

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

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)

Итерационный процесс запишем в виде:

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

и в случае метода минимальной ошибки (ММО) найдем параметр β из условия

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

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).

Регуляризованный метод минимальной ошибки

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

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

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

либо

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

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

$$\|F^\kappa(u)\|^2 \leq \mu_\kappa < F^\kappa(u), u - u_\alpha >, \quad \kappa = -1, 0, 1,$$

где

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

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

Монотонность оператора A исходного уравнения — очень сильное требование, которое не выполняется во многих важных прикладных задачах, например, в задачах гравиметрии и магнитометрии. В данной главе показано, что есть возможность ослабить условие монотонности 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_{\varkappa} определяются соотношениями (3.2), последовательности u^k , порождаемые процессом (2.3) 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

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

где $\kappa = -1, 0, 1$, для модифицированных вариантов ММО, МНС и ММН соответственно.

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

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

где ΔJ — усредненный скачок z -компоненты вектора намагниченности, $z = H$ — асимптотическая плоскость, $\Delta G(x, y)$ — 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, Дергачев, 2014)

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

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, итерации 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

Цель: число итераций для модиф. методов больше, чем для немодиф. Однако меньше затраты машинного времени.

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

В третьей главе рассматриваются методы, основанные на методе Ньютона и Левенберга – Марквардта, для решения обратной задачи гравиметрии. Итерационные методы, основанные на методе Ньютона, подходят для решения задачи для модели двухслойной среды, а метод, основанный на методе Левенберга – Марквардта — для модели многослойной среды. Первый параграф посвящен вычислительной оптимизации метода Ньютона и покомпонентному методу типа Ньютона. Во втором параграфе предлагается рассмотреть покомпонентный метод, основанный на методе Левенберга – Марквардта. В третьем параграфе говорится об использовании инструментов параллельного вычисления. В четвертом параграфе обсуждаются результаты численного моделирования. Для задач, имеющих большой размер данных, приводятся результаты расчетов с использованием параллельных вычислений на многоядерных процессорах и графических ускорителях. В пятом

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 $u(x, y)$.

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 $(y - y')$.

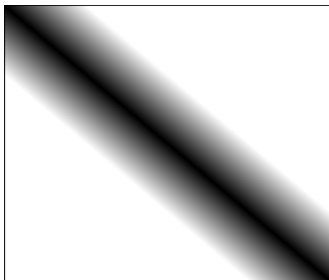


Рис. 2. Схема матрицы производной оператора A

Замечание 3.1.

В структурных обратных задачах гравиметрии 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

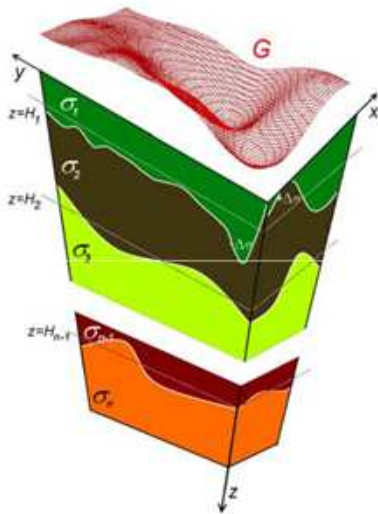


Рис.3. Модель многослойной среды.

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 предположению о локальности изменения гравитационного поля предложен покомпонентный метод типа Левенберга – Марквардта:

$$u_l^{k+1} = u_l^k - \gamma \frac{1}{\varphi_l + \bar{\alpha}} \Lambda [A'(u_l^k)^T (A(u^k) - f_\delta) + \alpha(u_l^k - u_l^0)], \quad (1)$$

где l — номер границы раздела, $l = 1, \dots, L$, Λ — диагональная матрица, состоящая из весовых множителей (Акимова, Мисиллов, 2013),

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

где $K'_u(x', y', x, y, u_l^k(x, y))$ — функция ядра, транспонированного к ядру $K'_u(x, y, x', y', u_l^k(x, y))$. Величина φ_l зависит от u_l^k .

