

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.

В работах А. Б. Бакушинского предложен принцип итеративной регуляризации метода Ньютона и исследована его сходимость.

Введение

Устойчивые методы решения нелинейных некорректных задач строились и исследовались в работах А. Б. Бакушинского, В. В. Васина, Б. Т. Поляка, A. Neubauer, B. Kaltenbacher, H. W. Engl, А. Л. Агеева, А. В. Гончарского, С. И. Кабанихина, М. Ю. Кокурина, А. С. Леонова, В. А. Морозова, В. П. Тананы, А. Г. Яголы, M. Hanke.

В ИММ УрО РАН разработаны и исследованы параллельные алгоритмы на основе регуляризованных методов Ньютона, Левенберга – Марквардта и процессов градиентного типа (В. В. Васин, Е. Н. Акимова, Г. Я. Пересторонина, Л. Ю. Тимерханова, В. Е. Мисилов).

В ИГФ УрО РАН разработана оригинальная методика решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии с использованием идей регуляризации, построены алгоритмы на основе метода локальных поправок (П.С. Мартышко, И.Л. Пруткин, Н.В. Федорова, А.Л. Рублев, И.В. Ладовский, А.Г. Цидаев, Д.Д. Бызов).

При решении обратных задач гравиметрии и магнитометрии на больших сетках используются параллельные алгоритмы и многопроцессорные вычислители.

Целью диссертационной работы является построение новых устойчивых и экономичных алгоритмов на основе методов ньютоновского типа и α -процессов для решения нелинейных операторных уравнений и исследование их сходимости; реализация 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 нелинейным монотонным оператором. Дано обоснование двухэтапного метода на основе метода Ньютона и нелинейных аналогов α -процессов. Приводится оценка погрешности регуляризованного решения.

1.1. Регуляризованный метод Ньютона

Рассматривается уравнение I рода с неизвестной функцией u , монотонным $A : H \rightarrow H$, A^{-1} , $A'(u)^{-1}$ разрывны в окрестности решения

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

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 — начальное 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. 1397–1404.

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 $\forall z \in \text{Fix}(T)$ — множеству 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;

Vasin V.V., Eremin I.I. Operators and Iterative Processes of Fejer Type. Theory and Applications. Berlin/New York: Walter de Gruyter, 2009.

1.1. Оценка скорости сходимости РМН с монотонным оператором

Пусть для монотонного оператора A выполнены условия

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

$$\|A'(u^0)\| \leq N_1, \quad (1.7)$$

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

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

Теорема 1.3.

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

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

удовлетворяет неравенству сильной фейеровости, последовательность итераций u^k является сильно фейеровской 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

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:

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

Используя разложение Тейлора исходного уравнения в точке u^k , получим

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

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.

Модифицированные варианты на основе аналогов α -процессов

Производная оператора задачи вычисляется в начальном приближении:

- 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.

Vasin V. V. Regularized modified alpha-processes for nonlinear equations with monotone operators // Dokl. Math. – 2016. – Vol.469, pp. 13–16

- 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):

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

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

- регуляризованный метод минимальных невязок (ММН):

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

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

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

γ — демпфирующий множитель.

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

$\varkappa = -1, 0, 1$.

1.2. Оценка скорости сходимости нелинейных аналогов α -процессов

Пусть для монотонного оператора A выполнены условия

$$\forall u, v \in S(u^0; R) \quad \|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|, \quad \|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|, \\ \|A'(u^0)\| \leq N_1, \quad \alpha \leq \bar{\alpha}, \quad \bar{\alpha} \geq N_1,$$

для ММО $A'(u^0)$ — самосопряженный оператор, $\|u^0 - u_\alpha\| \leq r$, $r \leq \alpha/8N_2$.

Теорема 1.5.

Пусть выполнены условия, μ_\varkappa вычисляется для каждого из трех α -процессов.

Тогда при

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

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

$$\|u_{\alpha(\delta)}^{\delta,k} - \hat{u}\| \leq \|u_{\alpha(\delta)}^{\delta,k} - u_{\alpha(\delta)}^{\delta}\| + \|u_{\alpha(\delta)}^{\delta} - \hat{u}\| \leq r q^k(\delta) + 2\sqrt{k_0\delta}.$$

Получена оценка погрешности двухэтапного метода с монотонным оператором:

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

при выборе числа итераций по правилу

$$k(\delta) = \left\lceil \frac{\ln(2\sqrt{k_0\delta}/r)}{\ln q(\delta)} \right\rceil,$$

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.

