

Параллельные алгоритмы решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений больших размерностей

Д.Н. Раевский

Институт физики Земли им. О.Ю. Шмидта РАН

В данной работе представлены параллельные алгоритмы решения плохо обусловленных систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) больших размерностей с приближенно заданной правой частью, возникающих при решении множества обратных задач. Предложен блочный метод контрастирования (БМК) для решения таких СЛАУ, основанный на разбиении исходной области на подобласти экстремумов, для каждой из которых СЛАУ решается регуляризованным трехслойным итерационным методом Чебышева. Параллельные алгоритмы реализованы с использованием пакета MPI. Проведен численный эксперимент для оценки устойчивости итерационного метода и адекватности получаемых решений при интерпретации больших массивов гравиметрических данных.

Ключевые слова: параллельный алгоритм, большой массив данных, система линейных уравнений, обратная задача, итерационный метод, регуляризация, гравиметрия.

1. Введение

В настоящее время при решении многих прикладных обратных задач все чаще прибегают к использованию суперкомпьютеров в связи с большой размерностью исходной системы, обусловленной большим количеством исходных данных [1-5]. После редуцирования обратной задачи к конечномерной возникают системы уравнений с большим числом ненулевых матричных элементов (более 10^6), которые необходимо решить с требуемой точностью [1-3]. Алгоритм решения трехмерных обратных задач значительно сложнее алгоритма для двумерного случая, что приводит к худшей обусловленности получаемой системы. Методы решения плохо обусловленных систем больших размерностей с приближенно заданной правой частью требуют значительных вычислительных затрат, что стимулирует применение многопроцессорных систем. Использование параллельных вычислений позволяет конструировать алгоритмы решения обратных задач, сокращающие общее вычислительное время за счет увеличения вычислительных узлов и обеспечивающие нахождение устойчивого приближенного решения с заданной точностью даже при интерпретации больших массивов данных.

Применение параллельных вычислений особенно важно при интерпретации данных аномальных геофизических полей. Аномальные геофизические поля несут в себе большую информацию о неоднородностях в недрах нашей планеты. Качественная и количественная интерпретация данных гравиметрии, магнитометрии, электроразведки и других геофизических методов позволяет решать широкий спектр задач, от поиска и разведки полезных ископаемых до выявления крупных региональных структур. Увеличение разрешающей способности геологических исследований, а также постоянный рост объема данных, подлежащих интерпретации, стимулирует создание новых эффективных методов решения обратных задач геофизики, поддерживающих вычисления на многопроцессорных системах.

В настоящей работе рассматривается обратная задача гравиметрии в трехмерном варианте. Задача решается модифицированным методом S-аппроксимаций [6,7], в котором исходное аномальное гравитационное поле Земли аппроксимируется суммой простого и двойного слоев, распределенных на совокупности носителей, залегающих ниже заданного рельефа. После редуцирования задачи к конечномерной, основной вычислительной проблемой является нахождение устойчивого приближенного решения СЛАУ вида

$$Ax = f_{\delta}, \quad (1)$$

где $A = A^T > 0$ – исходная матрица, f_{δ} – вектор, компоненты которого представляют собой значения аномального гравитационного поля (или другого элемента поля) в заданной точке рельефа, x – вектор решения, который необходимо определить. Матрица A системы (1) является плохо обусловленной. В работе представлен блочный метод контрастирования, основанный на разбиении исходной области на подобласти локальных экстремумов. Для каждой из подобластей решается своя обратная задача, в рамках которой СЛАУ решается регуляризованным итерационным трехслойным методом Чебышева, после чего все полученные решения объединяются. Программы по решению СЛАУ были написаны на языке программирования Си с использованием библиотеки MPI для поддержки параллельных вычислений. На модельных примерах оценены эффективность и ускорение параллельного алгоритма в зависимости от количества используемых процессоров.

2. Постановка задачи

Предположим, что нам заданы значения аномального гравитационного поля f_{δ}^i в некоторых точках рельефа $(x_i^1, x_i^2, x_i^3), 1 \leq i \leq N$. В рамках метода линейных интегральных представлений, предложенного академиком В.Н. Страховым [8], представим измеренные величины f_{δ}^i в виде суммы полезного сигнала f^i и помехи случайного характера δf^i :

$$f_{\delta}^i = f^i + \delta f^i, 1 \leq i \leq N, \quad (2)$$

где каждая компонента f^i задается в виде интегрального представления

$$f^i = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \rho_r(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) d\mu_r(\xi), 1 \leq i \leq N, \quad (3)$$

в котором интегралы берутся по связным множествам M_r с заданными на них Лебеговыми мерами $\mu_r(\xi), 1 \leq r \leq R$, $Q_r^{(i)}(\xi) \in L_2(M_r)$ представляют собой заданные на M_r функции, а $\rho_r(\xi) \in L_2(M_r)$ – функции, подлежащие определению.

В рамках аппроксимационного подхода, задачи интерпретации аномальных геофизических полей в трехмерном случае условно можно разделить на два типа: *локальный* и *региональный*.

В *локальном варианте* горизонтальные размеры исследуемой территории не превышают одного градуса по долготе или широте. Тогда сферичностью Земли можно пренебречь, и рассматривать территорию как горизонтальную поверхность. В этом случае выберем декартову систему координат с осью OZ, направленной вверх.

В противном случае задача должна решаться в *региональном варианте*, когда необходимо учитывать сферичность Земли. Тогда идеализированную Землю можно рассматривать как сферу определенного радиуса, а систему координат выбрать географическую.

