На правах рукописи

Мисилов Владимир Евгеньевич

Итерационные методы и параллельные алгоритмы решения нелинейных обратных задач гравиметрии и магнитометрии

05.13.18 – Математическое моделирование, численные методы и комплексы программ

Автореферат

диссертации на соискание ученой степени

кандидата физико-математических наук

Екатеринбург – 2017

Работа выполнена в Федеральном государственном бюджетном учреждении науки Институт математики и механики им. Н. Н. Красовского Уральского отделения Российской академии наук.

Научный руководитель:	доктор физико-математических наук, доцент Акимова Елена Николаевна
Официальные оппоненты:	Танана Виталий Павлович, доктор физико-математических наук, профессор, ФГАОУ ВО «Южно-Уральский государственный университет (национальный исследовательский университет)» (г. Челябинск), заведующий кафедрой Вычислительной математики и высокопроизводительных вычислений Высшей школы электроники и компьютерных наук
	Долгаль Александр Сергеевич, доктор физико-математических наук, доцент, ФГБУН Горный институт УрО РАН (г. Пермь), главный научный сотрудник лаборатории Геопотенциальных полей
Ведущая организация:	ФГБУН Институт вычислительной математики и математической геофизики СО РАН (г. Новосибирск)

Защита состоится 29 марта 2017 г. в 14:00 часов на заседании диссертационного совета Д 212.285.25 на базе ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина» по адресу: 620000, г. Екатеринбург, пр. Ленина, 51, зал заседаний диссертационных советов, комн. 248.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке и на сайте ФГАОУ ВО «Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б. Н. Ельцина», http://lib.urfu.ru/mod/data/view.php?d=51&rid=264792

Автореферат разослан «_____» _______________ 2017 г.

Ученый секретарь
диссертационного совета,
доктор физ.-мат. наук,
профессор *В. Г. Пименов*

1. Общая характеристика работы

Диссертационная работа посвящена проблеме построения итерационных методов и параллельных алгоритмов решения нелинейных уравнений с реализацией на многоядерных процессорах для решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела сред на сетках большой размерности.

Актуальность темы. Гравитационные и магнитные поля несут важную информацию о неоднородностях земной коры и верхней мантии. Темпы совершенствования вычислительной техники существенно влияют на эффективность решения геофизических задач, направленных на изучение глубинного строения Земли, поиск и разведку месторождений полезных ископаемых. На современном этапе развития вычислительной техники наиболее удобным и общедоступным инструментом для экспресс-обработки геофизических данных в полевых условиях является переносной персональный компьютер с многоядерным процессором. Актуальной задачей является разработка и усовершенствование программных средств для оперативного сопровождения процесса полевых измерений и интерпретации данных, полученных на разных стадиях измерительных процессов.

Одними из важнейших задач являются обратные задачи гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела однородных сред с различными плотностями либо намагниченностями по известному гравитационному либо магнитному полю. Исследованию структурных обратных задач посвящены работы Е. Г. Булаха, В. Б. Гласко, А. С. Долгаля, А. И. Кобрунова, В. А. Кочнева, П. С. Мартышко, П. А. Миненко, В. М. Новоселицкого, И. Л. Пруткина, В. Н. Страхова, Н. В. Федоровой, А. В. Цирульского.

Эти задачи описываются интегральными уравнениями первого рода и являются существенно некорректными задачами: имеют неединственное решение, неустойчиво зависящее от входных данных.

После дискретизации и аппроксимации задачи сводятся к системам нелинейных уравнений большой размерности. Построению численных методов для корректных нелинейных задач посвящены работы Л. В. Канторовича, М. А. Красносельского, Б. Т. Поляка, J. Nocedal, J. C. Ortega.

Основоположниками теории некорректных задач являются А. Н. Тихонов, М. М. Лаврентьев и В. К. Иванов. В работах А. Б. Бакушинского, М. Ю. Кокурина, В. В. Васина, В. П. Тананы, S. George, M. Hanke, B. Kaltenbacher, A. Neubauer, O. Scherzer были предложены и исследованы методы итеративной регуляризации на основе процессов градиентного и ньютоновского типов и их модифицированных аналогов. В некоторых из этих подходов при определенных структурных условиях на оператор регуляризующие свойства итераций устанавливаются при подходящем выборе правила останова итераций без дополнительной регуляризации.

Алгоритмы решения обратных задач математической физики на основе метода локальных поправок и его модификаций разрабатывались в ИГФ УрО РАН (П. С. Мартышко[1], И. Л. Пруткин[2], А. Г. Цидаев), на основе итеративно регуляризованных градиентных методов и методов Ньютона и Левенберга–Марквардта — в ИММ УрО РАН (В. В. Васин[3], Е. Н. Акимова[4], Г. Я. Пересторонина, Л. Ю. Тимерханова). Метод локальных поправок отличается алгоритмической простотой и экономичностью, но не подходит для решения задач магнитометрии в случае произвольно направленной намагниченности. Методы типа Ньютона и Левенберга-Марквардта обладают высокой скоростью сходимости, но являются трудоемкими — требуют

[1] Мартышко П. С., Ладовский И. В., Цидаев А. Г. Построение региональных геофизических моделей на основе комплексной интерпретации гравитационных и сейсмических данных // Физика земли. 2010. № 11. С. 23–35.

[2] Пруткин, И. Л. О решении трехмерной обратной задачи гравиметрии в классе контактных поверхностей методом локальных поправок // Изв. АН СССР. Физика Земли 1 (1986): 67-77.

[3] Васин В. В., Пересторонина Г. Я., Пруткин И. Л., Тимерханова Л. Ю. Решение трехмерных обратных задач гравиметрии и магнитометрии для трехслойной среды // Математическое моделирование. 2003. Т. 15, № 2. С. 69–76.

