

МИНИСТЕРСТВО НАУКИ И ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ
РОССИЙСКОЙ ФЕДЕРАЦИИ
ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ
УЧРЕЖДЕНИЕ «ВСЕРОССИЙСКИЙ НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГЕОЛОГИЧЕСКИЙ НЕФТЯНОЙ ИНСТИТУТ»

На правах рукописи

Мицын Сергей Валерьевич

**МЕТОДИКА И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ
ТРЕХМЕРНОГО МОДЕЛИРОВАНИЯ СТРОЕНИЯ
ТЕРРИТОРИИ НА ОСНОВЕ ОБРАБОТКИ
ГЕОПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ПОЛЕЙ В СРЕДЕ
ГЕОИНФОРМАЦИОННОЙ СИСТЕМЫ INTEGRO**

Специальность 1.6.20 – Геоинформатика, картография

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата технических наук

Научный руководитель: доктор технических наук
Финкельштейн Михаил Янкелевич

2023 год – Москва

Оглавление

Введение.....	3
Глава 1. Методика и программное обеспечение для решения обратных задач на сеточных моделях.....	13
1.1 Модель.....	14
1.2 Метод Приезжева.....	16
1.3 Метод Приезжева на сеточных моделях	19
1.4 Учёт априорных данных параметризацией.....	24
1.5 Регуляризация.....	24
Глава 2. Разработка методики экстраполяции для расчёта инверсии.....	31
2.1 Формализация задачи	31
2.2 Методика экстраполяции	33
2.3 Содержательные гармоники спектрального разложения	35
2.4 Сравнение методик экстраполяции.....	36
Глава 3. Монтажный метод.....	41
3.1 Модель вмещающей среды	42
3.2 Атомарная модификация модели среды.....	43
3.3 Приоритет модификации.....	49
3.4 Ограничения	54
3.5 Групповые изменения классовой модели.....	56
3.6 Параллельная реализация.....	62
3.7 Вычисления на графических ускорителях	67
3.8 Стабилизация с помощью механизма приоритетов	86

Глава 4. Практическое применение разработок на примере моделирования Енисей-Хатангского регионального прогиба	95
4.1 Построение структурной карты на основе инверсии поля силы тяжести	96
4.2 Построение модели интрузий монтажным методом.....	99
Заключение	103
Список литературы	105

Введение

Актуальность проблемы.

Решение задач устойчивого экономического развития Российской Федерации невозможно без обеспечения народного хозяйства полезными ископаемыми. В связи с исчерпанием приповерхностных месторождений необходимостью повышения глубинности геологоразведочных работ. Поэтому актуальным направлением геолого-геофизических исследований является изучение глубинного строения перспективных территорий и создание их объемных моделей.

На региональном этапе изучения новых перспективных территорий, когда их охват буровыми и сейсмическими работами еще недостаточен для построения адекватных физико-геологических моделей, большую роль для оптимизации направлений поиска и проведения прогнозных построений играют материалы гравитационной и магнитной съемок, имеющиеся для весьма значительной части площади страны, по крайней мере, в мелких и средних масштабах. С использованием данных этих геопотенциальных полей возможно построение объемных моделей и определение соответствующих физических параметров. Таким образом, развитие методов и компьютерных технологий трехмерного моделирования, учитывающего гравитационное и магнитное поле.

Породы, слагающие геологическую среду, характеризуются большим разнообразием физических параметров, неоднородности распределения которых продуцируют аномалии соответствующих естественных физических полей. В частности, неоднородности плотности и намагниченности порождают аномалии гравитационного (силы тяжести) и магнитного полей.

Наиболее значительная часть территории России покрыта съёмками геопотенциальных полей масштаба 1:200 000. Данные съёмок проходят первичную обработку и в результате представляются в виде аномальных

полей, приведённых к условному нулевому уровню, заданных на регулярной прямоугольной сетке.

В настоящее время в ФГБУ ВНИГНИ функционирует программный комплекс ГИС INTEGRO[1; 2], разработанный коллективом сотрудников организаций. Этот программный комплекс предназначен для геоинформационной поддержки решения геологических задач. Одной из таких задач является построение трёхмерных моделей территорий по комплексу геолого-геофизических данных. Данная работа посвящена методам обработки геопотенциальных полей для построения трёхмерных моделей глубинного строения территории.

Разработанность темы

В силу некорректности обратных геофизических задач построения геофизической трёхмерной модели территории по данным геопотенциальных полей одному набору исходных данных может соответствовать огромное множество трёхмерных моделей территорий. Поэтому важную роль играет этап геофизической и геологической интерпретации полей на основе физических, статистических и эвристических связей между полем, физической средой и геологической обстановкой. Особое место занимают геолого-геофизической интерпретации на основе построения и анализа моделей эффективного параметра, например, методом полного градиента[3], векторного сканирования[4–8], аналитического продолжения[9; 10], вариаций Андреева-Гриффина[10; 11], и др. Промежуточное положение между ними и содержательными моделями занимают методы построения формально-эквивалентных моделей эффективного параметра, для таких моделей единицей измерения параметра является физическая величина (например, г/см^3), а параметр имеет смысл избыточной физической величины. Такие модели строятся специальными методами, которые объединяются в класс «аппроксимационных томографических»[12]. К ним относятся метод Новоселицкого[13; 14], другие методы, разработкой которых занимались в различное время Кобрунов А.И., Варфоломеев В.А.,

Блох Ю.И., Бабаянц П.С., Булах Е.Г., Мартышко П.С и др. [15–18]. Среди них выделяется метод Приезжева[19; 20], получивший широкое распространение в отечественных программных пакетах (ГИС INTEGRO, Каскад 3Д).

Также существуют разнообразные методики и алгоритмы решения обратных задач, основанные на монтажном методе, которые разрабатывали Страхов В.Н, Лапина М.И., Балк П.И., Долгаль А.С., Йеске А. и др. [21–24]. Они предполагают решение обратной задачи в конечноэлементной постановке. В данной работе осуществлено углубленное развитие и адаптация упомянутых методов применительно к задаче регионального моделирования.

На основе обработки полей разработано большое количество интерпретационных методов, включая различные варианты метода особых точек[25] (Страхов В.Н., Голиздра Г.Я., Берёзкин В.М., Трошков Г.А. и др.), распространённая на западе деконволюция Эйлера[26; 27].

Цель работы

Целью работы является разработка методик и программного обеспечения для объёмного моделирования глубинного строения территорий на основе интерпретации геопотенциальных полей.

Основные задачи работы

1. Разработка методики и программного обеспечения корректного пересчёта геопотенциальных полей, заданных на сетке, в эквивалентные распределения эффективного физического параметра на основе дискретных преобразований Фурье с учётом априорных данных.
2. Разработка методики и программного обеспечения экстраполяции потенциальных полей, заданных на сетке, по латерали с целью достижения корректности применения методов обработки, основанных на дискретных преобразованиях Фурье.
3. Разработка методики и программного обеспечения решения обратных геофизических задач на основе монтажного метода подбора физических

параметров сеточных моделей среды с целью обеспечения возможности построения сложных моделей без использования больших вычислительных ресурсов.

Объект исследования – глубинное геолого-геофизическое строение территории.

Предмет исследования – методы трёхмерного моделирования глубинного строения по геопотенциальным полям, заданным на сетке, на региональном этапе исследований территории.

Научная новизна.

1. Модернизирована методика инверсии геопотенциальных полей, переносящая метод Приезжева на дискретные сеточные модели, обеспечивающая полную эквивалентность инверсии соответствующему ей полю и допускающая параметризацию, позволяющую подбирать модели под имеющиеся априорные данные.
2. Разработана новая методика экстраполяции сеточных моделей полей, обеспечивающая непрерывность поля, его производных и периодичность поля.
3. Создана новая методика и программное обеспечение построения модели физической среды, основанная на монтажном методе, позволяющая строить содержательные модели среды, а также использующая групповые операции для ускорения вычислений и позволяющая строить модели без использования больших вычислительных ресурсов.

Достоверность результатов.

Методика и программного обеспечение для пересчёта сеточных моделей полей в эквивалентные распределение физического параметра на основе метода Приезжева обоснованы тщательным анализом корректности переноса результатов, основанных на непрерывных преобразованиях Фурье, на дискретные преобразования Фурье и сеточные модели поля и среды.

Достоверность всех изложенных результатов подтверждается многочисленными численными экспериментами, проведенными с использованием модельных ситуаций.

Кроме того достоверность полученных результатов подтверждается успешной апробацией разработанного программного обеспечения на различных технологических этапах трёхмерного моделирования территории, при выполнении госзадания ФГБУ ВНИГНИ, включая Енисей-Хатангский региональный прогиб, Предуральский прогиб, зону сочленения Волго-Уральской антиклизы и Тимано-Печёрской плиты, Астраханский свод, Прикаспийскую впадину, Жигулёвско-Пугачёвский свод Волго-Уральской антиклизы, зону сочленения Байкитской антиклизы и Курейской синеклизы и др.

Теоретическая значимость

1. Теоретическая значимость модернизации метода Приезжева заключается в теоретической проработанности, благодаря которой была построена методика, позволяющая получать распределение физического параметра, поле от которого совпадает с наблюдаемым полем вплоть до точности, обеспечиваемой вычислительной машиной и программным обеспечением.
2. Теоретическая значимость модернизации монтажного метода заключается в доказательстве возможности стабилизации монтажного метода через механизм приоритетов, что может использоваться для моделирования с использованием содержательных значений физического параметра.

Практическая значимость работы заключается в её направленности на решение актуальных для геологической отрасли задач моделирования объёмного строения территорий в условиях недостаточности скважинных и сейсмических данных.

Практическая ценность работы состоит в том, что разработанные методики и программное обеспечение для обработки и интерпретации

геопотенциальных полей, заданных на сетке, позволяют повысить точность построения трёхмерных геофизических и геологических моделей территорий.

Методология и методы исследования

Использовались методы математического анализа, математического моделирования, методы численного решения дифференциальных уравнений, методы математической статистики, оптимального управления и распараллеливания вычислений.

Защищаемые положения

1. Разработанные методика и программное обеспечение построения сеточных моделей эквивалентного распределения физического параметра на основе дискретного преобразования Фурье обеспечивает корректное распространение метода Приезжева на поля, заданные в виде дискретных сеток. Методика допускает параметризацию, позволяющую получать модели физической среды, согласующиеся с априорными данными, и отвечающие исходному полю.
2. Разработаны методика и программное обеспечение экстраполяции сеточных моделей потенциальных полей, обеспечивающие периодичность и непрерывность продолжения поля и его первой производной, что позволяет подавить краевые эффекты при применении методов инверсии, основанных на дискретных преобразованиях Фурье.
3. Разработаны методика и программное обеспечение построения сеточных моделей среды на основе монтажного метода решения обратных задач, использующего механизм приоритетов и групповые операции, чем достигается возможность построения моделей сложнопостроенных сред на персональных компьютерах.

Достоверность результатов.

Методика и программное обеспечение для пересчёта сеточных моделей полей в эквивалентные распределения физического параметра на основе метода Приезжева обоснованы тщательным анализом корректности переноса

результатов, основанных на непрерывных преобразованиях Фурье, на дискретные преобразования Фурье и сеточные модели поля и среды.

Достоверность всех изложенных результатов подтверждается многочисленными численными экспериментами, проведенными с использованием модельных ситуаций.

Кроме того, достоверность полученных результатов подтверждается успешной апробацией разработанного программного обеспечения на различных технологических этапах трёхмерного моделирования территории при выполнении государственного задания ФГБУ «ВНИГНИ», включая Енисей-Хатангский региональный прогиб, Предуральский прогиб, зону сочленения Волго-Уральской антеклизы и Тимано-Печорской плиты, Астраханский свод, Прикаспийскую впадину, Жигулёвско-Пугачёвский свод Волго-Уральской антеклизы, зону сочленения Байкитской антеклизы и Курейской синеклизы и др.

Соответствие диссертации паспорту научной специальности

Полученные научные результаты соответствуют паспорту специальности 1.6.20 – «Геоинформатика, картография» по следующим пунктам:

П.7. Математическое, информационное, лингвистическое и программное обеспечение ГИС и их приложений.

П.8. Теория, методы и алгоритмы математической обработки и представления пространственных данных.

П.9. Методы и технологии геоинформационного анализа пространственных данных, геоинформационного и картографического моделирования пространственных объектов, процессов и систем с использованием средств вычислительной техники.

Внедрение

В результате проведённых исследований было разработано программное обеспечение, реализующее все разработанные методики, и внедрено в ГИС INTEGRO. Разработанные и модернизированные методики в

составе ГИС INTEGRO используются для моделирования трёхмерного строения территорий в условиях недостаточности скважинных и сейсмических данных, актуальной для организаций геологической отрасли. В основе диссертации лежат работы, проведённые в Федеральном государственном бюджетном учреждении «Всероссийский научно-исследовательский геологический нефтяной институт». Результаты исследований были успешно применены при работах на Енисей-Хатангском региональном прогибе в рамках выполнения госзадания института.

Личный вклад автора

Автор самостоятельно выполнил теоретический анализ методик обработки геопотенциальных полей, выполнил их модернизацию и разработал программное обеспечение, реализующее изложенные методики, на языке программирования C++. Автор принимал активное участие в разработке методического и технологического обеспечения решения обратных задач на основе этих методов: разработка вычислительных схем и графов; тестировании и испытании на модельных и практических примерах; разработке методического обеспечения по использованию программного обеспечения. Разработанное программное обеспечение интегрировано автором в ГИС INTEGRO.

Апробация

Результаты исследований отражены в шести печатных работах по теме диссертации в журналах, рекомендованных ВАК, а также выступлении на международной молодёжной конференции «Современные проблемы прикладной математики и информатики», 2014 и 48-м заседании международного научного семинара им. Д. Г. Успенского – В. Н. Страхова «Вопросы теории и практики геологической интерпретации геофизических полей», 2022.

Публикации

Результаты работы опубликованы в 6-и публикациях в журналах, находящихся в перечне ВАК.

1. Мицын С.В., Ососков Г.А. «Экстарполяция сеточных моделей геофизических полей методом конечных разностей». – Геоинформатика, 2016, №3, с. 29-34
2. Мицын С.В. «О численной реализации спектрального метода решения обратной задачи гравиразведки». – Геоинформатика, 2018, №3, с. 89-97
3. Пиманова Н.Н., Спиридонов В.А., Шаров Н.В., Мицын С.В. «Трёхмерное плотностное моделирование земной коры юго-восточной части Фенноскандинавского щита в ГИС INTEGRО». – Геоинформатика, 2019, №1, с. 24-35
4. Мицын С.В. «Новые методы решения прямых задач на геопотенциальные поля на профилях». – Геоинформатика, 2020, №1, с. 27-37
5. Мицын, С. В., Большаков Е. М. Монтажный метод в ГИС INTEGRО и его использование для решения обратной гравитационной задачи. – Геоинформатика. 2021. № 3. С. 36–47.
6. Широкова Т.П., Спиридонов И.В., Мицын С.В. Монтажный метод в ГИС INTEGRО для решения обратной задачи магнитного поля. – Геоинформатика. 2022. № 3. С. 30-38.

Доклады на конференциях:

1. Мицын, С. В. Монтажный метод в ГИС INTEGRО для построения сложных моделей территории / С.В. Мицын, Е.М. Большаков // Вопросы теории и практики геологической интерпретации геофизических полей : Материалы 48-й сессии Международного научного семинара им. Д.Г. Успенского - В.Н. Страхова: Сборник научных трудов, Санкт-Петербург, 24–28 января 2022 года. – Санкт-Петербург: Всероссийский научно-исследовательский геологический институт им. А.П. Карпинского, 2022. – С. 186-189.

Структура и объём публикации

Диссертация состоит из введения, четырёх глав, заключения общим объёмом 110 страниц, содержит список литературы из 45 источников.

В первой главе представлены результаты разработки методики и программного обеспечения для решения обратных задач на сеточных моделях геопотенциальных полей на основе дискретных преобразований Фурье. Представлены основные достижения в этой области, преимущества разработанной методики.

Во второй главе представлены результаты разработки методики и программного обеспечения экстраполяции сеточных моделей геопотенциальных полей по латерали, необходимые для корректного применения методов инверсии полей, основанных на дискретных преобразованиях Фурье.

В третьей главе представлены результаты разработки методики и программного обеспечения подбора физических параметров сеточной модели среды на основе монтажного метода.

В четвёртой главе представлены результаты практического применения разработок на различных этапах построения модели территории Енисей-Хатангского регионального прогиба.

Глава 1. Методика и программное обеспечение для решения обратных задач на сеточных моделях

Современные методы геофизического трёхмерного моделирования территорий для поиска и локализации месторождений полезных ископаемых в случае региональных исследований сопряжены с недостатком буровых и сейсмических данных о территории, при этом данные о геопотенциальных полях – магнитном и гравитационном – с различной точностью имеются для всей территории Земли.

Породы, слагающие физическую среду под дневной поверхностью, могут иметь различную плотность и намагниченность – значения физического параметра. Компактные объёмы аномально большого или малого значения физического параметра в однородной среде продуцируют аномалии гравитационного (силы тяжести) и магнитного полей (геопотенциальных полей). Безаномальное поле называется нормальным полем и является фоновой составляющей фактического геопотенциального поля; аномальное поле – геопотенциальное поле без учёта фоновой составляющей (нормального гравитационного или магнитного поля).

Измерения геопотенциальных полей производится с помощью специальных приборов – гравитометров и магнитометров, – в современном варианте в виде аэросъёмки или космисъёмки. Далее производится первичная обработка данных, включающая фильтрацию помех, компенсацию системных ошибок измерений, гриддинг (приведение измерений к виду регулярной сети, или растру), а также приведение к уровню моря трансформацией Буге, то есть строится поле такое, каким оно было бы в плоскости на нулевом уровне. Результат обработки записывается в виде $u_i = u(x_i, y_i)$ для точки i с координатами x_i, y_i .

В прикладной геофизике важное место занимает задача пересчёта или трансформации геопотенциальных полей, заданных на сетке, в нижнее полупространство для получения *моделей эффективного параметра* с целью

дальнейшего их использования при построении *содержательных моделей*[28], описывающих объект исследования в физических или геологических терминах. На сегодняшний день разработано множество методов построения моделей эффективного параметра для различных моделей среды и аномального поля.

1.1 Модель

Исследования в данной работе сфокусированы на задачах, связывающих сеточные модели поля и среды. Поле задаётся значениями в точках сетки: $u_i = u(x_i, y_i)$, где точки сетки – вектора (x_i, y_i) , где $i = (q_i, l_i)$ – двумерный индекс точки сетки. Вектор (x_i, y_i) определим через аффинный оператор преобразования координат M : $(x_i, y_i) = M(q_i, l_i)^T$. К оператору M дополнительно выдвигается требование: прямые углы преобразовываются в прямые углы.

Физическая среда задаётся функцией $g(x, y, z)$, определённой в области V ($(x, y, z) \in V$), которая, в свою очередь, целиком находится в нижнем полупространстве $E_- \subset \mathbb{R}^3$ (при $z < 0$). Хотя ось z традиционно направлена вниз, в ГИС INTEGR0 она направлена вверх, поэтому в работе используется соотношение $z < 0$ для $(x, y, z) \in E_-$. В случае сеточных моделей объём V представляет собой прямоугольную призму, у которой две грани – горизонтальные (верхняя и нижняя). Эта область делится на элементы с центрами в точках сетки (x_j, y_j, z_j) , где $j = (q_j, l_j, m_j)$ – трёхмерный индекс точки в этой сетке. Эти точки задаются как вектора $(x_j, y_j, z_j) = M^{(z)}(q_j, l_j, m_j)^T$, где $M^{(z)}$ – аффинный оператор преобразования координат, преобразующий горизонтальную плоскость в горизонтальную плоскость.

