

О конструировании вычислительного
алгоритма для решения некорректной задачи
с использованием визуализации
на вычислительном комплексе МВС-1000

Т.И. Серезникова

ИММ УрО РАН

В работе изложен опыт, полученный в процессе восстановления разрывных решений интегрального уравнения Фредгольма первого рода, конструирования вычислительного алгоритма и подбора подходящих параметров регуляризации и итерационной аппроксимации с использованием визуализации.

Автор благодарит С.В. Шарфа за полезные консультации и П.А. Васева за предоставленную автору возможность использовать эффективную подсистему онлайн-визуализации и отмечает, что данная система требует минимум усилий прикладного программиста при ее использовании. Технические же вопросы реализации данной подсистемы обсуждаются в  [5,6].

Постановка задачи и регуляризация

В работе В.В. Васина [1] поставлена и теоретически обоснована задача о восстановлении решения одномерного интегрального уравнения Фредгольма первого рода

$$Au \equiv \int_0^1 K(t, s)u(s)ds = f(t), \quad 0 \leq t \leq 1, \quad (1)$$

на основе тихоновской регуляризации с использованием стабилизатора, содержащего норму Липшица

$$\|u(s)\|_{H^\mu} = \max_{s \in D} |u(s)| + \sup_{s_1, s_2 \in D} \frac{|u(s_1) - u(s_2)|}{|s_1 - s_2|^\mu}. \quad (2)$$

В данной работе задача сводится к численному нахождению функции u , доставляющей минимум функционалу $\Phi^\alpha(u, \hat{u})$ при фиксированном значении параметра α

$$u = \underset{u}{\operatorname{argmin}} \Phi^\alpha(u, \hat{u})$$

$$\Phi^\alpha(u, \hat{u}) = \|Au - f\|^2 + \alpha \{ \|u - \hat{u}\|_{L_2}^2 + \|u - \hat{u}\|_{H^\mu} \}, \quad (3)$$

где \hat{u} — пробное решение.

В модельных расчетах в качестве \hat{u} использовались

- либо приближенное решение задачи, полученное ранее при малом α ,
- либо результат расчета \hat{u} по специально разработанному для этого алгоритму.

Оптимальное u для функционала из (3) находится с помощью итерационного субградиентного метода

$$u^{k+1} = u^k - \lambda_k \nabla \Phi^\alpha(u^k, \hat{u}) / \|\nabla \Phi^\alpha(u^k, \hat{u})\|, \quad (4)$$

где $\nabla \Phi^\alpha(u^k, \hat{u})$ — произвольный субградиент функционала Φ^α в точке u^k ,

$$\lambda_k = (\Phi^\alpha(u^k, \hat{u}) - \Phi_*^\alpha) / \|\nabla \Phi^\alpha(u^k, \hat{u})\|, \quad (5)$$

Φ_*^α — оптимальное значение функционала.

Формулы (4)–(5) позволяют последовательно получать очередное приближение функции u^{k+1} при монотонном уменьшении величины минимизируемого функционала.

Используется следующая дискретная аппроксимация минимизируемого функционала на равномерной сетке с шагом $h = 1/N$

$$\min \left\{ \max_{0 \leq i \leq N} \left| \sum_{j=0}^N \nu_j K(t_i, s_j) u_j - f_i \right| + \right. \\ \left. + \alpha \left[\max_{0 \leq j \leq N} |u_j| + \max_{0 \leq i, j \leq N} \frac{|u_i - u_j|}{|t_i - t_j|^\mu} \right] : \{u_j\}_1^N \right\}, \quad (6)$$

где ν_j — коэффициенты квадратурной формулы трапеций. Вид субградиента приводится в качестве примера лишь для третьего слагаемого функционала из (6)

$$\varphi(u) = \max_{0 \leq i, j \leq N} \frac{|u_i - u_j|}{|s_i - s_j|^\mu}. \quad (7)$$

Пусть $J(u)$ — множество пар индексов i_0, j_0 , для которых достигается максимум.