В рамках метода линейных интегральных представлений В.Н. Страховым и И.Э. Степановой был разработан метод S-аппроксимаций [9,10], который состоит в аппроксимации исходного поля суммой простого и двойного слоев, распределенных на некоторой совокупности носителей, залегающих ниже заданного рельефа. Рассмотрим локальный вариант. Допустим, что нам известны значения третьей производной гравитационного потенциала по оси x_3 в точках рельефа $M^i = (x_1^i, x_2^i, x_3^i), 1 \leq i \leq N$. Тогда можно представить исходное поле в виде суммы простого и двойного слоев, создаваемых совокупностью горизонтальных плоскостей, расположенных ниже заданного рельефа:

$$-\frac{\partial V}{\partial x_3}(M^i) = \sum_{r=1}^R \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_{1,r}(\hat{\xi})(x_3^i - H_r) d\hat{\xi}}{[\sqrt{(x_1^i - \xi_1)^2 + (x_2^i - \xi_2)^2 + (x_3^i - H_r)^2}]^3} +$$

$$+ \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\rho_{2,r}(\hat{\xi})(2(x_3^i - H_r)^2 - (x_1^i - \xi_1)^2 - (x_2^i - \xi_2)^2) d\hat{\xi}}{[\sqrt{(x_1^i - \xi_1)^2 + (x_2^i - \xi_2)^2 + (x_3^i - H_r)^2}]^5}, \quad 1 \leq i \leq N, \hat{\xi} = (\xi_1, \xi_2), \quad (4)$$

где $V(M^i)$ – потенциал гравитационного поля в точке M^i , $\rho_{1,r}(\hat{\xi}), \rho_{2,r}(\hat{\xi})$ – плотности простого и двойного слоев соответственно, распределенные на горизонтальной плоскости, глубина залегания которой равна H_r . Система координат выбрана так, чтобы одна из горизонтальных плоскостей задавалась уравнением $H_r = 0$. Обозначим подынтегральную функцию в первом слагаемом для r -го слоя в точке M^i через $Q_{1,r}^{(i)}$, а во втором слагаемом – через $Q_{2,r}^{(i)}$. Так как исходные данные заданы с некоторой погрешностью δ , то входной информацией являются значения f_δ^i . Решая следующую вариационную задачу при помощи метода множителей Лагранжа [11]:

$$\Omega(\rho) = \sum_{r=1}^R \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\rho_{1,r}^2(\hat{\xi}) + \rho_{2,r}^2(\hat{\xi})) d\hat{\xi} = \min_{\rho} \quad (5)$$

$$f_\delta^i - \sum_{r=1}^R \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (\rho_{1,r}(\hat{\xi}) Q_{1,r}^{(i)}(\hat{\xi}) + \rho_{2,r}(\hat{\xi}) Q_{2,r}^{(i)}(\hat{\xi})) d\hat{\xi} = 0, \quad 1 \leq i \leq N,$$

получаем, что аппроксимации искомых функций имеют вид:

$$\rho_{1,r}^{(a)}(\hat{\xi}) = \tilde{\rho}_{1,r}(\hat{\xi}, \lambda), \quad \rho_{2,r}^{(a)}(\hat{\xi}) = \tilde{\rho}_{2,r}(\hat{\xi}, \lambda),$$

$$\tilde{\rho}_{1,r}(\hat{\xi}, \lambda) = \sum_{i=1}^N \lambda^i Q_{1,r}^{(i)}(\hat{\xi}), \quad \tilde{\rho}_{2,r}(\hat{\xi}, \lambda) = \sum_{i=1}^N \lambda^i Q_{2,r}^{(i)}(\hat{\xi}), \quad 1 \leq r \leq R, \quad (6)$$

где неизвестный вектор множителей Лагранжа $\lambda = (\lambda^1, \lambda^2, \dots, \lambda^N)$ находится из решения СЛАУ $A\lambda = f_\delta$

$$a_{ij} = \sum_{r=1}^R \int_{-\infty}^{+\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} (Q_{1,r}^{(i)}(\hat{\xi}) Q_{1,r}^{(j)}(\hat{\xi}) + Q_{2,r}^{(i)}(\hat{\xi}) Q_{2,r}^{(j)}(\hat{\xi})) d\hat{\xi}, \quad 1 \leq i \leq N, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (7)$$

В локальном варианте элементы матрицы могут быть вычислены точно:

$$a_{ij} = 2\pi \sum_{r=1}^R \frac{x_3^i + x_3^j - 2H_r}{(\sqrt{(x_3^i + x_3^j - 2H_r)^2 + (x_1^i - x_1^j)^2 + (x_2^i - x_2^j)^2})^3} +$$

$$\frac{(x_3^i + x_3^j - 2H_r)(9[(x_1^i - x_1^j)^2 + (x_2^i - x_2^j)^2] - 6(x_3^i + x_3^j - 2H_r)^2)}{(\sqrt{(x_3^i + x_3^j - 2H_r)^2 + (x_1^i - x_1^j)^2 + (x_2^i - x_2^j)^2})^7}, \quad 1 \leq i \leq N, \quad 1 \leq j \leq N. \quad (8)$$

Найденные по формуле (6) аппроксимации используются для дальнейшего анализа поля. На основе найденных функций возможно вычисление линейных трансформант поля, разделять поле по глубине и т.д. Поэтому основной вычислительной проблемой в методе S-аппроксимаций является нахождение устойчивого приближенного решения (или семейства решений) СЛАУ (7).

При решении СЛАУ предполагается, что нам известны постоянные δ_{\min}^2 и δ_{\max}^2 , которые являются оценками квадрата нормы помехи снизу и сверху:

$$\delta_{\min}^2 \leq \|\mathcal{J}\|_E^2 \leq \delta_{\max}^2, \quad \|\mathcal{J}\|_E^2 = \sum_{i=1}^N (\mathcal{J}^i)^2. \quad (9)$$

Знание этих постоянных позволяет отобрать только те решения СЛАУ (7), нормы невязки которых находятся в заданных границах.

Несмотря на простоту и эффективность метода S-аппроксимаций, ему присущ один серьезный недостаток: невязка между исходным и аппроксимированным полями минимизируется в пространстве функций, интегрируемых на носителе эквивалентных масс. Подобная постановка задачи приводит к простым аналитическим формулам (см. (6) – (8)), однако при этом теряется значительная информация о геометрии самого носителя масс, то есть формы аномалиеобразующих тел, представляющих первостепенный интерес. Постановка же задачи в других классах (например, в пространстве равномерно непрерывных или равномерно дифференцируемых функций) значительно усложнит алгоритм, что приведет к худшим результатам при вычислении линейных трансформант.