[4] Akimova E. N, Vasin V. V. Stable parallel algorithms for solving the inverse gravimetry and magnetometry problems // Intern. J. Engineering Modelling. 2004. Vol. 17. № 1–2, P. 13–19

выполнения операций с матрицами большой размерности.

Проблемам исследования и распараллеливания алгоритмов применительно к задачам математической физики посвящены работы В. В. Воеводина[5], Дж. Ортеги[6], Д. К. Фаддеева, В. Н. Фаддеевой. Построению и исследованию параллельных алгоритмов для решения задач гравиметрии и магнитометрии посвящены работы Е. Н. Акимовой[7].

В диссертационной работе предлагаются менее ресурсоемкие по сравнению с классическими градиентными методами и процессами типа Гаусса-Ньютона итерационные методы решения нелинейных уравнений, возникающих при решении структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о восстановлении поверхностей раздела сред, и их параллельная реализация на многоядерных процессорах. Применение разработанных параллельных алгоритмов и программ в значительной мере повышает эффективность решения задач.

Целью диссертационной работы является построение быстрых и экономичных итерационных градиентных методов и параллельных алгоритмов решения нелинейных уравнений применительно к обратным структурным задачам гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела сред, и реализация алгоритмов в виде комплекса программ для быстрой обработки данных на сетках большой размерности.

Методология и методы исследования. В диссертационной работе использован математический аппарат численных методов оптимизации, теории некорректных задач и методы математического моделирования. Для реализации алгоритмов на многоядерных процессорах используется технология параллельного программирования OpenMP.

---

[5] Воеводин В. В., Воеводин Вл. В., Параллельные вычисления. СПб: БХВ-Петербург, 2002. 599 с.

[6] Ортега Дж. Введение в параллельные и векторные методы решения линейных систем. М.: Мир, 1991. 366 с

[7] Акимова Е. Н. Параллельные алгоритмы решения обратных задач гравиметрии и магнитометрии на МВС-1000 // Вестник ННГУ. 2009. № 4. С. 181–189.

Научная новизна. Результаты, представленные в диссертации, являются новыми, имеют теоретическую и практическую ценность.

1. Для решения нелинейных уравнений применительно к структурным обратным задачам гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела сред построены новые экономичные итерационные методы: линеаризованный метод сопряженных градиентов, покомпонентный градиентный метод и их регуляризованные варианты. Для случая произвольно направленной суммарной намагниченности на основе нелинейного метода сопряженных градиентов построен алгоритм решения структурной обратной задачи магнитометрии о восстановлении одной поверхности раздела.

2. Для решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о восстановлении нескольких поверхностей раздела сред предложен и исследован новый алгоритм, позволяющий из базового интегрального уравнения одновременно находить несколько поверхностей. Построены варианты линеаризованных градиентных методов с весовыми множителями: методы наискорейшего спуска и минимальной ошибки, модифицированные методы наискорейшего спуска и сопряженных градиентов.

3. Разработан и реализован для многоядерных процессоров комплекс параллельных программ решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела сред на основе предложенных методов. Разработанные алгоритмы и параллельные программы протестированы на построенных модельных задачах и задачах на основе реальных данных.

Теоретическая и практическая значимость. Разработанные в диссертационной работе и апробированные в расчетах параллельные алгоритмы и программы могут быть эффективно использованы при численном решении на многоядерных процессорах ряда обратных задач теории потенциала: задач гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела. Алгоритмы и программы были использованы для решения обратных задач гравиметрии совместно с сотрудниками Лаборатории математической геофизики ИГФ УрО РАН [2,6,7]. Разработанные экономичные алгоритмы решения нелинейных уравнений могут быть использованы в составе программных пакетов, предназначенных для геофизических исследований для сеток большой размерности.

Степень достоверности и апробация результатов Основные положения диссертационной работы докладывались и обсуждались на всероссийских и международных конференциях и семинарах: международной научной конференции «Параллельные вычислительные технологии (Новосибирск, 2012; Челябинск, 2013; Ростов-на-Дону, 2014; Екатеринбург, 2015), XIII и XIV Уральских молодежных научных школах по геофизике (Екатеринбург, 2012; Пермь, 2013), 41-ой сессии международного семинара имени Д. Г. Успенского (Екатеринбург, 2014), 2-м, 3-м и 4-м Национальном Суперкомпьютерном Форуме (Переславль-Залесский, 2013; 2014; 2015), международной конференции «Алгоритмический анализ неустойчивых задач» (Челябинск, 2014).

Публикации по теме диссертации. Основные результаты диссертации опубликованы в 19 работах, в том числе 10 — в научных изданиях, рекомендованных ВАК и проиндексированных базами Scopus или Web of Science [1–10]. Содержание диссертации и основные положения, выносимые на защиту, отражают персональный вклад автора в опубликованные работы. В работах [1–10] автору диссертации принадлежит построение линеаризованного метода сопряженных градиентов и покомпонентного градиентного метода для решения задач о восстановлении одной поверхности; разработка алгоритма решения задачи магнитометрии о восстановлении одной поверхности в случае произвольно направленной намагниченности; разработка модифицированных градиентных методов с переменными весовыми множителями для решения задач о восстановлении нескольких поверхностей раздела, построение параллельных алгоритмов на основе методов градиентного типа и разработка программ для многоядерных процессоров с использованием технологии OpenMP.

Структура и объем диссертации. Диссертация состоит из введения, трех глав, заключения и библиографии. Объем диссертационной работы составляет 124 страницы. Библиография содержит 120 наименований, в том числе 19 публикаций автора по теме диссертации. Список иллюстраций включает 28 позиций. Список таблиц включает 5 позиций.

Исследования по теме диссертации выполнены в период с 2012 по 2016 годы в Отделе некорректных задач анализа и приложений Института математики и механики УрО РАН.

Автор выражает искреннюю признательность своему научному руководителю — доктору физико-математических наук, ведущему научному сотруднику ИММ УрО РАН Елене Николаевне Акимовой.