При этом важным свойством операторов аффинных преобразований M и $M^{(z)}$ является соответствие сеток поля и среды: из $q_i = q_j$ вытекает $x_i = x_j$ и из $l_i = l_j$ вытекает $y_i = y_j$. Также важным является соответствие размеров

сеток n_q , n_l и n_m : $\mathbf{i} \in (0 \dots n_q - 1) \times (0 \dots n_l - 1)$ для двумерных сеток и $\mathbf{j} \in (0 \dots n_q - 1) \times (0 \dots n_l - 1) \times (0 \dots n_m - 1)$ для трёхмерных сеток.

В ГИС INTEGR0 в качестве элемента обычно берётся прямоугольная призма. Значения среды в элементах задаются как значения в сетке $g_i = g(x_i, y_i, z_i)$. Можно говорить, что сеточная модель g аппроксимирует некоторую непрерывную модель g .

Геопотенциальное поле в точке (x_i, y_i) связано с распределением физического параметра g следующим выражением:

$$u(x_i, y_i) = Ag = \iiint_V g(x, y, z)k(x - x_i, y - y_i, z - z_i)dxdydz. \quad (1.1)$$

A – оператор прямой задачи, преобразующий распределение физического параметра g в аномальное геопотенциальное поле u . При этом считаем, что u определено с точностью до постоянного члена, что связано с тем, что u выражает аномалии в геопотенциальном поле (если $u = C$, то поле не имеет аномалий, и, соответственно, аномалообразующих объектов в g). В этой формуле $k(x, y, z)$ – поле точечного объекта с единичным значением физического параметра. Например, для поля силы тяжести (гравитационного поля, или первой вертикальной производной гравитационного потенциала) $k(x, y, z) = \gamma z(x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2}$, γ – гравитационная постоянная. Так как сеточной модели заполняющие объём элементы – одинаковые прямоугольные призмы, то в (1.1) интеграл заменяется на сумму:

$$u(x_i, y_i) = \sum_j g(x_j, y_j, z_j)\dot{k}(x_j - x_i, y_j - y_i, z_j), \quad (1.2)$$

где индекс j пробегает по множеству индексов точек сетки среды, а $\dot{k}$ – поле от элемента среды:

$$\dot{k}(x_j, y_j, z_j) = \iiint_v k(x, y, z + z_j)dxdydz, \quad (1.3)$$

где v – область, занимаемая элементарной прямоугольной призмой, помещённой в начало координат, то есть область значений для выражения $\mathbf{M}^{(z)}(r; s; t)^T - \mathbf{M}^{(z)}(0; 0; 0)^T$, где переменные r, s, t принимают значения $r \in (-1/2; 1/2)$, $s \in (-1/2; 1/2)$, $t \in (-1/2; 1/2)$. Так как мы ограничиваемся моделями, целиком лежащими в нижнем полупространстве, максимальное значение z_j должно быть как минимум ниже начала координат на полшага сетки по вертикали.

1.2 Метод Приезжева

Среди методов, осуществляющих инверсию выражения (1.1), выделяется известный метод Приезжева[19], обладающий двумя важными свойствами:

- 1) строится не просто эффективный параметр, а эффективный физический параметр, имеющий смысл формально-эквивалентного по аномальному полю распределения физического параметра;
- 2) большая скорость вычислений, позволяющая строить большие сеточные модели за короткий срок.

Недостатками метода Приезжева являются недостаточные возможности по учёту априорных данных (кроме поля) и ориентированность на непрерывно заданные поля, а не на сеточные модели. Первый недостаток вызывает проблемы, связанные с тем, что создаваемая инверсия на практике часто противоречит априорным данным, а второй недостаток вызывает проблему, связанную с тем, что такая инверсия не является распределением эффективного параметра, эквивалентным исходному полю, и на практике может быть достаточно далеко от него. Оба этих недостатка разрешаются в данной работе.

Теоретические основы заключаются в инверсии способа решения прямой задачи для непрерывных моделей поля и распределения физического параметра в нижнем полупространстве. Так, геопотенциальное поле определено как значение функции $u(x, y)$ на плоскости $(x, y, 0)$, $(x, y) \in \mathbb{R}^2$, а

значения физического параметра задаются в нижнем полупространстве $g(x, y, z)$. Значения поля определяются следующим выражением, схожим с выражением (1.1):

$$u(x, y) = Ag = \iiint_V g(x, y, z)k(x - x_i, y - y_i, z - z_i)dx dy dz. \quad (1.4)$$

Метод Приезжева опирается на спектральное разложение Фурье правой части (1.4), в результате которой тройной интеграл сводится к одинарному. Далее представлено упрощённое автором изложение метода[29]. Определим непрерывные преобразования Фурье $\mathcal{F} = \mathcal{F}_{x,y \rightarrow \nu_x, \nu_y}$ вдоль осей x и y для действительных функций, с обычной (не угловой) частотой (волновыми числами) ν_x, ν_y , следующим образом:

$$[\mathcal{F}f](\nu_x, \nu_y) = \iint_{\mathbb{R}^2} f(x, y) e^{-i2\pi(x\nu_x + y\nu_y)} dx dy.$$

Обозначим $\mathcal{F}u = U$, $\mathcal{F}g = G$, $\mathcal{F}k = K$. Тогда, согласно теореме о свёртке (по осям x и y) справедливо соотношение:

$$U(\nu_x, \nu_y) = \int_{-\infty}^0 G(\nu_x, \nu_y, z) K(\nu_x, \nu_y, z) dz. \quad (1.5)$$

Так как в (1.5) значения функций, соответствующие одним волновым числам, не зависят от значений, соответствующих другим волновым числам, зафиксируем значения ν_x, ν_y . Тогда (1.5) приобретает вид:

$$U = \int_{-\infty}^0 G(z) K(z) dz. \quad (1.6)$$

Определим скалярное произведение комплексных функций f и h вдоль оси z : $f \cdot h = \int_{-\infty}^0 f h^* dz$, где h^* – комплексное сопряжённая к h функция. Докажем простое соотношение: если для скаляра u и функций-векторов $\mathbf{f}$, $\mathbf{h}$ и $\boldsymbol{\psi}$ выполняются условия $u = \mathbf{f} \cdot \mathbf{h} \neq 0$ (по существу, это значит, что поле – не

нулевое, иначе решение было бы тривиально) и $\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h} \neq 0$, то верно соотношение:

$$u = (u(\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h})^{-1} \boldsymbol{\psi}) \cdot \mathbf{h}.$$

Фактически, взяв неортогональный вектор $\boldsymbol{\psi}$, можно, домножив его на скаляр $u(\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h})^{-1}$, получить вектор, для которого скалярное произведение с $\mathbf{h}$ равно заранее заданной величине u . Действительно, если вынести множитель $u(\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h})^{-1}$ за скалярное произведение, то верно $u = (u(\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h})^{-1} \boldsymbol{\psi}) \cdot \mathbf{h} = u(\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h})^{-1}(\boldsymbol{\psi} \cdot \mathbf{h}) = u$.

Выражение (1.6) как раз является скалярным произведением G^* и K . Тогда, взяв функцию $\Psi(v_x, v_y, z)$, не ортогональную по скалярному произведению к $K(v_x, v_y, z)$ ни по одной паре волновых чисел v_x, v_y , можно получить инверсию $G_\Psi(v_x, v_y, z)$ для (1.4) по следующему выражению:

$$\mathcal{F}[A_\Psi^{-1}u] = G_\Psi(z) = U \left(\int_{-\infty}^0 \Psi(z') K(z') dz' \right)^{-1} \Psi(z). \quad (1.7)$$

На практике требование к Ψ формулируется более строго: $\Psi^* \cdot K$ должно быть далеко от нуля для всех пар волновых чисел, а нарушение этого требования ведёт к неустойчивости решения. Множество инверсий $\{G_\Psi\}$ является формально-эквивалентными решениями: композиция оператора прямой и обратной задачи – тождественный оператор: $AA_\Psi^{-1} = I$. В работах Приезжева[19; 20] предложен класс функций для построения оператора обратной задачи в аналитическом виде: $\left(\int_{-\infty}^0 \Psi_n(z') K(z') dz' \right)^{-1} \Psi_n(z) = \Phi_n(\omega, z) = \frac{n^{n+1}}{n!} z^n \omega^n e^{-n\omega z}$, где $\omega = 2\pi\sqrt{v_x^2 + v_y^2}$ – угловая частота, а параметр n – «крутизна фильтра». В работах Приезжева доказывается, что Φ_n является корректной подстановкой в (1.7).

1.3 Метод Приезжева на сеточных моделях

При формулировке метода Приезжева важную роль играет то, что соотношения (1.1) и (1.4) можно рассмотреть как одинарный интеграл вдоль оси z для функции, являющейся свёрткой k и g . В случае сеточных моделей есть два определения свёрток: периодическая и аperiodическая (1.2). Однако на аperiodическую свёртку не распространяется теорема о свёртке, являющаяся ключевой для метода Приезжева, поэтому требуется переопределить зависимость между распределением физического параметра и аномальным полем через периодическую дискретную свёртку.

Мы ранее определили сеточные модели, которые хоть и являются прямоугольными, но не лежат вдоль осей текущей проекции. Определение периодической свёртки и дискретных преобразований для таких моделей нетривиально и потребует дополнительных построений.

Также периодичность свёртки накладывает важные требования на вид ядра свёртки $\hat{k}$, отличающееся и от k , и от $\dot{k}$. Ядро свёртки, в отличие от сеточных моделей поля и физической среды, определено в другой системе координат, где координаты нулевого индекса $\mathbf{i} = (0,0)$ находятся в начале координат. Кроме того, ядро также является периодическим – в том смысле, то для свёртки $\langle \dot{f} | \hat{k} \rangle$ сеток $\dot{f}$ и $\hat{k}$ её значения в ненулевых индексах рассчитываются исходя из вращения сетки ядра $\hat{k}$. На практике, вид $\hat{k}$ выбирается так, чтобы локально быть максимально похожим на $\dot{k}$ вокруг нуля с учётом возможных вращений сетки. Это разрешается таким образом, что, говоря упрощённо, только в одной четверти точек $\hat{k} = \dot{k}$, а в остальных трёх четвертях $\hat{k}$ является отражением первой четверти $\dot{k}$. Для отражения этого факта введём функцию $\Gamma(i, n)$, осуществляющую такое отражение индекса i вдоль некоторой оси сетки размером n : $\Gamma(i, n) = \left(i + \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor\right) \bmod n - \left\lfloor \frac{n}{2} \right\rfloor$. Так, для индексов i , находящихся на одной половине двумерной сетки, имеем $\Gamma(i, n) \geq 0$, а для индексов на противоположной половине – $\Gamma(i, n) <$

0. Поскольку дискретная свёртка – двумерная, сетка делится на 4 примерно равные части (см. рис. 3.1).

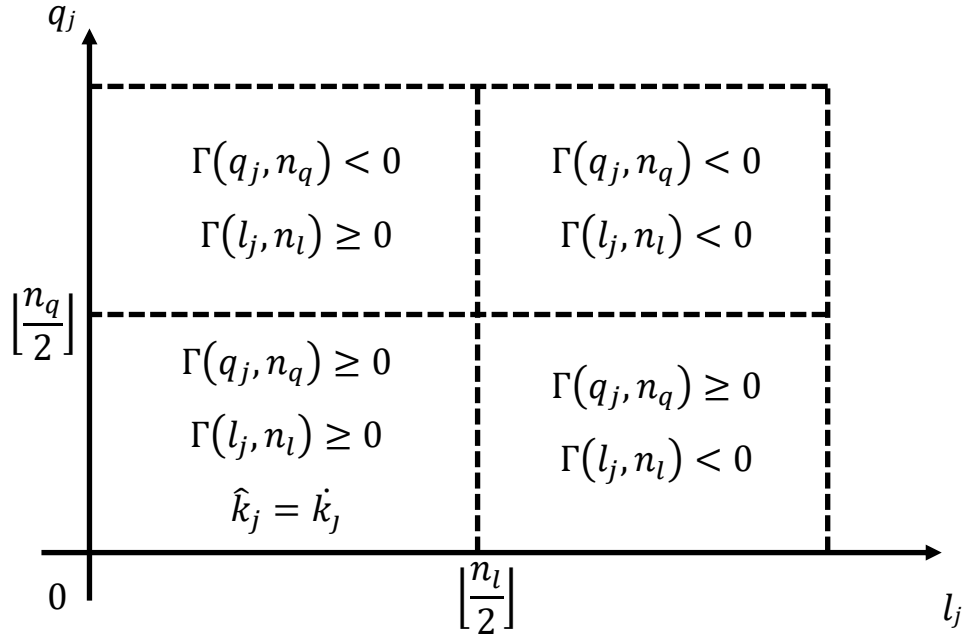


Рис 1.1. Схема расположения знаков индексов в сетке для расчёта функции ядер свёртки для $\hat{k}$.

Ядро свёртки с учётом периодичности дискретных преобразований Фурье определяется следующим образом:

$$\hat{k}_j \triangleq k \left(\mathbf{M}^{(z)}(\Gamma(q_j, n_q), \Gamma(l_j, n_l), m_j)^T \right), \quad (1.8)$$

где n_q , n_l и n_m – размеры сетки. Главное отличие $\hat{k}$ от k заключается в том, что $\hat{k}$ имеет периодический вид.

Определим дискретное преобразование Фурье (ДПФ) для некоторой заданной на двумерной сетке функции $\dot{f}$. ДПФ для функции $\dot{f}$, определённой в точках сетки x_j, y_j , является функция $\dot{F} = \mathcal{F}\dot{f}$, областью определения которой являются точки сетки, соответствующие волновым числам, – $\{(v_{x,s}, v_{y,s})\}$ (здесь индексы x и y обозначают, к какой спектральной оси относится координата (волновое число) точки, а s – индексы точек в этой спектральной сетке). Пусть $\dot{F}_s = \dot{F}(v_{x,s}, v_{y,s})$.

Заметим, что дискретное преобразование Фурье является периодическим в том смысле, что значение разложения в точках $(v_{x,s}, v_{y,s})$ и $(v_{x,s} + j\Delta v_x, v_{y,s} + l\Delta v_y)$ равны для некоторых Δv_x и Δv_y и целых j и l , что позволяет определить классы эквивалентных волновых чисел $\{(v_{x,s} + j\Delta v_x, v_{y,s} + l\Delta v_y), i \in \mathbb{Z}, j \in \mathbb{Z}\}$. Обычно подразумевается, что функция $\dot{F}$ определена на таких волновых числах, которые имеют наименьший модуль: $(v_{x,s}, v_{y,s}) \in Dom(\dot{F})$ только тогда, когда $v_{x,s} = \operatorname{argmin}_{v_{x,s}} |v_{x,s} + j\Delta v_x|$ и $v_{y,s} = \operatorname{argmin}_{v_{y,s}} |v_{y,s} + l\Delta v_y|$.

Дискретное разложение Фурье производится вдоль осей x и y простираения исходной сетки. Для того, чтобы отразить этот факт, введём дополнительные координаты, обозначающие длину пути от точки с индексами $(q_i, 0)$ или $(0, l_i)$ до точки с индексом 0 вдоль соответствующей оси: $x'_j = \|\mathbf{M}(q_j, 0)^T - \mathbf{M}(0, 0)^T\|$, $y'_j = \|\mathbf{M}(0, l_j)^T - \mathbf{M}(0, 0)^T\|$. Тогда соответствующие (1.3) дискретные преобразование Фурье функции $\dot{f}$ имеют вид:

$$[\mathcal{F}\dot{f}](v_{x,s}, v_{y,s}) = \sum_j \dot{f}(x_j, y_j) e^{-i2\pi(x'_j v_{x,s} + y'_j v_{y,s})}. \quad (1.9)$$

При этом $v_{x,s} = \Gamma(t, n_x)/n_x(1/x'_{(1,0)})$, $t = 0..n_x - 1$, и $v_{y,s} = \Gamma(t, n_y)/n_y(1/y'_{(0,1)})$, $t = 0..n_y - 1$. На практике, дискретные преобразования Фурье вычисляются с помощью библиотек, которые инвариантны как к аффинным преобразованиям координат, так и к шагу по волновым числам Δv или шагу по осям. Однако координаты x'_j и y'_j используются при вычислении значений $\dot{\Psi}$ или $\dot{\psi}$.

Итого, соотношения между сеточными моделями поля $\hat{u}$ и физической среды g_j выражается следующим образом:

$$\hat{u} = \sum_j g_j \hat{k}_j, \quad (1.10)$$

Использование периодической свёртки ведёт к появлению краевых эффектов в рассчитанном поле $\hat{u}$ по распределению физического параметра $\dot{g}$, причём краевые эффекты следуют не столько из того, что за границами сетки данных о распределении физического параметра, сколько из того факта, что распределение физического параметра около одной границы сетки значительно влияет на расчётное поле с другой стороны. Однако, как уже было указано выше, периодическая свёртка позволяет использовать быстрые дискретные преобразования Фурье для обеспечения практически интерактивных расчётов прямой задачи (1.10).

В контексте задачи построения инверсии мы полагаем, что исходным данным должно соответствовать распределение плотностей по формуле (1.10), то есть исходные данные представляют собой функцию $\hat{u}$, а не $\dot{u}$, но тогда точно также, как и в прямой задаче, возникают проблемы, связанные с краевыми эффектами. Для этого предлагается строить экстраполяцию поля, и разработанная методика экстраполяции описана в главе 2.

Снова, как и в случае с непрерывными функциями, зафиксируем волновые числа $\nu_{x,s}, \nu_{y,s}$. Можно доказать верность выражения, аналогичного (1.7) для сеточных моделей:

$$\dot{G}_\Psi(z_j) = \hat{U} \left(\sum_{z_k} \Psi(z_k) \hat{K}(z_k) \right)^{-1} \dot{\Psi}(z). \quad (1.11)$$

В формуле (1.11) $\hat{U} = \mathcal{F}\hat{u}$, $\dot{\Psi} = \mathcal{F}\dot{\psi}$, $\hat{K} = \mathcal{F}\hat{k}$, а скалярное произведение определяется стандартным образом для комплексных векторов. В работах Приезжева[19; 20] предлагается использовать инверсию в следующем виде:

$$\dot{G}_n(z_j) \triangleq \hat{U} \Phi_n(\omega, z), \quad (1.12)$$

где $\omega = 2\pi\sqrt{\nu_{x,s}^2 + \nu_{y,s}^2}$ – угловая частота, и $\Phi_n(\omega, z) = \frac{n^{n+1}}{n!} z^n \omega^n e^{-n\omega z}$.

