УДК 519.6

# ОБ ОДНОМ ПОДХОДЕ К РЕШЕНИЮ ОБРАТНЫХ ЗАДАЧ ВЫЧИСЛИТЕЛЬНОЙ ДИАГНОСТИКИ НА ВЫСОКОПРОИЗВОДИТЕЛЬНЫХ ЭВМ

**А. В. Гончарский**[1]

Рассматриваются методы решения обратных задач математической физики на суперкомпьютерах. Обсуждаются подходы, основанные на применении конечномерных параметрических моделей в случаях детерминированных и стохастических ошибок. Рассматриваемые методы показали высокую эффективность при их реализации на высокопроизводительных вычислительных кластерах.

Хорошо известно, что большинство обратных задач относится к некорректно поставленным [1, 2]. К классическим некорректным задачам относятся, например, так называемые операторные уравнения 1-го рода

$$A(z) = u, \quad z \in \mathbb{Z}, \quad u \in \mathbb{U}. \tag{1}$$

Здесь $\mathbb{Z}$, $\mathbb{U}$ — некоторые функциональные пространства, $A$ — оператор, действующий из $\mathbb{Z}$ в $\mathbb{U}$.

Методы решения некорректных задач были разработаны в конце прошлого века в первую очередь благодаря усилиям школы российских ученых [1 – 5]. Построенная теория дает исчерпывающие ответы на фундаментальные проблемы математики. Теория решения некорректных задач рассматривается с математической точки зрения как задача приближенного вычисления функции, когда ее аргумент задан с ошибкой. Были получены важные результаты о классе функций, допускающих приближенное вычисление [5, 6], построены эффективные алгоритмы приближений [7] и т.п.

Теория решения некорректных задач позволила построить технологию решения различных прикладных задач физики, химии, астрономии и др. [8]. Решение некорректных задач уже не было искусством. Существовал широкий набор алгоритмов их решения при наличии различной априорной информации об искомом решении. Несомненно, что созданная теория решения некорректных задач стала одним из важнейших результатов математики в прошедшем столетии.

В настоящее время появление высокопроизводительных ЭВМ, увеличивающих вычислительные возможности в тысячи раз, казалось бы должно было дать прорывные результаты в области решения некорректных задач. По мнению автора, пока этого не произошло. Перенесение алгоритмов на суперЭВМ с персоналок для сложных алгоритмов регуляризации оказалось вовсе не простым делом. Эффективность использования параллельных вычислительных структур тоже не всегда оказывалась очевидной. Любопытно отметить, что для большинства одномерных обратных задач вполне достаточно использования персональных ЭВМ. В многомерных обратных задачах зачастую не хватает и мощности суперЭВМ.

В этой заметке автор хотел бы обсудить одну идею использования вычислительных кластеров для решения многомерных обратных задач, которая с точки зрения эффективности вычислений, безусловно, является перспективной. Как известно, новое есть хорошо забытое старое.

Отправной точкой разработки методов решения некорректных задач было использование конечномерных параметрических моделей [1].

Необходимо отметить, что физиками конечномерные параметрические модели были использованы задолго до появления работ в области решения некорректных задач [9, 10]. Рассмотрим один пример. Если посмотреть на диск Солнца, то интенсивность его излучения с элементарной площадки, находящейся от центра на расстоянии $\xi$, хорошо описывается так называемой функцией потемнения к краю: $J(\xi) = J^0\left(1 - x + x\sqrt{1 - \dfrac{\xi^2}{R^2}}\right)$. Здесь $J^0$, $x$ — некоторые константы, а $R$ — радиус диска Солнца. Удивительно, но этот закон описывает функцию потемнения к краю диска $J(\xi)$ для большинства звезд [10]. Именно благодаря этому параметрическому представлению из так называемых кривых блеска затменных систем были получены уникальные и очень точные данные о радиусах звезд [9, 10].

[1] Научно-исследовательский вычислительный центр, Московский государственный университет им. М.В. Ломоносова, Ленинские горы, 119991, Москва; e-mail: gonchar@srcc.msu.su

Задача определения неизвестных функций $J(\xi)$ из кривых блеска затменных систем сводилась к решению системы одномерных интегральных уравнений 1-го рода типа $\int\limits_0^l K(x,\xi)J(\xi)\,d\xi = u(x)$. Здесь $u(x)$ — полученная из эксперимента кривая блеска, а $K(x,\xi)$ — известная функция.