Автор выражает благодарность за постановку ряда проблем, поддержку, полезные замечания и обсуждения члену-корреспонденту РАН Владимиру Васильевичу Васину, члену-корреспонденту РАН Петру Сергеевичу Мартышко и ведущему научному сотруднику ИГФ УрО РАН Игорю Викторовичу Ладовскому.

2. Содержание работы

Во **введении** обосновывается актуальность темы проведенных исследований и дан обзор публикаций, близких к теме диссертации. Во введении сформулирована цель работы, научная новизна и практическая значимость результатов, кратко изложено содержание работы.

Первая глава диссертации посвящена постановкам обратных структурных задач гравиметрии и магнитометрии о восстановлении поверхностей раздела сред по гравитационным либо магнитным данным. Показано, что рассматриваемые в диссертационной работе прикладные задачи сводятся к решению нелинейных уравнений большой размерности.

В **разделе 1.1** приводятся постановки структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о восстановлении одной поверхности раздела, рассмотренных в работах Б. В. Нумерова[8], Н. Р. Малкина[9], О. А. Шванка и Е. Н. Люстиха[10], В. Н. Страхова, П. С. Мартышко, И. Л. Пруткина.

Предполагается, что нижнее полупространство состоит из двух однородных слоев, разделенных искомой поверхностью. Задана декартова система координат с осью z, направленной вниз. Пусть поверхность раздела задана уравнением $z = \zeta(x, y)$, разность плотностей слоев равна $\Delta\sigma$, поверхность имеет горизонтальную асимптотическую плоскость $z = h$, т.е. $\lim\limits_{|x|+|y|\to\infty} |\zeta(x, y) - h| = 0$. Гравитационный потенциал однородного тела D равен

$$V(\boldsymbol{r}_0) = f\sigma \int\limits_D \frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|} dr,$$

где $\boldsymbol{r}_0$ — радиус-вектор точки наблюдения, $\boldsymbol{r}$ — радиус-векторы точек тела D.

Аномальное гравитационное поле (вертикальная компонента ускорения свободного падения, первая производная ньютоновского потенциала) $\Delta g(x', y', 0) = \frac{\partial V(x', y', 0)}{\partial z}$, измеренное на поверхности $z = 0$, от рассматриваемого полупространства с точностью до постоянного слагаемого будет равным полю от тела, ограниченного поверхностью $\zeta(x, y)$ и плоскостью h и имеющего плотность $\Delta\sigma$. Имеем

$$f\Delta\sigma \int\limits_{-\infty}^{\infty} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \left\{ \frac{1}{\sqrt{(x - x')^2 + (y - y')^2 + \zeta^2(x, y)}} - \right. \tag{1}$$

[8] Нумеров Б. В. Интерпретация гравитационных наблюдений в случае одной контактной поверхности // ДАН СССР 21 (1930): 569–574.

[9] Малкин Н. Р. О решении обратной магнитометрической задачи для случая одной контактной поверхности (случай пластообразно залегающих масс) // ДАН СССР. Сер. А 9 (1931): 232–235.

[10] Шванк О. А., Люстих Е. Н. Интерпретация гравитационных наблюдений. Л.: Гостоптехиздат, 1947. 400 с.

$$-\frac{1}{\sqrt{(x-x')^2+(y-y')^2+h^2}}\Bigg\}dxdy = \Delta g(x',y',0),$$

где f — гравитационная постоянная.

В случае задачи магнитометрии нижнее полупространство состоит из двух слоев постоянной вертикально направленной намагниченности, разделенных искомой поверхностью. Для нахождения аномального магнитного эффекта однородного тела используется теорема Пуассона: магнитный потенциал однородно намагниченного тела вычисляется по формуле $U = -\frac{1}{4\pi}\langle \boldsymbol{J}, \nabla V\rangle$, где V — гравитационный потенциал тела такой же формы и размеров, имеющего постоянную плотность σ, такую, что $f\sigma = 1$. Для вертикальной компоненты напряженности магнитного поля $\Delta Z(x, y, z) = \frac{\partial U(x,y,z)}{\partial z}$, порождаемого рассматриваемым подпространством и измеренного на земной поверхности, получаем

$$\begin{aligned}\frac{\Delta J}{4\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\Bigg[&\frac{-h}{\big((x-x')^2+(y-y')^2+h^2\big)^{3/2}}+\\ &+\frac{\zeta(x,y)}{\big((x-x')^2+(y-y')^2+\zeta^2(x,y)\big)^{3/2}}\Bigg]dxdy = \Delta Z(x',y',0),\end{aligned} \tag{2}$$

где ΔJ — разность намагниченностей на границе раздела сред.

При априорно известных значениях полей $\Delta g(x', y', 0)$ либо $\Delta Z(x', y', 0)$, разности плотностей $\Delta\sigma$ либо намагниченностей $\Delta\boldsymbol{J}$ и глубины h залегания плоскости уравнения (1) и (2) являются нелинейными двумерными интегральными уравнениями первого рода относительно функции $\zeta(x, y)$, описывающей искомую поверхность. После дискретизации уравнений на прямоугольной сетке $n = M \times N$ (ячейки двумерной сетки нумеруются построчно слева направо с переносом), где заданы правые части $\Delta g(x', y', 0)$ или $\Delta Z(x', y', 0)$, и аппроксимации интегральных операторов по квадратурным формулам прямоугольников, имеем вектор правой части $F(x, y)$ размерности n, вектор решения z размерности n и систему нелинейных уравнений в операторном виде

$$A[z] = F. \tag{3}$$

В **разделе 1.2** приводится подробный вывод уравнения обратной задачи магнитометрии о восстановлении одной поверхности раздела сред в случае произвольно направленного вектора суммарной намагниченности.