Одним из способов устранения указанных проблем является введение особого функционала, позволяющего уточнять некоторые допустимые решения СЛАУ (7). Основная конструкция S-аппроксимации сохраняется, поэтому такой метод назван *модифицированным методом S-аппроксимаций* [6,7].

В модифицированном методе S-аппроксимаций решения находятся по формулам (6) – (8). Рассмотрим дополнительный функционал качества решения $\Xi(\rho)$, который будет «отбирать» наилучшие решения среди множества допустимых решений R_x СЛАУ (7)

$$R_x : \left\{ \hat{x} \in R^N : \delta_{\min}^2 \leq \|A\hat{x} - f\|_E^2 \leq \delta_{\max}^2 \right\}. \quad (10)$$

В формуле (10) через \hat{x} обозначено устойчивое приближенное решение СЛАУ (7). Так как аппроксимации исходных функций зависят от полученного решения СЛАУ, то можно перейти к задаче минимизации функционала $\Xi(\rho)$ на множестве R_x . Так как глобальный минимум не обязательно будет являться адекватным с геолого-физической точки зрения решением, то будем находить семейство решений, каждое из которых доставляет минимум функционалу $\Xi(\rho)$ на R_x и является решением задачи (5). Опишем алгоритм модифицированного метода S-аппроксимаций:

1. в рамках классического метода S-аппроксимаций (4) – (8) находится приближенное устойчивое решение СЛАУ \hat{x}^0 по формулам (7) – (8);
2. решается задача по минимизации функционала $\Xi(\rho)$ на множестве допустимых решений R_x . Находится общее количество локальных минимумов S и соответствующее каждому из них решение $\hat{x}^s, 0 \leq s \leq S$;
3. вычисляются аппроксимации $\tilde{\rho}_{k,r}(\hat{\xi}, \lambda) = \tilde{\rho}_{k,r}(\hat{\xi}, \hat{x}^s), k = 1, 2, 1 \leq r \leq R, 1 \leq s \leq S$;
4. из семейства функций $\tilde{\rho}_{k,r}(\hat{\xi}, \hat{x}^s), k = 1, 2, 1 \leq r \leq R, 1 \leq s \leq S$ выбираются те, которые наилучшим образом удовлетворяют условиям поставленной задачи.

Заметим, что функционал $\Xi(\rho)$ может отображать различную априорную информацию, которую необходимо учитывать при решении обратной задачи. При условии отсутствия какой-либо априорной информации, можно минимизировать первые горизонтальные производные плотностей простого и двойного слоев. В этом случае полученные аппроксимации будут более сглаженными, и линейные трансформанты поля будут восстанавливаться с более высокой точностью.

3. Метод решения СЛАУ

В рамках аппроксимационного подхода при решении обратной задачи гравиметрии основным вычислительным этапом является решение СЛАУ, размерность которой определяется исходным количеством гравиметрических пунктов [1-4,6,7,12,13]. Свойства матрицы зависят как от типа решаемой задачи, так и от конкретной методики, применяемой при ее решении. Напри-

мер, по интерпретационному характеру обратные задачи гравиметрии подразделяются на множество типов: задача рудного типа по восстановлению форм или плотностей геологических тел в локальном варианте [2,4,6,9], построение глобальных моделей гравитационного поля [3,7,10], задача нахождения поверхностей раздела нескольких сред [1] и многие другие. Методики решения перечисленных обратных задач разнообразны. В региональном варианте особенно часто используется сферический гармонический анализ (СГА), в рамках которого потенциальное поле раскладывается по сферическим функциям [3]. Анализ гравитационного поля и построение линейных трансформант в региональном варианте эффективно и в рамках модифицированного метода S-аппроксимаций [7,10].

Для решения СЛАУ, возникающих при редуцировании обратной задачи к конечномерной, используются методы градиентного типа [1], прямые методы [3,12] и другие итерационные методы [2,4,13]. Прямые методы для решения систем больших размерностей (например, метод квадратного корня [3,12]) целесообразно использовать только в том случае, если матрица имеет специфический вид и хорошо обусловлена. В противном случае полученное решение будет неустойчивым и линейные трансформанты поля будут вычисляться с большой погрешностью.

3.1 Блочный метод контрастирования

Как уже было отмечено, при интерпретации гравиметрических данных большого объема, исходная система является плохо обусловленной с большим числом неизвестных в системе. Для улучшения обусловленности системы используются классические регуляризующие алгоритмы [14].

Чтобы уменьшить вычислительную сложность алгоритма решения СЛАУ (7), предлагается изначально разбить исходную область на определенные блоки, для каждого из которых решается своя обратная задача и своя СЛАУ. Такой подход позволит найти такое нулевое приближение для всей системы, что количество итерационных шагов, необходимых для нахождения необходимого решения, существенно сократится. Однако разбиение области на блоки одинаковых размеров (например, квадратов или прямоугольников) может не дать хороших результатов в связи с эффектом дробления локальных аномалий, а именно, если какая-либо наиболее интенсивная аномалия порождается одним источником (или совокупностью близко расположенных источников одного характера), то такую аномалию не следует относить к различным блокам. В связи с этим предложен *блочный метод контрастирования (БМК)*, в рамках которого область делится на подобласти наиболее интенсивных аномалий (экстремумов поля). Алгоритм этого метода можно описать следующим образом:

1. находится общее количество экстремумов поля T , при этом из-за наличия помехи во входных данных из совокупности близко расположенных экстремумов выбирается максимальный по модулю;
2. для каждой из найденных центров аномалий на предыдущем шаге оцениваем интенсивность по осям ОХ и ОУ:

$$u_{x_1}^t = \max_{x_1} \frac{|u(\dot{M}^t) - u(\dot{M}_{x_1}^t)|}{\rho(\dot{M}^t, \dot{M}_{x_1}^t)},$$

$$u_{x_2}^t = \max_{x_2} \frac{|u(\dot{M}^t) - u(\dot{M}_{x_2}^t)|}{\rho(\dot{M}^t, \dot{M}_{x_2}^t)}, 1 \leq t \leq T, \quad (11)$$