Хорошая модель, адекватная реальности, и априорная конечнопараметрическая модель, базирующаяся на теории строения атмосфер звезд, позволили создать так называемую классическую теорию интерпретации кривых блеска затменных систем [10]. Возникающие обратные задачи легко решаются на обычных персональных ЭВМ и вовсе не нуждаются в использовании суперкомпьютеров, как и большинство одномерных обратных задач.

В этой заметке хотелось бы обсудить проблемы, возникающие при решении многомерных обратных задач, для которых объем вычислений существенно возрастает.

Идея, которую хотелось бы обсудить, — это попытка сделать ремейк технологии конечнопараметрических моделей, но уже с использованием суперЭВМ.

Метод решения обратной задачи в этом случае есть прямой перебор по параметрам модели в области допустимых значений параметров. С точки зрения использования параллельных вычислительных структур выигрыш очевиден. Каждый процессор независимо решает задачу при фиксированном наборе параметров модели. Все вычисления процессоров независимы друг от друга. Алгоритм идеально ложится на параллельные структуры. Таким образом, вычислительные возможности таких алгоритмов по сравнению с персональной ЭВМ вырастают в тысячи раз. По мнению автора, такая технология может стать прорывной для широкого круга обратных задач.

Перейдем к математической постановке задачи. Пусть обратная задача в рамках выбранной математической модели описывается операторным уравнением (1). Пусть $\mathbb{Z}, \mathbb{U}$ для простоты — гильбертовы пространства, $u = u(x)$ — заданная функция, $z = z(s)$ — неизвестная функция аргумента $s$. Оператор $A$ позволяет вычислить точные данные $u(x)$ при заданной функции $z(s)$. Переменные $x$ и $s$, естественно, могут быть многомерными векторами.

В детерминированной постановке обычно вместо точного значения $u(x)$ мы имеем дело с ее приближением $u_\delta(x)$ — входными данными, полученными из эксперимента. При этом полагают, что кроме $u_\delta(x)$ известна и погрешность задания входной информации $\delta$, такая, что $\|u_\delta(x) - u(x)\| \leqslant \delta$.

В рамках конечномерной параметрической модели из априорных представлений формулируется параметрическая зависимость

$$z(s) = z(s,\theta), \quad \theta \in \mathbb{R}^s.$$

Здесь функция $z(s,\theta)$ — известная функция аргумента $s$ при каждом фиксированном наборе параметров $\theta \in \mathbb{R}^s$, $\mathbb{R}^s$ — конечномерное пространство размерности $s$. В рамках конечнопараметрической модели обратная задача сводится к определению области параметров $\Theta \subset \mathbb{R}^s$, такой, что

$$\|Az(s,\theta) - u_\delta\| \leqslant \delta$$

для всех $\theta \in \Theta$. Используя современные высокопроизводительные кластеры, такую задачу можно решать простым перебором в области допустимых значений параметров $\theta$ из $\mathbb{R}^s$. Как мы уже подчеркивали выше, производительность таких алгоритмов по сравнению с персональными компьютерами возрастает в тысячи раз.

Важной проблемой решения обратных задач является представление об ошибке $\delta$. С точки зрения математиков — заданы приближенное значение $u_\delta$ и его погрешность $\delta$, такие, что $\|u_\delta - u\| \leqslant \delta$. Как из реальных данных эксперимента добыть $u_\delta$, ясно, а вот о том, как вычислить $\delta$, обычно стыдливо умалчивается, перекладывая эту проблему на экспериментаторов. Между тем это важнейший элемент всякого регуляризирующего алгоритма. В этой связи зачастую вероятностная модель погрешности является более предпочтительной.