Нелинейное уравнение, описывающее эту задачу, можно получить, используя в теореме Пуассона разность намагниченностей, состоящую из трех компонент $\Delta \boldsymbol{J} = (\Delta J_x, \Delta J_y, \Delta J_z)$ и взяв интеграл по z (см. [12] и Шванк, Люстих, 1947):

$$\begin{gathered}\frac{1}{4\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\int\limits_{-\infty}^{\infty}\left[\frac{\Delta J_x(x-x') + \Delta J_y(y-y') - \Delta J_z h}{\left((x'-x)^2 + (y'-y)^2 + h^2\right)^{3/2}} - \right. \\ \left. - \frac{\Delta J_x(x-x') + \Delta J_y(y-y') - \Delta J_z \zeta(x,y)}{\left((x'-x)^2 + (y'-y)^2 + \zeta^2(x,y)\right)^{3/2}}\right] dxdy = \Delta Z(x', y', 0).\end{gathered} \tag{4}$$

Аналогичное уравнение можно получить для модуля напряженности магнитного поля ΔT.

При известных значениях $\Delta J_x, \Delta J_y, \Delta J_z, \Delta Z(x', y', 0)$, h уравнение (4) является нелинейным интегральным уравнением первого рода относительно функции $\zeta(x, y)$ и после дискретизации и аппроксимации интегрального оператора приобретет вид (3).

Для решения задачи (4) во второй главе разработаны параллельные алгоритмы на основе нелинейного метода сопряженных градиентов и его регуляризованного варианта.

Раздел 1.3 посвящен обобщению постановок задач на случай нескольких поверхностей раздела.

Предполагается, что нижнее полупространство состоит из нескольких однородных слоев, разделенных искомыми поверхностями $S_l (l = 1, ..., L)$, где L — априорно известное число поверхностей раздела. Гравитационный либо магнитный эффект от такого полупространства равен сумме эффектов от всех поверхностей раздела[1].

Пусть поверхности раздела задаются уравнениями $\zeta_l = \zeta_l(x, y)$, разности плотностей либо намагниченностей на них равны $\Delta\sigma_l$ либо $\Delta\boldsymbol{J}_l$, поверхности имеют горизонтальные асимптотические плоскости $z = h_l$, т.е. $\lim\limits_{|x|+|y|\to\infty} |\zeta(x, y) - h| = 0$. Гравитационное поле от суперпозиции поверхностей с точностью до постоянного слагаемого равно

$$f \sum_{l=1}^{L} \Delta g_l(x', y', 0) dxdy = \Delta g(x', y', 0), \tag{5}$$

где f — гравитационная постоянная, L — число поверхностей раздела, $\Delta g_l(x', y', 0)$ — гравитационный эффект от одной поверхности.

В случае задачи магнитометрии магнитное поле от суперпозиции поверхностей будет равным

$$\sum_{l=1}^{L} \Delta Z_l(x', y', 0) = \Delta Z(x', y', 0), \tag{6}$$

где $\Delta Z_l(x', y', 0)$ — магнитный эффект от одной поверхности.

Уравнения (5) и (6) являются нелинейными двумерными интегральными уравненями первого рода относительно искомых функций ζ_l.

Традиционный алгоритм решения этих двух задач заключается в использовании технологии разделения источников аномалий по глубине, разработанной П. С. Мартышко и И. Л. Пруткиным[11]. Основная идея технологии заключается в аналитическом продолжении гравитационного поля вверх или вниз. Продолжение поля вверх требует вычисления значения интеграла Пуассона для полупространства. Задача продолжения поля вниз сводится к линейному интегральному уравнению Фредгольма первого рода и решается итерационными градиентными методами. После применения

[11] Мартышко П. С., Пруткин И. Л. Технология разделения источников гравитационного поля по глубине // Геофизический журнал 25, no. 3 (2003): 159-168.

этой технологии общее гравитационное или магнитное поле приближенно разделяется на компоненты, соответствующие отдельным границам, и задача сводится к решению нескольких задач, описанных в разделе 1.1.

Вторая глава посвящена построению оригинальных экономичных алгоритмов решения задач, поставленных в первой главе.

В **разделе 2.1** строятся алгоритмы решения систем вида (3) на основе предложенного для корректных задач оптимизации варианта метода сопряженных градиентов[12]. Рассмотрим систему нелинейных уравнений

$$A[z] = F,$$

где $A : R^n \Rightarrow R^m$ — конечномерная аппроксимация интегрального оператора первого рода, дифференцируемая по Фреше. Если решение существует, то задача его нахождения эквивалентна задаче минимизации

$$\min\left\{\frac{1}{2}\left\|A(z) - F\right\|^2 : z \in R^n\right\}.$$

Обозначим градиент квадратичной невязки $S(z) \equiv A'(z)^T(A(z) - F) = \nabla\left[\frac{1}{2}\left\|A(z) - F\right\|^2\right]$. Построим итеративный процесс вида

$$z_{k+1} = z_k + \alpha_k p_k, \tag{7}$$

где $k \geqslant 0$ — номер итерации, $z_0 \in R^n$ — некоторое начальное приближение.

Направления p_k определяются по формуле

$$p_k = -A'(z)^T(A(z) - F) + \beta_k p_{k-1}.$$

Для параметра β в работе используется модифицированная формула Полака-Рибьера-Поляка

$$\beta_k = \beta_k^{PRP+} = \max\{\beta_k^{PRP}, 0\}, \quad \beta_0 = 0,$$
$$\beta_k^{PRP} = \frac{\langle S(z_k), (S(z_k) - S(z_{k-1}))\rangle}{\left\|S(z_{k-1})\right\|^2}.$$

[12] Gilbert J. C., Nocedal J., Global convergence properties of conjugate gradient methods for optimization // SIAM Journal on optimization 2, no. 1 (1992): 21-42.

