Métodos paralelos para la resolución de un problema inverso, aplicacion sobre un problema de gravimetria

Leonardo Andrés Jofré Flor

September 8, 2014

1 Prefacio

Resolver problemas de la física desde la computación, si es que nos podemos referir a la computación solo como cálculo, es una estrategia que ha ido tomando fuerza dada la posibilidad de obtener soluciones cada vez mas eficientemente a problemas cada vez más grandes. Esto se produce por evolución de la capacidad de computo de los procesadores, y estudio de las estructuras de datos solución en tiempos de cómputo cada vez de menor orden en espacio para computo y tiempo de cálculo, también métodos numéricos resuelven problemas clásicos del álgebra lineal.

El material incluido ... todos estos ingredientes necesarios para poder resolver un problema de mecánica computacional mediante la técnica de problemas inversos.

Esto de la computación, que se refiere a la capacidad a la capacidad de uso intensivo de computadores, concepto ligeramente impromipio, dado que el instrumento no define la técnica

estudiando modelos algorítmicos de fenómenos físicos, permite resolver problemas que no son tratables analíticamente, o como se suele referir, requieren de métodos numérico.

Luego, la computación permite un interesante juego teórico: Si se tiene un modelo detallado de la realidad que se aspira a comprender, se puede puede simular el comportamiento en la memoria de un computador para lograr medir cantidades relevantes, y en la medida de que la computación y algoritmos avanzan nos permiten generar herramientas automatizadas.

El presente trabajo tiene nace en el contexto de crear las herramientas necesarias para la resolución más general de una linea de investigación de gravimetría para el laboratorio de modelamiento matemático para geomecánica (MMGEO) que tenía como objetivo estimar el cave-back a partir de las mediciones de gravedad (verticales) en terreno. Dada las necesidades de considerar geometrías más generales y además considerar la información de la producción de material de la mina es necesario hacer consideración de una nuevo método numérico que se base en otros supuestos

La forma en que se desarrolló este trabajo depende fuertemente de la evolución de cada uno de los problemas puntuales que he tenido la explorados, buscando metodologías para la resolución de problemas, sirviendo de apoyo para otros matemáticos o creando nuevas implementaciones para los papers que instuiamos en que se podrán encontrar las soluciones para los subproblemas.

Esto quiere decir que el desarrollo, aunque consideraba de mucho material y ya mucha implementación para la fecha en que se inicio esta tesis, gran parte del trabajo fue darle una secuencialidad, ordenando, revisando y desechando los multiples borradores en papel y papers sueltos.

Mucho tiene de resumen del trabajo ya hecho, pero así mismo ese resumen recoje los argumentos necesarios para justificar los futuros trabajos que pueden ser posibles o en los que ya se están trabajando.

Es posible que cada uno de los capítulos de este trabajo tiendan a parecer un trabajo independiente, eso es totalmente intencional, las razones son que cada uno de los términos de este trabajo se han desarrollado de forma independiente pero sin una conexión entre estas, cada una ha intentado trabajar con la física de forma independiente. Esto más que un defecto puede considerarse una oportunidad, dado que, un trabajo importante seráa la interelación de distintos modelos para obtener las generalizaciones de un modelo unificado.

2 Introducción

El concepto de Problema inverso, como su nombre lo indica, el camino contrario al problema directo Todo efecto proviene de una causa, (...) un problema se puede denominar como directo si conocemos las leyes que rigen un fenómeno y las causa de un fenómeno con lo cual es muy directo computar algunos parámetros que caracterizan a los efectos. El problema inverso es distinto está inscritos en una rama relativamente reciente de las matemáticas. En el problema inverso se intenta deducir las causas (resumidas en los parámetros de un modelo) a partir de los datos observados. Dado que para estimar los parámetros del modelo, nos basamos en métodos que dependen de los datos observados hace que nos enfrentemos a un conjunto de preguntas que son de importancia resolver y que implican respuestas en una formulación matemática, lo que implicaría la posibilidad de un diseño de computo suficiente para obtener.