Перепишем в дискретной форме

$$u_{l,i}^{k+1} = u_{l,i}^k - \gamma \frac{1}{\varphi_{l,i} + \bar{\alpha}} w_{l,i} \left[\{A'(u_l^k)^T (A(u^k) - f_\delta)\}_i + \alpha(u_{l,i}^k - u_{l,i}^0) \right], \quad (2)$$

где $w_{l,i}$ — i -й весовой множитель, зависящий от l -й границы раздела,

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

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

3.4. 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.

Вычислены 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 на одном процессорном ядре, T_m — время выполнения параллельного алгоритма на m ($m > 1$) ядрах процессора.



Рис. Принцип работы потоков в OpenMP.

Технология CUDA

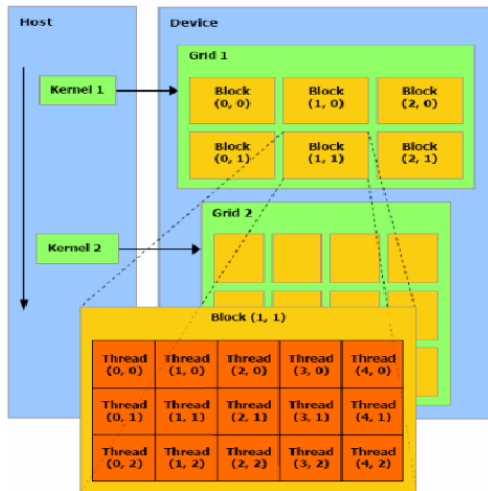


Рис. Иерархия компонентов вычислительной сетки GPU.

3.5. Задача 1

Цель: решить обратную задачу гравиметрии методами типа Ньютона с распараллеливанием OpenMP.

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

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

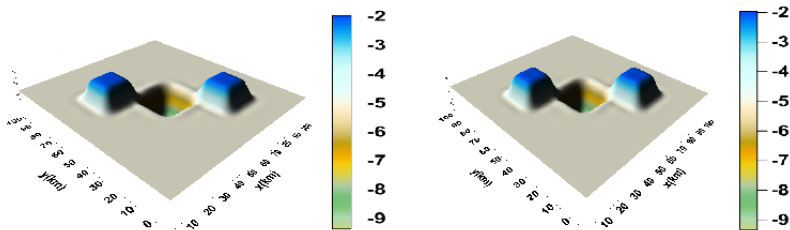


Рис.4. Модельная поверхность (слева) и приближенное решение (справа):

$$D = \{0 \leq x \leq 270, 0 \leq y \leq 300\},$$
$$H = 5, \Delta x = \Delta y = 0.3, \Delta \sigma = 0.2 \text{ г/см}^3.$$

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

3.5. Задача 2

Цель: Решить задачу гравиметрии и сравнить модифицированный метод Ньютона и покомпонентный метод Ньютона на больших сетках.

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

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

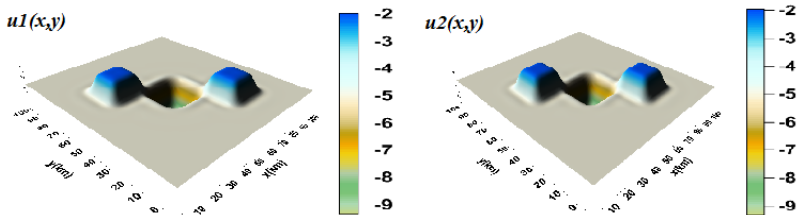


Рис.7. Решение, полученное модиф. методом Ньютона (слева) и решение, полученное покомпонентным методом (справа).

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. Проведенные эксперименты наглядно демонстрируют выгоду использования ПМН для решения обратных задач на больших сетках.