В классических методах размер шага α_k находится из условия:

$$\alpha_k = \operatorname*{argmin}_{\alpha} \left\{ \|A(z_k - \alpha p_k) - F\|^2 \right\}.$$

На каждой итерации необходимо решать задачу одномерной минимизации. Чтобы избавиться от этой алгоритмически сложной процедуры, модифицируем процесс следующим образом. Воспользуемся идеей линеаризации[13]. Она состоит в том, что нелинейный оператор заменяется линейной аппроксимацией в итерационной точке, в таком случае минимум квадратичной невязки можно найти по явной формуле. Линеаризуем оператор A в точке z_k

$$A(z) \cong A(z_k) + A'(z_k)(z - z_k)$$

и найдем размер шага α_k решением задачи минимизации для линеаризованного выражения $\|A(z_k) + A'(z_k)(z_k + \alpha p_k - z_k) - F\|^2$. Получим

$$\alpha_k \approx \widetilde{\alpha_k} = -\frac{\langle p_k, S(z_k)\rangle}{\|A'(z_k)p_k\|^2}.$$

После добавления дополнительного управляющего параметра ψ, впервые введенного В. В. Васиным для линеаризованного метода наискорейшего спуска с постоянным демпфирующим множителем и дающего расширение области сходимости[14], процесс (7) приобретет вид (см. [9]):

- линеаризованный метод сопряженных градиентов (ЛМСГ)

$$\begin{aligned} &z_{k+1} = z_k - \psi \frac{\langle p_k, S(z_k)\rangle}{\|A'(z_k)p_k\|^2} p_k, \quad p_k = S(z_k) + \beta_k p_{k-1}, \\ &p_0 = S(z_0), \quad \beta_k = \max\left\{ \frac{\langle S(z_k), (S(z_k) - S(z_{k-1}))\rangle}{\|S(z_{k-1})\|^2}, 0 \right\}, \\ &S(z) = A'(z)^T(A(z) - F). \end{aligned} \tag{8}$$

[13] Kaltenbacher B., Neubauer A., Scherzer O. Iterative regularization methods for nonlinear ill-posed problems // Vol. 6. Walter de Gruyter, 2008.

[14] Васин В. В. О сходимости методов градиентного типа для нелинейных уравнений // ДАН (1998): 7-9.

В качестве начального приближения предлагается использовать $z^0 = H$, где $z = H$ — уравнение асимптотической плоскости либо априорно известное нулевое приближение $z^0 = \hat{Z}$. Критерием останова итерационных процессов является условие $\|A(z) - F\| \,/\, \|F\| < \varepsilon$ при некотором $\varepsilon < 1$.

Как показали численные эксперименты, при решении задач с сильно возмущенной правой частью процесс (8) может расходиться при любом выборе демпфирующего параметра. Путем регуляризации задачи по методу Тихонова

$$A'(z)^T(A(z) - F) + \alpha(z - z^0) = 0, \tag{9}$$

где z^0 — начальное приближение, α — параметр регуляризации, удается построить устойчивый к погрешностям вариант линеаризованного метода сопряженных градиентов (см. [11]):

$$\begin{aligned} &z_{k+1} = z_k - \psi \frac{\langle p_k, S(z_k)\rangle}{\|A'(z_k)p_k\|^2 + \alpha \|p^k\|^2} p_k, \quad p_k = S(z_k) + \beta_k p_{k-1}, \\ &p_0 = S(z_0), \quad \beta_k = \max\left\{ \frac{\langle S(z_k), (S(z_k) - S(z_{k-1}))\rangle}{\|S(z_{k-1})\|^2}, 0 \right\}, \\ &S(z) = A'(z)^T(A(z) - F) + \alpha(z - z^0). \end{aligned} \tag{10}$$

В **разделе 2.2** строится экономичный алгоритм решения систем нелинейных уравнений вида (3) на основе идеи И. Л. Пруткина[2]. Идея основана на возможности минимизировать невязку правой части $(A_i(z) - F_i)^2$ в узле i только за счет изменения значения z_i в том же узле.

Рассмотрим i-е уравнение системы (3):

$$A_i(z) = F_i.$$

Задача нахождения z из этого уравнения эквивалентна задаче минимизации

$$\min\left\{ \frac{1}{2}(A_i(z) - F_i)^2 : z \in R^n \right\}.$$

Условие минимума влечет соотношение:

$$\nabla(\frac{1}{2}(A_i(z) - F_i)^2) = (A_i(z) - F_i)\nabla A_i^T(z) = 0.$$

Построим метод градиентного типа:

$$\hat{z}^{k+1} = z^k + \alpha(A_i(z) - F_i)\nabla A_i^T(z). \quad (11)$$

где k — номер итерации.

Из условия $\alpha = \underset{\alpha}{\operatorname{argmin}}\{(A_i(z^{k+1}) - F_i)^2\}$, пользуясь линейным приближением $A_i(z) \simeq A_i(z^k) + \nabla A_i(z^k)(z - z^k)$, получаем $\alpha^k = -1/\left\|\nabla A_i(z^k)\right\|^2$. Таким образом, процесс (11) примет вид

$$z^{k+1} = z^k - \frac{A_i(z^k) - F_i}{\left\|\nabla A_i^T(z^k)\right\|^2}\nabla A_i(z^k).$$

Применяя эту формулу на каждой итерации для получения нового значения z^{k+1} независимо в каждом узле i, получаем покомпонентный градиентный метод (см. [10]):

$$z_i^{k+1} = z_i^k - \frac{A_i(z^k) - F_i}{\|\nabla A_i(z^k)\|^2}\left(\frac{\partial A_i}{\partial z_i}(z_i^k)\right). \quad (12)$$

Введя демпфирующий параметр ψ и заменив уравнение регуляризованным вариантом (9), получаем регуляризованный покомпонентный градиентный метод (см. [11]):

$$z_i^{k+1} = z_i^k - \psi\frac{A_i(z^k) - F_i + \alpha(z_i^k - z_i^0)}{\|\nabla A_i(z^k)\|^2 + \alpha}\left(\frac{\partial A_i}{\partial z_i}(z_i^k)\right). \quad (13)$$

По сравнению с традиционными методами градиентного типа данный метод не требует работы с матрицами. Метод применим к задачам гравиметрии и магнитометрии о восстановлении одной поверхности в случае вертикальной намагниченности.