Además, para tratar computacionalmente el problema, los modelos deben ser discretizados y esto introduce errores adicionales.

La gravimetría es un proceso importante en la búsqueda de depósitos minerales

El Hace referencia a la computación de alto rendimiento para resolver un problema físico que nace fundamentalmente de la minería.

El presente trabajo presenta algunos avances que hacen referencia a la reconsideración de dominios más generales lo que impacta directamente en los métodos computacionales y abre camino para el uso más eficiente del hardware mediante computación paralela.

De esto se deduce que el modelo posiblemente mejorable en los siguientes aspectos:

1. Considerar el volumen como una nueva restricción.
2. Mejorar la velocidad de convergencia del método numérico.
3. Aspectos de visualización de los resultados.
4. considerar distribuciones más generales para la estimación de la forma del volumen.
5. Reestimar el parametro α para la regularización de Tychonoff para el problema mal puesto.

2.1 objetivos generales

Exponer los métodos computacionlaes para resolver problemas científicos que requieren de alto rendimiento.

Formular un método general para estimar volúmenes que generen campos escalares cocidos. Crear un nuevo modelo computacional de problema inverso para poder reconstruir el volumen buscado.

Comparar los resultados anteriores ...

2.2 objetivos específicos

crear una aplicaciones que haga uso de un cluster de alto desempeño mediante computación paralela me paso de mensajes para la resolución de un problema de gravimetría.

Por otra parte, exportar librerías de mallado que ya se encuntran en C++ a python, como lo son TetGen, meiante swig y específicamente mediante una biblioteca llamada instant, esta parte se hará al final del desarrollo ya que pertenece a una parte de optimización de lo ya existente.

3 Planteamiento del problema

Sea $p \in \mathbb{R}^3$ una particula que genera un campo escalar en la coordenada x de la forma $F(x-u)$ donde u son las coordenadas de p.

Si consideramos un volumen V compuesta por la superposición de estas partículas, el campo escalar generado por este volumen estará determinado por la siguiente integral:

$$\psi(x) = \int_V \rho(u)F(x-u)dV$$

donde ρ es una función de densidad para la coordenada u.

El cálculo del campo escalar ψ en todo el medio es trivial, dado que es una integral sobre un volumen ya conocido y el cálculo desde un punto de vista computacional y matemático carece de atractivo para la mayoría de los casos.

Podríamos decir entonces que el volumen V es la causa del campo escalar ψ y este campo se puede obtener conociendo F y ρ

Por otro lado, los problemas de ingeniería en los cuales se desea estimar las causas de un fenómeno siempre tiene una cantidad limitada de información, y que además pueden contener errores.Si se conocen para un conjunto finito de puntos en el espacio $(x_i, \psi(x_i))$ los campos escalares producidos se desea recuperar la forma del volumen V que genera esos campos específicamente.

4 Propuesta de solución

Para este se hay que recuperar la frontera como incognita que produce esos vectores conocidos, para ello se usará una estructura de datos de malla generada mediante una triangulación de Delaunay en la cual mediante un método numérico de Newton-Raphson se iterará cada nodo de la frontera hasta converger a la solución buscada.

Se propone una solución mediante un método numérico que toma una malla inicial Ω que representa el volumen del sólido y que iterativamente converja a una malla que busca minimizar la siguiente integral.

$$I(\Omega) = \sum_i (\psi(x_i) - \int_\Omega F(x_i - u) dV)^2$$

Consideremos que existe una función $G : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ que cumple siguiente propiedad

$$\nabla \cdot G(u) = F(x_i - u)$$

entonces, gracias al teorema de la divergencia:

$$I(\Omega) = \sum_i (\psi(x_i) - \int_{\partial\Omega} \vec{G} \cdot \vec{n} dS)^2$$

donde $\vec{n}$ es el vector normal a la superficie volumen buscado.