Пусть входные данные $u(x)$ измеряются в точках $x_i$, $i = 1,\dots,k$. Будем считать, что полученные экспериментальные значения являются реализацией случайного вектора $\widetilde{u} \in \mathbb{R}^k$. Случайный вектор $\widetilde{u}$ отличается от истинного вектора $u$ на случайный вектор $\varepsilon \in \mathbb{R}^k$; здесь $\varepsilon$ — погрешность эксперимента: $\varepsilon = \widetilde{u} - u$. Обычно математическое ожидание $E\varepsilon_i = 0$. Для простоты будем считать, что $\varepsilon_i$, $i = 1,\dots,k$, независимы и нормально распределены с математическим ожиданием, равным 0, и с одинаковой дисперсией $\sigma^2$. Перепишем операторное уравнение (1) в виде

$$Az(s,\theta) = B(\theta) = u, \quad \theta \in \mathbb{R}^s, \quad u \in \mathbb{R}^k.$$

Здесь $B$ — нелинейный оператор из $\mathbb{R}^s$ в $\mathbb{R}^k$. Будем называть доверительной областью с уровнем доверия $\gamma$ оцениваемого параметра $\theta \in \mathbb{R}^s$ случайную область $D \subset \mathbb{R}^s$, с вероятностью $\gamma$ содержащую истинное значение параметра $\theta$. Задача построения доверительных интервалов тесно связана с задачей проверки статистических гипотез [11]. Для построения доверительного интервала выбираем некоторую статистику $\Delta(\widetilde{u}\,)$, зависящую от экспериментальных данных $\widetilde{u}$, причем распределение $\Delta(\widetilde{u}\,)$ известно [11]. Например, $\Delta(\widetilde{u}\,) = \sum\limits_{i=1}^{k}\bigl(B(\theta)_i - \widetilde{u}_i\bigr)^2$. Здесь $B(\theta)_i$ — $i$-я компонента вектора $B(\theta) \in \mathbb{R}^k$. Известно, что случайная величина $\Delta(\widetilde{u}\,)$ имеет распределение $\chi^2$ [11]. Задаваясь уровнем доверия $\gamma$ [11], из статистических таблиц определяют квантиль (число) $\Delta_0$ [12, 13], такой, что

$$P\bigl(\Delta(\widetilde{u},\overline{\theta}\,) \leqslant \Delta_0\bigr) = \gamma,$$

где $\overline{\theta}$ — неизвестное истинное значение $\theta$.

Объединяя в доверительную область $D(\widetilde{u}\,) \in \mathbb{R}^s$ те $\theta$, для которых $\Delta(\widetilde{u}\,) = \Delta(\widetilde{u},\overline{\theta}\,) \leqslant \Delta_0$, получаем доверительную область $D(\widetilde{u}\,) \in \mathbb{R}^s$ для параметров $\theta$. Известно, что вероятность того, что истинное значение $\theta$ принадлежит построенной области $D(\widetilde{u}\,) \in \mathbb{R}^s$, равна $\gamma$ [11, 12]. Таким образом, и в статистической постановке с вычислительной точки зрения задача построения доверительных интервалов для искомых параметров модели сводится опять к простому перебору параметров $\theta$ с проверкой неравенства $\Delta(\widetilde{u},\theta) \leqslant \Delta_0$. Можно вместо статистики $\Delta(\widetilde{u}\,)$ использовать и другие статистики.

В некоторых случаях объем вычислений можно существенно сократить. Пусть оператор $A$ — линейный оператор из $\mathbb{Z}$ в $\mathbb{U}$. Пусть параметризация $z(s,\theta)$ такова, что $z(s,\theta)$ зависит от первых $m$ компонент вектора $\theta \in \mathbb{R}^s$ линейно. Рассмотрим случайную величину $\Delta_{\min}(\widetilde{u}\,)$, такую, что $\Delta^2_{\min}(\widetilde{u}\,) = \min\limits_{\theta_1,\dots,\theta_m} \Delta^2(\widetilde{u},\theta)$. Если ошибки $\varepsilon_i$ — независимы и распределены по нормальному закону, то $\Delta^2_{\min}(\widetilde{u}\,)$ имеет известное распределение [11, 13]. Это означает, что для построения доверительных интервалов для компонент $\theta_{m+1},\dots,\theta_s$ можно использовать статистику (случайную величину) $\Delta^2_{\min}(\widetilde{u}\,)$. Доверительные интервалы находятся простым перебором по параметрам $\theta_{m+1},\dots,\theta_s$. Задача нахождения минимума $\Delta^2(\widetilde{u}\,)$ по компонентам $\theta_1,\dots,\theta_m$ при фиксированных остальных параметрах легко решается как аналитически, так и численно.