В **разделе 2.3** описывается новый алгоритм решения систем уравнений (5) или (6). Он позволяет по суммарному полю из интегрального уравнения находить несколько структурных границ одновременно.

После дискретизации уравнений (5) или (6) на сетке $n = M \times N$ где задана правая часть $\Delta Z(x, y)$ и аппроксимации интегрального оператора по квадратурным формулам имеем вектор правой части $F(x, y)$ размерности n, результирующий вектор решения $z = [Z_1, ..., Z_L]$ размерности $L \cdot n$ и систему нелинейных уравнений вида

$$\widetilde{A_n}[z] = \widetilde{F_n}. \tag{14}$$

Замечание. Задача (14) является недоопределенной в том смысле, что при правой части размерности n вектор неизвестных имеет размерность $L \cdot n$. При ее решении итерационными методами, которые применяются для задач о восстановлении одной поверхности, полученные решения могут удовлетворять базовому уравнению, но значительно отличаться от истинных. Основная идея нового алгоритма состоит в задании весовых коэффициентов для каждой из поверхностей и для каждого узла сетки по отдельности. Это обеспечивает более тонкую настройку и дает возможность за счет выбора весовых коэффициентов выбрать более правдоподобное решение.

В работах [2,3] для решения системы (14) предложено использовать линеаризованные итерационные методы градиентного типа (наискорейшего спуска и минимальной ошибки) с весовыми множителями γ_i, вычисляемыми для каждой компоненты $z_i (i = 1, ..., L \cdot M \cdot N)$:

- линеаризованный метод наискорейшего спуска (ЛМНС)

$$z_i^{k+1} = z_i^k - \gamma_i \frac{\left\| S(z^k) \right\|^2}{\left\| A'(z^k) S(z^k) \right\|^2} S_i(z^k), \tag{15}$$

- линеаризованный метод минимальной ошибки (ЛММО)

$$z_i^{k+1} = z_i^k - \gamma_i \frac{\left\| A(z_k) - F \right\|^2}{\left\| S(z^k) \right\|^2} S_i(z^k),$$

где z_i — i-я компонента результирующего вектора z, $S_i(z)$ — i-я компонента вектора $S(z^k) = A'(z^k)^T (A(z^k) - F)$, k — номер итерации.

Как показали численные эксперименты, применение новых алгоритмов значительно сокращает время счета по сравнению с традиционным алгоритмом, состоящим в независимом решении задач о восстановлении каждой из поверхностей.

В работах [5, 6] строятся быстрые модифицированные варианты методов. Модификация метода (15) состоит во внесении весовых множителей в направление линейного поиска, т. е. направления $S(z) = \nabla \left[\frac{1}{2}\left\|A(z) - y\right\|^2\right]$ заменяются на v, которые получаются путем покомпонентнго домножения $S(z)$ на веса γ_i, и в этом направлении ищется минимум суммарной невязки. Это уменьшает число итераций по сравнению с методом (15). Имеем

- линеаризованный модифицированный метод наискорейшего спуска (ЛММНС)

$$z^{k+1} = z^k - \psi \frac{\langle v^k, S(z^k)\rangle}{\left\|A'(z^k)v^k\right\|^2} v^k, \quad v_i^k = \gamma_i S_i(z^k),$$
$$S(z) = A'(z)^T(A(z) - F);$$

где ψ — демпфирующий параметр, i — номер итерации.

Аналогичная идея была применена к методу ЛМСГ(8):

- линеаризованный модифицированный метод сопряженных градиентов (ЛММСГ)

$$z^{k+1} = z^k - \psi \frac{\langle p^k, S(z^k)\rangle}{\left\|A'(z^k)p^k\right\|^2} p^k, \quad p^k = v^k + \beta_k p^{k-1}, \quad p^0 = v^0,$$
$$v_i^k = \gamma_i S_i(z^k), \beta_k = \max\left\{\frac{\langle v^k, (v^k - v_{k-1})\rangle}{\left\|v^{k-1}\right\|^2}, 0\right\},$$
$$S(z) = A'(z)^T(A(z) - y),$$

где ψ — демпфирующий параметр, k — номер итерации.

Весовые множители γ_i для каждой компоненты $z_i (i = 1, ..., L \cdot M \cdot N)$ будем выбирать двумя способами: используя выделенные для каждой границы гравитационные или магнитные поля

$$F \longrightarrow [F_1, F_2, ..., F_L] = (f_1, f_2, ..., f_{m \cdot n}, ..., f_{L \cdot M \cdot N}) \longrightarrow (\gamma_1, \gamma_2, ..., \gamma_{L \cdot M \cdot N}),$$

$$F_l \longrightarrow (\gamma_{M \cdot N \cdot l+1}, \gamma_{M \cdot N \cdot l+2}, ..., \gamma_{M \cdot N \cdot (l+1)}), \quad \gamma_i = \frac{|f_i|^\beta}{\max\limits_{i,l} |f_i|^\beta}, \quad \beta > 1,$$

либо используя известные начальные приближения искомых границ

$$\hat{Z} = [\hat{Z}_1, \hat{Z}_2, ..., \hat{Z}_L] = (\hat{z}_1, \hat{z}_2, ..., \hat{z_{m \cdot n}}, ..., z_{L \cdot \hat{M} \cdot N}) \longrightarrow (\gamma_1, \gamma_2, ..., \gamma_{L \cdot M \cdot N}),$$

$$\hat{Z}_l \longrightarrow (\gamma_{M \cdot N \cdot l+1}, \gamma_{M \cdot N \cdot l+2}, ..., \gamma_{M \cdot N \cdot (l+1)}), \quad \gamma_i = \frac{|\frac{\hat{f}_i}{H_i} - 1|^\beta}{\max\limits_{i,l} |\frac{\hat{f}_i}{H_i} - 1|^\beta}, \quad \beta > 1,$$