4.1 Modelo discretizado

Dado que el minimizador de I no se puede obtener de forma analítica en su forma más general se hará uso de un método numérico para encontrar las coordenadas nodales para la discretización de la frontera Ω.

Si consideramos $\tilde{\Omega}$ una discretización tetrahedrizada del dominio original Ω donde se cumple la siguientes propiedades:

$$\bigcup_{T_i \in \tilde{\Omega}} T_i = \tilde{\Omega}$$

como es natural y que además que cada una de sus componentes sean disyuntas, esto quiere decir que

$$\bigcap_{T_i \in \tilde{\Omega}} T_i = \varnothing$$

por lo que la integral queda definida de la siguiente forma

$$I(\Omega) = \sum_i (\psi(x_i) - \sum_{u_j \in \partial\tilde{\Omega}} \vec{G}_k \cdot \vec{n}_k \Delta S_k)^2$$

En donde $u_j \in \partial\tilde{\Omega}$ significa que la suma se hace sobre todos los nodos de la frontera del volumen buscado y ΔS_k corresponde a un area asociada que se puede ontener mediante la siguiente formula.

$$\Delta S_k = \sum Poli_k$$

en donde $\sum_k Poli_k$ es el area de la superficie generada por el polígono formado por todos los centroides de cada uno de los triangulos que contienen a u_k dado el mallado específico. Para esta cuenta se puede usar el ortocentro, el baricentro o el incentro siendo los tres buenas aproximaciones, se seleccionará entonces la que hagan que el cálculo sea más simple.

Una caracteristica de esta medida es que se debe cumplir que

$$\lim_{N \to \infty} \sum \Delta S_k = \oint dS = A$$

en donde A es el area de la superficie para el caso continuo.

En el caso elemental, la solucion del problema es la superficie que minimize el funcional I pero en el caso mas general existen una serie de restricciones que se deben de tomar en consideracion y son especificamente de cinco tipos.

1.- El volumen encerrado es conocido 2.- La frontera de la superficie es conocida en un conjunto finito de puntos 3.- La frontera de la superficie es conocida es un conjunto infinito de puntos (un segmento) 4.- la superficie esta acotada de alguna manera por otra superficie. 5.- existen segmentos de recta que estan estrictamente fuera del volumen inscrito en la superficie.

4.2 Rediscretización

En la medida que la frontera de discretizada de Ω vaya actualizandose hasta converger en el minimizador de I entonces la calidad de la triangulación de la frontera va disminuyendo por lo que es necesario rediscretizar el dominio para conservar las propiedades óptimas dadas por la triangulación de Delaunay.

4.3 Restricciones y regularización

Al ser un problema del tipo inverso que admite una inestabilidad natural, dado que los datos son por mucho inferiores a los grados de libertad que se desean estimar, nos vemos en la necesidad de agregar restricciones que hagan robustecer los resultados y aumentar la velocidad de convergencia. Además se buscará usar conocimiento a priori que sirva como restricción: Un ejemplo es que es conocida el area de la superficie o el volumen las cuales serían restricciones de igualdad y la segunda es que el volumen debe respetar ciertas cotas superiores o inferiores las cuales son restricciones de desigualdad. Para manejar ese tiempo de restricciones se hará uso del teorema de karush Khun Tacker que es una generalización de los multiplicadores de Lagrange para este objetivo.

4.4 Método de Newton-Raphson paralelo

Finalmente, después de todo el procedimiento anterior se buscará la solución en paralelo del método numérico para encontrar la solución, para esto se usará la librería Petsc dado que para el método de Newton-Raphson se requiere calcular numéricamente la inversa del jacobiando, que es en si una matriz dispersa, esta biblioteca tiene como objetivo ese tipo específico de problemas.

Consideremos que se tiene un sistema de la forma

$$F(x) = 0$$

en donde $x = (x_1, x_2, \cdots, x_k)$, para resolver el sistema se tiene entonces que usar algún método iterativo eficiente, como lo puede ser Newton-Raphson, así de esta manera, si calculamos el jacobiano J, el algoritmo dependiendo de la condición inicial x_0 queda de la siguiente manera.