Адаптации (1.11) и (1.12) метода построения инверсии (1.7) к сеточным моделям имеют ряд особенностей. В работе Приезжева[20] изложены требования к разрешающей способности сеточных моделей для различения

спектров отдельных точечных источников. Особенность периодичности сигнала ДПФ, вытекающая из неё проблема краевых эффектов и предлагаемая методика для её решения, как уже указывалось выше, изложены во второй главе. Кроме того, выражение (1.12), соответствующее оригинальной программной реализации метода инверсии, имеет важный недостаток при сравнении с предлагаемой автором методикой, построенной по выражению (1.11): в отличие от непрерывных моделей, для сеточных моделей равенство $\Phi_n(\omega, z) = (\sum_{z_k} \Psi(z_k) \hat{K}(z_k))^{-1} \Psi(z)$ в общем случае не выполняется. Это не даёт права утверждать, что $A\dot{g}_n = \hat{u}$, то есть, строго говоря, $\dot{g}_n$ не обязательно входит в класс эквивалентных по полю $\hat{u}$ распределений физического параметра (и на практике поле от $\dot{g}_n$ не равно $\hat{u}$). Это проистекает из следующих предпосылок:

1. Замена знака интеграла в (1.7) на сумму в (1.11). Очевидно, что сумма является лишь аппроксимацией интеграла. Кроме того, обычно сеточная модель среды строится около поверхности, и не заходит на большую глубину, однако функция $\Phi_n(\omega, z)$ на практике имеет большой саппорт по глубине, и значения физического параметра должны быть распределены и на большой глубине, где трёхмерная сетка не определена.
2. Также функция $\Phi_n(\omega, z)$ выведена из условия, что поля от элемента сеточной модели $\hat{k}$ является полем от точечной массы или магнитного диполя, в то время как она определяется согласно (1.8).

Поэтому предлагаемой методике, и в её программной реализации в ГИС INTEGR0, используется аналитический вид только лишь для Ψ , и инверсия рассчитывается по выражению (1.11). По сравнению с методом Приезжева теряется физический смысл в виде разделения точечных источников, но зато выполняется тождество $AA_{\Phi}^{-1}\hat{u} = \hat{u}$, которое и является условием эквивалентности $A_{\Phi}^{-1}\hat{u}$ по полю $\hat{u}$.

1.4 Учёт априорных данных параметризацией

Формула (1.12) позволяет использовать целый спектр разнообразных функций для Ψ . В одной из работ Приезжева[19] среди прочего предлагается использовать плотностную модель, построенную на основе сейсмических априорных данных. В ходе практического применения промежуточных вариантов программного обеспечения, реализующего разработанную методику, был получен эмпирический способ генерации Ψ следующим способом: используя некоторую цилиндрическую функцию $f(r, z)$, где r – длина радиуса, проложенного от начала координат, задаётся функция $\psi_{\alpha, \beta}(r, z) = |z|^{-\beta} f(r, \alpha z)$, где α – множитель по глубине, β – экспонента при z , а r рассчитывается с учётом периодичности рассчитываемой $\psi(x, y, z)$. В качестве f была выбрана $f(r, z) = (1 - (rz^{-1})^2)e^{(rz^{-1})^2}$. Меняя параметры α и β , можно переносить «основную» массу ненулевых значений физического параметра (избыточная плотность, эффективная намагниченность) по оси z . Эмпирически выявлено, что во многих ситуациях удаётся подобрать α и β так, что результат инверсии не противоречит имеющимся априорным данным[30].

Ограничением разработанной методики является невозможность иметь различные распределения в разных областях сетки (например, различные параметры α и β в различных областях сетки).

1.5 Регуляризация

В некоторых случаях методика может продуцировать неустойчивые решения, сильно изменяющиеся при слабых изменениях входных данных. Например, иногда может потребоваться ограничить саппорт $\dot{g}$, подразумевая при этом, что основные аномалообразующие объекты (или неоднородности) расположены на большой глубине, при этом аномальное поле содержит малые по простиранию аномалии, которые не могут быть объяснены никаким адекватным распределением физического параметра. В других случаях

проблемы могут возникнуть, если в поле содержится высокочастотный шум, хотя в этих случаях лучше произвести предварительную фильтрацию аномального поля[9]. Так или иначе, на практике в таких случаях результатом инверсии часто является сильно зашумлённое эквивалентное распределение физического параметра. Для работы с такими случаями была разработана процедура регуляризации данной методики.

Разработанная регуляризация опирается на определение обусловленности оператора обратной задачи A_{ψ}^{-1} . Обусловленность оператора выражает влияние ошибки измерения данных на построенную инверсию. Обусловленность линейного оператора выражается в виде числа обусловленности:

$$\mu(A_{\psi}^{-1}) = \|A\| \|A_{\psi}^{-1}\|, \quad (1.13)$$

где норма оператора X определена как спектральная норма:

$$\|X\| = \max \frac{\|X\dot{x}\|}{\|\dot{x}\|}, \quad (1.14)$$

где вектор $\dot{x}$ принадлежит области определения оператора X , а норму вектора берём $\|\dot{x}\| = \|\dot{x}\|_2$. Чем меньше число обусловленности, тем «стабильнее» оператор обратной задачи. И наоборот, чем больше число обусловленности, тем больше шума продуцирует оператор инверсии.

Зафиксируем параметризацию $\dot{\Psi} = \dot{\Psi}_{\alpha,\beta}$. Для удобства обозначим $\dot{\mathcal{U}}$ – множество возможных сеточных моделей поля, и $\mathfrak{G}_{\psi} = \{A_{\psi}^{-1}[\dot{u}] | \forall \dot{u} \in \dot{\mathcal{U}}\}$ – множество инверсий сеточных моделей полей из $\dot{\mathcal{U}}$, получаемых из конкретной параметризации $\dot{\Psi}$. Исследуемые операторы – оператор обратной задачи $A_{\psi}^{-1}[\dot{u}] = \mathcal{F}^{-1}[(\mathcal{F}[\dot{u}]\dot{\Phi}_{\psi})]$, $\dot{u} \in \dot{\mathcal{U}}$, и оператор прямой задачи $A[\dot{g}] = \mathcal{F}^{-1}[\mathcal{F}[\dot{g}] \cdot \hat{K}^*]$, $\dot{g} \in \mathfrak{G}_{\psi}$. Число обусловленности (1.13) обычно находят через нормы операторов (1.14), которые, в свою очередь, обычно выражают через сингулярные числа соответствующих матриц, но в этой работе они выведены через исследование каждого оператора по отдельности.

Дополнительно для удобства определим операторы в спектральной области: оператор расчёта прямой задачи $\mathfrak{K}(\dot{G}) = \dot{G} \cdot \dot{K}^*$ и оператор инверсии $\mathfrak{Z}(\dot{U}) = \dot{U} \dot{\Phi}_{\psi}$. Так как операторы преобразования Фурье унитарные, они не влияют на операторную норму, и число обусловленности можно переписать, опуская преобразования Фурье, следующим образом: $\mu(A) = \|\mathfrak{K}\| \|\mathfrak{Z}\|$. Таким образом, мы свели задачу определения числа обусловленности через нормы операторов $\mathfrak{K}$ и $\mathfrak{Z}$, которые найти значительно проще.

Зафиксируем v_x, v_y и заметим, что для оператора $\mathfrak{Z}$ элементы $(\mathfrak{Z}(\dot{U}))(v_x, v_y)$ не зависят от элементов $\dot{U}(v_{x'}, v_{y'})$ при $v_x \neq v_{x'}$ или $v_y \neq v_{y'}$. Это значит, что единичный базис для $\mathfrak{Z}$ отображается в ортогональные вектора. Обозначим вектор такого базиса как $\delta_{v_{x,s}, v_{y,s}}(v_x, v_y) = \left[\frac{1}{n_x n_y} \mathcal{F}(e^{i2\pi(x_k v_{x,s} + y_j v_{y,s})}) \right](v_x, v_y)$ – вектор с одним ненулевым элементом в точке $(v_{x,s}, v_{y,s})$ и значением 1. Так как любой вектор $\dot{U}$ раскладывается по базису $\{(\delta_{v_{x,s}, v_{y,s}})\}$, то любой вектор $\mathfrak{Z}(\dot{U})$ раскладывается по базису $\{\mathfrak{Z}(\delta_{v_{x,0}, v_{y,0}})\}$: $\mathfrak{Z}(\dot{U}) = \sum_{v_{x,s}, v_{y,s}} \lambda_{v_{x,s}, v_{y,s}} \mathfrak{Z}(\delta_{v_{x,0}, v_{y,0}})$, где $\lambda_{v_{x,s}, v_{y,s}}$ – коэффициенты разложения $\dot{U}$.

По правилу треугольника норма образа $\dot{U}$: $\|\mathfrak{Z}\dot{U}\| \leq \sum_{v_{x,s}, v_{y,s}} \lambda_{v_{x,s}, v_{y,s}} \|\mathfrak{Z}(\delta_{v_{x,0}, v_{y,0}})\|$, и, следовательно, для оценки $\|\mathfrak{Z}\|$ достаточно рассмотреть только вектора из базиса $\{(\delta_{v_{x,s}, v_{y,s}})\}$: $\|\mathfrak{Z}\| = \max_{v_x, v_y} \frac{\|\mathfrak{Z}\delta_{v_x, v_y}\|}{\|\delta_{v_x, v_y}\|} = \max_{v_x, v_y} \|\mathfrak{Z}\delta_{v_x, v_y}\|$.

Оператор $\mathfrak{K}$ реализует отображение из пространства большей размерности в меньшее, но так как мы рассматриваем свойства оператора A_{ψ}^{-1} , то, ограничив область определения $\mathfrak{K}$, мы можем оценить его норму так же просто, как и $\mathfrak{Z}$. Пусть $Dom(\mathfrak{K}) = \{\dot{G}: [\mathcal{F}^{-1}\dot{G}] \in \mathfrak{G}_{\psi}\}$. Тогда точно также, как и с оператором $\mathfrak{Z}$, благодаря независимости элементов с различными

v_x, v_y норму $\mathfrak{K}$ можно выразить следующем образом: $\|\mathfrak{K}\| = \max_{v_x, v_y} \frac{\|\mathfrak{K} \mathfrak{Z} \delta_{v_x, v_y}\|}{\|\mathfrak{Z} \delta_{v_x, v_y}\|}$. Учитывая, что $\forall \dot{X}: \mathfrak{K} \mathfrak{Z} \dot{X} = \dot{X}$, то выражение для $\|\mathfrak{K}\|$ упрощается до $\|\mathfrak{K}\| = \frac{1}{\min_{v_x, v_y} \|\mathfrak{Z} \delta_{v_x, v_y}\|}$.

$$\text{Итого, } \mu(A) = \frac{\max_{v_x, v_y} \|\mathfrak{Z} \delta_{v_x, v_y}\|}{\min_{v_x, v_y} \|\mathfrak{Z} \delta_{v_x, v_y}\|}.$$

С точки зрения вычислений, для нахождения числа обусловленности требуется многократное суммирование квадратов соответствующих элементов вектора $\dot{\Phi}_{\psi}$ и взятие максимума и минимума, вычислительная сложность – $O(n_x n_y n_z)$.

На основании анализа обусловленности можно предложить метод регуляризации, основанный на ограничении числа обусловленности через грубую модификацию оператора обратной задачи. Введём коэффициент регуляризации $\alpha_{reg} \ll 1$, и примем ограничитель $\lambda = \alpha_{reg}^{-1} \|\mathfrak{K}\|$. Тогда ядро свёртки регуляризованного оператора:

$$\dot{\Psi}^{(\lambda)}(v_x, v_y, z) = \begin{cases} \dot{\Psi}(v_x, v_y, z) & | \dot{\Psi}(v_x, v_y, z) \leq \lambda, \\ \lambda e^{i \arg(\dot{\Psi}(v_x, v_y, z))} & | \dot{\Psi}(v_x, v_y, z) > \lambda. \end{cases}$$

Тогда число обусловленности для пары операторов $\mathfrak{K} \mathfrak{Z}$ равно α_{reg}^{-1} .

Эта регуляризация основана на грубом отсечении величин, на которые далее масштабируются значения ДПФ поля $\dot{u}$. Можно предложить более мягкий вариант, преобразующий $\dot{\Psi}$ с помощью функции $f(x)$, имеющей асимптоту $f(x) = x$ при $x \rightarrow 0$ и $f(x) = \lambda$ при $x \rightarrow +\infty$, например, $f(x) = e^{i \arg(x)} \frac{2}{\pi} \lambda \arctan(\frac{\pi}{2\lambda} |x|)$. Стоит заметить, что при вычислениях необходимо учесть некорректность комплексного вращения при малых $|x|$.

Такому виду регуляризации можно дать следующую интерпретацию. При решении прямой задачи функция, являющаяся Фурье-образом ядра свёртки, убывает по экспоненте с увеличением глубины и значения волновых чисел. Соответственно, оператор инверсии увеличивает амплитуды для таких

волновых чисел и перераспределяет их по глубине. Если амплитуды волновых чисел для больших волновых чисел увеличиваются слишком сильно, результирующее распределение физического параметра оказывается неадекватным – например, оно может иметь вид шахматной доски, или обычно мелкой ряби. По сути, этот факт соответствует другому признаку некорректности обратной задачи – малые изменения амплитуда больших волновых чисел приводят к большим изменениям в результате инверсии. Регуляризация ограничивает усиление амплитуд для больших волновых чисел, удаляя рябь из результата инверсии и подавляя некорректность задачи.

С одной стороны, регуляризованный оператор инверсии более не является «точным» оператором, то есть построенная инверсия не представляет собой эквивалентное исходному аномальному полю распределение физического параметра. С другой стороны, механизм регуляризации позволяет строить инверсии для случаев, когда для данного поля принципиально невозможно построить инверсию – например, из-за шума и ошибок измерений.

Поясним идею из предыдущего абзаца на примере. Для этого создадим простую сеточную плотностную модель g_{init} – кубическую призму с эффективной плотностью 1 (г/см^3), окружённую средой с эффективной плотностью 0 (рис. 1.1). Соответственно, под решением обратной задачи будем понимать обращение поля от этой призмы, полученного в ходе прямого моделирования. Решение обратной задачи в первую очередь зависит от выбранной параметризации ψ , которую мы будем приводить на рисунке 1.2 в левом столбце, а эквивалентную плотностную модель – в правом.

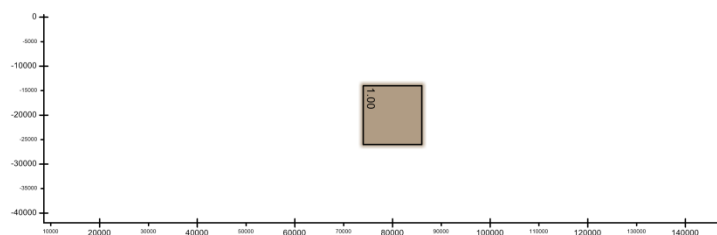


Рис. 1.2. Исходная плотностная модель.

Для модели g_{init} была рассчитана прямая задача, и для полученного поля были рассчитаны варианты инверсии с тремя различными вариантами параметризации ψ , представленные на рисунке 1.3. Все три варианта эквивалентны основной идее в решении обратной задачи по Новоселицкому – в смысле распределения аномалообразующих масс в пределах между двумя глубинами h_1 и h_2 , определяемыми верхней и нижней границей кубической призмы в исходной модели g_{init} .

Первый вариант предполагает $\psi = g_{init}$, и это эквивалентно распределению масс на тех же глубинах, на которых находится кубическая призма в исходной модели g_{init} – между двумя глубинами h_1 и h_2 , определяемыми верхней и нижней границей этой кубической призмы. Как хорошо видно, при использовании достаточно слабого коэффициента регуляризации $\alpha_{reg} = 10^{-7}$ плотности достаточно хорошо распределены примерно в той же области, в которой находится исходный куб (см. рис. 1.2).

Второй и третий вариант соответствуют эквивалентному перераспределению на глубины выше и ниже исходных, используя коэффициент регуляризации $\alpha_{reg} = 10^{-3}$. В случае пересчёта наверх исходная призма «размывается» по объёму в слое, что вполне ожидаемо. При пересчёте вниз возникает волновая картина. Это объясняется тем, что для аномального поля от призмы, расположенной на какой-то конкретной глубине, невозможно подобрать эквивалентную призму на большей глубине. Однако, при использовании регуляризации всё же удалось подобрать некоторое распределение плотностей, поле от которого является достаточно близким к полю от исходной призмы.

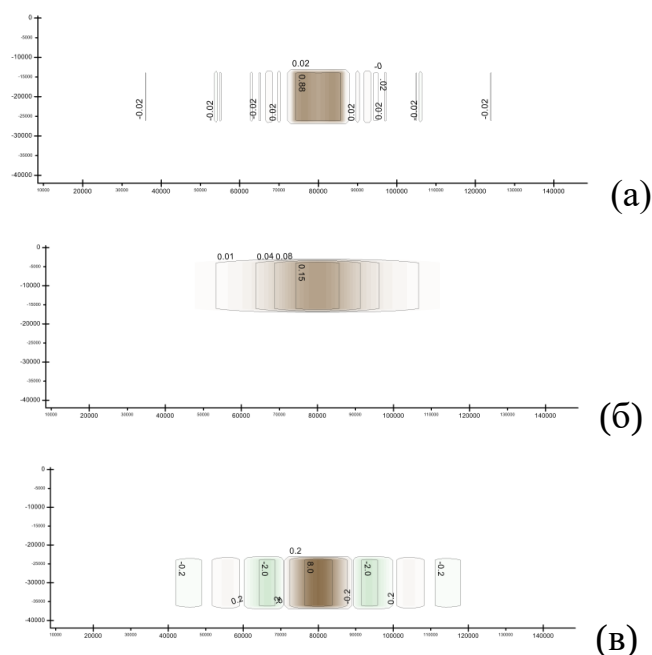


Рис. 1.3 Инверсия поля от плотностной модели g_{init} различными параметризациями с регуляризацией: а) $\psi = g_{init}$, $\alpha_{reg} = 10^{-7}$; б-в) ψ – призма той же геометрии, расположенная выше (б) и ниже (в) исходной, $\alpha_{reg} = 10^{-3}$.

Таким образом, можно утверждать, что регуляризация является важным фактором решения обратных задач в виде инверсии аномальных геопотенциальных полей.

В итоге, можно заключить, что доказано **первое защищаемое положение**: разработаны методика и программное обеспечение построения сеточных моделей эквивалентного распределения физического параметра на основе дискретного преобразования Фурье обеспечивает корректное распространение метода Приезжева на поля, заданные в виде дискретных сеток. Методика допускает параметризацию, позволяющую получать модели физической среды, согласующиеся с априорными данными, и отвечающие исходному полю.

Глава 2. Разработка методики экстраполяции для расчёта инверсии

Методы пересчёта геопотенциальных полей, заданных на сетке, в эквивалентные распределения физического параметра, обсуждаемые в главе 1, основаны на дискретных преобразованиях Фурье (ДПФ), важным свойством которых является периодичность преобразовываемого сигнала. Если же сигнал не периодичен, то такая ситуация эквивалентна периодическому сигналу с разрывом, и обработка сеточных данных такого сигнала вызывает значительные краевые эффекты. Также такой вид обработки требует наличия заполненной прямоугольной сетки (без пропусков данных). С целью решения этих проблем была разработана методика экстраполяции сеточных данных геопотенциальных полей, подавляющая краевые эффекты за счёт периодичности результирующего (экстраполированного) сигнала, непрерывности первых производных и, как следствие, отсутствия ложных экстремумов на границе между областью, содержащей исходные данные, и областью экстраполяции.

Если сетка заполнена, то обычно используется один из двух способов экстраполяции: отражение сетки и периодическая линейная интерполяция. Обе такие экстраполяции порождают периодическую сетку, однако всё ещё имеется разрыв в первой производной. В конце этой главы будет произведено сравнение разработанной методики с этими вариантами экстраполяции.

