1. Уважаемые участники семинара!

Вашему вниманию представляется диссертационная работа на тему «Регуляризующие алгоритмы на основе методов Ньютоновского типа и нелинейных аналогов α-процессов».

1. 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 первого рода. Теорию решения некорректных задач развивали Тихонов, Лаврентьев, Бакушинский, Васин, Танана, Ягола, Neubauer, Scherzer, и др.
2. Алгоритмы решения обратных задач математической физики на основе регуляризованных градиентных методов, методов Гаусса -- Ньютона, Левенберга -- Марквардта разрабатывались в Институте Уральского отделения РАН В.~В.~Васиным, Е.~Н.~Акимовой. Алгоритмы решения геофизических задач на основе метода локальных поправок разрабатывались в Институте геофизики Уральского отделения Пруткиным.
3. Целью диссертационной работы является построение новых устойчивых и экономичных по времени и памяти алгоритмов на основе методов ньютоновского типа и α-процессов для решения нелинейных операторных уравнений и исследование их сходимости; реализация параллельных алгоритмов в виде комплекса программ на многоядерных и графических процессорах (видеокартах) для вычислений на сетках большого размера.
4. В первой главе рассматриваются методы решения нелинейных некорректных задач с монотонным оператором. Дано обоснование двухэтапного метода на основе сходимости регуляризованного метода Ньютона. Построены методы минимальной ошибки, наискорейшего спуска и минимальных невязок и доказывается их сходимость и сильная фейеровость при аппроксимации регуляризованного решения.
5. 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. Производится регуляризация по Лаврентьеву с параметром α, f\_delta – правая часть с шумом. Рассматривается метод Ньютона, по формуле 1.3. Итеративно регуляризованный метод Ньютона ранее был исследован на сходимость в работах Бакушинского, Гончарского 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. Модифицированный метод Ньютона, где производная оператора вычисляется в фиксированной точке был исследован в работе Васина.
6. Доказывается теорема о сходимости метода Ньютона при условиях липшицевости оператора А и его производной. При γ=1, достигается локальная сходимость метода к регуляризованному решению, причем наилучшее q при α=α с чертой.
7. Приведем условие 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. Пусть для монотонного оператора А выполнены условия липшицевости и липшицевости его производной в некотором шаре, содержащем начальное приближение и регуляризованное решение, есть оценка нормы производной оператора в точке u0, A’(u0) – самосопряженный оператор. 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 γ, получаем то значение γ, при котором достигается минимальное q.
9. Впервые термин α-процессы появился в монографии Красносельского и др. его соавторов, методы предназначались для решения линейного уравнения с самосопряженным, положительно определенным оператором. Для получения итерационных α-процессов для решения нелинейного операторного уравнения, используем линеаризацию по формуле Тейлора в точке u^k. Удерживая два члена из разложения, переходим к линейному уравнению в фиксированной итерационной точке, получаем последовательность линейных задач и параметр β\_k находим из условия минимума соответствующих функционалов для метода ММО (α-процесс с α=-1), МНС (α=0) и ММН (α=1). В нелинейном случае введена единая запись этих процессов для нелинейного уравнения с параметром ϗ, так как во многих работах α уже обозначается как параметр регуляризации. Здесь нельзя писать дробную степень, в отличие от линейного случая, где можно любое от -1 до бесконечности, так как требуется самосопряженность оператора производной.
10. α-процессы можно модифицировать, вычислив производную оператора в фиксированной точке. На слайде выписаны модифицированные ММО, МНС и ММН. Модифицированные α-процессы являются экономичными по количеству вычислительных операций, так как не требуют вычисления A’(u\_k) на каждом шаге итераций. Для модифицированных случаев α-процессов можно писать любую степень (Васин, доклады РАН), так как оператор производной самосопряженный.
11. Доказывается теорема о сходимости α-процессов с оценкой при условиях липшицевости и липшицевости его производной в некотором шаре. Для ММО требуется самосопряженность оператора производной в некоторой точке u^0 и локальность начального приближения. Важно, что параметры α и α с чертой разные, так как α с чертой ≥ N\_0. Если их брать одинаковыми, то оценка не получится. μ\_ϗ вычисляется в промежуточной теореме для каждого α-процесса. В ходе доказательства теоремы 1.3. устанавливается фейеровость, сходимость итераций к u\_ α, минимизируя ||u^k-u\_ α || по γ, получаем γ, при котором достигается минимальное q для ММО, МНС и ММН.
12. Полученные в главе 1 оценки скорости сходимости итерационных процессов и результаты по аппроксимации точного решения исходного уравнения семейством регуляризованных решений u\_a позволяют получить оценку погрешности двухэтапного метода. В нашей совместной работе с Влад. Васильевичем Васиным приводится теорема об оптимальной по порядку оценке погрешности двухэтапного метода. (У Бакушинского назначается α\_k, условие на α\_k и доказывается теорема сходимости. А на этом пути можно получить оценки погрешности на классе).
