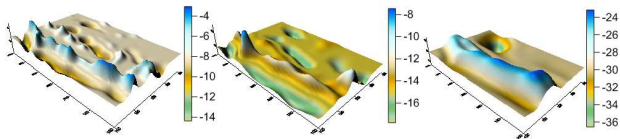


Точные решения $u_0(x, y)$, $u_1(x, y)$, $u_2(x, y)$.

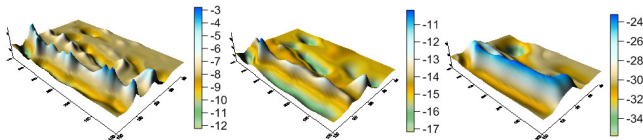
$H_1 = 8$ км, $H_2 = 15$ км и $H_3 = 30$ км. Скачки плотности $\Delta\sigma_1 = 0.2$ г/см³, $\Delta\sigma_2 = 0.1$ г/см³, $\Delta\sigma_3 = 0.1$ г/см³. Шаги сетки $\Delta x = 2$ км, $\Delta y = 3$ км.



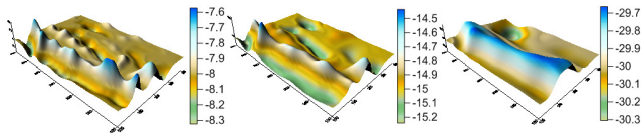
Границы, восстановленные ЛМ $\tilde{u}_0(x, y)$, $\tilde{u}_1(x, y)$, $\tilde{u}_2(x, y)$.



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 ,
- 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.7. 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.

Параметр шага $\gamma = 1$, параметры регуляризации $\alpha = 0.1$, $\bar{\alpha} = 1$, критерий останова $\Delta = \|A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_\delta\|/\|f_\delta\| < 0.15$.

Табл.8. Относительные ошибки для задачи с шумом

Метод	N	δ_1	δ_2	δ_3
ЛМ	24	0.048	0.035	0.059
ПЛМ	8	0.048	0.040	0.068

Вывод: решения, полученные двумя методами, близки между собой и близки к истинному решению. Покомпонентный метод Левенберга – Марквардта решает задачу в 10 раз быстрее. покомпонентного метода типа Левенберга – Марквардта позволяет избежать трудностей, возникающих при применении классического метода Левенберга – Марквардта: обращение плохо обусловленных матриц, высокая вычислительная сложность и большие затраты памяти. Результаты численного моделирования показывают, что относительная норма невязки покомпонентного метода сходится к Δ за меньшее число итераций, чем классический регуляризованный метод Левенберга – Марквардта.

Основные результаты

1. Для нелинейного уравнения с монотонным оператором доказаны теоремы о сходимости 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. Для задачи с немонотонным оператором, производная которого имеет неотрицательный спектр, доказаны теоремы сходимости для метода Ньютона, нелинейных α -процессов и их модифицированных вариантов.

Основные результаты

2. Для решения систем нелинейных интегральных уравнений с ядром оператора структурной обратной задачи гравиметрии для модели двухслойной среды предложен покомпонентный метод типа Ньютона. Предложена вычислительная оптимизация метода Ньютона и его модифицированного варианта при решении задач с матрицей производной, близкой к ленточной. Для решения систем нелинейных уравнений структурных обратных задач гравиметрии для модели многослойной среды предложен покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта с весовыми множителями. При решении модельных обратных задач гравиметрии на больших сетках продемонстрирована экономичность предложенных методов по вычислениям и затратам оперативной памяти.
3. Разработан комплекс параллельных программ для многоядерных и графических процессоров (видеокарт) решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии на сетках большой размерности методом Ньютона, модифицированным методом Ньютона, методом Левенберга-Марквардта, покомпонентными методами типа Ньютона и типа Левенберга-Марквардта.

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 регуляризирующих 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., Мисилов В. Е., Скурыдина А. Ф. Параллельные алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии на МВС // Вестник УГТУ. 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. V.6, N.3. pp. 5–15.

- 5 Акимова, Е. Н., Мисилов, 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 Мисилов В.Е., Миниахметова 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 Миниахметова 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.

- ❶ Акимова Е.Н., Мисилов В.Е., Миниахметова 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.
- ❷ 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.
- ❸ 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!