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

В. К. Иванов, В. В. Васин, В. П. Танана. Теория линейных некорректных задач и её приложения. М.: Наука, 1978. — 206 с.

1.3. Иллюстрирующий 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

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

Результаты: проверена применимость методов, получено приближенное решение.

U. Tautenhahn. 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

$A: \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$, $\forall i, j \lambda_i > 0$, $\lambda_i \neq \lambda_j$, $i \neq j$, $A'(u) + \bar{\alpha}I = S(u)\Lambda(u)S^{-1}(u)$,

$\mu(S(u)) = \|S(u)\| \cdot \|S^{-1}(u)\|$. Имеется оценка:

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

Теорема 2.1.

Пусть выполнены условия, а также:

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

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

$$\|A'(u^0)\| \leq N_1.$$

$A'(u^0)$ — симметричная матрица, $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $\bar{\alpha} \geq 4N_1$, $\|u^0 - u_\alpha\| \leq r$,

$r \leq \alpha/8N_2\bar{S}$. 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 аналогов α -процессов с немонотонным оператором

Теорема 2.3.

Пусть выполнены условия (пред. слайд), $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $\|u^0 - u_\alpha\| \leq r$, для ММО:

$r \leq \alpha/6\bar{S}N_2$, $\bar{\alpha} \geq N_1$, МНС: $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $r \leq \alpha/3N_2$, ММН:

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

Тогда при $\gamma < 2/\mu_\varkappa$, $\varkappa = -1, 0, 1$, с соответствующими μ_\varkappa , 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 $\gamma^{opt} = \frac{1}{\mu_\varkappa}$ справедлива оценка

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

где

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

2.3. Модифицированные аналоги α -процессов с немонотонным оператором

Пусть выполнены условия: $\forall u, v \in S(u^0; R) \|A(u) - A(v)\| \leq N_1 \|u - v\|$,
 $\|A'(u) - A'(v)\| \leq N_2 \|u - v\|$, $\|A'(u^0)\| \leq N_1$, $A'(u^0)$ — симметричная матрица, спектр которого состоит из неотрицательных различных собственных значений, $0 < \alpha \leq \bar{\alpha}$, $\bar{\alpha} \geq N_1$, $\|u^0 - u_\alpha\| \leq r$, $r \leq \alpha/6N_2$.

Теорема 2.5

Пусть выполнены условия. Тогда при

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

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 $\gamma^{opt} = \frac{1}{\mu_\varkappa}$ справедлива оценка

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

где

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

Замечание 2.4

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 $k(\delta) = \lceil \ln(m\delta^p/N) / \ln q(\delta) \rceil$, при котором справедлива оценка для невязки двухэтапного метода

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

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 $\varepsilon < 10^{-2}$ получена за 4–5 итераций, у модифицированных меньше время счета.

Е. Н. Акимова, В. Е. Мисилов, 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 метода 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

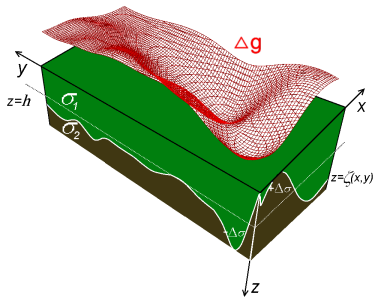
$$A(u) = f\Delta\sigma \left\{ \iint_D \frac{1}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + H^2]^{1/2}} dx' dy' - \iint_D \frac{1}{[(x-x')^2 + (y-y')^2 + u^2(x', y')]^{1/2}} dx' dy' \right\} = \Delta g(x, y, 0),$$

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,

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



Вычислительная оптимизация метода Ньютона

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 $A'_n(u^k)$.

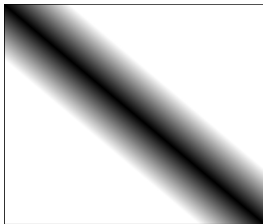


Схема матрицы производной оператора A

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.

В формуле (1.3) вместо матрицы $A'(u^k) = \{a_{i,j}\}$ используется диагональная матрица $\bar{A} = \{\bar{a}_{i,j}\}$, $\bar{a}_{i,j} = \begin{cases} a_{i,j}, & |i - j| \leq \beta \cdot n, \\ 0, & |i - j| > \beta \cdot n. \end{cases}$

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

3.1. Покомпонентный метод типа Ньютона

Рассмотрим нелинейное интегральное уравнение:

$$[A(u)](t) = \int_a^b K(t, s, u(s)) ds = f(t).$$

Поправка в методе Ньютона Δu^k определяется из решения линейного интегрального уравнения:

$$A'(u^k)\Delta u^k = \int_a^b K'_u(t, s, u^k(s))\Delta u^k(s) ds = A(u^k) - f.$$

