1. Уважаемый председатель диссертационного совета! Уважаемые члены диссертационного совета и все присутствующие! Вашему вниманию представляется диссертационная работа на тему «Регуляризующие алгоритмы на основе методов ньютоновского типа и нелинейных аналогов α-процессов».
2. Построение итеративно регуляризованных алгоритмов востребовано для решения широкого круга некорректных прикладных задач. Основы теории некорректно поставленных задач были заложены в работах Тихонова, Иванова, Лаврентьева.
3. Дальнейшее развитие было продолжено в работах их последователей и учеников. В работах Бакушинского предложен принцип итеративной регуляризации метода Ньютона и исследована его сходимость. В ИГФ УрО РАН разработана методика решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии с использованием идей регуляризации на основе метода локальных поправок. Алгоритмы решения обратных задач математической физики на основе регуляризованных градиентных методов, методов Гаусса -- Ньютона, Левенберга -- Марквардта разрабатывались в Институте математики и механики УрО РАН.
4. Целью диссертационной работы является построение новых устойчивых и экономичных по времени и памяти алгоритмов на основе методов ньютоновского типа и аналогов α-процессов для решения нелинейных операторных уравнений и исследование их сходимости; реализация параллельных алгоритмов в виде комплекса программ на многоядерных и графических процессорах для вычислений на больших сетках.
5. В первой главе рассматриваются методы решения некорректных задач с монотонным оператором, к которым, сводятся, например, некорректные задачи выпуклой оптимизации. Исследуются регуляризованный метод Ньютона и нелинейные аналоги альфа-процессов. Доказывается их сходимость и сильная фейеровость при аппроксимации регуляризованного решения. Дано обоснование двухэтапного метода.
6. Рассматривается нелинейное уравнение I рода с неизвестной функцией u с монотонным дифференцируемым по Фреше оператором А, действующим на паре гильбертовых пространств, для которого обратный оператор и оператор, обратный к производной, в общем случае разрывны в окрестности решения. Рассматривается двухэтапный метод, где на первом этапе производится регуляризация по Лаврентьеву с параметром α, а на втором этапе аппроксимируется регуляризованное решение. Рассматривается метод Ньютона, по формуле 1.3. Итеративно регуляризованный метод Ньютона ранее был исследован на сходимость в работах Бакушинского, при γ=1, α=α с чертой=α\_к. В его работах априори назначается последовательность параметров α\_к и при условии на вторую производную оператора А доказывается сходимость итераций к решению исходного операторного уравнения. Двухэтапный метод на основе модифицированного метода Ньютона, где производная оператора вычисляется в начальной точке, был исследован в работе Васина.
7. Приведем условие сильной фейеровости для оператора шага и итерационных последовательностей. Это полезное свойство позволяет строить гибридные итерационные процессы, полученные произведением нескольких операторов шага с общим множеством неподвижных точек, а также учитывать в итерационном алгоритме априорные ограничения на решение в виде неравенств.
8. Доказывается теорема о сходимости метода Ньютона. Пусть для монотонного оператора А выполнены следующие условия. Тогда при соответствующем γ, оператор шага и итерационная последовательность удовлетворяют свойству сильной фейеровости при определенном ν, имеет место сходимость итераций к регуляризованному решению, минимизируя ||u^k-u\_ α || по демпфирующему множителю γ, получаем оценку скорости сходимости q.
9. Впервые термин α-процессы появился в монографии Красносельского и его соавторов, это методы для решения линейного уравнения с самосопряженным положительно полуопределенным оператором. Для получения аналогов α-процессов для решения нелинейного операторного уравнения, используем разложение по формуле Тейлора в точке u^k до второго порядка. Параметр β\_k находим из условия минимума соответствующих функционалов для метода ММО (α-процесс с α=-1), МНС (α=0) и ММН (α=1).
10. Схема построения аналогов α-процессов впервые была реализована Владимиром Васильевичем Васиным, получены и исследованы модифицированные аналоги α-процессов, где производная оператора вычисляется в начальной точке. На слайде выписаны модифицированные ММО, МНС и ММН. Они являются экономичными по количеству вычислительных операций, так как не требуют вычисления A’(u\_k) на каждом шаге итераций.
11. В данной работе исследуется случай, когда производная вычисляется в каждой итерационной точке. Введена единая запись этих процессов для нелинейного уравнения с параметром ϗ вместо α, так как во многих работах α традиционно обозначается как параметр регуляризации.