Конечно-параметрические модели широко распространены, например, в астрофизике [13]. Представляется интересным использование конечномерных моделей в диагностике приповерхностных слоев Земли и в геофизике [14, 15].

Хотелось бы обсудить очевидные преимущества изложенного выше подхода:

1) использование важной априорной информации об искомом решении;

2) возможность сверхэффективного использования кластерных комплексов;

3) отсутствие серьезных проблем в программировании на кластерах;

4) возможность получать не только приближенное решение, но и его ошибку.

Недостатки подхода также очевидны. Из теории решения некорректных задач следует, что для получения более точных решений необходимо увеличивать точность входной информации. Чем выше точность входной информации, тем более сложные конечнопараметрические модели необходимо использовать.

Можно говорить о системе расширяющихся моделей, начиная с самых простых конечнопараметрических до бесконечномерных моделей, основанных на априорной информации об искомом решении. Рассмотрим, например, хорошо известную обратную задачу гравиметрии [5]. Изменения гравитационного поля на поверхности Земли $\Delta g(r)$, вызванные компактной неоднородностью $T$, можно рассчитать как

$$\Delta g(x,y,0) = \gamma \iiint\limits_T \frac{\partial}{\partial \xi}\,\frac{1}{r(M,P)}\,dv_p\Big|_{z=0}. \tag{2}$$

Здесь $\gamma$ — некоторая константа, $r(M,P) = \sqrt{(x-\xi)^2 + (y-\eta)^2 + (z-\zeta)^2}$. Обратная задача гравиметрии состоит в определении из (2) неоднородности $T$. В простейшей модели неоднородность $T$ можно аппроксимировать трехмерным однородным эллипсоидом, имеющим однородную плотность. В рамках таких конечномерных моделей обратную задачу можно эффективно решать на кластерах в рамках рассмотренных выше представлений.

Если гипотеза о том, что решение задачи может быть найдено в рамках такой простой параметрической модели оказывается несостоятельной, то модель может быть расширена, например, естественным образом на любые выпуклые компактные тела $T$ в трехмерном пространстве.

Априорная информация о выпуклости искомых функций может быть положена в основу построения регуляризирующих алгоритмов.

Если искомая функция $z(s)$ в операторном уравнении (1) является функцией одной переменной, можно предложить эффективные алгоритмы решения обратных задач и доказать теоремы о характере сходимости приближенного решения к точному. Все эти алгоритмы решения одномерных задач доведены до стандартных программ и легко реализуются на персональных ЭВМ [8].

Априорная информация о выпуклости искомого решения сужает области допустимых решений в бесконечномерном пространстве до компактного множества. Таким образом, регуляризирующие процедуры сводятся к минимизации функционала невязки на области допустимых решений [8].

В двумерном или трехмерном случае задача оказывается намного сложнее. Так, например, предложить эффективные алгоритмы решения обратной задачи (2) на множестве выпуклых трехмерных тел $T$ намного труднее. Остается открытым и вопрос о том, как использовать огромный потенциал суперЭВМ для реализации алгоритмов минимизации функционалов при наличии подобной априорной информации.

Остановимся еще на одной многомерной обратной задаче диагностики — акустическом или сейсмическом зондировании приповерхностных слоев Земли. В простейшей скалярной волновой модели распространение волн в среде описывается уравнением Гельмгольца

$$\Delta u(r,q,\omega) + \frac{\omega^2}{c^2(r)}\, u(r,q,\omega) = f(r,q,\omega). \tag{3}$$

Здесь $r \in \mathbb{R}^3$ — положение точки в пространстве, $\omega$ — круговая частота звука, $u(r,q,\omega)$ — скалярное волновое поле, $c(r)$ — фазовая скорость в среде, функция $f(r,q,\omega)$ описывает источники [14].