где $F_l(l = 1, ..., L)$ — аномальные поля от гравитирующих либо магнитных масс, находящихся между соответствующими глубинами H_{l-1} и H_{l+1} ($H_0 = 0$, $H_{L+1} = \infty$) для искомых поверхностей раздела $S_l(l = 1, ..., L)$, выделенные из общего гравитационного $\Delta g(x, y)$ или магнитного поля $\Delta Z(x, y)$ по методике повысотных трансформаций $(l = 1, ..., L)$ — известные нулевые приближения соответствующих искомых поверхностей раздела $S_l(l = 1, ..., L)$, β — сглаживающий параметр.

В качестве начального приближения предлагается использовать плоскости либо известное нулевое приближение $\hat{Z}$. Условием останова итерационных процессов является условие $\|A(z) - F\| \,/\, \|F\| < \varepsilon$ при достаточно малом ε, где $F = \sum\limits_{l=1}^{L} F_l$.

Третья глава посвящена разработке параллельных алгоритмов на основе методов, предложенных в первых двух главах, их реализации в виде комплекса программ для многоядерных процессоров и тестированию на модельных задачах и задачах с реальными данных.

Раздел 3.1 посвящен построению параллельных алгоритмов и разработке программ для многоядерных процессоров. На основе предложенных автором методов разработаны параллельные алгоритмы и программы для многоядерных процессоров с использованием технологии OpenMP и средств компилятора Intel C++ Compiler. Технология была выбрана по причине общедоступности многоядерных процессоров и возможности портирования программ на современные сопроцессоры Intel Xeon Phi. В практических задачах типичным размером сетки является $n = 10^3 \times 10^3$, поэтому значительное время занимает вычисление значений интегрального оператора и матрицы производных на каждой итерации. Распараллеливание проводится путем разделения вектора решения и матрицы производных горизонтальными полосами на блоки, число которых соответствует числу процессорных ядер. Основной поток исполнения кроме выполнения своего фрагмента расчетов занимается созданием и синхронизацией дополнительных OpenMP-потоков. На текущей итерации каждый поток вычисляет свой блок матрицы производных и значений оператора. Это осуществляется путем использования директивы #pragma omp parallel для внешних циклов. Для внутренних циклов была использована векторизация с помощью директивы компилятора #pragma simd, что позволяет в несколько раз сократить время вычислений. Матрица производных имеет большую размерность (для сетки $10^3 \times 10^3$ размерность матрицы составит $10^6 \times 10^6$) и занимает значительный объем памяти (7500 ГБ), поэтому используется метод вычисления элементов матрицы производных «на лету», то есть вычисление значения элемента матрицы происходит в момент обращения к этому элементу без сохранения его в памяти.

В **разделе 3.2** представлена структура разработанного комплекса программ для многоядерных процессоров, приводится описание интерфейса. Даны рекомендации по использованию методов для классов задач.

Раздел 3.3 посвящен построению модельных задач, тестированию предложенных параллельных итерационных алгоритмов на задачах с модельными [3–5] и реальными [2,6] данными, сравнению с традиционными методами и алгоритмами по таким показателям, как число итераций, время счета, относительная погрешность приближенного решения. Проведен анализ ускорения и эффективности параллельных программ.

Проведенные численные эксперименты показали, что предлагаемые автором методы и алгоритмы являются экономичными с точки зрения времени счета и требуемых вычислительных ресурсов.

3. Основные результаты диссертации

1. Построены новые экономичные итерационные методы решения нелинейных уравнений трехмерных структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о восстановлении одной поверхности раздела сред: линеаризованный метод сопряженных градиентов, покомпонентный градиентный метод и их регуляризованные варианты. На основе линеаризованного метода сопряженных градиентов построен алгоритм решения структурной обратной задачи магнитометрии о восстановлении одной поверхности раздела для случая произвольно направленного вектора суммарной намагниченности.

2. Для решения структурных обратных задач о нахождении нескольких поверхностей раздела сред предложен и исследован оригинальный алгоритм, основанный на применении построенных градиентных методов с переменными весовыми множителями: методов наискорейшего спуска и минимальной ошибки, модифицированных методов наискорейшего спуска и сопряженных градиентов.

3. Разработан и реализован для многоядерных процессоров комплекс параллельных программ решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии о нахождении поверхностей раздела сред на основе предложенных методов. Разработанные алгоритмы и параллельные программы протестированы на построенных модельных задачах и задачах на основе реальных данных.

Основным направлениияи дальнейших исследований может быть разработка вариантов комплекса программ для сопроцессоров Intel Xeon Phi, интеграция комплекса программ в систему удаленных вычислений «Специализированный веб-портал решения задач на многопроцессорных вычислительных системах» [1] для обеспечения доступа пользователей к вычислениям на суперкомпьютерах через веб-интерфейс.

Публикации автора по теме диссертации

Статьи в изданиях из перечня ВАК, SCOPUS, WoS

1. Акимова Е. Н., Белоусов Д. В., Мисилов В. Е. Алгоритмы решения обратных геофизических задач на многопроцессорных вычислительных системах // Сибирский журнал вычислительной математикию 2013. Т. 16, № 2. С. 107–121. (0,9 п.л./0,3 п. л.)

2. Акимова Е. Н., Мартышко П. С., Мисилов В. Е. Алгоритмы решения структурной задачи гравиметрии в многослойной среде // Доклады Российской академии наук. 2013. Т. 453, № 6. С. 676-679. (0,2 п.л./0,12 п. л.)