где $u(M)$ – исходное поле, $\dot{M}^t = (\dot{x}_1^t, \dot{x}_2^t, \dot{x}_3^t)$ – координаты центра аномалии t . $\dot{M}_{x_1}^t$ – ближайшие по оси ОХ точки к \dot{M}^t , а $\dot{M}_{x_2}^t$ – ближайшая по оси ОУ точки к \dot{M}^t , $\rho(M^s, M^t)$ – евклидово расстояние между точками M^s и M^t ;

3. для каждой из точек $M^i = (x_1^i, x_2^i, x_3^i)$, $1 \leq i \leq N$ определяется условие, по которому она войдет в один из блоков с центром $\dot{M}^t = (\dot{x}_1^t, \dot{x}_2^t, \dot{x}_3^t)$, $1 \leq t \leq T$:

$$\begin{aligned} & |u(M^i) - u(\dot{M}^t)| \leq u_{x_1}^t \rho_{x_1}(M^i, \dot{M}^t) + u_{x_2}^t \rho_{x_2}(M^i, \dot{M}^t), \quad \rho(M^i, \dot{M}^t) \leq \rho_T, \\ & \rho_{x_1}(M^i, \dot{M}^t) = \sqrt{(x_1^i - \dot{x}_1^t)^2 + (x_3^i - \dot{x}_3^t)^2}, \quad \rho_{x_2}(M^i, \dot{M}^t) = \sqrt{(x_2^i - \dot{x}_2^t)^2 + (x_3^i - \dot{x}_3^t)^2}, \\ & \rho_T = \frac{\sqrt{(x_{1,\max} - x_{1,\min})^2 + (x_{2,\max} - x_{2,\min})^2 + (x_{3,\max} - x_{3,\min})^2}}{\sqrt{T}}, \quad 1 \leq i \leq N, 1 \leq t \leq T, \end{aligned} \quad (12)$$

где $(x_{1,\max}, x_{2,\max}, x_{3,\max})$ и $(x_{1,\min}, x_{2,\min}, x_{3,\min})$ – координаты наиболее удаленных друг от друга точек наблюдения;

4. если общее количество точек в блоке N_{t^*} (размер рассматриваемого блока) относительно мало по сравнению с общим числом точек измерений $N_t^* \leq 10\sqrt{N}$ то этот блок объединяется с блоком, расстояние между центрами которых минимально;
5. для каждого из блоков решается своя СЛАУ со следующими ограничениями:

$$\frac{0.9\delta_{\min}^2 N_t}{N} \leq \|\delta f_t\|_E^2 \leq \frac{1.1\delta_{\max}^2 N_t}{N}, \quad 1 \leq t \leq T, \quad (13)$$

где δ_{\min}^2 и δ_{\max}^2 являются ограничениями на квадрат нормы ошибки для всей системы с N измерениями.

3.2 Регуляризованный трехслойный метод Чебышева решения СЛАУ

Для решения СЛАУ, возникающих при решении обратных задач геофизики модифицированным методом S-аппроксимаций, использование методов градиентного типа неэффективно по следующей причине: в модифицированном методе S-аппроксимаций необходимо определить общее количество экстремумов на множестве приближенных решений (см. раздел 2). Определение даже нескольких экстремумов при помощи методов градиентного типа достаточно затруднительно по той причине, что есть вероятность «свалиться» в область одного из экстремумов, и метод будет нуждаться в дополнительной настройке, чтобы избежать этой проблемы.

Поэтому был разработан алгоритм, основанный на регуляризации известного трехслойного метода Чебышева [13]. Основным недостатком чебышевских итерационных методов состоит в необходимости знания максимального и минимального собственного чисел, от которых напрямую зависит скорость сходимости. Максимальное собственное значение можно за небольшое число итераций (30-40) найти с высокой степенью точности при помощи степенного метода [15]. Минимальное же собственное значение было предложено рассматривать как дополнительный стабилизирующий параметр регуляризации, значение которого меняется с каждым шагом итерации. Опишем алгоритм регуляризованного трехслойного итерационного метода Чебышева:

1. вместо исходной системы (7) рассматривается ее регуляризованный аналог:

$$(A + \alpha S)x = f_\delta, \quad (14)$$

где $S = S^T > 0$ – $N \times N$ -матрица (в простейшем случае равная единичной), α – параметр регуляризации;

2. максимальное собственное значение L_α матрицы $A + \alpha S$ ищется при помощи степенного метода [15];
3. система (14) решается при помощи итерационной трехслойной схемы Чебышева [16] с дополнительным параметром регуляризации l_α вместо минимального собственного значения:

$$\begin{aligned} & x_{i+1} = \beta_{i+1}(E - \tau(A + \alpha S))x_i + (1 - \beta_{i+1})x_{i-1} + \beta_{i+1}f_\delta, \\ & x_1 = (E - \tau(A + \alpha S))x_0 + \tau f_\delta, \\ & \tau = \frac{2}{L_\alpha + l_\alpha}, \beta_1 = 2, \beta_{i+1} = \frac{4}{4 - \rho^2 \beta_i}, \rho = \frac{L_\alpha - l_\alpha}{L_\alpha + l_\alpha}, l_\alpha = c^i L_\alpha, i = 1, \dots, \end{aligned} \quad (15)$$

где $0 < c < 1$ – задаваемая константа;

4. находится множество решений $\hat{x}_{\alpha_k}, 1 \leq k \leq K$, соответствующих различным значениям параметра регуляризации α_k , для которых выполняется неравенство (13);
5. из полученного множества $\hat{x}_{\alpha_k}, 1 \leq k \leq K$ отбираются те $\bar{x}_{\alpha_k}, 1 \leq k \leq K^*$, которые минимизируют следующий функционал:

$$\Phi(\alpha) = (\|A\hat{x}_{\alpha_k} - f\|_E^2 - \delta_{\min}^2)^2 + (\|A\hat{x}_{\alpha_k} - f\|_E^2 - \delta_{\max}^2)^2 + (Sx, x)^2 + (\|A\hat{x}_{\alpha_k} - f\|_E^2 - \|A\hat{x}_{\alpha_k}\|_E^2 + \|f\|_E^2)^2; \quad (16)$$