Предположим, что среда является однородной со скоростью распространения волны $c_0$ везде за границами области $R$, содержащей неоднородность, описываемую неизвестной функцией $c(r)$. Обратная задача состоит в отыскании $c(r)$ по наблюдениям на поверхности Земли. Поскольку неизвестными являются $c(r)$ и $u(r,q,\omega)$, обратная задача является нелинейной и сводится к решению системы двух нелинейных операторных уравнений [14]

$$\begin{aligned} u(r,q,\omega) &= u_0(r,q,\omega) + \omega^2 \int\limits_R G(r',r,\omega)\,\xi(r')\,u(r',q,\omega)\,dr', \quad r \in R,\\ U(p,q,\omega) &= \omega^2 \int\limits_R G(r',p,\omega)\,\xi(r')\,u(r',q,\omega)\,dr', \quad p \in P. \end{aligned} \tag{4}$$

Здесь $U(p,q,\omega)$ — функция Грина, $U(r,q,\omega)$ — получается как результат измерений в области расположения приемников, $u_0(r,q,\omega)$ — поле прямой волны.

Эта классическая постановка подробно исследовалась в работах [14, 15]. Даже в рамках простейшей скалярной модели (3) подобные задачи невозможно решать на персональных ЭВМ. Полученные результаты [14] показывают, что и на мощных кластерных комплексах решение таких нелинейных задач сопряжено со значительными трудностями из-за огромного объема вычислений.

В рамках простейшей конечнопараметрической модели, где неоднородность представлена шаром постоянной плотности $c_R$, конечнопараметрическая обратная задача легко решается простым перебором по параметрам модели. При фиксированных геометрических параметрах решение прямой (а стало быть, линейной) задачи легко находится из системы (4), причем и на этапе решения прямой задачи можно и нужно использовать возможности кластерных систем, распараллеливая расчет поля на поверхности Земли $u(r,q,w)$ в разных точках по $r$.

Модель может быть расширена, например, на эллипсоиды, ориентированные произвольным образом в пространстве. Эта задача также может решаться простым перебором. Если отказаться от конечнопараметрической модели и рассмотреть случай, когда априорной информацией является выпуклость искомой области $T$, задача существенно усложняется. Такие алгоритмы еще предстоит разработать.

Основную идею заметки можно сформулировать следующим образом. Существует естественный путь использования суперЭВМ для решения обратных задач, который состоит в распараллеливании некоторых элементов уже разработанных, хорошо зарекомендовавших себя алгоритмов. Но есть и другой путь — построение алгоритмов решения обратных задач, исходя из структуры суперЭВМ и их возможностей. Эта заметка и есть такая попытка.

Автор считает своим приятным долгом выразить благодарность чл.-корр. РАН Вл. В. Воеводину за неоднократные обсуждения работы.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Тихонов А.Н.* Об устойчивости обратных задач // ДАН СССР. 1943. **39**, № 5. 195–198.
2. *Тихонов А.Н.* О решении некорректно поставленных задач // ДАН СССР. 1963. **151**, № 3. 501–504.
3. *Лаврентьев М.М.* О некоторых некорректных задачах математической физики. Новосибирск: Сиб. отд. АН СССР, 1962.
4. *Иванов В.К.* Приближенное решение операторных уравнений первого рода // ЖВМ и МФ. 1966. **6**. 197–205.
5. *Bakushinsky A., Goncharsky A.* Ill-posed problems: theory and applications. Dordrecht: Kluwer Academic Publishers, 1994.
6. *Морозов В.А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987.
7. *Vinokurov V.A.* Regularizability of functions // Ill-Posed Problems in the Natural Sciences. M.: Mir, 1987. 52–70.
8. *Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. М.: Наука, 1983.
9. *Цесевич В.П.* Затменные переменные звезды. М.: Наука, 1971.
10. *Гончарский А.В., Черепащук А.М., Ягола А.Г.* Некорректные задачи астрофизики. М.: Наука, 1985.
11. *Климов Г.П.* Теория вероятностей и математическая статистика. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1983.
12. *Крамер Г.* Математические методы статистики. М.: Мир, 1975.
13. *Гончарский А.В., Романов С.Ю., Черепащук А.М.* Конечнопараметрические обратные задачи астрофизики. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1991.
14. *Гончарский А.В., Романов С.Ю.* Об одной задаче компьютерной томографии в волновом приближении // Вычислительные методы и программирование. 2006. **7**, № 1. 40–44.
15. *Гончарский А.В., Романов С.Ю., Харченко С.А.* Обратная задача акустической диагностики трехмерных сред // Вычислительные методы и программирование. 2006. **7**, № 1. 117–125.

Поступила в редакцию
08.09.2008