12. Доказывается теорема о сходимости аналогов α-процессов. Обратим внимание, что для ММО требуется самосопряженность оператора производной в точке u^0 и локальность начального приближения. Важно, что параметры α и α с чертой разные, так как α с чертой ≥ N\_0. μ\_ϗ вычисляется в промежуточной теореме для каждого α-процесса. В ходе доказательства теоремы 1.3. устанавливается сильная фейеровость, сходимость итераций к u\_α, минимизируя ||u^k-u\_ α|| по γ, получаем минимальное q для ММО, МНС и ММН.
13. Полученные в главе 1 оценки скорости сходимости итерационных процессов и результаты по аппроксимации точного решения исходного уравнения регуляризованным решением u\_a, позволяют получить оценку погрешности двухэтапного метода и построить регуляризующий алгоритм (получить приближенное решение, при  сходящееся к точному решению).
14. Применимость рассмотренных в главе методов демонстирируется на примере интегрального уравнения с монотонным оператором. Здесь показано, что поставленная задача некорректна. Проверены условия теорем, при расчетах использовались следующие входные данные, получены следующие результаты.
15. Во второй главе обоснована сходимость итераций РМН, ММО, МНС, ММН в **евклидовом пространстве** без требования монотонности оператора A исходного уравнения. Приведены результаты численных экспериментов.
16. Рассматривается **конечномерный случай**, когда оператор, действующий из R^n в R^n у которого матрица производной в точке u имеет спектр, состоящий из различных неотрицательных собственных значений. Воспользовавшись спектральным разложением матрицы A’(u)+ α c чертой I, получаем оценку для нормы обратного к нему оператора и доказываем теоремы сходимости. При выполнении условий теоремы, аналогичным образом, как и для монотонного оператора получаем оценки для q, γ.
17. Так же и для аналогов α-процессов получаем оценки скорости сходимости q и γ.
18. Как следствие, доказывается теорема для модифицированных α-процессов, где производная оператора вычисляется в начальной точке u^0, A’(u^0) – симметричная матрица, получаем оценку сходимости q, общую для всех трех методов.
19. Предложенный подход к получению оценок скорости сходимости итерационных процессов при аппроксимации регулризованного решения полностью переносится на случай, когда спектр матрицы производной, содержит набор малых по абсолютной величине отрицательных собственных значений. Можно подобрать α с чертой так, что все теоремы остаются справедливыми.
20. Для задач с немонотонным оператором нельзя получить общую оценку погрешности двухэтапного метода. Но можно установить оценку для невязки --- основной характеристики точности метода при решении задачи с реальными данными. Оценивая слагаемые в правой части, с использованием оценок главы 2, получаем правило выбора числа итерации, c оценкой невязки двухэтапного метода.
21. Применимость рассмотренных в главе методов демонстрируется на примере модельной задачи магнитометрии. Уравнение структурной обратной задачи магнитометрии о восстановлении поверхности раздела сред по измеренному магнитному полю имеет вид, где u(x,y) – неизвестная функция. Вычислен спектр матрицы производной. Результаты представлены на слайде.
22. В третьей главе предложены покомпонентные методы типа Ньютона и типа Левенберга -- Марквардта, а также вычислительная оптимизация метода Ньютона. Реализован комплекс программ, решены модельные задачи гравиметрии и магнитометрии.
23. Уравнение структурной обратной задачи гравиметрии о восстановлении поверхности раздела сред по измеренному гравитационному полю и скачку плотности сред имеет вид, где u(x,y) – неизвестная функция, в правой части – гравитационное поле, измеренное на некоторой площади.
24. Предлагается вычислительная оптимизация метода Ньютона. Выписав формулы производных оператора гравиметрии и магнитометрии, заметим, что наибольшие значения подынтегральная функция K принимает в точках x, y равных или близких к x’ и y’. В конечномерном случае, матрица производной оператора задачи будет с диагональным преобладанием.
25. Поэтому при решении обратных задач гравиметрии и магнитометрии без существенной потери точности можно отбросить элементы, отстоящие от главной диагонали далее, чем β-ю часть размерности матрицы.
26. Рассмотрим нелинейное интегральное уравнение. Поправка в методе Ньютона \Delta u^k определяется из решения линейного интегрального уравнения. После дискретизации получаем систему уравнений.
27. Теперь в каждом i-м уравнении полагаем, что все поправки в точке s\_j равны поправке в s\_i, то есть все компоненты вектора \Delta u^k(s\_j) одинаковы. $\Delta u^k(s\_i)$ вынесем за знак суммы. i-я компонента поправки вычисляется по этой формуле.