6. результирующее решение ищется как усреднение всех $\bar{x}_{\alpha_k}, 1 \leq k \leq K^*$ решений:

$$\tilde{x} = \sum_{k=1}^{K^*} p_k \bar{x}_{\alpha_k}; p_k > 0, 1 \leq k \leq K^*; \sum_{k=1}^{K^*} p_k = 1. \quad (17)$$

4. Параллельный алгоритм решения СЛАУ

Алгоритм решения можно разбить на три этапа. На первом этапе запускается блочный метод контрастирования, в рамках которого область делится на подобласти экстремумов поля. На втором этапе для каждой из подобластей решается своя СЛАУ. На третьем этапе решается вся система с нулевым приближением, равным объединению всех решений, полученных на втором этапе. Если первый этап занимает всего 5-7% (в зависимости от количества найденных экстремумов) от общего вычислительного времени, то вторые два этапа занимают оставшееся время приблизительно в одинаковом соотношении. Поэтому при построении параллельного алгоритма необходимо наилучшим образом распараллелить именно предложенный в разделе 3.2 итерационный метод решения СЛАУ. Параллельный алгоритм реализован с использованием пакета MPI для поддержки многопроцессорных вычислений. Так как основной вычислительной проблемой является решение СЛАУ, то возможно блочное разбиение системы по строкам, что обеспечит минимальное количество операций для межпроцессорного взаимодействия. Эффективность E_p и ускорение S_p оценивались по следующей формуле:

$$E_p = \frac{p_0 T_{p_0}}{p T_p}, S_p = \frac{T_{p_0}}{T_p}, p > p_0, \quad (18)$$

где p_0 – минимальное число процессоров, при котором решалась задача. Значения эффективности могут превышать единицу, если $p_0 \neq 1$. Однако при этом можно определить оптимальное значение параметра $\eta = N/p$, при котором эффективность алгоритма максимальна.

4.1 Параллельный алгоритм блочного метода контрастирования

Наиболее эффективным представляется способ распараллеливания, когда для каждого вычислительного узла запускается свой алгоритм БМК. Обозначим через P общее число процессоров. Исследуемая территория D разбивается на P одинаковых непересекающихся подобластей $D_p^{par}, 1 \leq p \leq P$. Процессору с номером p на вычисление передается своя область D_p^{par} , для которой запускается алгоритм БМК. В рамках БМК на каждом процессоре находится некоторое количество экстремумов поля, общее количество которых передается всем процессорам в виде массива $(x_1^s, x_2^s, x_3^s, f_\delta^s), 1 \leq s \leq S$, где (x_1^s, x_2^s, x_3^s) – координаты экстремума поля, а f_δ^s – значение аномального поля. Каждый процессор определяет адекватность построенного массива на наличие рядом расположенных экстремумов $(x_1^s, x_2^s, x_3^s, f_\delta^s), 1 \leq s \leq S$, при этом каждым процессором со всем массивом сравниваются только экстремумы, полученные для определенной

ему подобласти D_p^{par} . После корректировки полученного массива, каждый процессор проверяет принадлежность отдельно взятой точки из определенной ему подобласти D_p^{par} к одному из блоков $D_s, 1 \leq s \leq S^*$, соответствующих определенной аномалии. После этого поочередно для каждого из блоков решается своя СЛАУ.

4.2 Параллельный алгоритм регуляризованного трехслойного метода Чебышева

Для решения СЛАУ на многопроцессорных вычислительных системах применяется распараллеливание системы по строкам, где каждому отдельно взятому процессору на вычисление передается свой блок с матрицей A_p размера $N/p \times N$. Так как число столбцов остается неизменным и система трехслойная, то каждому процессору необходимо также знать полностью две предыдущие итерации. Объединение полученных вектор-решений и передача общего вектора всем вычислительным узлам осуществляется при помощи функции MPI_Allgatherv. Функции вычисления нормы вектора и произведения матрицы на вектор также распараллеливаются по блочной структуре.

При такой вычислительной схеме время, затрачиваемое на межпроцессное взаимодействие, значительно меньше времени решения СЛАУ, так как каждым процессором решается своя система независимо от другого, при этом количество вычислительных операций одинаково для каждого блока. Каждое определенное количество итераций (по умолчанию \sqrt{N}) ведущим процессором проверяется выполнение условия (13). Если оно выполняется, то полученный вектор решения и соответствующее ему значение параметра регуляризации сохраняются. После того, как значение квадрата нормы невязки меньше нижней границы в неравенстве (13), то результирующее решение записывается в файл с учетом шагов 5,6 раздела 3.2.

5. Результаты численного эксперимента

Для оценки эффективности предложенного алгоритма представим результаты численного эксперимента по построению S-аппроксимации аномального гравиметрического поля в локальном варианте. Рассматривается область протяженностью 60 км по осям OX и OY. Аномальное гравитационное поле создается 11 кольцами, геометрические параметры и значения избыточной (недостаточной) плотности которых описаны в таблице 1. В таблице 1 X_c, Y_c – координаты центра кольца, R – радиус образующей окружности, R_c – расстояние от центра кольца до центра образующей окружности, Z_c – глубина залегания (от дневной поверхности до центра кольца), m – избыточная (недостаточная) плотность.