2.1 Формализация задачи

Обозначим исходную сеточную модель геопотенциального поля как функцию $u = u(x_j, y_i)$. Обозначим B подмножество прямоугольной сетки, на котором известны значения функции $u(x_j, y_i) = \alpha_{j,i}$, и которая дополняется до другой, большей сетки $\Omega = \{x_j = j\Delta x\} \times \{y_i = i\Delta y\}$, $i \in \{0, 1, \dots, n_y - 1\}$, $j \in \{0, 1, \dots, n_x - 1\}$, причём $B \subset \Omega$. Задача экстраполяции модели

геопотенциального поля заключается в построении функции $\hat{u}$, определённой везде на Ω , причём для $\forall (x_j, y_i) \in B: \hat{u}(x_j, y_i) = \alpha_{j,i}$.

По практике применения инверсии по описанной в главе 1 методике было выделено три требования к данным, при удовлетворении которых корректно применение этой или подобной методики:

1. Отсутствие разрыва $\hat{u}$ на границе ∂B области B и в области экстраполяции $\bar{B} = \Omega \setminus B$ в целом. Разрыв функции $\hat{u}$ продуцирует большие ложные аномалии в объёме физической среды, находящейся под разрывом.
2. Отсутствие разрыва первых частных производных $\hat{u}$ на границе ∂B области B и в области экстраполяции $\bar{B}$, поскольку ДПФ функции $\hat{u}$, содержащей разрывы первых частных производных, содержит высокочастотный шум, который отражается в инверсии в виде ложных аномалий, находящихся близко к поверхности.
3. Периодичность $\hat{u}$, требуется исходя из требованию к периодичности сигнала, для которого строится ДПФ. Периодичность сигнала вытекает из первого требования: ввиду периодичности ДПФ сетку можно интерпретировать так, как если бы её противоположные стороны были связаны (как тор). Однако тогда отсутствие периодичности $\hat{u}$ означало бы, что функция $\hat{u}$ у её границ претерпевает разрыв.

Понятие производной функции $\hat{u}$ на границе ∂B для сеточной модели требует уточнения, так как сами исходные данные $\alpha_{j,i}$ не определяют производную $\hat{u}$, только её значения. Мы будем полагать границей ∂B точки из B , непосредственно граничащие с областью экстраполяции $\bar{B}$. Для определённости положим, что граница перпендикулярна оси x и проходит по координате x_{j_0-1} : $(x_j, y_i) \in B$ для $j < j_0$ и $(x_j, y_i) \in \bar{B}$ $j \geq j_0$. Для производной можно записать аппроксимационную формулу:

$$\beta_{j_0-1,i_0} = \left[\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \right] (x_{j_0-1}, y_{i_0}) = \left[\frac{\partial u}{\partial x} \right] (x_{j_0-1}, y_{i_0}) \approx \frac{1}{h} (\alpha_{j_0-1,i_0} - \alpha_{j_0-2,i_0}), \quad (2.1)$$

где h – шаг сетки, $\mathbf{n}$ – нормаль к границе ∂V . Аналогично будет выглядеть формула для границы вдоль оси y .

Рассмотренные выше способы продолжения сетки – отражение и линейная экстраполяция – выполняют требования 1 и 3, но не 2.

2.2 Методика экстраполяции

Разработанная методика основана на постановке и решении краевой задачи, не описывающей физический процесс, продуцирующий поле u , а индуцируемой требованиями к сеточным моделям геопотенциальных полей для корректности применения к ним процедур инверсии, основанных на дискретных преобразованиях Фурье.

На предварительном этапе экстраполяции выбирается расстояние (в шагах сетки), на которое исходная сетка расширяется.

Предлагаемая методика основан на постановке и решении краевой задачи, и одним из вариантов экстраполяции могла бы быть экстраполяция, основанная на системе уравнений в частных производных Лапласа $\Delta u = \partial^2 \hat{u} / \partial x^2 + \partial^2 \hat{u} / \partial y^2 = 0$ с краевыми условиями Дирихле. Как и отражение и линейная экстраполяция, «экстраполяция методом Лапласа» удовлетворяет требованиям 1 и 3, но не 2. Это может показаться контринтуитивным: тождество Лапласа должно выполняться, так как предполагается, что в плоскости $z = 0$ не содержится ненулевых значений эффективного параметра, и тогда в силу потенциальности поля разрывов первой производно не должно быть. Однако необходимо учитывать, что физический закон распространяется на трёхмерное пространство, т.е. оператор Лапласа необходимо рассчитывать по трём направлениям, однако сетка, соответствующая полю, – двумерная, и, значит, выбор задачи $\Delta \hat{u} = 0$ не соответствует физическим законам. На практике, оператор Лапласа хоть и продуцирует непрерывную экстраполяцию поля с непрерывными первыми

производными, но на границе экстраполяции имеется разрыв первой производной по перпендикулярному к границе направлению, что ведёт к появлению ложных аномалий в рассчитываемой инверсии.

Разработанная методика экстраполяции основана на решении краевой задачи вида $Q(\hat{u}) = \partial^4 \hat{u} / \partial x^4 + \partial^4 \hat{u} / \partial y^4 = 0$ для области экстраполяции $\bar{B}$ с использованием краевых условий в виде $\hat{u}(x_j, y_i) = \alpha(x_j, y_i) = \alpha_{j,i}$ для точек сетки $(x_j, y_i) \in B$. При этом удовлетворяются краевые условия не только на значение функции, но и на её первую производную.

Для численной аппроксимации оператора Q методом конечных разностей используется следующий оконный шаблон:

$$\begin{Bmatrix} & & 1 & & \\ & & -4 & & \\ 1 & -4 & 12 & -4 & 1 \\ & & -4 & & \\ & & 1 & & \end{Bmatrix}.$$

То есть, имеем набор уравнений $u_{j-2,i} - 4u_{j-1,i} + 12u_{j,i} - 4u_{j+1,i} + u_{j+2,i} + u_{j,i-2} - 4u_{j,i-1} - 4u_{j,i+1} + u_{j,i-2} = 0$.

Выпишем краевые условия в точках $(x_j, y_i) \in \partial B$, к удовлетворению которых мы стремимся:

$$u(x_j, y_i) = \alpha(x_j, y_i). \quad (2.2)$$

$$\left[\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \right] (x_j, y_i) = \beta(x_j, y_i). \quad (2.3)$$

Здесь $\mathbf{n}$ – нормаль к границе ∂B , и тогда $\left[\frac{\partial u}{\partial \mathbf{n}} \right]$ – производная вдоль этого направления. Чтобы показать, что такая схема учитывает краевые условия не только на значения функции (2.2) но и на её производную (2.3), вспомним аппроксимационную формулу первой производной (2.1). Снова для определённости договоримся, что $(x_j, y_i) \in B$ для $j < j_0$ и $(x_j, y_i) \in \bar{B}$ $j \geq j_0$. Тогда справедливы соотношения:

$$\left[\frac{\partial^4 u}{\partial x^4}\right](x_{j_0}, y_i) + \left[\frac{\partial^4 u}{\partial y^4}\right](x_{j_0}, y_i) \approx \frac{1}{h^4} (u_{j_0-2,i} - 4u_{j_0-1,i} + 12u_{j_0,i} - 4u_{j_0+1,i} + u_{j_0+2,i} + u_{j_0,i-2} - 4u_{j_0,i-1} - 4u_{j_0,i+1} + u_{j_0,i+2}). \quad (2.4)$$

$$\frac{1}{h^3} \beta_{j_0-1,i} \approx \frac{1}{h^4} (u_{j_0-2,i} + u_{j_0-1,i}). \quad (2.5)$$

Соотношение (2.5) представляет собой левую аппроксимацию первой производной вдоль оси x в точке (x_{j_0-1}, y_i) первого порядка точности. Подставляя (2.1) и (2.5) в (2.4) и заменяя асимптотическое равенство на строгое, получим разностное уравнение:

$$+12u_{j_0,i} - 4u_{j_0+1,i} + u_{j_0+2,i} + u_{j_0,i-2} - 4u_{j_0,i-1} - 4u_{j_0,i+1} + u_{j_0,i+2} = h\beta_{j_0-1,i} + 3\alpha_{j_0-1,i}.$$

Иными словами, при подстановке $\alpha_{j_0-2,i}$ в (2.4) вместо $u_{j_0-2,i}$, учитываются краевые условия на вторую производную (2.3), аппроксимация которой имеет вид (2.5). Интересно, что обычно при решении краевых задач даны значения $\alpha_{j_0-1,i}$ и $\beta_{j_0-1,i}$ на границе, вводится фиктивная точка $u_{j_0-2,i} \approx \alpha_{j_0-1,i} - h\beta_{j_0-1,i}$ и подставляется в (2.4), но в нашем случае существует реальная точка с заданным значением $u_{j_0-2,i} = \alpha_{j_0-2,i}$, которая позволяет игнорировать тот факт, что значение производной на границе ∂B самом деле не задано. В этом случае удовлетворение краевым условиям (2.3) происходит «автоматически».

2.3 Содержательные гармоники спектрального разложения

Периодичность сигнала позволяет получать гармоники с содержательными коэффициентами. Так, на рисунке (3.1) изображена спектральная мощность сигнала (поля) $|\mathcal{F}\hat{u}|^2$ с усреднением по концентрическим кольцам вокруг нуля: $f_{r_i} = M_{r_i \leq \sqrt{v_x^2 + v_y^2} \leq r_{i+1}} [|\mathcal{F}\hat{u}|^2(v_x, v_y)]$.

Для волновых чисел, больше чем ~ 0.05 , мощности $\dot{u}$ имеют вид «пилы», что

обусловлено эффектом Гиббса[31] – шумы из-за разрыва на границе и свойства периодичности ДПФ не дают точной картины о мощности сигнала и «реального» шума. Для экстраполяции же видно, что в районе волновых чисел 0.12-0.13 (1/км) имеется «спад» по мощности гармоник. Это вполне соответствует спецификации поля как обобщённого на масштаб 1:1 000 000.

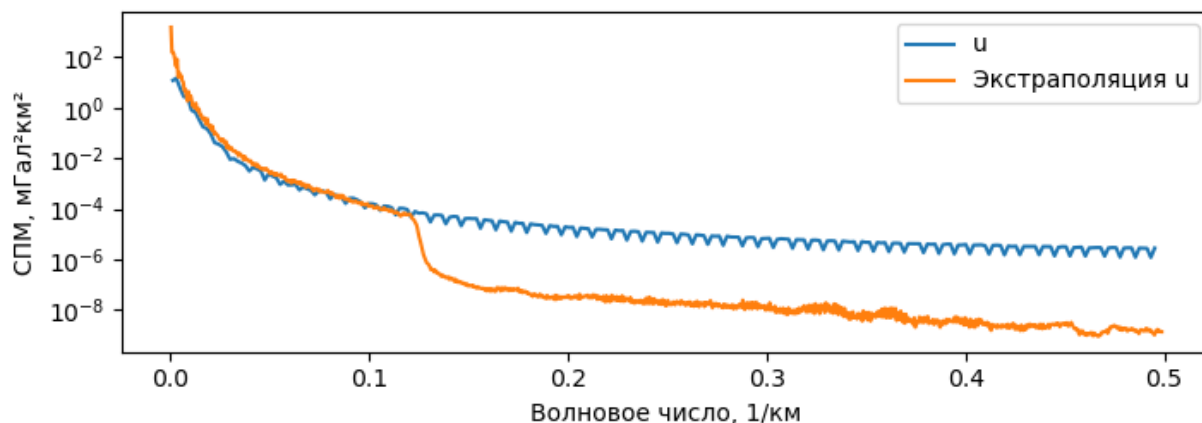


Рис. 2.1. Спектральная плотность мощности (СПМ) для исходного аperiodического поля и его экстраполяции на примере поля силы тяжести для территории Енисей-Хатангского регионального прогиба.

2.4 Сравнение методик экстраполяции

Благодаря непрерывности не только самой функции $\hat{u}$, но и её производных (градиента), экстраполяция указанной методикой эффективно подавляет краевые эффекты. С целью иллюстрации этого факта была произведена экстраполяция различными методами. В качестве исходных данных взята модель поля силы тяжести, построенная по реальным измерениям, для территории Енисей-Хатангского регионального прогиба. Процесс построения происходил по следующей процедуре:

1. Разбиение исходной сеточной модели на две половины по направлению север-юг, и принято, что исходные данные для экстраполяции $\alpha_{j,i}$ даны только для западной половины.

2. Построение экстраполированной сеточной модели в той же сетке каждым из упомянутых методов (отражение, линейная интерполяция, Лапласа и $Q(\hat{u})$).
3. Построение инверсии для каждой из построенных экстраполированных сеточных моделей.
4. Построение разреза по центральной прямой поперёк направления разбиения сетки исходных данных для всех моделей – как для экстраполированных моделей поля, так и для построенных инверсий.

Напомним, цель построения экстраполированной сеточной модели заключается в подавлении краевых эффектов. Мы будем называть краевыми эффектами разницу между исходным полем в области экстраполяции и построенной экстраполированной моделью – чем больше экстраполяция похожа на исходное поле, тем меньше краевые эффекты. С другой стороны, задачу необходимо рассматривать в контексте построения инверсии, и тогда целью будет минимизация разницы между построенной инверсией исходного поля и экстраполированного.

На рисунке 2.2 изображены соответствующие модели гравитационного поля: исходная сеточная модель и различные методы экстраполяции. Под расстоянием подразумевается расстояние до линии разделения поля на область B и область экстраполяции $\bar{B}$. Для минимизации краевых эффектов модель экстраполированного поля должно быть максимально похожим на исходное, чему соответствует именно предлагаемая методика ($Q(\hat{u}) = \partial^4 \hat{u} / \partial x^4 + \partial^4 \hat{u} / \partial y^4 = 0$). Хорошо проиллюстрировано отсутствие разрыва как значения функции $\hat{u}$, так и её производной вдоль оси x только для предлагаемой методики.

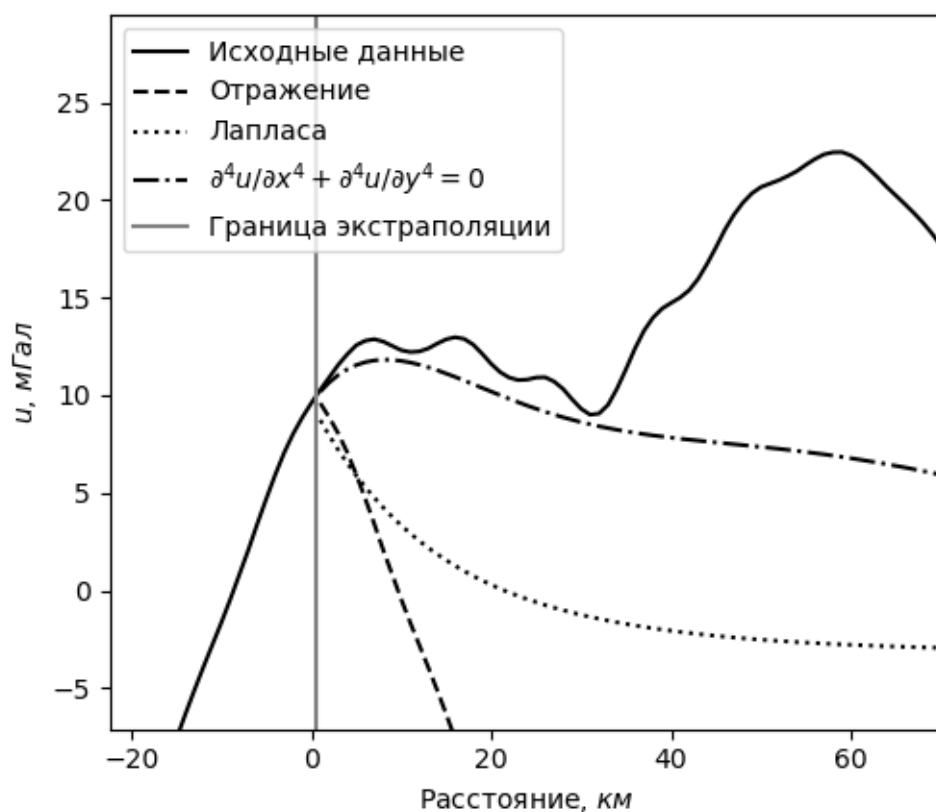


Рис. 2.2. Сравнение моделей поля – исходного и экстраполированные модели.

Для различных методов экстраполяции были построены инверсии методом, рассмотренным в главе 1, со следующими параметрами: множитель по глубине $\alpha = 3$ и экспонента при z $\beta = 1$. На рисунке 2.3а) изображена инверсия для исходного поля, на остальных рисунках изображён модуль разницы между этой инверсией и инверсией для экстраполированной модели поля различными способами. Как видно, наименьшая разница наблюдается именно для разработанной методики экстраполяции.

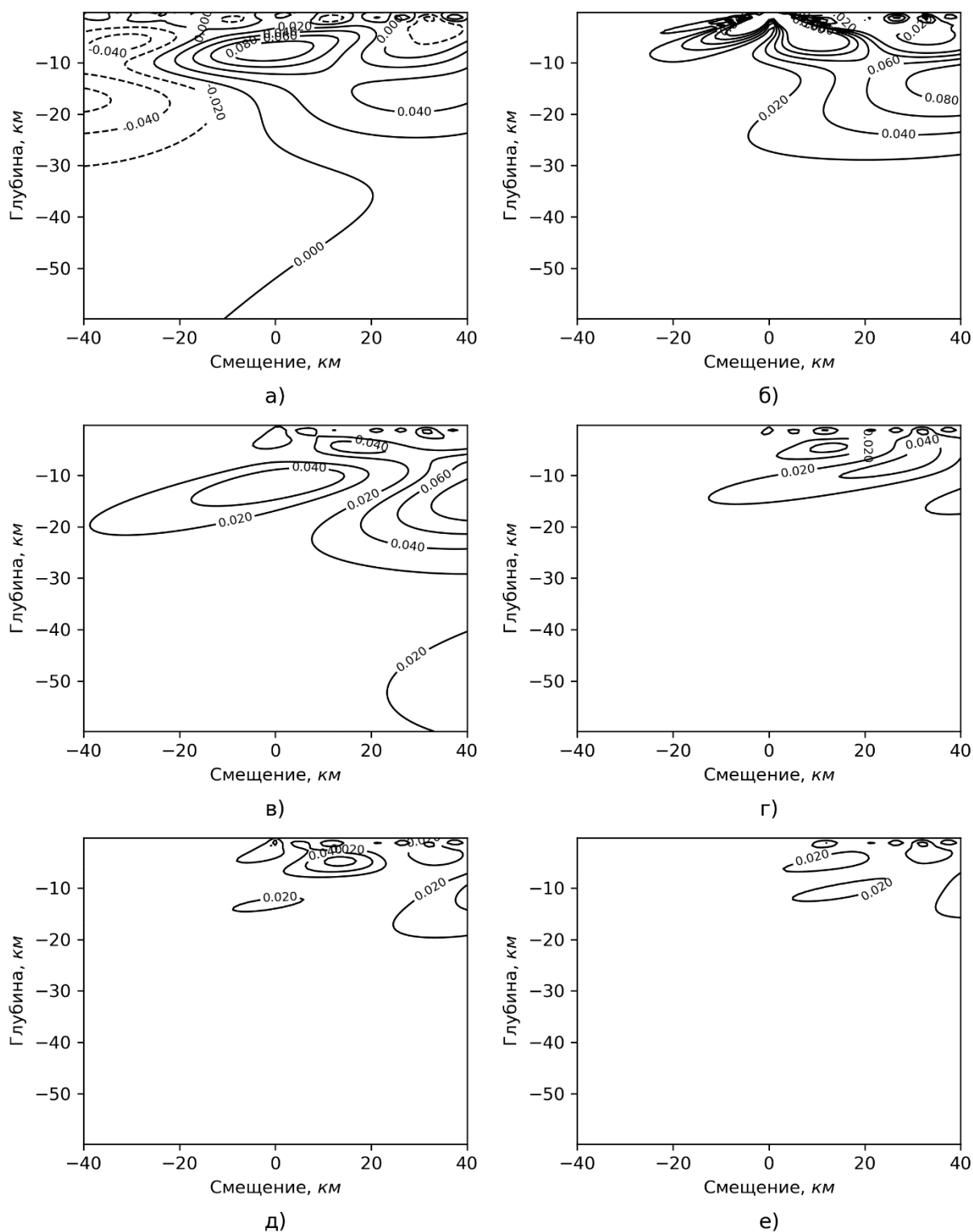


Рис 2.3. Разрезы инверсий: а) инверсия исходного поля; б-е) модули разницы между инверсией исходного поля и экстраполяцией для следующих методов: б) без экстраполяции (повтор); в) отражение; г) линейная интерполяция; д) методом Лапласа; е) разработанная методика $Q(\hat{u})$. Единицы – г/см³.