3.5. Задача 3, гравиметрия, многослойная среда

Цель: сравнить по точности решения и по машинным затратам регуляризованный Левенберга – Марквардта и покомпонентный типа Левенберга – Марквардта.

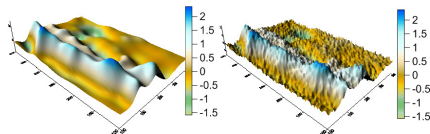


Рис. 10. Суммарное поле и поле с шумом 22% (мГал), $\mu = 1$, $\sigma = 1.15$.

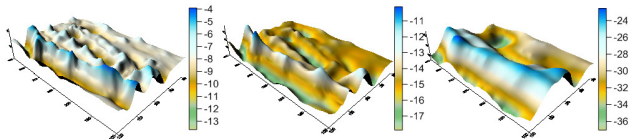


Рис. 11. Точные решения $u_0(x, y)$, $u_1(x, y)$, $u_2(x, y)$.

$H_1 = 8$ 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.

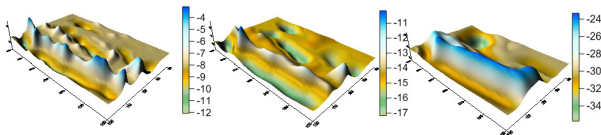


Рис. 12. Границы, восстановленные ЛМ $\tilde{u}_0(x, y)$, $\tilde{u}_1(x, y)$, $\tilde{u}_2(x, y)$.

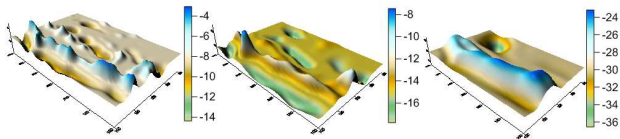


Рис. 13. Границы, восстановленные ПЛМ $\hat{u}_0(x, y)$, $\hat{u}_1(x, y)$, $\hat{u}_2(x, y)$.

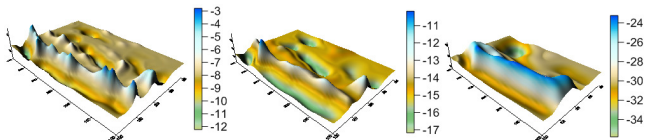


Рис. 14. Границы, восстановленные ЛМ для данных с шумом $\tilde{u}_0(x, y)$,
 $\tilde{u}_1(x, y)$, $\tilde{u}_2(x, y)$.

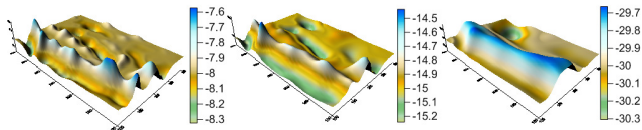


Рис. 15. Границы, восстановленные ПЛМ для данных с шумом $\hat{u}_0(x, y)$,
 $\hat{u}_1(x, y)$, $\hat{u}_2(x, y)$.

- сетки 100×100 и 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 $\delta_i = \|u_a - u_\varepsilon\| / \|u_\varepsilon\|$,
- T_1 — Intel Xeon (1 ядро),
- T_2 — Intel Xeon (8 ядер),
- T_3 — NVIDIA Tesla M2050.

Табл.7. Результаты расчетов в задаче гравиметрии в многослойной среде

Метод	N	δ_1	δ_2	δ_3	Сетка $10^2 \times 10^2$			Сетка $10^3 \times 10^3$		
					T_1	T_8	T_n	T_1	T_8	T_n
ЛМ	60	0.052	0.026	0.051	4 м.	1 м.	22 с.	11 ч.	1 ч.	35 м.
					6 с.	15 с.		40 м.	25 м.	
ПЛМ	20	0.051	0.035	0.060	33 с.	16 с.	3 с.	1 ч. 12 м.	10 м.	3 м.

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: использование 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., Мислов, 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.

- 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.

Другие публикации

- 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!