Вводится вектор

$$v_{i_0 j_0} = (0, \dots, 0, \frac{1}{|t_{i_0} - t_{j_0}|^\mu}, 0, \dots, 0, -\frac{1}{|t_{i_0} - t_{j_0}|^\mu}, 0, \dots, 0), \quad (8)$$

где ненулевые элементы занимают позиции с номерами i_0 и j_0 ; тогда тогда субдифференциал $\partial\varphi(u)$ имеет вид

$$\partial\varphi(u) = \begin{cases} M = \text{co}\{v_{i_0 j_0}\}_{i_0, j_0 \in J(u)}, & \text{если } u_{i_0} - u_{j_0} > 0, \\ \text{co}\{M \cup (-M)\}, & \text{если } u_{i_0} - u_{j_0} = 0, \\ -M = \text{co}\{-v_{i_0 j_0}\}_{i_0, j_0 \in J(u)}, & \text{если } u_{i_0} - u_{j_0} < 0, \end{cases} \quad (9)$$

где $\text{co}\{M\}$ — выпуклая оболочка множества M ,
 $u = (u_1, u_2, \dots, u_N)$.

По результатам предыдущей работы ▶ [4] выделены две проблемы:

- Слишком длительный счет.
- Сглаживание изломов графика в процессе расчетов.

В данной работе рассматривается модификация алгоритма

- использующая достаточно большие значения параметра α ,
- вычисляющая пробное решение \hat{u} по специальному алгоритму вместо использования нулевого пробного решения,
- использующая одинаковый набор ключевых численных процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения.

По результатам предыдущей работы [4] выделены две проблемы:

- Слишком длительный счет.
- Сглаживание изломов графика в процессе расчетов.

В данной работе рассматривается модификация алгоритма

- использующая достаточно большие значения параметра α ,
- вычисляющая пробное решение \hat{u} по специальному алгоритму вместо использования нулевого пробного решения,
- использующая одинаковый набор ключевых численных процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения.

По результатам предыдущей работы ▶ [4] выделены две проблемы:

- Слишком длительный счет.
- Сглаживание изломов графика в процессе расчетов.

В данной работе рассматривается модификация алгоритма

- использующая достаточно большие значения параметра α ,
- вычисляющая пробное решение \hat{u} по специальному алгоритму вместо использования нулевого пробного решения,
- использующая одинаковый набор ключевых численных процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения.

По результатам предыдущей работы [4] выделены две проблемы:

- Слишком длительный счет.
- Сглаживание изломов графика в процессе расчетов.

В данной работе рассматривается модификация алгоритма

- использующая достаточно большие значения параметра α ,
- вычисляющая пробное решение \hat{u} по специальному алгоритму вместо использования нулевого пробного решения,
- использующая одинаковый набор ключевых численных процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения.

Процедура расчетов помимо величины параметров α и μ порождает дополнительные параметры счета:

- число точек сетки при проведении дискретной аппроксимации — $N + 1$,
- стартовые значения для u^0 и \hat{u} в формулах (4)–(5),
- параметр остановки расчетов, например, в виде верхнего ограничения $K, (k < K)$ числа проведенных перерасчетов (итераций) по формулам (4)–(5).

Визуализации проводимых расчетов позволила подобрать параметры, сформировать алгоритм расчетов и получить достаточно быстро улучшенное приближенное решение.

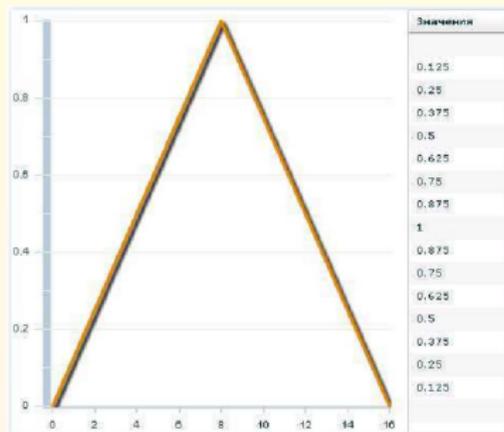
Численные эксперименты проводились в процессе решения интегрального уравнения с ядром $K(t, s)$, имеющим вид

$$K(t, s) = H/[H^2 + (t - s)^2], \quad 0 < H \leq 1, \quad 0 \leq t, s \leq 1,$$

для двух моделей с известными точными решениями, “шалаш” и “ступенька”.

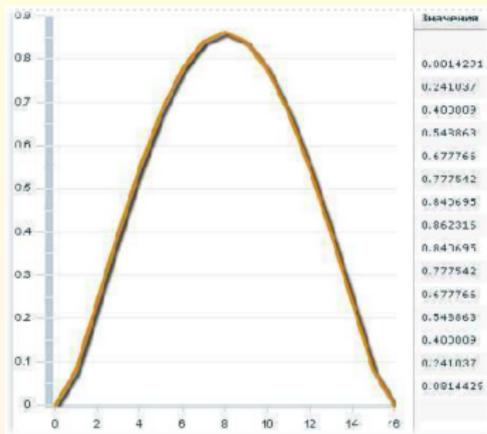
В проведенных расчетах параметр N фиксирован, $N = 16$.