3. Акимова Е. Н., Васин В. В., Мисилов В. Е. Алгоритмы решения обратных задач гравиметрии о нахождении поверхностей раздела сред на многопроцессорных вычислительных системах // Вестник УГАТУ. 2014. Т. 18, № 2(63). С. 208-217. (0,5 п.л./0,3 п. л.)

4. Акимова, Е. Н., Мисилов В. Е., Скурыдина А. Ф. Параллельные алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии на многопроцессорных вычислительных системах // Вестник УГАТУ. 2014. Т. 18, № 4(65). С. 206-215. (0,6 п.л./0,25 п. л.)

5. Акимова, Е. Н., Мисилов, В. Е., Скурыдина, А. Ф., Третьяков, А. И. Градиентные методы решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии на суперкомпьютере «Уран» // Вычислительные методы и программирование: Новые вычислительные технологии (Электронный научный журнал). 2015. Т. 16, вып. 1. С. 155–164. (0,6 п.л./0,2 п. л.)

6. Мартышко П. С., Акимова Е. Н., Мисилов В. Е. О решении структурной обратной задачи гравиметрии модифицированными методами градиентного типа // Физика Земли. 2016. № 5. С. 82–86. (0,25 п.л./0,15 п. л.)

7. Martyshko P. S., Pyankov V. A. Akimova E. N., Vasin V. V., Misilov V. E. On solving a structural gravimetry problem on supercomputer «Uran» for the Bashkir Predural's

area [Электронный ресурс]// Proceedings of 12th Int. Conf. on Geoinformatics: Theoretical and Applied Aspects. Kiev, Ukraine. 2013. URL: http://earthdoc.eage.org/publication/publicationdetails/?publication=68121 (дата обращения: 19.12.2016). (0,25 п.л./0,07 п. л.)

8. Akimova E.N., Martyshko P.S., Misilov V.E. Parallel algorithms for solving structural inverse magnetometry problem on multucore and graphics processors // International Multidisciplinary Scientific GeoConference Surveying Geology and Mining Ecology Management, SGEM. 2014. Vol. 3, Iss. 2. P. 713–720. (0,5 п.л./0,3 п. л.)

9. Akimova E.N., Martyshko P.S., Misilov V.E. A fast parallel gradient algorithm for solving structural inverse gravity problem [Электронный ресурс] // AIP Conference Proceedings. 1648. 850063. 2015. Rhodes, Greece, 22–28 Sept. 2014. URL: http://dx.doi.org/10.1063/1.4913118 (дата обращения: 19.12.2016). (0,5 п.л./0,3 п. л.)

10. Akimova E.N., Misilov V. E., A fast componentwise gradient method for solving structural inverse gravity problem // International Multidisciplinary Scientific GeoConference Surveying Geology and Mining Ecology Management, SGEM. 2015. Vol. 3, Iss. 1. P. 775-781 (0,4 п.л./0,3 п. л.)

Другие публикации

11. Akimova E.N., Misilov V.E., Tretyakov A.I. Regularized methods for solving nonlinear inverse gravity problem [Электронный ресурс] // 15th EAGE International Conference on Geoinformatics: Theoretical and Applied Aspects (EAGE, Kiev, 2016). URL: http://earthdoc.eage.org/publication/publicationdetails/?publication=84559 (дата обращения: 19.12.2016). (0,25 п.л./0,1 п. л.)

12. Misilov V. E., On solving the structural inverse magnetic problem of finding a contact surface in the case of arbitrary directed magnetization [Электронный ресурс] // 15th EAGE International Conference on Geoinformatics: Theoretical and Applied Aspects (EAGE, Kiev, 2016). URL: http://earthdoc.eage.org/publication/publicationdetails/?publication=84574 (дата обращения: 19.12.2016). (0,25 п.л.)

13. 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. (0,2 п.л./0,08 п. л.)

14. Акимова Е.Н., Мисилов В.Е., Дергачев Е.А. Алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии // Материалы 41-ой сессии межд. семинара им. Д.Г. Успенского «Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей». Екатеринбург: ИГФ УрО РАН. 2014. С. 4-6. (0,15 п.л./0,05 п. л.)

15. Акимова Е.Н., Мисилов В.Е. Итеративно регуляризованные методы решения структурных обратных задач гравиметрии и магнитометрии в многослойной среде // Тез. докл. Всерос. конф. с междунар. участием, посвящ. памяти В.К. Иванова ААНЗ-2014. Челябинск: ЮУрГУ. 2014. С. 94–95. (0,07 п.л./0,04 п. л.)

16. Акимова Е.Н., Белоусов Д.В., Мисилов В.Е. Алгоритмы решения обратных геофизических задач на многопроцессорных вычислительных системах // Труды межд. конференции ПАВТ'2012, Новосибирск, 26-30 марта 3012 г. Челябинск: ЮУрГУ. 2012. С. 28-41. (0,9 п.л./0,3 п. л.)

17. Акимова Е.Н., Васин В.В., Мисилов В.Е. Алгоритмы решения обратных задач гравиметрии о нахождении поверхностей раздела сред на многопроцессорных вычислительных системах // Труды межд. конференции ПАВТ'2013, Челябинск, 31 мар. – 5 апр. 2013 г. Челябинск: ЮУрГУ. 2013. С. 27–37. (0,5 п.л./0,3 п. л.)

18. Акимова Е.Н., Мисилов В.Е., Миниахметова А.Ф. Параллельные алгоритмы решения структурной обратной задачи магнитометрии на многопроцессорных вычислительных системах // Труды межд. конференции ПАВТ'2014, Ростов-на-Дону, 31 мар. – 4 апр. 2014 г. Челябинск: ЮУрГУ. 2014. С. 19–29. (0,6 п.л./0,25 п. л.)

19. 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 ПАВТ'2015 Екатеринбург, 31 мар. – 2 апр. 2015 г. Челябинск: ЮУрГУ. 2015. С. 8–18. (0,6 п.л./0,2 п. л.)