После дискретизации получаем систему уравнений:

$$\sum_{j=1}^n h K'_u(t, s_j, u^k(s_j)) \Delta u^k(s_j) = [A(u^k)](t) - f(t)|_{t=t_i}, \quad 1 \leq i \leq n.$$

Теперь в каждом i -м уравнении полагаем, что все поправки $\Delta u^k(s_j) = \Delta u^k(s_i)$, то есть все компоненты вектора $\{\Delta u^k(s_j)\}_1^n$ одинаковы. $\Delta u^k(s_i)$ вынесем за знак суммы.

$$\Delta u^k(s_i) = \frac{[A(u^k)](t) - f(t)|_{t=t_i}}{\sum_{j=1}^n h K'_u(t, s_j, u^k(s_j))}, \quad 1 \leq i \leq n.$$

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

Постановка обратной задачи гравиметрии

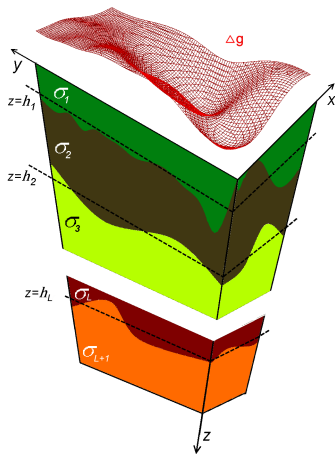
восстановления нескольких поверхностей раздела

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



3.2. Покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта

Регуляризованный метод Левенберга – Марквардта с весовыми множителями

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

По аналогии с ПМН, получим 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.

3.3. Описание комплекса параллельных программ

- на основе предложенных методов разработаны параллельные алгоритмы для вычислений на многоядерных процессорах и графических ускорителей;
- 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**

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

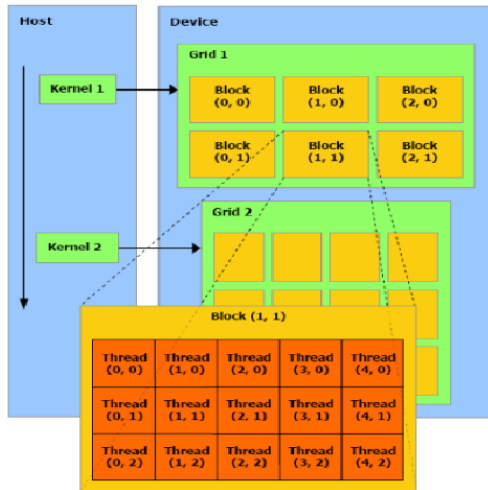
где T_1 — время выполнения последовательного алгоритма, T_m — время выполнения параллельного алгоритма на m ($m > 1$) ядрах процессора.

Технология OpenMP для многоядерных процессоров



Принцип работы потоков в OpenMP.

Технология CUDA для видеокарт

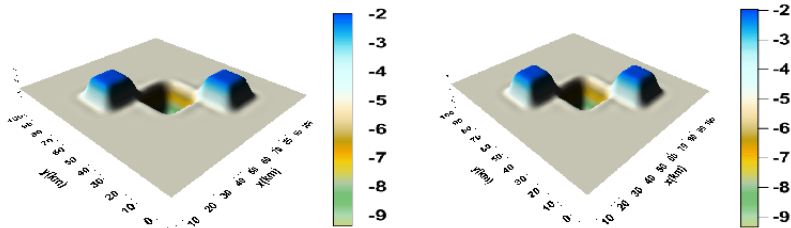


Иерархия компонентов вычислительной сетки GPU.

3.4. Задача 1 (сравнение методов 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):

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

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

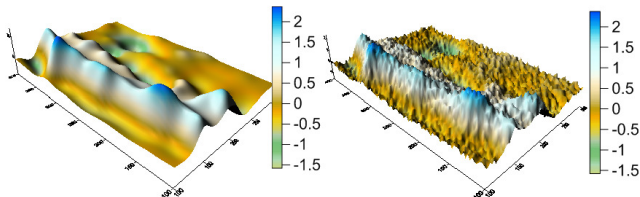
- критерий останова итераций $\delta = \frac{\|u_e - u_a\|}{\|u_e\|} \leq 0.025$, параметры регуляризации $\alpha = \bar{\alpha} = 10^{-3}$, $\Delta = \|A(u^k) + \alpha(u^k - u^0) - f_\delta\|/\|f_\delta\|$,
- размер $A'_n(u^k) \approx 2.6 * 10^5 \times 2.6 * 10^5$,
- T_1 — Intel Xeon (1 ядро), T_8 — Intel Xeon (8 ядер), T_{GPU} — NVIDIA Tesla M2050.