28. Для решения обратной задачи гравиметрии получаем покомпонентный метод Ньютона, который, в отличие от метода Ньютона не требует вычисления обратной матрицы, а просто вычисления функции ψ (x', y'), имеющей следующий вид. С регуляризацией покомпонентный метод Ньютона представлен на предпоследней формуле. В дискретном виде в последней.
29. Рассматривается структурная обратная задача гравиметрии для модели многослойной среды, суммарное гравитационное поле получаем путем сложения гравитационных полей от каждой поверхности, где L – число поверхностей раздела.
30. После дискретизации уравнения на сетке с общим число точек n, получаем систему из n нелинейных уравнений c числом неизвестных L\*n. Чтобы доопределить задачу, вводятся весовые множители, предложенные Акимовой, Мисиловым и используется метод Левенберга-Марквардта с весовыми множителями. Здесь Lamda – весовой диагональный оператор. По аналогии с ПМН, выполним аппроксимацию: вынесем поправку за знак интеграла и получим покомпонентный метод типа Левенберга-Марквардта. φ\_l вычисляется для каждого u\_l. В методе Л-М требуется вычисление произведения матриц и обращение результата произведения матриц. ПЛМ является более привлекательным с точки зрения затрат времени и памяти ЭВМ.
31. В дискретной записи итерационный метод с регуляризацией представлен на слайде.
32. Предложенные методы реализованы в виде параллельных алгоритмов 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, приведенные на слайде.
33. На слайде изображены схемы работы OpenMP и графических процессоров NVIDIA c иерархией компонентов вычислительной сетки CUDA.
34. Решается задача гравиметрии для модели двухслойной среды. Точное решение задается формулой на слайде, на рисунке точное решение слева и приближенное решение справа.
35. Сравниваются между собой методы ньютоновского типа. Вычисления производились на сетке 512 на 512, размер матрицы производной примерно 260 тысяч на 260 тысяч. Были получены следующие результаты. Эксперимент показал, что покомпонентный метод типа Ньютона является самым экономичным по вычислительным затратам: в 3 раза быстрее методов Ньютона и его модифицированного варианта и в 2 раза быстрее метода с ленточной матрицей. Все алгоритмы обладают высокой степенью параллелизма.
36. Решается задача гравиметрии для модели многослойной среды методом Левенберга-Марквардта и покомпонентным методом типа Левенберга-Марквардта. Формулы точных решений взяты с небольшими изменениями из цитируемой статьи. По суммарному полю требуется вычислить три поверхности раздела сред. На поле наносится гауссовский шум 22%.
37. Здесь верхняя группа рисунков – точные решения, посередине – поверхности раздела, восстановленные методом Левенберга-Марквардта, нижняя группа рисунков – покомпонентным методом Левенберга-Марквардта.
38. На этом слайде приближенные решения для задачи с шумом.
39. Приводятся результаты вычислений на сетке 1000 на 1000, матрица производной имеет миллион строк и три миллиона столбцов. Критерий останова ε, в таблице количество итераций, относительные погрешности решения у каждой из поверхностей раздела, времена счета последовательной программы, параллельной программы на 8 ядрах Intel Xeon и на видеокарте. Чтобы сократить объёмы памяти, используемые методом ЛМ, матрично-векторные операции выполняются «на лету».
40. Основные результаты диссертации. Для уравнения с монотонным оператором дано обоснование двухэтапного метода на основе регуляризованного метода Ньютона и нелинейных аналогов α-процессов: методы минимальной ошибки, наискорейшего спуска, минимальных невязок. Доказаны теоремы сходимости и сильная фейеровость итерационных процессов при аппроксимации регуляризованного решения. В конечномерном случае результаты обобщены для уравнений с немонотонным оператором, производная которого имеет неотрицательный спектр.
41. Для решения обратной структурной задачи гравиметрии предложены экономичные покомпонентные методы типа Ньютона и Левенберга – Марквардта. Предложена вычислительная оптимизация метода Ньютона при решении задач с матрицей производной с диагональным преобладанием. Разработан комплекс параллельных программ для суперкомпьютеров решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии на больших сетках.
42. Материалы диссертации докладывались на семинарах и конференциях,
43. 5 работ опубликовано в журналах ВАК, 3 – процитировано в Scopus, всего 13 публикаций.
44. Спасибо за внимание.