13. Приводится пример нелинейного интегрального уравнения с монотонным оператором из L2 в L2. Уравнение взято из Таутенхана. В случае шума при δ->0 y\_δ->y, а ||u-u^ δ||->бесконечности, что говорит о некорректности поставленной задачи. При расчетах использовались следующие входные данные δ=0.1, точное решение – функция z=t^2, начальное приближение u^0=0, γ=1, α=10^-3, α с чертой=1. Критерий останова – относительная погрешность 0.25. Методы достигли заданной точности за 8-9 итераций.
14. 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 численных расчетов.
15. 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, можно получить оценку для нормы обратного к нему оператора и доказать теоремы сходимости. При выполнении условия равномерной ограниченности функции μ(S(u)) по u в шаре и симметричности матрицы производной в некоторой точке из шара, аналогичным образом, как и для монотонного оператора получаем оценки для q, γ.
16. Так же и для α-процессов получим оценки скорости сходимости q и γ.
17. 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.
18. В случае, когда спектр матрицы A'(u^k), состоящий из различных вещественных значений, содержит набор малых по абсолютной величине отрицательных собственных значений, можно подобрать такой параметр регуляризации α с чертой, что α с чертой минус модуль наименьшего собственного значения= α со звездочкой > 0, норму обратного оператора к A'(u)+ αI можно оценить сверху, заменяя в оценке α с чертой на α со звездочкой. Таким образом, все теоремы остаются справедливыми при замене α с чертой на α со звездочкой.
19. Для задач с немонотонным оператором нельзя получить общую оценку погрешности двухэтапного метода, как на слайде 13. Тем не менее, в конечномерном случае, когда производная оператора A'(u) имеет положительный спектр, можно установить оценку для невязки --- основной характеристики точности метода при решении задачи с реальными данными. Запишем неравенство треугольника и оценим первое слагаемое, используя константу Липшица и оценки сходимости, полученные в теоремах главы 2, а второе – из условия разрешимости регуляризованного уравнения с параметром регуляризации α, зависящим от δ и принадлежности регуляризованного решения шару радиуса m с центром в u^0. Выбирая, например, α=α(δ) и приравнивая слагаемые в правой части, получаем правило выбора числа итерации, при котором справедлива оценка для невязки двухэтапного метода
20. Решается модельная задача магнитометрии. Уравнение структурной обратной задачи магнитометрии о восстановлении поверхности раздела сред по измеренному магнитному полю имеет вид, где u(x,y) – неизвестная функция. По точному решению синтезируется магнитное поле, далее решается обратная задача. Было получено число обусловленности A'\_n(u\_n^k примерно 1.8\*10^7, спектр неотрицательный, состоящий из различных собственных значений. Параметры указаны на слайде. Итерационные методы достигают ε за 4--5 итераций, у модифицированных меньше время счета.
21. В третьей главе предложены покомпонентные методы типа Ньютона и типа Левенберга -- Марквардта, а также вычислительная оптимизация методов типа Ньютона. Реализован комплекс программ, решены модельные задачи гравиметрии.
22. Уравнение структурной обратной задачи гравиметрии о восстановлении поверхности раздела сред по гравитационному полю и скачку плотности сред имеет вид, где u(x,y) – неизвестная функция, в правой части –поле, измеренное на некоторой площади.
23. В уравнении гравиметрии в предыдущем слайде обозначим ядро интегрального оператора A через функцию K. Итерации в методе Ньютона строятся как умножение оператора производной в точке u^k на поправку на итерации Δu^k равно –(A(u)-f). В случае задачи гравиметрии производится интегральное преобразование над поправкой с ядром K’\_u. Идея ПМН в замене в этом выражении u^k(x, y)=u^k(x', y')=const относительно переменных интегрирования и вынесем за знак интеграла. Т.о. загрубляем левую часть, но упрощаем расчеты.
24. Таким образом, для решения обратной задачи гравиметрии получаем покомпонентный метод Ньютона. Здесь, в отличие от метода Ньютона, не требуется 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. Сумму $\psi\_{k,m}^k$ можно интерпретировать как сумму элементов $(k\times M + l)$-й строки матрицы производной $A'\_n(u\_n^k)$.
25. 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.
26. 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.
27. При решении структурной обратной задачи гравиметрии для модели многослойной среды, суммарное гравитационное поле получаем сложением гравитационных полей от каждой поверхности, где L – число поверхностей раздела.
28. После дискретизации уравнения на сетке с общим число точек n, где задана правая часть и аппроксимации интегрального оператора по квадратурным формулам имеем вектор правой части длины n, результирующий вектор решения длины L\*n, матрицу производной оператора с n строк, L\*n столбцов, получаемую приписыванием справа матрицы производной в u^k\_l. При транспонировании получаем матрицу с L\*n строк и n столбцов. Система состоит из n нелинейных уравнений c числом неизвестных L\*n. Чтобы доопределить задачу вводятся весовые множители, предложенные Акимовой, Мисиловым. Для решения системы уравнений используется метод Левенберга-Марквардта с весовыми множителями. Здесь Lamda – диагональный весовой оператор, состоящий из весовых множителей. По аналогии с ПМН, можно вынести поправку за знак интегрального оператора гравиметрии и получить покомпонентный метод типа Левенберга-Марквардта. φ\_l вычисляется для каждого u\_l. Очевидно, что ПЛМ является более привлекательным с точки зрения затрат времени и памяти ЭВМ, т.к. нет операций умножения и обращения матриц.