Другим преимуществом предложенной методики продолжения поля по латерали, по сравнению с отражением, является то, что при использовании отражения размер сеточной модели увеличивается в 4 раза (в 2 раза по каждой оси), в то время как в указанном методе достаточно сделать экстраполяцию на 10-30%, в зависимости от конкретного поля, а также наличия тренда и используемых методов редукции поля. Это уменьшает требования к вычислительным ресурсам при дальнейшей обработке данных.

В итоге, можно заключить, что доказано **второе защищаемое положение**: разработаны методика и программное обеспечение экстраполяции сеточных моделей потенциальных полей, обеспечивающие периодичность и непрерывность продолжения поля и его первой производной, что позволяет подавить краевые эффекты при применении методов инверсии, основанных на дискретных преобразованиях Фурье.

Глава 3. Монтажный метод

В последнее время монтажный метод привлекает всё больше внимания в контексте решения обратных гравитационных задач. Основной толчок к развитию связан с развитием вычислительной техники, поскольку в трёхмерной постановке метод является вычислительно затратным. Основывающийся на ранних работах Страхова[22; 23] – алгоритме кристаллизации, метод заключается в итеративном процессе последовательного приближения решения (квазирешения) обратной задачи с помощью модификации плотностей отдельных элементов модели, которые осуществляются с учётом исходящих из априорной информации ограничений на возможные модификации и значения плотностей. Процесс решения просто интерпретируется исследователем, например, как заполнение пространства аномалообразующими объектами или неаномальной вмещающей средой.

Богатство возможностей монтажного метода ограничивается обнаруженными проблемами с его применением в более сложных постановках, например, при разнознаковых избыточных плотностях[32]. На основе практики работы с монтажным методом разработано алгоритмическое и программное обеспечение для ГИС INTEGRO, разрешающее трёхмерное моделирование как отдельно стоящих тел (рудный тип задач), так и комплексное моделирование сложной территории, выражающееся в виде задачи со сложным распределением масс [33] (далее – сложными моделями).

В разработанной на основе монтажного метода методике решения обратных задач на геопотенциальные поля введены два новшества: приоритет модификаций и групповые операции. Приоритет позволяет стабилизировать (или регуляризовать) метод при работе со сложными моделями с разнознаковыми физическими параметрами, а также позволяет работать напрямую с моделями с содержательными значениями плотностей, соотносящихся к усреднённым значениям плотностей конкретных классов

слагающих пород, в то время как прежде применение монтажного метода осуществлялось только при построении моделей эффективного (избыточного) физического параметра. Групповые операции, в свою очередь, позволяют на практике производить вычисления на больших сеточных моделях при отсутствии больших вычислительных ресурсов (компьютерного кластера).

3.1 Модель вмещающей среды

Пусть моделируемый объём (моделируемая территория) – прямоугольная призма $\Omega = \cup \omega$, ω – элементы замощения, когерентные прямоугольные призмы со сторонами длиной b_x, b_y, b_z ; призмы касаются друг друга только целыми гранями. Таким образом, элементы – атомарные единицы модели, каждой точке элемента ставится в соответствие одно и то же значение физического параметра. Элементом ставятся в соответствие индексы, используемые как основной способ обозначения этих элементов: $\mathbb{V} = \{v\}$ – множество всех трёхмерных индексов ячеек, $v = (v_x, v_y, v_z) \in 1 \dots n_x \times 1 \dots n_y \times 1 \dots n_z = \mathbb{V}$.

Для задания значений физического параметра используется специальная композитная модель $M(v)$, состоящая из композиции классовой модели и функций физического параметра, определяемых ниже. Классовая модель $L(v)$ соотносит каждый элемент к классу (каждому элементу ставит в соответствие метку класса): $L: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{L}$, где $\mathbb{L} \subset \mathbb{Z}_0$ – множество меток классов. Сам класс соотносит каждому элементу, потенциально способному иметь соответствующую метку, значение физического параметра через функцию физического параметра $D_l: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$. Тогда комбинированную функцию физического параметра определим как $D: \mathbb{L} \times \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$, $D(l, v) = D_l(v)$ и композитная модель – как $M = M_{L,D}: \mathbb{V} \rightarrow \mathbb{R}$, $M(v) = D(L(v), v)$.

Такая формулировка модели позволяет назначать классам содержательный смысл. Например, классом может быть рудное тело, магматическая интрузия или вмещающая среда, представленная слоистой

или градиентной моделью. При этом обычно можно составить одну или несколько разумных гипотез о составе пород таких объектов, что позволяет назначить этим объектам физические параметры плотности и намагниченности или магнитной восприимчивости. Наличие набора функций $D_i(v)$ позволяет таким объектам иметь не только равномерное значение параметра, но и отличающееся для различных входящих в них элементов – например, градиентную плотность. Разные тела одной природы и генеза могут иметь как разные, так и одинаковые метки: в первом случае подразумевается важность разделения однородных тел в рамках решаемой задачи.

3.2 Атомарная модификация модели среды

В монтажном методе построение модели состоит в итеративной эволюции модели через малые изменения классовой модели L : модель L_{i+1} получается из модели L_i переназначением значения метки для одного элемента v , где новое значение берётся из множества значений меток ячеек из окрестности $\eta_{\pm}(v)$.

Определим окрестность модификаций $\eta_{\pm}(v)$ как набор элементов, находящихся в непосредственном соседстве с v (имеющих общую грань):

$$\eta_{\pm}(v) = \{w: w \in \mathbb{W} \wedge |v_x - w_x| + |v_y - w_y| + |v_z - w_z| = 1\}. \quad (3.1)$$

Тогда разница между двумя соседними классовыми моделями определяется через ячейку, меняющую метку класса, и соседнюю ячейку, имеющую новое значение метки. Назовём *модификацией* пару ячеек $\mu = (v, w) \in \mathbb{W} \subset \mathbb{V}^2$, таких что $w \in \eta_{\pm}(v)$; *доступной модификацией* – такую $\mu^* \in \mathcal{W}(L) \subset \mathbb{W}$, что $L(v) \neq L(w)$. Договоримся, что если две классовой модели L_i и L_{i+1} (на шаге i) различаются переназначением метки у одной ячейки, то была совершена (*применена*) модификация $\mu = (v, w)$, если метка переназначена у ячейки v , а новое значение её метки – это значение метки ячейки w . Обозначим классовую модель с совершённой модификацией как $L_{i+1} = L_i + \mu$.

Тогда можно определить, что функционал процесса, реализующего монтажный метод, заключается в итеративном выборе модификаций μ и их применении с целью минимизации некоторого функционала – невязки в аномальном геопотенциальном поле – разнице между измеренным аномальным полем и аномальным полем, продуцируемым текущей моделью $M_{L,D}$. Такой процесс называется оптимизацией.

Данное определение процесса оптимизации накладывает важное ограничение на класс композитных моделей, заключающееся в независимости плотности ячейки от меток других ячеек. Например, область дробления может моделироваться пониженной плотностью в центре с плавным переходом к плотности вмещающей среды по её краям. Модель с изменёнными границами простираения области дробления получается через изменение меток у некоторых ячеек модели, но тогда плотность должна меняться не только у них, но и у тех ячеек, которые находятся во всей области дробления, что запрещено композитной моделью – функции физического $D_l(v)$ не меняются в течение всего процесса оптимизации. Однако область дробления с переменной плотностью можно включить в модель, если её построение не является целью моделирования монтажным методом: она должна быть задана заранее и зафиксирована. По этой же причине недоступны некоторые приёмы монтажного метода – например, формальная оптимизация по значениям избыточных плотностей класса решением линейных задач на каждой итерации[34]. Более того, как указывается в различных работах, условием остановки в монтажном методе при использовании формальной оптимизации является именно достижение значения избыточной плотности заранее заданного интервала [32], что в общем случае невозможно в рамках выбранного модельного класса. Однако преимуществом использования такого модельного класса является то, что появляется возможность строить модели, являющиеся содержательными или имеющие отдельные черты содержательных.

Пусть линейный оператор A связывает модель среды с моделью аномального геопотенциального поля: $u_M = AM_{L,D}$. Под такой записью мы понимаем то, что композитная модель M , задаваемая классовой моделью L и комбинированной функцией физического параметра D , полностью определяет сеточную модель среды, а для неё хорошо известен оператор прямой задачи (см. главу 1).

Определим поле от модификации:

$$u_L(\mu) = AM_{L+\mu,D} - AM_{L,D}. \quad (3.2)$$

Поле от модификации – это эффект от применения модификации, который отразится на текущей невязке аномального поля. В некоторых случаях имеется некоторая свобода по отношению к трансформациям и редукциям поля. Так, если производится комплексное региональное моделирование территории, то обычно работают с редуцированными моделями полей[35], для которых первый начальный момент приведён к 0. Более общий случай такой трансформации – удаление линейного тренда [36].

Пусть целевое поле $u_0: u_{0,i} = u_0(x_i, y_i)$ задано на нулевом уровне в точках $\{(x_i; y_i)\}$, $i=1 \dots n_u$, где n_u – количество точек в сеточной модели поля. Обозначим невязку модели $r(M) = R_M = u_M - u_0$, норму невязки $|r| = |r|_p = (\sum_i (r_i)^p)^{1/p}$ ($p = 1$ или 2) и *разницу норм невязок* $r(\mu)$:

$$r(\mu) = r_M(\mu) = |r_{M|L+\mu,D}| - |r_{M|L,D}| = |AM_{L+\mu,D} - u_0| - |AM_{L,D} - u_0| \quad (3.3)$$

Разница норм невязок – это эффект от применения модификации μ на текущую невязку r . Чем сильнее применение модификации уменьшает невязку модели, тем меньше $r(\mu)$; если применение модификации уменьшает невязку модели, то $r(\mu) < 0$. Решение обратных задач в самых различных формулировках требует минимизации невязки – соответственно, при осуществлении монтажного метода обычно следует применять именно такие модификации, для которых выполняется:

$$r(\mu) < 0. \quad (3.4)$$

Выполнение условия (3.4) ещё не делает алгоритм жадным. Жадный алгоритм – такой итеративный алгоритм, согласно которому на каждом шаге выполняется локально оптимальное действие. Локальная оптимальность подразумевает минимизацию невязки по условию локально-оптимальной модификации: $r(\mu) \rightarrow \min_{\mu}$. В противоположность жадному алгоритму, разработанная методика применяет всё ещё локально-оптимальные модификации, однако в качестве условия оптимальности используется не уменьшение невязки, а приоритет, зависящий от разницы норм невязкок $r(\mu)$, но не равный ей.

При итеративном обходе вершин требуется вычислять (3.3), однако вычислительно эффективнее поддерживать в памяти значения текущей невязки $AM_{L,D} - u_0$, и рассчитывать только аномальное поле от одного элемента v для модификации $\mu = (v, w)$:

$$r = AM_{L,D} - u_0. \quad (3.5)$$

Тогда, подставляя (3.5) и (3.2) в (3.3), имеем следующее выражение для вычисления влияния применения модификации на невязку:

$$r(\mu) = |u_L(\mu) + r| - |r|. \quad (3.6)$$

Тогда вычислительная проблема сводится к вычислению значения $u_L(\mu)$. Оно, в свою очередь, зависит от двух величин: разницы в значении физического параметра элемента v до и после применения модификации $\mu = (v, w)$ и имманентного свойства элемента v – аномального поля, продуцируемого элементом v с единичным физическим параметром в нейтральной среде (с нулевой эффективной плотностью или намагниченностью):

$$u_L(\mu) = u(v)(D(L(w), v) - D(L(v), v)). \quad (3.7)$$

На практике при вычислении значения $r(\mu)$ эффективно пользоваться соотношениями (3.5), (3.6) и (3.7) вместо (3.3), причём наиболее вычислительно затратно именно вычисление именно $u(v)$. Его можно производить, например, по формуле для прямоугольной призмы[37], но при

этом необходимо учитывать свойства редукции к аномальному полю. Так, редуцированное по Буге поле u_0 , как правило, редуцируется дополнительно вычитанием константы (постоянной составляющей) или линейного тренда. Для разрабатываемой методики был взят первый вариант, который подразумевает $\sum_{i \in n_u} u_{0,i} = 0$, где n_u – количество точек в сеточной модели поля, а $u_{0,i}$ – амплитуда аномалии в точке i . Соответственно, если поля от единичных элементов $u(v)$ будут содержать ненулевую постоянную, то при применении модификаций текущее значение невязки r также будет накапливать эту постоянную, которая будет отражаться в норме невязки в сторону её увеличения, что необоснованно и вредит подбору модели.

Для демонстрации проблемы можно сделать следующие построения. Рассмотрим оператор прямой задачи в следующем виде:

$$AM_{L,D} = \sum_{v \in V} u(v)D(L(v), v). \quad (3.8)$$

Представим себе такую классовую модель L , для которой $AM_{L,D}$ имеет ненулевую постоянную составляющую. Представим себе поле u_0 , которое было бы получено в результате идеальных изменений и редукций, включая удаление постоянной составляющей, если бы модель $M_{L,D}$ идеально описывала геофизическую обстановку. Тогда, без удаления постоянной составляющей в операторе прямой задачи, имеем ненулевую разницу между полем от модели и измеренным полем: $|AM_{L,D} - u_0| \neq 0$, что контринтуитивно.

То есть, при вычислении $u(v)$ следует удалять постоянную составляющую. Тогда определим аномальное поле от единичного элемента следующим образом:

$$u(v) = \acute{u}(v) - \overline{\acute{u}(v)}, \quad (3.9)$$

где $\acute{u}(v)$ – полное (неаномальное, нередуцированное) поле от единичного элемента, а $\overline{\acute{u}(v)} = \sum_i \acute{u}_i(v) / n_u$ – его постоянная составляющая.

Как уже указывалось выше, вычисления $\mathcal{U}(v)$ можно производить по формуле для прямоугольной призмы[37], и она обеспечивает достаточно большую точность, однако имеет и свои недостатки. Альтернативой является аппроксимация в виде точечного источника аномального поля (точечной массы или магнитного диполя). Рассмотрим недостатки формулы для прямоугольной призмы:

1. Вычисления значительно медленнее. Так, в формуле для поля силы тяжести прямоугольной призмы используются 25 вычислительно сложных функций – 16 логарифмов, 8 арктангенсов и 1 квадратный корень (арифметическим упрощением сводится до вычисления 21 функции), в то время как, например, гравитационное поле от точечной массы требует однократного расчёта квадратного корня.
2. Вычисления требуют двойной точности. Так, при расчёте поля силы тяжести прямоугольной призмы происходит катастрофическое убывание точности (catastrophic cancellation) ввиду вычитания больших близких величин. Использование двойной точности увеличивает время вычислений в 2 раза на центральных процессорах, и дополнительно в 32 раза на графических ускорителях.

Конечно же, очевидный недостаток аппроксимации точечным источником является потеря точности – чем ближе к поверхности элемент v , и чем более анизотропной является сетка (отличающиеся шаги между точками по разным осям), тем больше разница между аппроксимацией и «истинным» аномальным полем прямоугольной призмы. Для реализации в ГИС INTEGR0 была выбрана аппроксимация точечным источником, так как важной характеристикой реализации является скорость вычислений ввиду больших размеров используемых моделей.

3.3 Приоритет модификации

Часто в различных методах качестве критерия оптимальности модификации используется минимизация невязки ($r_{L+\mu} \rightarrow \min_{\mu}$) жадным алгоритмом, но на практике в этот подход даёт плохие результаты. В некоторых работах предлагается регуляризованный функционал [36; 38]. Авторы предлагают использовать *приоритеты* над модификациями для контроля эволюции модели. Основная цель состоит в том, чтобы применять не те модификации, которые быстрее всего уменьшают невязку, а те, у которых наилучший приоритет, при этом наилучший приоритет должен быть у таких модификаций, применение которых не ухудшает другие качества модели.

Определим функцию приоритета $P^*: \mathbb{W} \rightarrow \mathbb{R}$, задающую приоритет для модификаций при текущей классовой модели (на текущей итерации); выбор модификации осуществляется на основе величины её приоритета. Пусть $\mu = (v, w)$ – допустимая модификация. Обозначим разницу плотностей ячейки до применения модификации и после как $D(\mu) = D(L(w), v) - D(L(v), v)$.

Определим функцию окрестности приоритета $\eta(v)$:

$$\eta(v) = \{\max(|v_x - w_x|, |v_y - w_y|, |v_z - w_z|) \leq L_{\eta}\}, \quad (3.10)$$

где L_{η} – радиус окрестности – параметр, фиксируемый перед началом оптимизации. Окрестность приоритета для элемента v – набор элементов, находящихся рядом с элементом v , которые исследуются с целью формирования приоритета элемента v . При этом используется следующее эвристическое правило: чем больше элементов рядом с v , которые принадлежат тому же классу, что и элемент w модификации $\mu = (v, w)$, то тем больше должен быть приоритет у модификации μ по сравнению с другими модификациями, для которых количество подобных элементов меньше.

Определим функцию приоритета следующим образом:

$$P^*(\mu) = P^*(v, w)|_L = -r(\mu)|D(\mu)|^{-\gamma}|z_v|^\beta \left(\sum_{w' \in \eta(v)} \delta_{L(w), L(w')} \right)^\alpha. \quad (3.11)$$

В формуле (3.11) $\delta_{i,j}$ – дельта Кронекера, z_v – глубина центра ячейки v . Приоритет управляется следующими коэффициентами: параметр α управляет компактностью классов, β уравнивает приоритет у модификаций, находящихся на разной глубине, а параметр γ позволяет уравновесить приоритет у похожих по эффекту на невязку $r(\mu)$ модификаций, для которых имеется больше различие у $D(\mu)$. Разъясним смысл этих параметров.

Для двух похожих по аномальному полю модификаций $\mu_1 = (v_1, w_1)$ и $\mu_2 = (v_2, w_2)$ (то есть, $|u_L(v_1)| \cong |u_L(v_2)|$), если $D(\mu_1) \gg D(\mu_2)$, то с большой вероятностью (правдоподобием) истинно $r(\mu_1) > r(\mu_2)$, что повлияет на приоритет в пользу первой модификации. В то же время, если модифицируемые элементы v_1 и v_2 относятся к двум топологически разным объектам (например, интрузивным телам), то логично было бы уравнивать такие модификации с точки зрения их приоритета. Например, как описано далее в работе, за одну итерацию применяется сразу набор модификаций, и предпочтительно было бы, если бы набор затрагивал оба объекта, а не только один из них. Соответственно, параметр γ балансирует приоритет у таких модификаций.