Модель 1



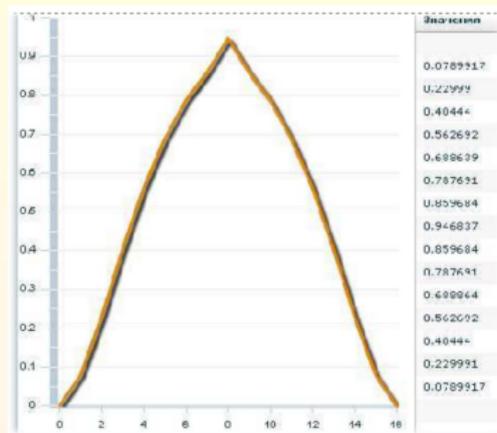
Точное решение

Модель 1



Приближенное решение после 12000 итераций при $\alpha = 10^{-11}$

Модель 1



Улучшенное приближение после 32 итераций при $\alpha = 0.5$

Модель 1

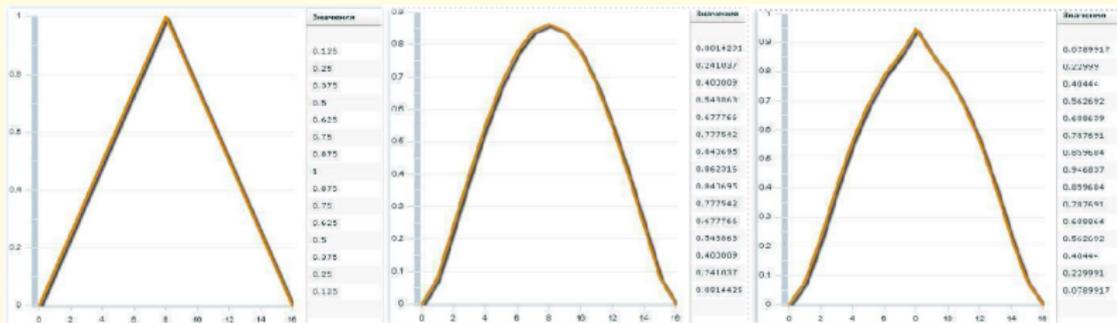


Рис. 1

Рис. 2

Рис. 3

Рис. 1. Точное решение

Рис. 2. Приближенное решение (12000 итераций, $\alpha = 10^{-11}$)

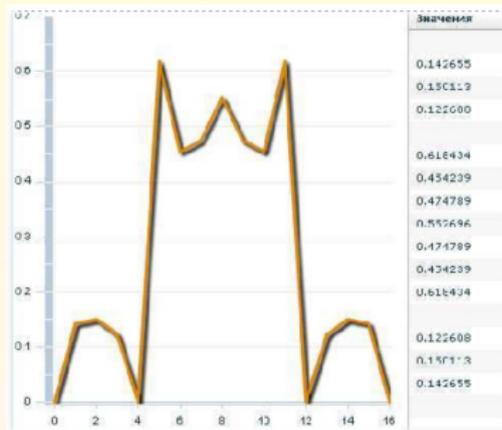
Рис. 3. Улучшенное решение (32 итерации, $\alpha = 0.5$)