29. В дискретной записи итерационный метод с регуляризацией представлен на слайде, здесь l – номер границы раздела и i-я компонента вектора пробегает значения от 0 до n-1 для каждого l, w\_l,I – весовые множители, вычисляемые по методике, описанной в процитированной работе.
30. Предложенные методы реализованы в виде параллельных алгоритмов для вычислений на многоядерных процессорах и графических ускорителей; используются инструменты: OpenMP, CUDA; библиотеки Intel MKL, Cublas для матрично-векторных операций и вычислений спектра матриц, чисел обусловленности; 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.
31. Схема комплекса программ приводится на слайде.
32. Технология OpenMP реализует идею параллельных вычислений с общей памятью, когда у всех процессов общая оперативная память и, соответственно, адресное пространство. Ключевыми понятиями OpenMP являются параллельная область, мастер-поток и подчиненные потоки. Последовательные и параллельные области разграничиваются в коде специальными директивами для компилятора. На слайде можно видеть, как при входе в параллельную часть мастер поток активирует другие параллельные потоки, которые совместно выполняют работу, а при выходе остается снова лишь мастер-поток. При выполнении последовательной части программы подчиненные потоки спят.
33. Технология CUDA для вычисления на видеокартах NVIDIA имеет свои особенности. Видеокарта предствляет собой периферийное устройство, при подключении к хост-машине (ПК) инициализируются тысячи потоков --- ядер. Поэтому при написании параллельного CUDA-кода требуется четко разграничивать пространство действия центрального процессора host и видеокарты device. Задачей кода для host требуется инициализация входных данных, запуск подпрограмм для видеокарты на тех участках кода, где требуется распараллеливание. Программный код для device состоит из специальных подпрограмм --- ядерных функций, выполняющихся непосредственно на видеокарте. Ядерная функция выполняется каждым ядром графического процессора внутри блока. На слайде показано, как все блоки соcтавляют вычислительную сетку grid. Каждый из блоков имеет свой уникальный id в пределах grid, каждое ядро имеет свой уникальный id в пределах свого блока.
34. Решается модельная 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: исключение из матрицы производной оператора A'(u^k) элементов, далеко отстоящих от диагонали, почти не влияет на количество итераций для достижения заданной точности метода Ньютона. Данные, полученные в ходе расчетов, не противоречат теоремам главы 2 о сходимости метода Ньютона. Замена матрицы производной на ленточную не оказывает существенного влияния на скорость сходимости за счет почти не измененного параметра N\_1 в оценках теорем главы 2. Все алгоритмы обладают высокой степенью параллелизма, что дает почти n-кратное уменьшение времени счета программ при использовании n ядер процессора. Из таблицы видно, что ускорение S\_m к близко к максимальным показателям. Эксперимент показал, что покомпонентный метод типа Ньютона является самым экономичным по вычислительным затратам: в 3 раза быстрее методов Ньютона и в 2 раза быстрее метода с ленточной матрицей.
36. Решается модельная задача гравиметрии для модели многослойной среды методом Левенберга-Марвкарда 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% с мат. ожиданием=1, дисперсия 1.15.
37. Здесь верхняя группа рисунков – точные решения, посередине – поверхности раздела, восстановленные методом Левенберга-Марквардта, нижняя группа рисунков – поверхности, восстановленные покомпонентным методом Лев.-Марк.
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=0.1, N – количество итераций для достижения заданной точности ε, δ1,2,3 – относительные погрешности решения каждой из поверхностей раздела, T1 – время счета последовательной программы, T2 – время счета параллельной программы на 8 ядрах Intel Xeon, T\_gpu – время счета на видеокарте NVIDIA Tesla. При больших размерах сеток матрицы в методе ЛМ требуют для хранения значительных объемов памяти. В этой задаче матрица $A'(u^k)^Т A'(u^k)$ с данными типа двойной точности занимает примерно 67 055.2~Гб. Чтобы сократить объёмы требуемой памяти, было решено выполнять все матрично--векторные операции <<на лету>>.
40. Основные результаты диссертации. Первое: для нелинейного уравнения с монотонным оператором дано обоснование двухэтапного метода на основе регуляризованного метода Ньютона. Построены нелинейные аналоги α-процессов: методы минимальной ошибки, наискорейшего спуска, минимальных невязок. Доказаны теоремы сходимости и сильная фейеровость итерационных процессов при аппроксимации регуляризованного решения. Для задачи с немонотонным оператором, производная которого имеет неотрицательный спектр, доказаны теоремы сходимости для метода Ньютона и нелинейных α-процессов к регуляризованному решению.
41. Второе: 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 с матрицей производной с диагональным преобладанием. 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.
42. Материалы диссертации докладывались на следующих семинарах и конференциях,
43. 5 работ опубликовано в журналах ВАК, 3 – процитировано Scopus, всего 13 публикаций.