Таблица 1. Параметры аномалиеобразующих тел

№ модельного тела	X_c , км	Y_c , км	R , км	R_c , км	Z_c , км	m , г/см ³
1	22.0	31.0	0.5	6.0	3.1	0.23
2	35.0	31.0	0.5	6.0	3.1	0.23
3	43.0	18.0	0.5	4.5	2.4	-0.24
4	50.5	25.5	0.5	4.5	2.4	-0.24
5	35.0	43.0	0.4	5.1	2.5	0.19
6	35.0	54.0	0.4	5.1	2.5	0.19
7	10.0	44.0	0.5	5.0	2.2	-0.22
8	10.0	55.0	0.5	5.0	2.2	-0.22
9	33.0	9.0	0.6	6.0	2.0	0.25
10	9.2	20.0	0.5	5.0	2.3	-0.18
11	30.0	30.0	2.0	15.0	10.0	0.25

Общее количество измерений $N=90601$, сеть нерегулярная. К вычисленному полю f_i в заданных пунктах рельефа $M^i = (x_1^i, x_2^i, x_3^i), 1 \leq i \leq 90601$ искусственно добавлялась помеха $\delta f_i, 1 \leq i \leq 90601$ таким образом, что $\|\delta f\|_E / \|f\|_E = 0.0355$. В рамках метода S-аппроксимаций исходное поле аппроксимировалось суммой простого и двойного слоев, распределенных на плоскостях, залегающих на глубинах 0.9 км и 2.5 км. Число обусловленности исходной матрицы $cond(A) = 5.4 \cdot 10^{10}$. Все вычисления проводились на суперкомпьютере «Ломоносов» НИВЦ МГУ [17].

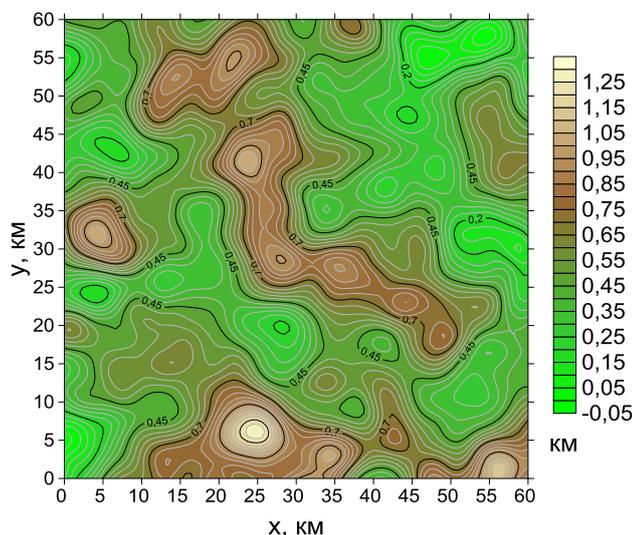


Рис. 1. Карта изолиний рельефа

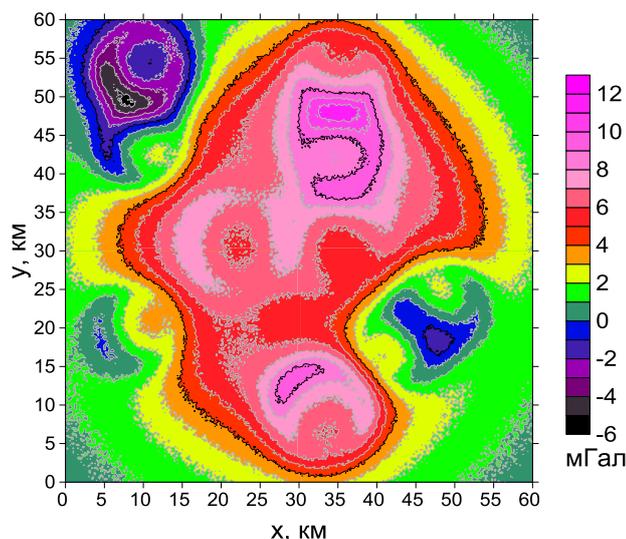


Рис. 2. Карта изоаномал (1 мГал = 10^{-5} м/с²)

Решения, полученные при различном числе процессоров, мало отличались друг от друга: аппроксимации искомым функций, найденные по формуле (6), совпадали с точностью более 99,99%. В таблице 2 приведены результаты S-аппроксимации: здесь $\sigma_{\min} = \sqrt{\delta_{\min}^2 / N}$, $\sigma_{\max} = \sqrt{\delta_{\max}^2 / N}$, $\sigma_0 = \|\mathbf{Ax} - f_{\delta}\|_E / \sqrt{N}$ – среднеквадратическое отклонение, $\Delta = \|\mathbf{Ax} - f_{\delta}\|_E / \|f_{\delta}\|_E$ – показатель качества решения, t – время работы алгоритма в минутах и секундах, $\theta = (\mathbf{Ax} - f_{\delta}, f) / (\|f\|_E \|\mathbf{Ax} - f_{\delta}\|_E)$ – коэффициент корреляции между вектором невязки $\mathbf{Ax} - f_{\delta}$ и точным вектором правой части $f = f_{\delta} - \delta f$, $\nu = (\mathbf{Ax} - f_{\delta}, \delta f) / (\|\delta f\|_E \|\mathbf{Ax} - f_{\delta}\|_E)$ – коэф-

коэффициент корреляции между вектором невязки $\Delta x \cdot f_\delta$ и вектором помехи δf , за (x, y) обозначается скалярное произведение векторов, P – общее число процессоров. Для более достоверной оценки эффективности параллельного алгоритма, программа прогонялась несколько раз и результирующее время находилось как усреднение всех реализаций.

Таблица 2. Результаты S-аппроксимации

P	σ_{\min} , мГал	σ_{\max} , мГал	σ_0 , мГал	Δ	t	θ	ν
100	0.1051	0.1819	0.1642	$3.5026 \cdot 10^{-2}$	9:10	$1.0556 \cdot 10^{-2}$	0.995907
200	0.1051	0.1819	0.1642	$3.5026 \cdot 10^{-2}$	4:16	$1.0556 \cdot 10^{-2}$	0.995907
300	0.1051	0.1819	0.1642	$3.5026 \cdot 10^{-2}$	2:49	$1.0556 \cdot 10^{-2}$	0.995907
400	0.1051	0.1819	0.1642	$3.5026 \cdot 10^{-2}$	2:10	$1.0556 \cdot 10^{-2}$	0.995907
600	0.1051	0.1819	0.1642	$3.5026 \cdot 10^{-2}$	1:33	$1.0556 \cdot 10^{-2}$	0.995907
800	0.1051	0.1819	0.1642	$3.5026 \cdot 10^{-2}$	1:12	$1.0556 \cdot 10^{-2}$	0.995907