Параметр β контролирует приоритет по глубине: чем он больше, тем приоритетнее изменения на большой глубине; при малых значениях β приоритет отдаётся изменениям на малой глубине. Логика введения этого параметра аналогична введению коэффициента по значению $D(\mu)$. Рассмотрим случай, когда аномальный объект расположен слишком низко, и желательно, чтобы в ходе исполнения процедуры монтажного метода он перемещался вверх. Тогда ожидается, что одинаковый приоритет должен отдаваться модификациям, соответствующим как добавлению элементов сверху от объекта, так и удалению их снизу от объекта. Однако, согласно

характеристикам геопотенциальных полей, это не так, и с помощью этого коэффициента удаётся учесть такую «асимметрию».

Экспериментально были получены следующие значения: $\beta < 0.5$ для поля силы тяжести, для магнитного поля $\beta < 1.5$ [39]. Можно считать указанные значения «сбалансированными», когда одинаковый приоритет отдаётся модификациям на произвольной глубине, однако необходимо учитывать, что, вообще, сбалансированные значения β , указанные выше, получены экспериментально на модельных данных, и для сеток различных параметров могут быть различными.

Параметр приоритета по окрестности α предназначен для *стабилизации* неустойчивого алгоритма. Для данной задачи под *неустойчивым алгоритмом* понимается такой алгоритм, который продуцирует такие модели, которые далее называются очевидно неадекватными. Адекватностью модели называется соответствие реальному положению вещей. Так как задача построения модели среды по модели продуцируемого аномального геопотенциального поля априори некорректна, не всегда возможно сказать, является ли модель неадекватной, даже если учитывать другие априорные данные (сейсмические, буровые и др). Однако есть класс геофизических моделей, которые не могут соответствовать никакому геологическому строению в принципе. Например, это могут быть ветвистые тела, или метки классов, назначенные в шахматном порядке. Такие модели мы будем называть *очевидно неадекватными*, подразумевая под этим, что беглого взгляда на трёхмерную визуализацию (средствами ГИС) достаточно, чтобы сделать вывод, что она не может соответствовать геологической обстановке. Другие авторы называют такие модели бессодержательными[40].

Известно, что монтажный метод без каких-либо стабилизирующих факторов продуцирует очевидно неадекватные модели, содержащие структуры типа «отростки» или «разрезы»[40; 41]. Введение в монтажный

метод факторов, предотвращающих построение таких моделей, будем называть стабилизацией, а такую модификацию метода – стабилизированной. Различными авторами предлагается [24] добавление стабилизирующего фактора в виде формальной оптимизации по физическому параметру. Она заключается в следующем:

1. Устанавливается $D(l, v) = D_l$ для всех классов l .
2. При расчёте $r(\mu)$ осуществляется минимизация $r(\mu) \rightarrow_{D_1, \dots, D_n} \min$ невязки по набору переменных физического параметра $D_1, \dots, D_n$, фактически решая линейную задачу.

При использовании такой процедуры предварительно задаются интервалы $I_1, \dots, I_n$, при попадании D_l в которые исполнение алгоритма завершается. То есть, например, алгоритм вполне может начинаться со значения $D_l = 40 \text{ г/см}^3$, что очевидно, неадекватно никакому геологическому строению, но в процессе уменьшится до адекватных и ожидаемых значений в заданном интервале I_l . Это мы и имеем в виду под формальной оптимизацией – ни промежуточные, ни конечные значения D_l не интересны с предметной точки зрения, так как они предварительно задаются интервалами их возможных значений.

Очевидным недостатком данной схемы является трудность использования такого стабилизированного монтажного метода вместе с введённой композитной моделью. Так, вид $D(l, v)$ специально выбран с целью моделирования сред с неоднородным физическим параметром, однако фиксированность $D(l, v) = D_l$ блокирует такую возможность. С другой стороны, известно, что при разнознаковых D_l монтажный метод всё равно нестабилен[32].

Параметр приоритета по окрестности введён для стабилизации монтажного метода. Основная идея состоит в том, что очень сложно задать такие ограничения на модели, чтобы, с одной стороны, отсеять явно неадекватные модели L_n , и, с другой, не отсеять «интересные», которые могли

бы адекватно представлять геофизическую и геологическую обстановку, а также все промежуточные модели $L_1, \dots, L_{n-1}$, которые необходимо пройти в алгоритме, чтобы дойти до интересной модели L_n , и при этом иметь малую вычислительную сложность. Однако вместо контроля моделей можно контролировать эволюцию моделей, отдавая предпочтение такой эволюции, при которой приоритет у таких модификаций, которые продуцируют модели, не являющиеся очевидно неадекватными.

Классы неадекватных моделей, упомянутые ранее, – «отростки» и «разрезы» – необходимо рассмотреть в их эволюции. Тогда можно ввести предположение, что отростки были построены в ходе добавления к появляющимся отросткам новых элементов к их концам. Релевантным свойством таких модификаций является то, что для целевого элемента v модификации $\mu = (v, w)$, у которого меняется метка класса, в его окрестности мало элементов, относящихся к тому же классу, что и w . Соответственно, при увеличении значения параметра $\alpha > 0$, приоритет у модификаций, продуцирующих «отростковые» модели, уменьшается. Таким образом, отсутствие отростков контролируется через контроль эволюции модели.

Из свойства аппроксимации непрерывных моделей конечноэлементными можно говорить о некоторой непрерывной границе классов, которой в модели хоть и нет, но которая соответствует модели по какому-либо правилу, и которая как минимум дважды гладкая. Однако здесь она не введена формально ввиду сложности её формализации. Тогда можно говорить о средней кривизне такой границы, и для нормали, выходящей из тела около целевого элемента w , принадлежащего телу, к элементу v , не принадлежащего телу, значение параметра $\alpha > 0$ увеличивает приоритет для модификации $\mu = (v, w)$, если средняя кривизна границы около элемента v положительная (граница выгибается в сторону нормали, или от w к v). В такой интерпретации очевидно, что для отростков кривизна отрицательная,

что предотвращает их рост, и наоборот, имеется положительная кривизна для «пустот» внутри тел, и они удаляются («зарастают») в ходе эволюции.

У приоритета есть важный недостаток, заключающийся в том, что, если нет допустимых модификаций, продуцирующих содержательные модели, то по алгоритму далее применяются нежелательные модификации. На данный момент в практике применения монтажного метода в рамках ГИС INTEGR0 используется преждевременная остановка алгоритма, а оценка модели производится прямо во время работы. Для этого в качестве результата рассматривается не только конечная модель L_N , но и множество промежуточных моделей L_{1n} , L_{2n} ,... Таким образом, при использовании монтажного метода для построения моделей мы принимаем, что конечная модель будет являться очевидно неадекватной, однако первые несколько моделей можно использовать как варианты решения обратной задачи, которые аппроксимируют целевое поле с увеличивающейся степенью точности. В этом случае ставится вопрос об автоматизации преждевременной остановки, то есть алгоритм следует останавливать даже когда существуют допустимые модификации. Для этого введены несколько правил остановки – на степень уменьшения и на величину текущей невязки, на максимальное количество итераций, на минимальное количество применённых модификаций за итерацию. Потенциально перспективным выглядит вариант, при котором остановка производится при нарушении ограничения на конфигурацию окрестности приоритета для наиболее приоритетной модификации или их набора.

3.4 Ограничения

Кроме полей обычно у исследователей имеются в наличии другие данные –сейсмические, буровые и др. Их трудно включить в минимизируемый функционал или приоритет, но можно учесть в виде ограничений на возможные пути эволюции или допустимые конфигурации (классовые модели). Определим функцию ограничений как функцию

$\mathcal{C}_L(\mu): \mathbb{W} \rightarrow \{0,1\}$, где 0 обозначает, что применение данной модификации запрещено, а 1 – разрешено.

Введём функцию ограничений на классовые модели $\mathcal{G}_i(L): \mathbb{V}^N \rightarrow \{0;1\}$, $\mathcal{G}_i(L) = 1$, если L – допустимая классовая модель, и $\mathcal{G}_i(L) = 0$ иначе.

Тогда функция ограничения на модификации определим как $\mathcal{C}^{(L)}(\mu) = \prod_i \mathcal{C}_i^{(L)}(\mu)$, где $\mathcal{C}_i^{(L)} = \mathcal{G}_i(L + \mu): \mathbb{W} \rightarrow \{0;1\}$ – функции, задающие отдельные более простые ограничения; $\mathcal{C}_i(\mu) = 1$, если в результате применения модификации образуется допустимая классовая модель, и $\mathcal{C}_i(\mu) = 0$ иначе.

Важным условием на возможность реализации ограничения является малая (желательно $O(1)$) вычислительная сложность функций $\mathcal{C}_i(\mu)$ по множеству ячеек модели среды и/или поля. С учётом ограничений приоритет определим как следующим образом:

$$P(\mu) = P^*(\mu)\mathcal{C}(\mu). \quad (3.12)$$

В программном обеспечении, как правило, функция ограничений $\mathcal{C}(\mu)$ вычисляется быстрее приоритета $P^*(\mu)$, поэтому имеет смысл сначала рассчитывать $\mathcal{C}(\mu)$, и если $\mathcal{C}(\mu) = 0$, то не рассчитывать $P^*(\mu)$. Если $P(\mu) > 0$, то μ назовём *допустимой модификацией*; множество допустимых модификаций $\mathcal{W}^* = \{\mu \in \mathbb{W} \mid P(\mu) > 0\}$.

Интересным примером является ограничение на «выпуклость» конфигураций (классов) [32]. Другой вариант ограничения является ограничение на гладкость, хорошо изложенный в другой работе [24]. Оба эти ограничения на классовую модель, с одной стороны, имеют вычислительную сложность $O(1)$ по количеству элементов в сеточной модели, и, с другой, используют информацию, общую для модели целиком – в первом случае, это количество пересечений границ всеми вертикальными и горизонтальными прямыми, во втором – количество элементов в классе, находящихся на границе класса, и общее количество элементов, принадлежащих классу (тогда гладкость – это доля элементов в классе не принадлежащих границе, к

общему количеству элементов в классе, а ограничение – это их минимальная доля). Там же указывается, что, вообще говоря, трудно указать минимальное значение гладкости, так как она зависит и от геометрии тел, составляющих класс, и даже от масштаба – ввиду того, что «размерность» границы – 2, а размерность тел – 3, при измельчении элементов (увеличении масштаба) изменяется и гладкость. По нашему опыту, такого рода ограничения не достигают своей цели – стабилизации монтажного метода, и намного проще и эффективнее пользоваться параметром приоритета α .

3.5 Групповые изменения классовой модели

По опыту эксплуатации программного обеспечения монтажного метода, встроенного в ГИС INTEGRO, и измерения характеристик производительности было выявлено, что основные вычислительные затраты связаны с вычислением поля от модификаций $u_L(\mu)$. Основная идея групповых модификаций состоит в том, чтобы во время исполнения программы минимизировать перерасчёт полей. На каждой итерации идёт расчёт соответствующего поля и влияния на невязку для каждой допустимой модификации $\mu \in \mathcal{W}^*$, при этом на следующей итерации эти расчёты бесполезны, так как меняется классовая модель. С этой целью была исследована и реализована возможность применения сразу группы модификаций, которые являются допустимыми на начало итерации.

Обычно итерация монтажного метода выглядит следующим образом: из всех допустимых модификаций $\mu \in \mathcal{W}^*$ выбираем наилучшую (с наибольшим значением приоритета) и применяем её [36; 40]. Основная идея заключается в том, чтобы за одну итерацию применять не одну модификацию, а сразу набор модификаций. В работе П.И. Балка и А. Йеске [34] указывается, что возможно применение бóльшего количества модификаций за итерацию, но приводится два алгоритма – Регулируемая Направленная Кристаллизация (РНК) и Раскристаллизация (РНР), в каждом из которых также применяется только по одной. При применении только

одной модификации за итерацию для больших (мелкоячеистых) сеточных моделей оптимизация осуществляется очень медленно, а при региональном моделировании обычно используются именно большие сеточные модели.

Рассмотрим несколько условий на текущую модель, которые, как правило, выполняются:

1. Элементы, принадлежащие одному классу, сгруппированы вместе в сетке или находятся в нескольких компактных группах.
2. У двух близких модификаций поля коррелированы в значительной мере: для $\mu_i = (v_i, u_i)$ и $\mu_j = (v_j, u_j)$, где элемент v_i , который переносится в другой класс при применении первой модификации μ_i , находится близко к v_j в сетке, а $L(u_i) = L(u_j)$, поля значительно коррелированы: $u_L(\mu_i) \cdot u_L(\mu_j) \|u_L(\mu_i)\|^{-1} \|u_L(\mu_j)\|^{-1} \approx 1$.
3. Уменьшение невязки от применения даже наиболее приоритетных модификаций намного меньше невязки: $r(\mu) \ll |r_{M|L,D}|$.

Первое условие, как правило, выполняется при региональном моделировании. В этом случае осуществляется генерализованное моделирование больших (масштабных) геологических или геофизических объектов, размеры которых намного больше размера одного элемента (базовой прямоугольной призмы). Напротив, появление классов (тел), малых в размерах, имеющих необычную геометрию – тонких, отростковых – связывается с неучтойчивостью решения по данной методике или конкретному алгоритму монтажного метода, и избегается как при построении стартовой модели, так и в процессе эволюции посредством управления коэффициентами приоритета и ограничениями.

Второе условие выполняется, так как у близких элементов похожее единичное аномальное поле.

Третье условие не выполняется, только если эффект от применения даже одной модификации заметно изменяет текущую невязку. В контексте регионального моделирования это означает, что уже составлена модель,

достаточно хорошо представляющая исходное аномальное поле, а дальнейшие итерации монтажного метода не приведут к значительным изменениям в модели.

Основная идея заключается в том, что, если условия 1-3 соблюдены, то в допустимые модификации с большой вероятностью находятся на границе одного из классов, сгруппированы вместе и, при применении последовательно $\mu_1, \dots, \mu_i$ модификаций, незначительно отражаются на уменьшении невязки $r(\mu_j)$ последующих модификаций $\mu_{i+1}, \dots, \mu_{n_c}$. Учитывая, что они в содержательном смысле относятся к росту одного класса (тела), то их приоритет может даже увеличиваться за счёт увеличения фактора, относящегося к приоритету по окрестности.

Специально для обеспечения регионального моделирования был реализован алгоритм, который подразумевает, что за одну итерацию применяется сразу множество модификаций. Каждая итерация разбивается на 2 этапа:

1. Из множества допустимых модификаций собираются n_c модификаций с максимальным приоритетом; устанавливается порядок $w_i < w_j$ над модификациями в соответствии с текущим приоритетом: $w_i < w_j \Leftrightarrow P^{*(L)}(w_i) > P^{*(L)}(w_j)$.
2. Собранные модификации по порядку применяются, учитывая ограничения. То есть, для каждого индекса i , перечисляющего номера собранных модификаций, w_i применяется, если $P^{*(L+w_1+\dots+w_{i-1})}(w_i) > 0$.

Таким способом осуществляется намного большее количество модификаций за итерацию, и это сильно ускоряет процесс построения модели на вычислительной машине.

Надо учитывать, что такая схема оказывает значительное влияние и на характер эволюции классовой модели, что интересно, положительное с точки зрения стабильности методики. Так, если применяемые модификации и

правда расположены компактно в одной или нескольких группах, то на практике эти группы применяемых модификаций обычно соответствуют переходу элементов из одного конкретного класса в другой – или, говоря по-другому, граница между классами как бы перемещается целиком или частично. В противном случае, если применяется только одна модификация за итерацию, то класс может «расти» в виде «отростка» шириной в один элемент, а такие структуры (геометрия), как правило, нехарактерны для моделируемых объектов в ходе регионального моделирования. С другой стороны, если целью моделирования является построение подобной структуры (например, подводящие каналы плутонических интрузий), то использование групповых операций может препятствовать моделированию таких структур.

Программная реализация групповых операций основана на понятии очереди модификаций. На каждой итерации на первом этапе допустимые модификации по одной помещаются в min-heap очередь с приоритетом с фиксированным ограничением сверху на кол-во модификаций n_c ; при превышении ограничения на длину очереди модификации с наименьшим приоритетом удаляются из неё. На втором этапе все модификации из очереди проверяются в порядке убывания значения приоритета и применяются (в случае положительного значения приоритета).

Обозначим элемент очереди $\vartheta \in \mathbb{W} \times \mathbb{R}$, определяющий модификацию и её предрассчитанный приоритет. Определим порядок на $\mathbb{W} \times \mathbb{R}$: для элементов очереди $\vartheta = (\mu, t)$ и $\vartheta' = (\mu', t')$ имеем $\vartheta < \vartheta' \Leftrightarrow t < t'$. Очередь модификаций типа min-heap($\mathbb{W} \times \mathbb{R}$) обозначим Q . Операция push(Q, ϑ) помещает элемент в очередь, операция pop(Q) удаляет минимальный (согласно определённому выше порядку) элемент из очереди, size(Q) – размер очереди (количество элементов очереди).

Первый этап итерации состоит в сборе списка модификаций $\mathcal{L}$ по алгоритму 1.

Алгоритм 1. Сбор модификаций.

Вход: множество доступных модификаций $\mathcal{W}_L \subset \mathbb{W}$; ограничение на размер очереди n_c .

Выход: список $\mathcal{L}$ наилучших допустимых модификаций.

Переменные: очередь с приоритетом Q : $\text{max-heap}(\mathbb{W} \times \mathbb{R}) = \{\}$.

1. Для $\forall \mu \in \mathcal{W}_L$:
 - 1.1 $t := P(\mu)$;
 - 1.2 $\vartheta := (\mu, t)$;
 - 1.3 если $t < 0$ или ($\text{size}(Q) == n_c$ и $\vartheta < \text{top}(Q)$), перейти к следующей модификации μ ;
 - 1.4 $\text{push}(Q, \vartheta)$;
 - 1.5 Если $\text{size}(Q) > n_c$: $\text{pop}(Q)$;
2. $\mathcal{L} :=$ список размера $\text{size}(Q)$;
3. Пока Q не пустая:
 - 3.1 $(\mu, t) := \text{pop}(Q)$;
 - 3.2 $\mathcal{L}[\text{size}(Q)+1] := \mu$.

По существу, алгоритм 1 собирает модификации в очередь, следя, чтобы она не переполнилась, после чего перекладывает их в список в обратном порядке, так как из очереди первыми выходят наименее приоритетные модификации. Асимптотическую сложность алгоритма можно неформально оценить как принадлежащую классу $O(n_c \log(n_c) + |\mathcal{W}_L|)$. С одной стороны, учитывая, что n_c – фиксированный параметр, асимптотическая сложность – $O(|\mathcal{W}_L|)$. С другой стороны, n_c – параметр с произвольным значением, и поэтому может выбираться исходя из величины $|\mathcal{W}_L|$, поэтому следует использовать именно указанную оценку.

На втором этапе итерации модификации из списка $\mathcal{L}$ условно применяются по алгоритму 2. После применения первой модификации, то есть после первого же изменения классовой модели, результирующая модель среды и, следовательно, приоритет модификаций также меняется, и поэтому на шаге 1.2 алгоритма 2 их надо рассчитывать повторно.

Алгоритм 2. Применение списка модификаций.

Вход: список модификаций $\mathcal{L}$ размера k ; классовая модель L_0 ; плотностная модель D .

Выход: классовая модель L_k .

Переменные: кандидаты μ_i .