Модель 2



Приближенное значение после 10 итераций при $\alpha = 0.5$

Модель 2



Приближенное решение после 10 итераций при $\alpha = 0.85$

Модель 2

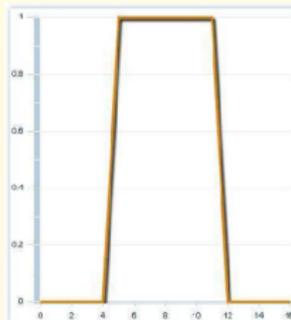


Рис. 3



Рис. 4

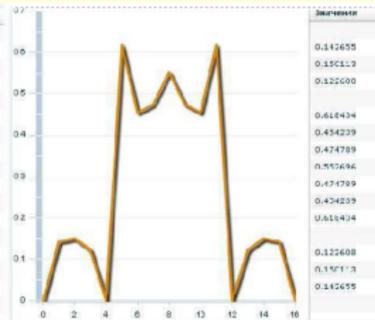


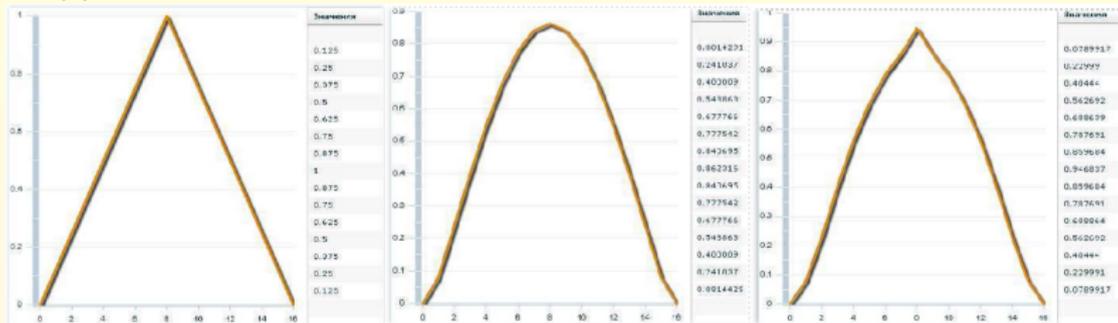
Рис. 5

Рис. 3. Точное решение

Рис. 4. Приближенное решение (10 итераций, $\alpha = 0.5$)

Рис. 5. Приближенное решение (10 итерации, $\alpha = 0.85$)

Модель 1



Модель 2



Предлагается

- На первом этапе — улучшить пробное решение \hat{u} , уменьшив его “пилообразность”.



Рис. 7



Рис. 8

Рис. 7. Начальный расчет пробного решения \hat{u} .

Рис. 8. Окончательный расчет пробного решения \hat{u} .

- На втором этапе — пробное решение \hat{u} с рис. 8 используется для получения улучшенного приближенного решения u .

Предлагается

- На первом этапе — улучшить пробное решение \hat{u} , уменьшив его “пилообразность”.



Рис. 7



Рис. 8

Рис. 7. Начальный расчет пробного решения \hat{u} .

Рис. 8. Окончательный расчет пробного решения \hat{u} .

- На втором этапе — пробное решение \hat{u} с рис. 8 используется для получения улучшенного приближенного решения u .

На втором этапе

Проводится сглаживание пробного решения с рис. 8



Рис. 8

Рис. 8. Окончательный расчет пробного решения \hat{u} .

На втором этапе

Проводится сглаживание пробного решения с рис. 8 и выполняется 15 итераций при $\alpha = 0.85$.

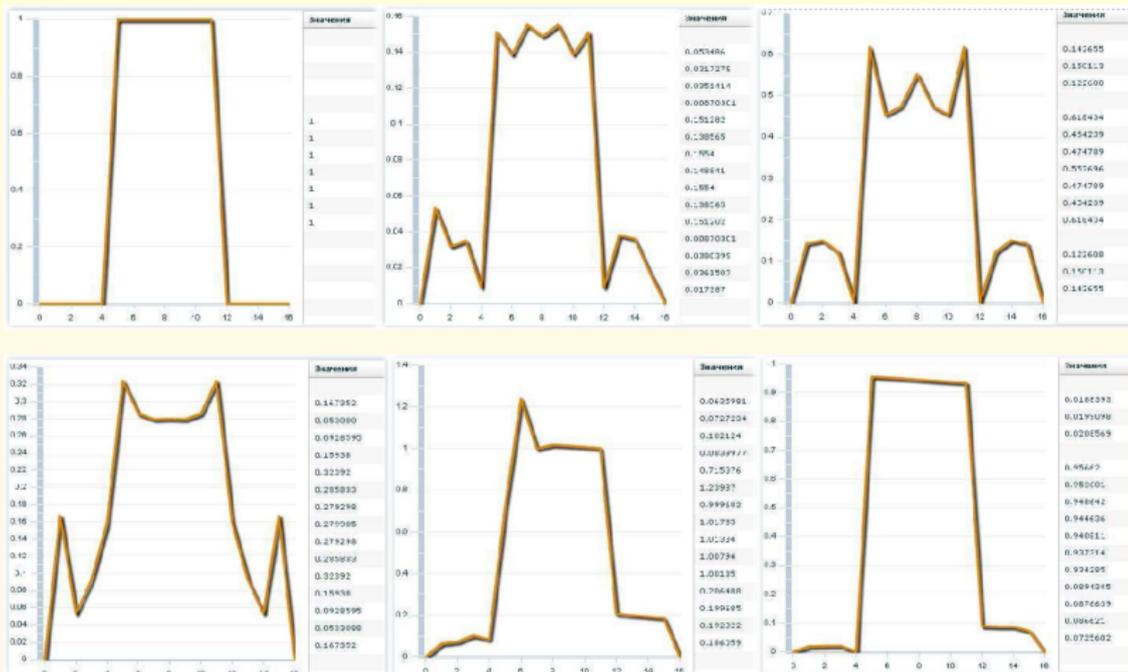


Рис. 8

Рис. 9

Рис. 8. Окончательный расчет пробного решения \hat{u} .