Таблица 3. Оценка эффективности параллельного алгоритма

P	t	E_p	S_p	$\eta = N/p$
100	9:10	-	-	906
200	4:16	1.072	2.144	453
300	2:49	1.083	3.249	302
400	2:10	1.05	4.2	226.5
600	1:33	0.99	5.94	151
800	1:12	0.95	7.6	113.25

Среднеквадратическое отклонение σ_0 находится в заданных границах ($\sigma_{\min} \leq \sigma_0 \leq \sigma_{\max}$), значение показателя качества решения Δ близко к теоретически заданному $\|\delta f\|_E / \|f\|_E = 0.0355$, коэффициент корреляции $\theta \approx 0$, а $\nu \approx 1$, следовательно, построенную аппроксимационную конструкцию можно считать достоверной. Ускорение увеличивается почти пропорционально числу процессоров, а значения эффективности близки к единице, поэтому алгоритм можно считать хорошо распараллеленным. Оптимальное значение параметра η достигается при числе процессоров $P \approx 300$, так как в этом случае эффективность алгоритма максимальна.

В рамках метода S-аппроксимаций были построены первые производные поля u_x, u_y, u_z , вторая вертикальная производная u_{zz} , вторая смешанная горизонтальная производная поля u_{xy} , а также аналитические продолжения поля u на горизонтальные плоскости $H = -0.5$ км, 0 км, 2 км, 4 км, 7 км и 12 км. Для оценки точности построенных линейных трансформант были вычислены коэффициенты корреляции между теоретически заданным и построенным в рамках S-аппроксимации элементами полей. Значения коэффициентов корреляций для всех линейных трансформант оказались выше 0.9. При этом аналитические продолжения в верхнее полупространство относительно заданного рельефа ($H = 2, 4, 7$ и 12 км) и первые горизонтальные были восстановлены почти идентично теоретически заданным – коэффициенты корреляции составляли более 0.99. Это говорит об адекватности полученных решений, достоверно отображающих геологические объекты, создающие аномальное гравитационное поле.

Так как построение линейных трансформант полностью определяется найденным решением СЛАУ (7), то это говорит о высокой эффективности предложенного метода решения плохо обусловленных систем алгебраических уравнений большой размерности применительно к обратным задачам геофизики.

6. Заключение

В статье представлены параллельные алгоритмы блочного метода контрастирования с регуляризованным итерационным трехслойным методом Чебышева для решения плохо обуслов-

ленных систем линейных алгебраических уравнений больших размерностей с приближенно заданной правой частью. Результаты численного эксперимента показали высокую эффективность предложенных алгоритмов при интерпретации большого массива гравиметрических данных.

Литература

1. Акимова Е.Н., Васин В.В., Мисилев В.Е. Алгоритмы решения обратных задач гравиметрии о нахождении поверхностей раздела сред на многопроцессорных вычислительных системах // Уфа: Вестник УГАТУ, 2014. Т. 18. №2. С. 208–217.
2. Раевский Д.Н., Степанова И.Э. Об эффективности параллельного алгоритма блочного метода контрастирования решения систем линейных алгебраических уравнений большой размерности. 43-я сессия международного научного семинара им. Д. Г. Успенского: труды международной конференции (Воронеж, 26-30 января 2016г.). Воронеж: ООО ИПЦ «Научная книга», 2016. С. 151–153.
3. Tscherning C.C., Kaas E., Sorensen B., Veicherts M. Multi-processing least squares collocation: Applications to gravity field // Journal of Geodetic Science, 2013. Vol. 3. No. 3. P. 219–223.
4. Долгаль А.С., Балк П.И., Деменев А.Г., Мичурин А.В., Новикова П.Н., Рашидов В.А., Христенко Л.А., Шархимуллин А.Ф. Использование метода конечных элементов при интерпретации данных гравиразведки и магниторазведки // Вестник Краунц. Науки о Земле, 2012. №1. С. 108–127.
5. Лукьяненко Д.В., Ягола А.Г. Использование многопроцессорных систем для решения обратных задач, сводящихся к интегральным уравнениям Фредгольма 1-го рода // Екатеринбург: Труды института математики и механики УРО РАН, 2012. Т. 18. №1. С. 222–234.
6. Раевский Д.Н., Степанова И.Э. О решении обратных задач гравиметрии с помощью модифицированного метода S-аппроксимаций // Физика Земли, 2015. №2. С. 44–54.
7. Раевский Д.Н., Степанова И.Э. Модифицированный метод S-аппроксимаций. Региональный вариант // Физика Земли, 2015. №2. С. 55–66.
8. Страхов В.Н. Вариационные методы в теории линейных трансформаций гравитационных и магнитных аномалий // Докл. АН СССР, 1990. Т.312. №1. С. 63–67.
9. Страхов В.Н., Степанова И.Э. Метод S-аппроксимаций и его использование при решении задач гравиметрии (локальный вариант) // Физика Земли, 2002. №2. С.3–19.
10. Страхов В.Н., Степанова И.Э. Метод S-аппроксимаций и его использование при решении задач гравиметрии (региональный вариант) // Физика Земли, 2002. №7. С.3–12.
11. Лаврентьев М.А., Люстерник Л.А. Курс вариационного исчисления: учебное пособие для студентов, 2е изд. М.Л.: Гостоптехиздат, 1950. 296 с.
12. Страхов В.Н. и др. Актуальные проблемы геофизики и геоинформатики: сборник научных трудов. М.:ИФЗ РАН, 2004. 138 с.
13. Степанова И.Э., Раевский Д.Н., Щепетилев А.В. О повышении эффективности модифицированного метода S-аппроксимаций // Физика Земли, 2016. №1. С. 149–160.
14. Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г. Численные методы решения некорректных задач. М.: Наука, 1990. 230 с.
15. Уилкинсон Дж. Х. Алгебраическая проблема собственных чисел. М: Наука, 1970. 564 с.
16. Самарский А.А., Николаев Е.С. Методы решения сеточных уравнений. М.: «Наука», 1978. 592 с.