1. Для $i = 1..k$:
 - 1.1 $\mu_i := \mathcal{L}[i]; (v_i, w_i) = \mu_i$
 - 1.2 если $L(v_i) = L(w_i)$, перейти к следующему i
 - 1.3 $t_i := P|_{L=L_{i-1}}(\mu_i)$
 - 1.4 если $t > 0$, то $L_i := L_{i-1} + \mu_i$, иначе $L_i := L_{i-1}$;

С одной стороны, повторный расчёт приоритетов в алгоритме 2, казалось бы, должен замедлять выполнение алгоритма. Так как приоритет необходимо пересчитывать после каждого применения модификации, если большая часть модификаций из списка применяется, приоритет необходимо рассчитывать для каждой модификации индивидуально (не пакетно), и, значит, невозможно (или трудно) их рассчитывать параллельно. Однако ускорение достигается тогда, когда выполняются следующие условия: 1) общее количество допустимых модификаций $|\mathcal{W}_L^*|$ намного меньше количества доступных модификаций $|\mathcal{W}_L|$; 2) применение одной модификации слабо влияет на приоритет достаточно большого количества других модификаций в очереди. Выполнение первого условия обеспечивает то, что этап 2 намного менее затратный вычислительно по сравнению с этапом 1. Выполнение второго условия увеличивает вероятность того, что за одну итерацию будет применено сразу несколько модификаций, в идеале – ровно n_c , но обычно это число меньше в несколько раз. Количество применённых модификаций за итерацию падает, когда норма поля индивидуальных ячеек становится примерно одного порядка с нормой текущей невязки, или невязку не удаётся существенно уменьшить с помощью изменения классовой модели вообще; с нашей точки зрения, оба эти условия следует рассматривать как условие для остановки процесса оптимизации.

При использовании слишком маленького или слишком большого ограничения на длину очереди уменьшается производительность. В предельном случае при $n_c = 1$ алгоритм сводится к обычному алгоритму без очереди – регулируемой направленной перекристаллизации. При слишком большой длине очереди ($n_c \sim |\mathcal{W}^*|$) страдает параллелизм. Число Амдала – характеристика параллельных алгоритмов, равная максимально возможному ускорению исполнения алгоритма при работе на p процессорах (ядер) по сравнению с последовательным выполнением: если α – доля вычислений, которая может быть выполнена только последовательно, а доля $(1 - \alpha)$ – идеально распараллеливается, то максимальное ускорение $S_p = (\alpha + (1 - \alpha)/p)^{-1}$.¹ Учитывая, что на втором этапе выполняется примерно тот же объём работы, что и на первом, но однопоточно, и предполагая идеальную распараллеливаемость первого шага, при $p \rightarrow \infty$, имеем $\alpha = 0.5$ и $S_p = 2$, что очень мало. С другой стороны, высокий параллелизм (большая величина S_p) вовсе не эквивалентен высокой производительности, и именно при больших значениях n_c может находиться пик скорости построения аппроксимирующих моделей. Также при выборе длины очереди надо исходить из того, что эта величина может качественно влиять на получаемое решение. В итоге, заранее вывести оптимальную или рациональную формулу для выбора n_c достаточно сложно.

3.6 Параллельная реализация

Как уже упоминалось ранее, наиболее ресурсоёмкая часть программной реализации монтажного метода связана с вычислением полей. С целью ускорения программного исполнения процедур монтажного метода была разработана реализация вычисления поля на графических ускорителях (GPGPU).

Вычисление полей осуществляется для вычисления эффекта на невязку от потенциального применения модификации μ .

Процесс вычисления поля производится в рамках двух типов операций:

1. Вычисление степени уменьшения текущей невязки в случае применения модификации и её приоритета – на первом этапе;
2. Пересчёта текущей невязки при применении допустимой модификации – на втором этапе.

Теоретически, на втором этапе можно использовать рассчитанные значения поля $u_L(\mu)$ из первого этапа, либо рассчитывать их параллельно. Напомним, что на втором этапе вычисляются значения $P(\mu)$, которые зависят от уменьшения невязки $r(\mu)$, которое, в свою очередь, зависит от значений поля $u_L(\mu)$. Сохранение вычисленных значений $u_L(\mu)$ в min-heap очереди Q представляет потенциал для оптимизации вычислений за счёт отсутствия повторных вычислений на втором этапе, однако на практике внедрению такой оптимизации препятствует ограничение на размер оперативной памяти. При длине очереди модификаций n_c и количестве точек сетки поля N требуемый объём памяти только на хранение промежуточных значений единичного аномального поля элементов $4n_cN$ байт, не включая проблем, связанных с выделением памяти под метаданные и фрагментацией памяти. На практике, при построении больших региональных моделей размер сетки и ячейки модели определяется не требованиями к задаче, а имеющимися в наличии ресурсами – чем больше памяти у вычислительного узла, тем больше выбирается сетка. В связи с этим было принято решение отказаться от этой оптимизации.

Другой способ оптимизации второго этапа – конвейерная обработка полей с распараллеливанием по данным. В этом случае в оперативной памяти поддерживаются не n_c , а только $n_p < n_c$ моделей аномальных полей элементов. Это множество полей рассчитывается параллельно с итерированием по списку модификаций: если текущая рассматриваемая модификация – μ_i , то в параллельном процессе расчёта полей может обрабатываться (или находиться в очереди рассчитанных) поля для модификаций $\mu_{i+1}, \mu_{i+2}, \dots, \mu_{i+n_p}$. Такой схеме оптимизации препятствует тот

факт, что в списке модификаций $\mathcal{L}$ имеется большое количество модификаций, имеющих одинаковый эффект, т.е. для $\mu_i = (v_i, w_i)$ и $\mu_j = (v_j, w_j)$ имеем с большой вероятностью большое множество таких пар μ_i и μ_j , что $v_i = v_j$, причём $D(w_i) = D(w_j)$ при $w_i \neq w_j$ из чего следует $P(\mu_i) = P(\mu_j)$, то есть такие модификации расположены рядом в списке модификаций. При проходе списка модификаций по алгоритму 2 такие модификации будут отвергнуты согласно пункту 1.2 этого алгоритма, и результат расчёта не будет использован. На практике, от $2/3$ до $3/4$ модификаций отвергаются ввиду этой проблемы, что значительно уменьшает эффективность этой оптимизации.

В итоге, параллелизация алгоритма эффективно доступна только на первом этапе расчёта. При этом можно определить параллелизм по данным: в рамках алгоритма 1 цикл на шаге 1 распараллеливается по доступным модификациям $\mu \in \mathcal{W}_L$. Основной объём вычислений, как уже указывалось выше, относится к вычислению влияния модификации на текущую $r_L(\mu)$, так как оно зависит от $u(v)$, остальное – вычисление приоритета на основе $r_L(\mu)$, а также управление min-heap очередью $\mathcal{Q}$, практически не занимает вычислительных ресурсов. Напротив, так как программный объект, соответствующей min-heap очереди $\mathcal{Q}$, – один, операции с очередью потребуют синхронизации, что при высокой степени параллелизма может отрицательно сказаться на производительности. Поэтому основное внимание было сосредоточено на параллелизации вычисления $r_L(\mu)$.

Расчёт $r_L(\mu)$, с одной из точек зрения, является векторной операцией. Пусть для $\mu = (v, w)$ известна $\bar{u}(v)$. Тогда расчёт $r_L(\mu)$ состоит из:

1. отображения (map) списка индексов $j=0 \dots n_c$ (номеров) точек сетки поля в векторную (поэлементную) разницу $d(\mu) = r - (u'(v) - \bar{u}(v))$;
2. свёртки списка (fold, или reduce) для вектора $d(\mu)$, результат которой равен норме невязки после применения модификации $|d(\mu)|$;

3. скалярное вычитание нормы текущей невязки из нормы невязки после применения модификации μ для получения искомого результата: $r_L(\mu) = |d(\mu)| - |r_L|$.

Расчёт значения $\bar{u}(v)$, в свою очередь, является более простым вариантом сочетания векторных операций отображения и свёртки:

1. отображения (map) списка индексов $j=0 \dots n_c$ (номеров) точек сетки поля в значения $u'(v)$ согласно формуле для расчёта аномального поля элемента;
2. свёртка списка (вектора) $u'(v)$ для получения среднего значения $\bar{u}(v)$.

Операции отображения и свёртки хорошо подходят для векторизации на современных процессорах (все процессоры с поддержкой архитектуры 64-битные x86 поддерживают подходящий набор инструкций для векторизации SSE2), а также на графических ускорителях (GPGPU), для которых, в связи с распространённостью графических ускорителей от Nvidia, было решено в дальнейшем использовать ускорение на GPGPU на основе технологии CUDA.

Расчёт значений $\bar{u}(v)$ часто повторяется, при этом хранение результатов занимает 4 байта на один элемент модели, в связи с чем значения $\bar{u}(v)$ после однократного расчёта сохраняются в оперативной памяти для повторного использования.

Необходимо заметить, что сами по себе операции вычисления $r_L(\mu)$ и $\bar{u}(v)$ слишком малы, чтобы распараллелить конкретно их, так как накладные расходы превышают потенциально возможные выгоды от параллелизма. Так, например, параллельные вычисления значения $\bar{u}(v)$ для одного элемента модели, реализованные на технологии CUDA с помощью библиотеки Thrift, позволяли загрузить графический ускоритель на $\approx 2\%$ по временной утилизации, а всё остальное время занимали накладные расходы на старт и завершение вычислений. В связи с этим распараллеливание было выполнено

по множеству элементов v или модификаций μ , где каждый элемент или модификация обрабатываются последовательно (на центральном процессоре) или параллельно в рамках одного блока (на графическом ускорителе).

Выбранная схема параллельного исполнения проиллюстрирована на рисунке 3.1. Поток исполнения T_0 допустимых модификаций – поток исполнения, исполняющий функции определения и передачи списка доступных модификаций $\mathcal{W}(L)$ в синхронную FIFO очередь $Q^{(in)}$. Множество потоков исполнения T_i для вычисления приоритета в свою очередь получают модификации $\mu = \{v, w\}$ из $Q^{(in)}$ и рассчитывают приоритет $P(\mu)$ и, как часть расчёта приоритета, – невязки $r_L(\mu)$ и параметр $\bar{u}(v)$ редукции аномального поля $\bar{u}(v)$ элемента v , помещают в синхронную FIFO очередь $Q^{(out)}$. Они ответственны за исполнение шагов 1.1 и 1.2 алгоритма 1. Поток исполнения очереди модификаций, в свою очередь, исполняет функции сбора элементов $\vartheta = (\mu, P(\mu))$ и размещение их в очереди Q , исполняя шаги 1.3-1.5 алгоритма 1.

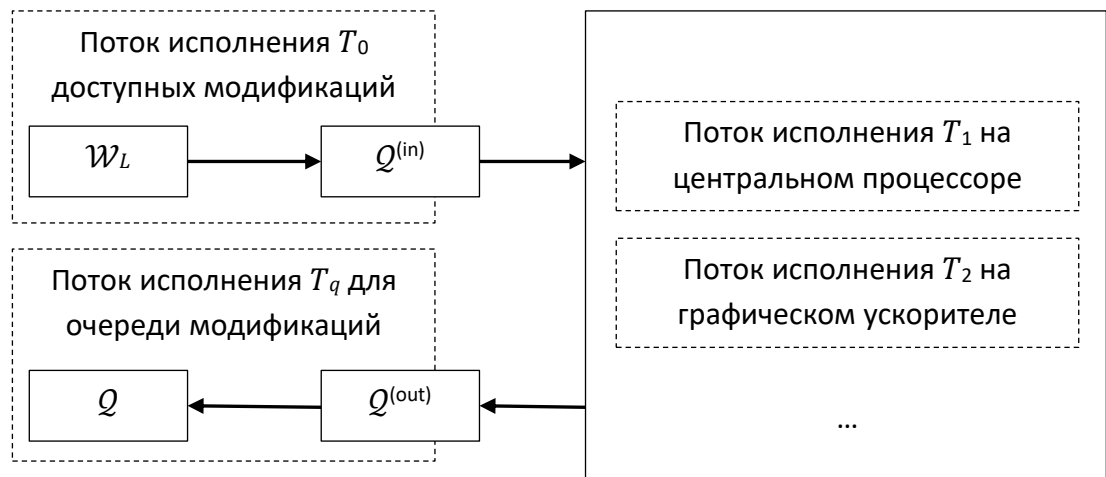


Рис 3.1 Схема параллельной обработки в программной реализации монтажного метода.

Таким образом, при распараллеливании алгоритма 1, шаг 1 алгоритма 1, ответственный за заполнение очереди Q , полностью заменяется на вызов процедуры, параметризующей и запускающей соответствующие потоки исполнения, и осуществляющей ожидание окончания работы потока

исполнения T_q очереди модификаций. С программной точки зрения, множество $\mathcal{W}_L$ разбивается в произвольном порядке на блоки (chunks), которые и помещаются в очередь $Q^{(\text{in})}$, и соответствующие блоки помещаются в $Q^{(\text{out})}$, таким образом осуществляется параллельная обработка блоками, представляющими собой подмножества доступных модификаций $\mathcal{W}(L)$. Дополнительным плюсом такой схемы является возможность производить вычисления параллельно и на центральном процессоре, и на графическом ускорителе, а также потенциально возможность поддержки распределённых вычислений.

3.7 Вычисления на графических ускорителях

Различия в программных реализациях вычисления $\bar{u}(v)$ и $r_L(\mu)$ на центральном процессоре и графическом ускорителе приводят к различающимся результатам работы монтажного метода. В ходе апробации разработанной программной реализации монтажного метода было выявлено, что предметная (геофизическая и геологическая) оценка результирующих решений обратных задач с использованием вычислений на центральном процессоре и графическом ускорителе отличается незначительно – в пределах допустимых погрешностей, а качественные отличия – отсутствуют. Однако отличия могут быть значительными для моделей различных размеров, и поэтому было проведено исследование различий между этими двумя реализациями.

Для исследования различий были составлены две синтетические сеточные модели поля: $\Omega_1 = \{(0,1,2, \dots, n-1) \times (0,1,2, \dots, n-1)\}$ и $\Omega_0 = \{(0,0), (0,0), \dots\}$, с шагом в километрах. То есть, Ω_1 – сетка размера n^2 (для различных n) с шагом по латерали 1 км, а Ω_0 – список точек с координатами $(0,0)$. Сетка Ω_1 выбрана для моделирования ординарной ситуации, то есть ожидается, что в рамках монтажного метода реальные сетки будут иметь похожий вид. Сетка Ω_0 выбрана для демонстрации вырожденной ситуации, и

ождается, что ошибки (погрешности) вычислений, связанных с операцией редукции, проявятся на ней наиболее выражено.

Для вычисления значений в точках этих сеток была составлена одномерная вертикальная сетка точечных источников аномального гравитационного поля с k точками с координатами $(0,0,z_j)$, $z_j = 0.25 \dots 25.25$ км.

Были произведены расчёты с использованием реализаций на центральном процессоре (CPU), графическом ускорителе (CUDA), а также были разработаны «эталонные» реализации «Precise» с использованием вычислений с повышенной точностью (то есть, с использованием double precision floating point и метода суммирования Кахана). Была рассчитана разница между Precise и отдельными реализациями (на центральном процессоре и графическом ускорителе), после чего результаты поделены на Precise, и полученный результат взят за относительную ошибку. Таким образом, для реализации X относительная погрешность вычисления величины m :

$$\kappa^{X,m}(z_i) = |m^{(X)} - m^{(Precise)}| / |m^{(Precise)}|. \quad (3.13)$$

Исследования по точности были проведены отдельно для среднего значения аномального поля элементарного источника $\bar{u}(v)$ и для разницы норм невязкок $r_L(\mu)$.

Рассмотрим вариант с гравитационным полем. Для $n = 100$ погрешность вычислений равномерная для всех z_j и программных реализаций, типичный вид представлен на рисунке 3.2. Повышенная ошибка для реализации CUDA обоснована тем, что при суммировании используется 32-битные аккумулялирующие переменные, в то время как для реализации CPU – 64-битные.

При анализе погрешности можно ориентироваться на точность ε 32-битных чисел с плавающей точкой – расстояние между 1.0 и следующим представимым числом в 32-битном представлении. Точность вычисления

центральном процессоре, в целом, находится в рамках 32-битной точности (то есть, в основном – под прямой $y(x) = \varepsilon$).

Результаты расчёта для размера сетки Ω_0 с $n = 100$ представлены на рисунке 3.2 (64-битная аккумулирующая переменная для реализации на центральном процессоре) и 3.3 (32-битная). На них продемонстрировано, что для центрального процессора при использовании 32-битной аккумулирующей переменной происходит накопление ошибки вычислений; напротив, при использовании 64-битной аккумулирующей переменной ошибка – на уровне вычислений с 32-битной точностью. Учитывая, что суммирование не является медленной операцией с 64-битной точностью, следует использовать именно 64-битную точность.

С другой стороны, при расчётах на графических ускорителях 32-битной точности аккумулирующей переменной достаточно – она всё ещё выше, чем для 64-битной точности, но в пределах нормы. Это связано, в первую очередь, с особенностью реализации вычислений на графических ускорителях: вычисление, связанное с одним элементом модели, организовано в рамках одного CUDA блока, в котором содержится 128 аккумулирующих переменных в статической CUDA памяти. В связи с этим накапливаемая ошибка также меньше в 128 раз, что связано с тем, что накапливаемая ошибка имеет один знак.

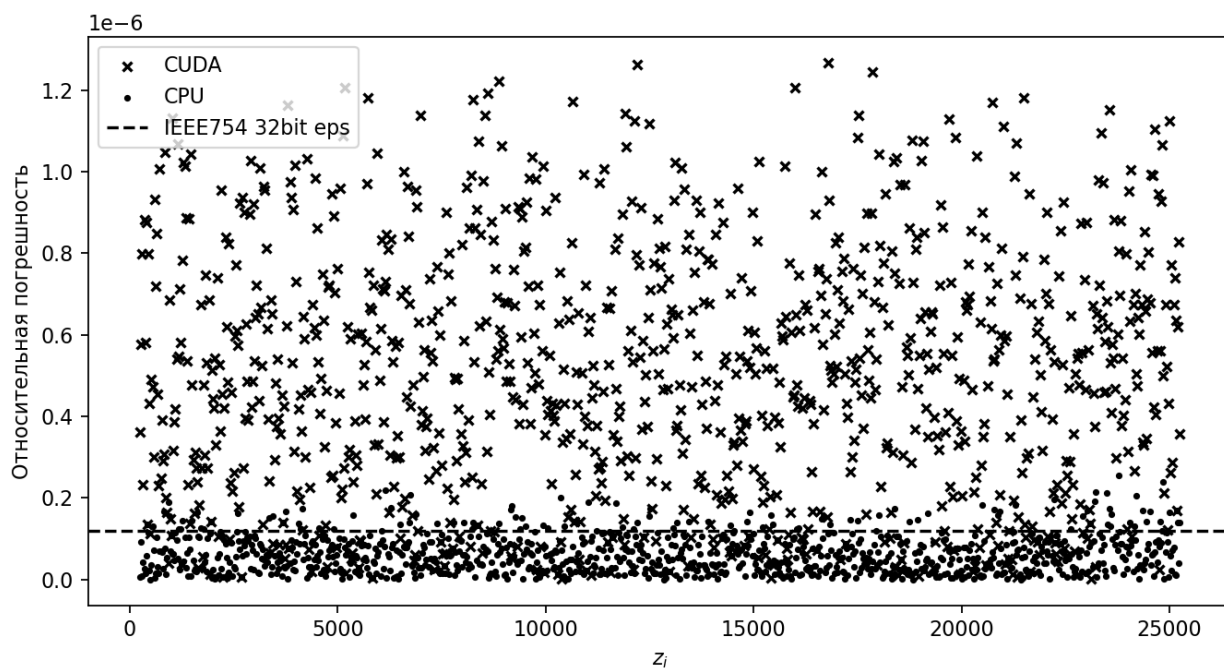


Рисунок 3.2. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_0 с $n = 100$.