$x_{n+1} = x_n + J^{-1}(x_n) * F(x_n)$

en donde se sabe que J es una matriz dispersa

el valor de $J^{-1}(x_n) * F(x_n)$ es muy complejo de obtener mediante métodos exactos. El valor de esta multiplicación es equivalente a la solución del sistema

$J(x_n)f = F(x_n)$

4.5 Subespacio de Krilov

El espacio de Krilov es muy importante para la resolucion de sistemas de ecuaciones en donde hay que invertir una matriz dispersa, se busca la solucion del sistema dentro de ese espacio. El subespacio de Krilov es un sobespacio que se construye de la siguiente manera

$K_r(A, v) = spanA^0v, ..., A^{r-1}v$

El $n-$simo espacio de Krilov , en donde A es una matriz invertir

4.6 Uso de Generalized minimal residual method (gmres)

Gmres aproxima la solución la solución $Ax = b$ para el vector $x_n \in K_n$ que minimiza la norma Euclidea del residuo $r_n = Ax_n - b$.

Es un método iterativo para la solución de sistemas de ecuaciones lineales no simétricos. El método aproxima

4.6.1 Uso de gmres para la inversión en paralelo

5 Aplicaciones

El problema que se trata de solucionar es el caso más general de la busqueda de un medio que genera un campo escalar. Si el campo está asociado al gravitacional entonces se trataría de un problema de gravimetría en donde las diferencias de gravedad entre dos instantes representan el campo gravitacional producido por un volumen desprendido en una caverna, por otro lado, si el campo es un campo magnético entonces se trata de un problema de magnetometría, en donde un mineral con una densidad ρ genera alteraciones el un campo magnético, ambas técnicas requeridas en minería.

6 Modelo computacional

El problema es escencialmente numérico y por lo tanto computacional. Al ser un problema no resoluble analíticamente en su forma más general, abre la pósibilidad del uso de técnicas numéricos y las estructuras de datos que la hacen atractiva desde un punto de vista algorítmico.

desconosido que se desea estimar, entonces el problema es diferente y puede llegar a ser no trivial. La solución puede no existir, de existir puede ser no única y de ser única puede no ser estable. Para demostrar la existencia, unicidad y estabilidad de la solución son partes del desafio de la tesis.

Este tipo de problemas son denominados problemas inversos los cuales muchos de ellos pueden ser denominados como problemas inversos mal puestos y que requieren de técnicas de regularización y agregar. Determinar si es un problema paralelizable, el tratamiento en terminos computacionales y cuales son las estructuras de datos necesarias para manipular correcta y/o eficientemente el problema no son cuestiones de respuesta inmediata. En la medida que la investigación vaya evolucionando irán apareciendo problemas que van a ser resueltos primero con un prototipo suboptimo y luego su implementación definitiva.

Estas preguntas no son de respuesta inmediata y dependen del problema que se esté tratando, pero está a la vista que la abundancia de hardware permite reflexionar sobre las posibilidades de optimización del problema en la media que ya se tenga una solucón subóptima, por esta razón considerará en la medida que se deba de optimizar la solución existente.

7 Optimización no lineal

El presente capítulo tiene como objetivo presentar el teorema Khun-Tucker para optimización no lineal. Este teorema es una generalización a los multiplocadores de Lagrange por lo que nos permite resolver problemas de optimización no lineal mediante restricciones de desigualdad, además las condiciones de Kuhn-Tucker da las condiciones necesarias para la existencia de solución de un programa de optimización no lineal. Además se identifican los puntos en el cual el cómputo se puede escalar horizontalmente mediante la técnica de computación paralela.