17. Воеводин Вл.В., Жуматий С.А., Соболев С.И., Антонов А.С., Брызгалов П.А., Никитенко Д.А., Стефанов К.С., Воеводин Вад.В. Практика суперкомпьютера «Ломоносов» // Открытые системы. Москва: Издательский дом «Открытые системы», 2012. № 7. С. 36–39.

Parallel algorithms of solving ill-conditioned systems of linear equations of big dimensions

D.N. Raevsky

The Schmidt institute of physics of the Earth RAS

Parallel algorithms of solving ill-conditioned systems of linear algebraic equations (SLAE) of big dimensions with noisy right hand side arising at the solving many inverse problems are presented in this study. The block contrasting method (BCM) for solving such SLAE based on separating the whole area into subareas of extremums where the SLAE is solved by regularized iterative three-layer Chebyshev method for each subarea is developed. The parallel algorithms are written with using MPI package. The numerical calculation for stability estimating of the iterative method and estimating the adequacy of obtained solutions for interpreting big gravity data is presented.

Key words: parallel algorithm, big data, system of linear equations, inverse problem, iterative method, regularization, gravimetry.

References

1. Akimova E.N., Vasin V.V., Misilov V.E. Algoritmy resheniya obratnykh zadach gravimetrii o nakhozhenii poverkhnostey razdela sred na mnogoprotsessornykh vychislitel'nykh sistemakh [Algorithms of solving the inverse gravimetric problems on discontinuities finding on multiprocessor systems] // Ufa: Vestnik UGATU, 2014. Vol. 18. No. 2. P. 208–217.
2. Raevsky D.N., Stepanova I.E. Ob effektivnosti parallel'nogo algoritma blochnogo metoda kontrastirovaniya resheniya sistem lineynykh algebraicheskikh uravneniy bol'shoy razmernosti [On efficiency of parallel algorithm of the block contrasting method of solving of systems of the linear algebraic equations of big dimensions]. 43-ya sessiya mezhdunarodnogo nauchnogo seminar im. D. G. Uspenskogo: trudy mezhdunarodnoy konferentsii (Voronezh, 26-30 yanvarya 2016g.) [43-rd session of Uspensky international scientific workshop: proceedings of international workshop (Voronezh, Russia, January, 26-30, 2016)]. Voronezh: OOO IPC «Nauchnaya kniga», 2016. P. 151–153.
3. Tscherning C.C., Kaas E., Sorensen B., Veicherts M. Multi-processing least squares collocation: Applications to gravity field // Journal of Geodetic Science, 2013. Vol. 3. No. 3. P. 219–223.
4. Dolgal A.S., Balk P.I., Demenev A.G., Michurin A.V., Novikova P.N., Rashidov V.A., Christenko L.A., Sharkhimullin A.F.. The finite-element method application for interpretation of gravity and magnetic data// Bulletin of KRAESC. Earth sciences, 2012. No. 1. P. 108–127.
5. Luk'yanenko D.V., Yagola A.G. Application of multiprocessor systems for solving inverse problems leading to Fredholm integral equations of the first kind // Ekaterinburg: Trudy Instituta Matematiki i Mekhaniki UrO RAN, 2012. Vol. 18. No. 1. P. 222–234.
6. Raevskiy D.N., Stepanova I.E., On the solution of inverse problems of gravimetry by the modified method of S-approximations // Izvestiya Physics of the Solid Earth, 2015. Vol. 51, No. 2. P. 207–218.
7. Raevskiy D.N. and Stepanova I.E. The modified method of S-approximation. Regional version // Izvestiya Physics of the Solid Earth, 2015. Vol. 51. No. 2. P. 197–206
8. Strakhov V.N. Variatsionnye metody v teorii lineynykh transformatsiy gravitatsionnykh i magnitnykh anomalii [Variational methods in linear transformations theory of gravitational and magnetic anomalies// Dokl. Akad. Nauk SSSR, 1990. Vol. 312. No. 1. P. 63–67.

9. Strakhov V.N., Stepanova I.E. The S-approximation method and its applications to gravity problems // *Izvestiya Physics of the Solid Earth*, 2002. Vol. 38. No. 2. P. 91–107.
10. Strakhov V.N., Stepanova I.E. Solution of gravity problems by the S-approximation method (regional version) // *Izvestiya Physics of the Solid Earth*, 2002. Vol. 38. No. 7. P. 535–544.
11. Lavrentyev M.A., Lusternik L.A., Kurs variatsionnogo ischisleniya [Course of variational calculus]. Moscow: Gostoptehizdat, 1950. 296 p.
12. Strakhov V.N. et al. Aktual'nye problemy geofiziki i geoinformatiki: sbornik nauchnyh trudov [Actual problems of the geophysics and the geoinformatics: proceedings]. Moscow: IPE RAS, 2004. 138 p.
13. Stepanova I.E., Raevskiy D.N., Schepetilov A.V. A.B. On increasing the efficiency of the modified method of S-approximations // *Izvestiya Physics of the Solid Earth*, 2016. Vol. 52. No. 1. P. 144–154.
14. Tikhonov A.N., Goncharsky A.V., Stepanov V.V., Yagola A.G. Numerical methods for the solution of ill-posed problems. Springer, 1995. 254 p.
15. Wilkinsons J.H. The algebraic eigenvalue problem, revised edition. Clarendon press, 1988. 680 p.
16. Samarskiy A.A., Nikolaev E.S. Metody resheniya setochnykh uravneniy [The methods of solving grid equations. Moscow: Nauka, 1978. 592 p.
17. Voevodin V.I., Zhumatiy S.A., Sobolev S.I., Antonov A.S., Bryzgalov P.A., Nikitenko D.A., Stefanov K.S., Voevodin Vad.V. Praktika superkomp'yutera «Lomonosov» [Practice of the «Lomonosov» supercomputer] // *Opened systems*. Moscow: Publishing house «Opened systems», 2012. No. 7. P. 36–39.