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 минимальных невязок	5	0.041	50 мин	6.8 мин.	—	7.3	—
4. Метод Ньютона с ленточной матрицей	4	0.041	43 мин	6,8 мин.	30 сек	7.41	86
5. Покомпонентный метод Ньютона	6	0.041	20 мин	2,82 мин.	11 сек	7.14	100

Вывод: ПМН является самым экономичным по вычислительным затратам: в 3 раза быстрее методов 1–2 и в 2 раза быстрее метода 4.

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



Суммарное поле и поле с шумом 22% (мГал)

Модельные поверхности построены по аналогии с границами раздела из статьи.

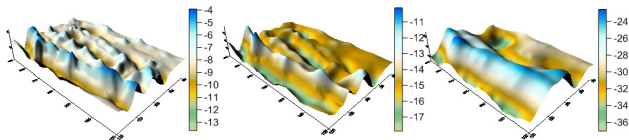
$H_1 = 8$ км, $H_2 = 15$ км и $H_3 = 30$ км. Скачки плотности $\Delta\sigma_1 = 0.2$ г/см³,

$\Delta\sigma_2 = 0.1$ г/см³, $\Delta\sigma_3 = 0.1$ г/см³. Шаги сетки $\Delta x = 2$ км, $\Delta y = 3$ км.

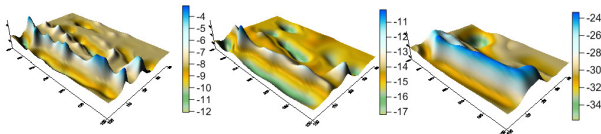
Аддитивный гауссовский шум с $\mu = 1$, $\sigma = 1.15$, $\text{noise} = \frac{\mu + 3\sigma}{f_{\max}} \cdot 100\% = 22\%$.

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

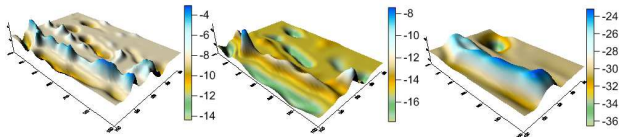
Решения, полученные для данных без шума



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

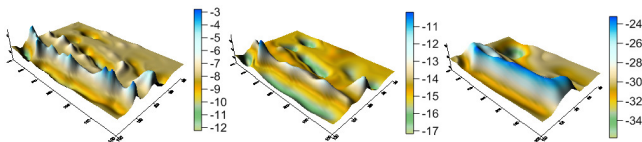


Границы, восстановленные ЛМ $\tilde{u}_0(x, y)$, $\tilde{u}_1(x, y)$, $\tilde{u}_2(x, y)$.

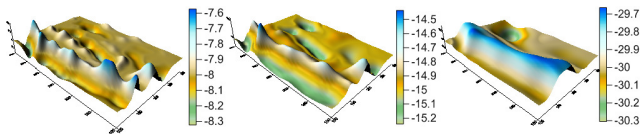


Границы, восстановленные ПЛМ $\hat{u}_0(x, y)$, $\hat{u}_1(x, y)$, $\hat{u}_2(x, y)$.

Решения, полученные для данных с шумом



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 $10^6 \times 3 \times 10^6$,
- параметр регуляризации $\alpha = 10^{-3}$ и демпфирующий множитель $\gamma = 1$,
- $\varepsilon = \frac{\|A(u) + \alpha u - f_\delta\|}{\|f_\delta\|} = 0.1$,
- 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, ускорение на видеокарте в более, чем в 20 раз.

Основные результаты

1. Для уравнения с монотонным оператором дано обоснование двухэтапного метода на основе метода Ньютона и нелинейных аналогов α -процессов: метода минимальной ошибки, метода наискорейшего спуска, метода минимальных невязок. Доказаны теоремы сходимости и сильная фейеровость итерационных процессов при аппроксимации регуляризованного решения. Результаты обобщены на конечномерный случай для задачи с немонотонным оператором, производная которого имеет неотрицательный спектр.
2. Для решения нелинейных интегральных уравнений обратных задач гравиметрии предложены экономичные покомпонентные методы типа Ньютона и типа Левенберга – Марквардта. Предложена вычислительная оптимизация метода Ньютона при решении задач гравиметрии и магнитометрии.
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 Мисилов В.Е., Миниакметова 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 Миниакметова 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!