8 Problemas inversos

Uno se los más famosos problemas invesos es el siguiente:¿Podemos escuchar la forma de de un tambor?, esto quiere decir: ¿Es posible encontrar una única forma para un tambor basándonos en el sonido que este emite?, el problema directo es verdaderamente simple, dado que, conocida la forma, podemos deducir el sonido que emite y su solución es conocida ya desde hace mucho tiempo, pero para la solución invesa la respuesta es que no, dado que dos tambores distintos pueden emitir el mismo sonido, esto quiere decir que si escuchamos un sonido no podríamos distinguir cual es la forma del que lo omite.

Las teorías físicas nos permiten hacer predicciones: Dada una descripción completa de un sistema físico nosotros podemos predecir el resultado de algunos parámetros. El problema de predecir el resultado de las medidas es llamado *problema de modelación o de modelamiento*. El *problema inverso* consiste en que, usando los resultados actuales inferir los valores de los parámetros que caracterizan el sistema.

Muchos sistemas físicos pueden ser descritos usando un modelo lineal de la forma:

$$AX = Y$$

en donde X e Y se consideran espacios de Hilbert.

8.1 Regularización

Método de regularización de Tichonoff

La idea básica de la regularización de Tichonoff está relacionada con la minimización del funcional cuadrático:

$$\Phi_\mu(f,g) = \|Af - g\|^2 + \mu^2\|f\|^2$$

El minimizador se puede obtener de forma analítica de la siguiente manera.

$$X = \left(A^*A + \mu^2 I\right) A^*Y$$

alguna bibliografía definen $\mu = \sigma_Y/\sigma_X$ como el parámetro óptimo.

8.2 Regularización de Tichonoff paralelo para problemas de optimización no lineal

La regularizacion de Tijonov se usa habitualmente para obtener soluciones relativamente suaves, dado que penaliza la norma de la solucion lo que penaliza las gradientes grandes.

Para buscar el óptimo para el siguiente problema de optimización con restricciones

$f(x) = 0$ con $g_i(x) < 0 y h_i = 0$ Al generar un sistema no lineal iterativamente se converge a la solución.

Para resolver un problema no lineal, pero que al mismo tiempo conserve cierta suavidad en la solucion se usara la siguiente tecnica.

9 Ejemplo bidimensional

Consideremos la curva cerrada simple C en el plano XY que encierra a un área Ω y $F(x,y) = \frac{y}{(x^2+y^2)^{\frac{3}{2}}}$ un campo escalar genereado por una unidad diferencial dA entonces el campo escalar en el punto (x,y) generado por la totalidad del área encerrada por la curva cerrada simple C es

$$\psi(x,y) = \int_\Omega F(u-x, v-y)dudv$$

$$\psi(x,y) = \int_\Omega \frac{1}{(x-u)^2+(y-v)^2}dudv$$

Aplicando el teorema de Green

$$\psi(x,y) = \int_{\partial\Omega} Pdu + Qdv$$

en donde se cumple que $\frac{\partial Q}{\partial u} - \frac{\partial P}{\partial v} = \frac{1}{(x-u)^2+(y-v)^2}$. Si consideramos que P es constante en términos de v entonces $\frac{\partial P}{\partial v} = 0$, luego:

$$\frac{\partial Q}{\partial u} = \frac{1}{(u-x)^2+(v-y)^2}$$

luego $Q(u,v) = \int \frac{1}{(u-x)^2+(v-y)^2}du + h(v)$

Como C es una curva cerrada simple, entonces $\int h(v)dv = 0$, finalmente, el campo escalar en todo queda definido en todo el espacio como la siguiente función.

$$\psi(x,y) = \oint_{\partial\Omega} Q(u-x, v-y)dv$$

Si discretizamos la integral

$$\tilde{\psi}(x,y) = \sum_i Q(u_i - x, v_i - y)(v_i - v_{i-1})$$

finalmente, se desean buscar nodos $\{(u_i, v_i)\}_i$que minimice el error cuadrático

$$I(\Omega) = \sum_k (\psi_k - \tilde{\psi}(x_k, y_k))^2$$

Se puede demostrar que es equivalente a buscar los nodos