Рис. 9. Полученное приближенное решение за 15 итераций при $\alpha = 0.85$



Изломы точного решения восстановлены достаточно хорошо.

Заключение

- В ранее проведенных экспериментах по численному восстановлению решений  [2,3,4] для приближенных решений оказалось характерным сглаживание точного решения в точках резкого изменения графиков восстанавливаемых функций и длительный счет, составляющий тысячи итераций.
- В данной работе вычислительный алгоритм дополнен процедурами, позволяющими изменять пробное решение. Набор числовых процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения используется один и тот же.
- Уточнение вариантов алгоритма и выбор величины параметров осуществлялись в процессе расчетов и просмотра в режиме on-line большого количества графиков субградиентов и приближенных решений.

Заключение

- В ранее проведенных экспериментах по численному восстановлению решений $\triangleright [2,3,4]$ для приближенных решений оказалось характерным сглаживание точного решения в точках резкого изменения графиков восстанавливаемых функций и длительный счет, составляющий тысячи итераций.
- В данной работе вычислительный алгоритм дополнен процедурами, позволяющими изменять пробное решение. Набор числовых процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения используется один и тот же.
- Уточнение вариантов алгоритма и выбор величины параметров осуществлялись в процессе расчетов и просмотра в режиме on-line большого количества графиков субградиентов и приближенных решений.

Заключение

- В ранее проведенных экспериментах по численному восстановлению решений ▶ [2,3,4] для приближенных решений оказалось характерным сглаживание точного решения в точках резкого изменения графиков восстанавливаемых функций и длительный счет, составляющий тысячи итераций.
- В данной работе вычислительный алгоритм дополнен процедурами, позволяющими изменять пробное решение. Набор числовых процедур и для расчета пробного решения, и для основного расчета приближенного решения используется один и тот же.
- Уточнение вариантов алгоритма и выбор величины параметров осуществлялись в процессе расчетов и просмотра в режиме on-line большого количества графиков субградиентов и приближенных решений.

Список литературы

- 1 Васин В.В. Аппроксимация негладких решений линейных некорректных задач // Тр. Ин-та математики и механики УрО РАН. 2006. Т.12, № 1. С.64–77. [▶ ->Сл.2](#)
- 2 Васин В.В., Серезникова Т.И., Шарф С.В. Решение одной задачи восстановления изображения методом регуляризации и итеративной аппроксимации // Алгоритмы и программ. средства паралл. вычислений. Вып.7. Екатеринбург: УрО РАН. 2001. С.250–261.
- 3 Васин В.В., Серезникова Т.И., Шарф С.В. Распараллеливание и оптимизация при решении задачи восстановления изображения двухэтапным методом // Алгоритмы и программ. средства паралл. вычислений. Вып.7. Екатеринбург:УрО РАН. 2004. С.47–64.
- 4 Васин В.В., Серезникова Т.И., Шарф С.В. Васев П.А. О распараллеливании и визуализации при решении некорректных задач методами регуляризации и итерационной аппроксимации на вычислительном комплексе МВС-1000 // Параллельные вычислительные технологии: Тр. научной конф. Челябинск: ЮУрГУ, 2007. Т. 2. [▶ ->Сл.7](#) [▶ ->Сл.13](#)

Список литературы

- 5 Авербух В.Л., Манаков Д.В, Васев П.А., Комаровский И.А., Мухачев А.А., Шинкевич А.Н. Подходы к реализации средств on-line визуализации параллельных вычислений // “Супервычисления и мат. моделирование”: Тез. междунар. семинара. Саров: ВНИИЭФ-РФЯЦ, 2003. С. 14–16.
- 6 Васев П.А. Разработка механизма транспортной подсистемы для интерактивной визуализации параллельных вычислений // “Супервычисления и математическое моделирование”: Тез. междунар. семинара . Саров: ВНИИЭФ-РФЯЦ, 2004. С.22–23. [▶ -> Сл.1](#)