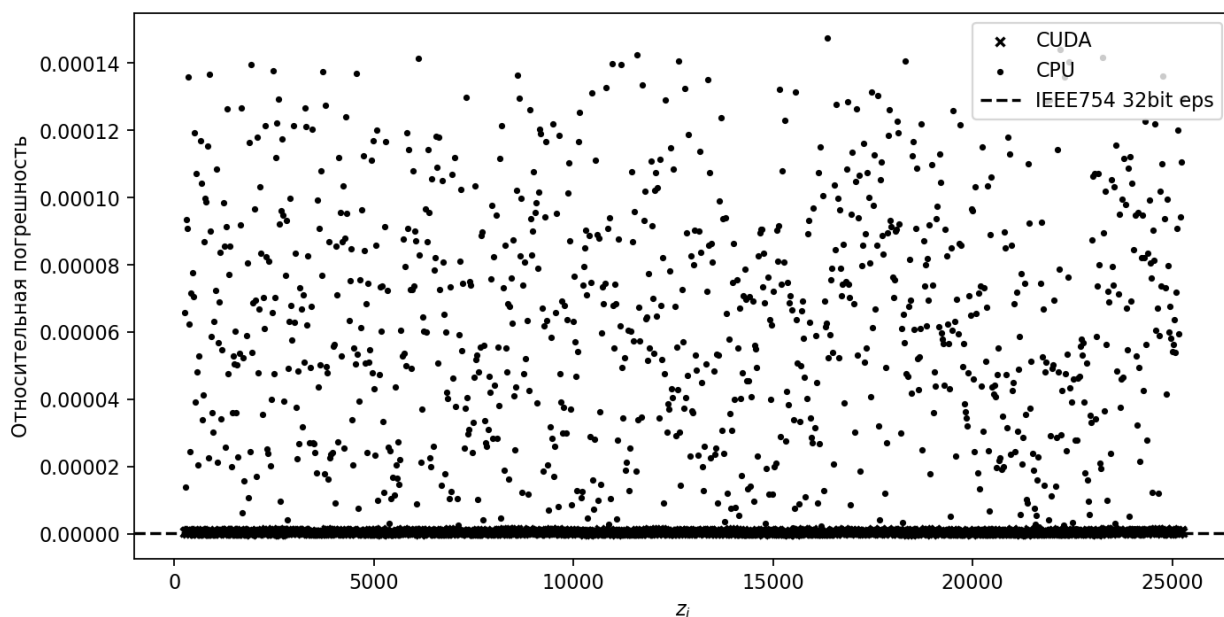


Рисунок 3.3. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_0 с $n = 100$ при использовании 32-битной аккумулирующей переменной для реализации на центральном процессоре.

В случае же использования невырожденной сетки Ω_1 с $n = 100$ ошибка значительно меньше (рисунки 3.4 и 3.5). Так, для 32-битной аккумулирующей переменной при вычислениях на центральном процессоре ошибка больше, чем на графическом ускорителе, лишь в 38 раз.

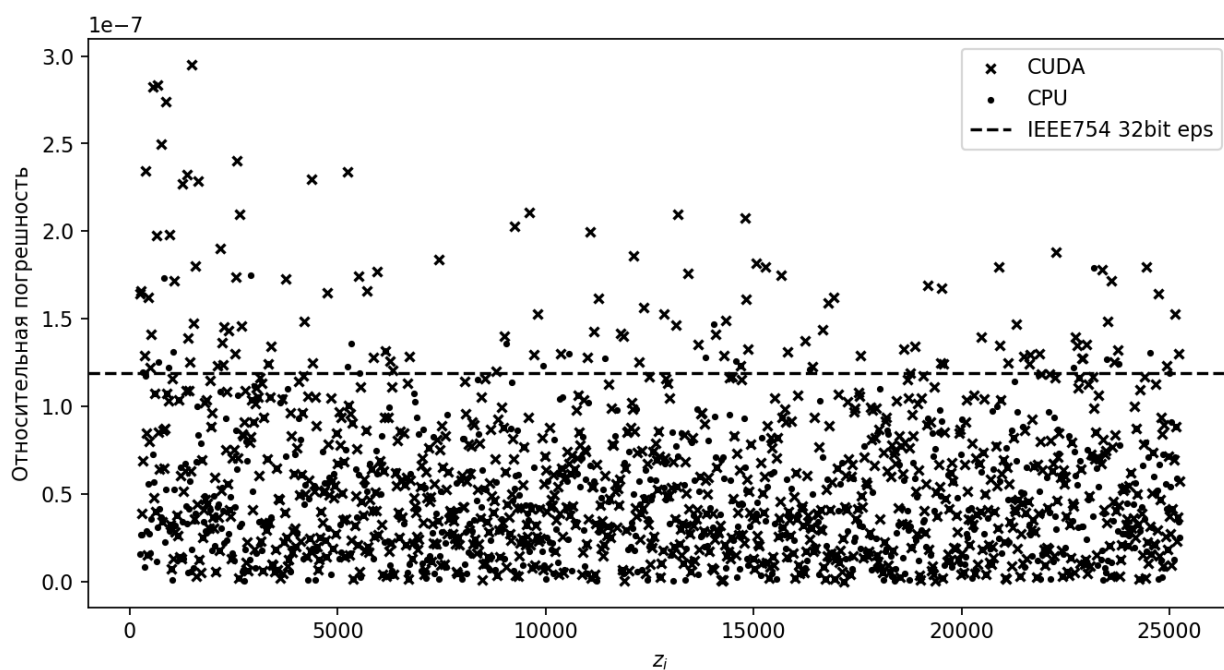


Рисунок 3.4. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_1 с $n = 100$.

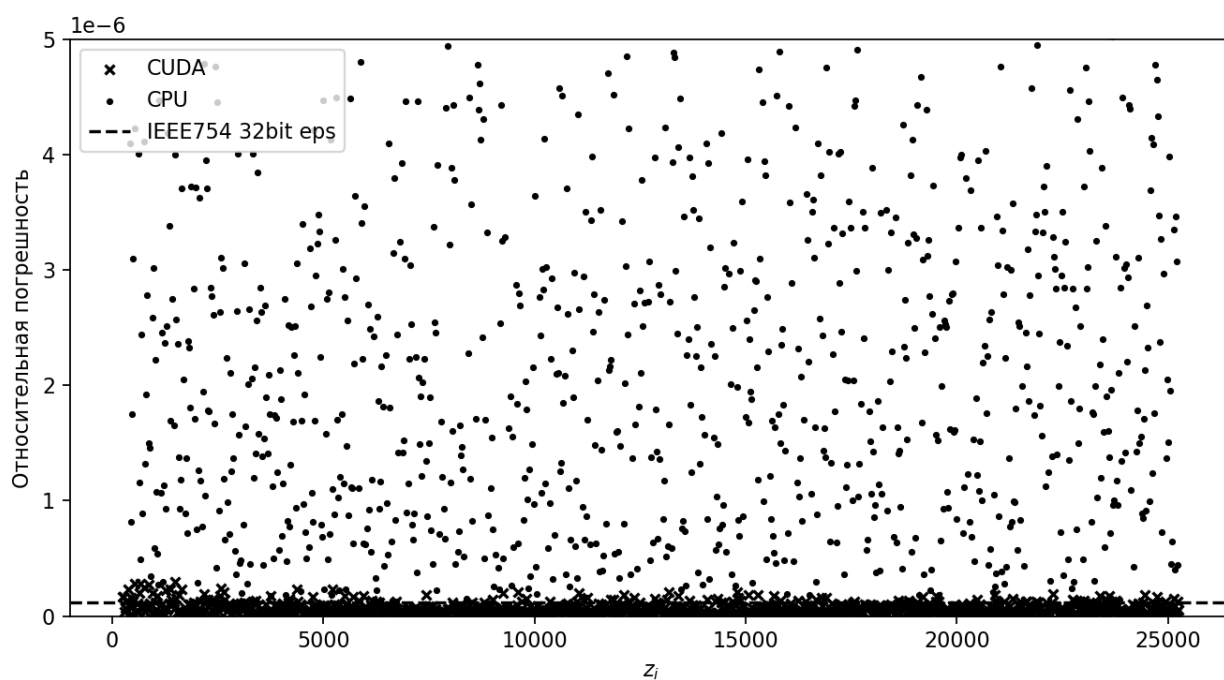


Рисунок 3.5. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_1 с $n = 100$ при использовании 32-битной аккумулирующей переменной для реализации на центральном процессоре.

Практический предел размеров сетки $n = 4000$, за которым длительность вычислительного процесса эффективно запрещает работу с монтажным методом. На рисунке 3.6 представлены относительные ошибки

для сетки Ω_0 с $n = 4000$. Погрешность для программной реализации вычислений на графическом ускорителе больше в 150 раз по сравнению с $n = 100$ и достигают 0.175% (среднее – 0.08%, средняя с учётом знака – 0.01%). Это можно интерпретировать так, что после изменения метки класса у 1000 (или 10000) элементов текущая невязка будет содержать ненулевое среднее значение от одного усреднённого (в некотором смысле) элемента. Влияние на результирующую текущую невязку связано в значительной мере с корреляцией между полями модифицируемых элементов и невязкой, а, значит, сильно зависит от текущей невязки и классовой модели L , ввиду чего его трудно проанализировать; оценку в виде значения в 1/1000 или 1/10000 можно взять как верхний предел накопленной погрешности в текущей невязке от ошибки вычисления $\bar{u}(v)$ для данной сеточной модели.

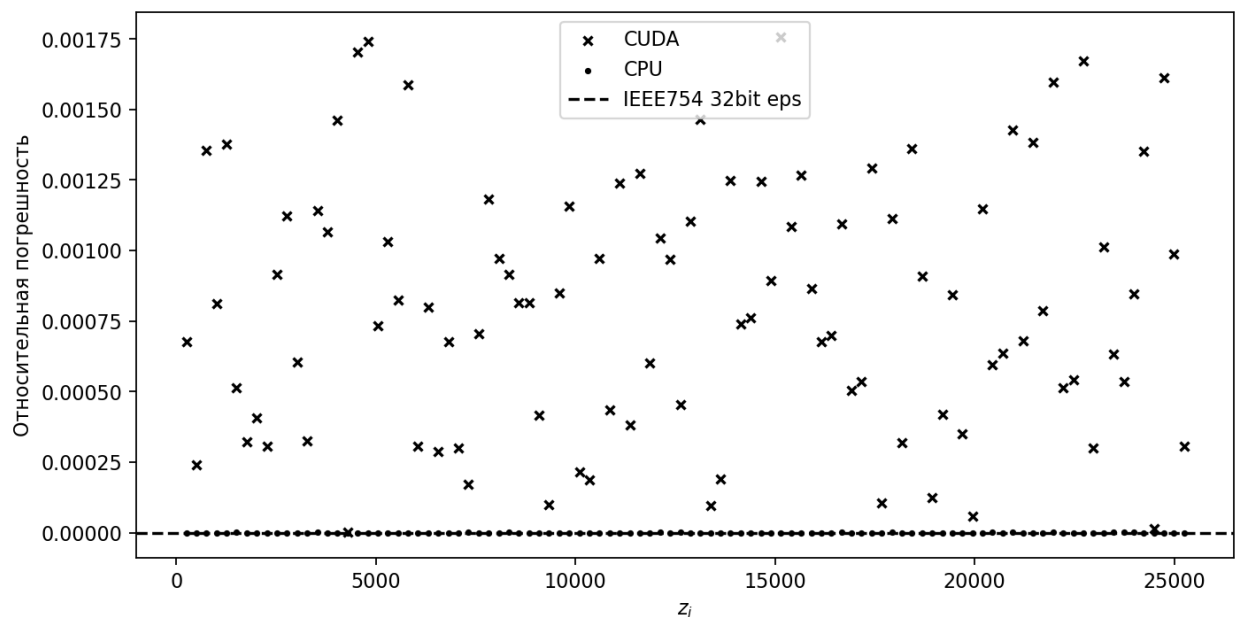


Рисунок 3.6. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_0 с $n = 4000$.

Расчёт относительных ошибок (рисунки 3.7-3.8) для сетки Ω_1 с $n = 4000$ показывает наличие паттерна в погрешности расчётов. Также становится очевидным, что использование 32-х битной аккумуляторной переменной не практично ввиду большой погрешности.

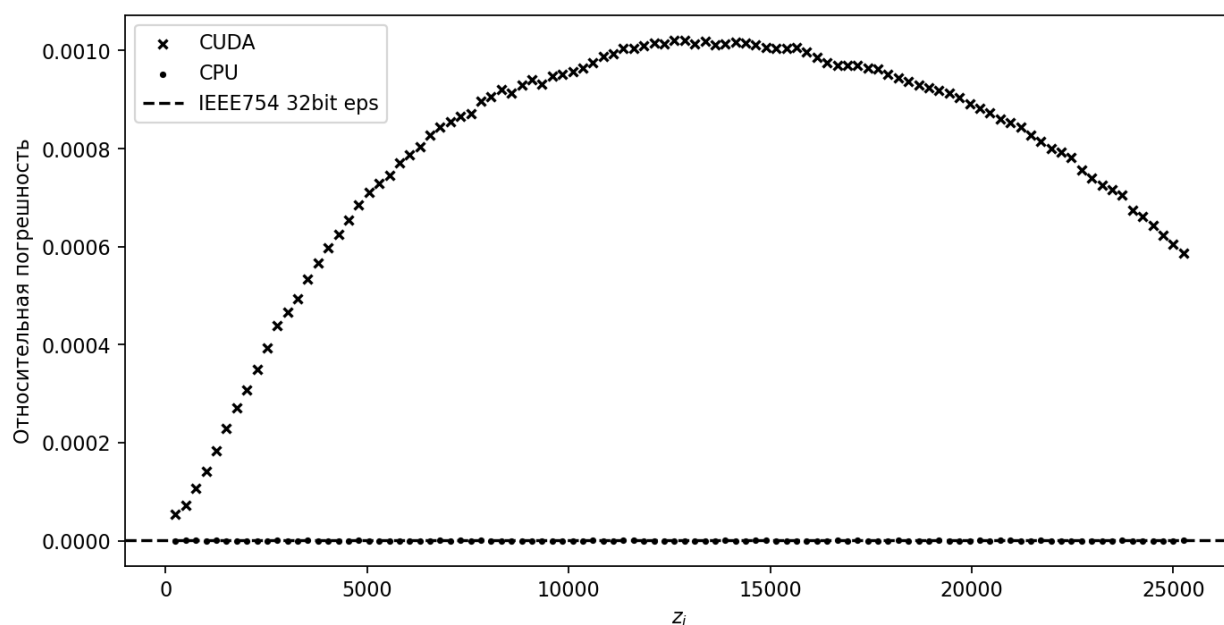


Рисунок 3.7. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_1 с $n = 4000$.

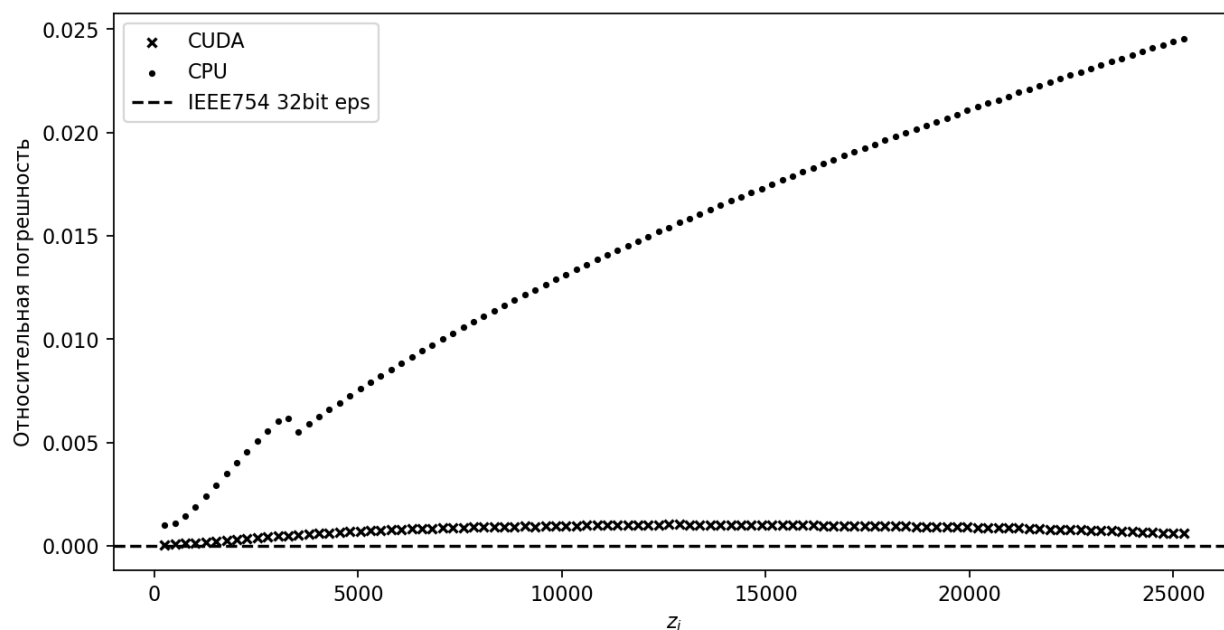


Рисунок 3.8. Относительная ошибка $\bar{u}(v)$ для сетки Ω_1 с $n = 4000$ при использовании 32-битной аккумулярующей переменной для реализации на центральном процессоре.

Уменьшения нормы текущей невязки $r_L(\mu)$ вычисляется согласно выражению (3.2): $r_L(\mu) = |r_L - u(v)| - |r_L|$. При этом значения r_L сгенерированы синтетически как значения равномерно распределённой случайной величины от -30 до 30 мГал.

Оценка относительных погрешностей вычисления величины $m = r_L(\mu)$ для реализации X согласно (3.13) имеет важную особенность – при переходе $r_L^{(Precise)}(\mu)$ через ноль возникает сингулярность, которая выглядит на графике как большая величина относительной погрешности. Далее везде, где требуется, будет представлен дополнительный график «абсолютной погрешности» $r_L^{(Precise)}(\mu)$ (без взятия модуля), на котором виден переход через ноль.

Особенность расчётов невязки заключается в том, что норма невязки намного больше нормы аномального поля элемента, $|r_L| \gg |u(v)|$, что подразумевает, что все операции в (3.2) производятся с двойной точностью, кроме вычисления $u(v)$, которое производится с одинарной (32-битной) точностью. Следовательно, в отличие от вычислений $\bar{u}(v)$ основной эффект в погрешность вкладывает либо вычисление $u(v)$, когда $|r_L|\varepsilon < |u(v)|$, либо $r_L - u(v)$, когда $|r_L|\varepsilon > |u(v)|$.

На рисунке 3.9 представлены относительные погрешности вычисления $r_L(\mu)$ для сетки Ω_1 с $n = 100$. Погрешности для элементов на всех глубинах, кроме пика (на данной выборке текущей невязки $|r_L|$) примере – около 6000 м), укладываются в предел до 10^{-5} . Причина появления пика заключена в том, что знаменатель в формуле относительной ошибки переходит через ноль, в то время как числитель содержит ошибку. Так, на рисунке 10 представлена усреднённая относительная погрешность на 10 выборках, где в наличии несколько пиков, отвечающие различным позициям элемента – источника аномального поля.

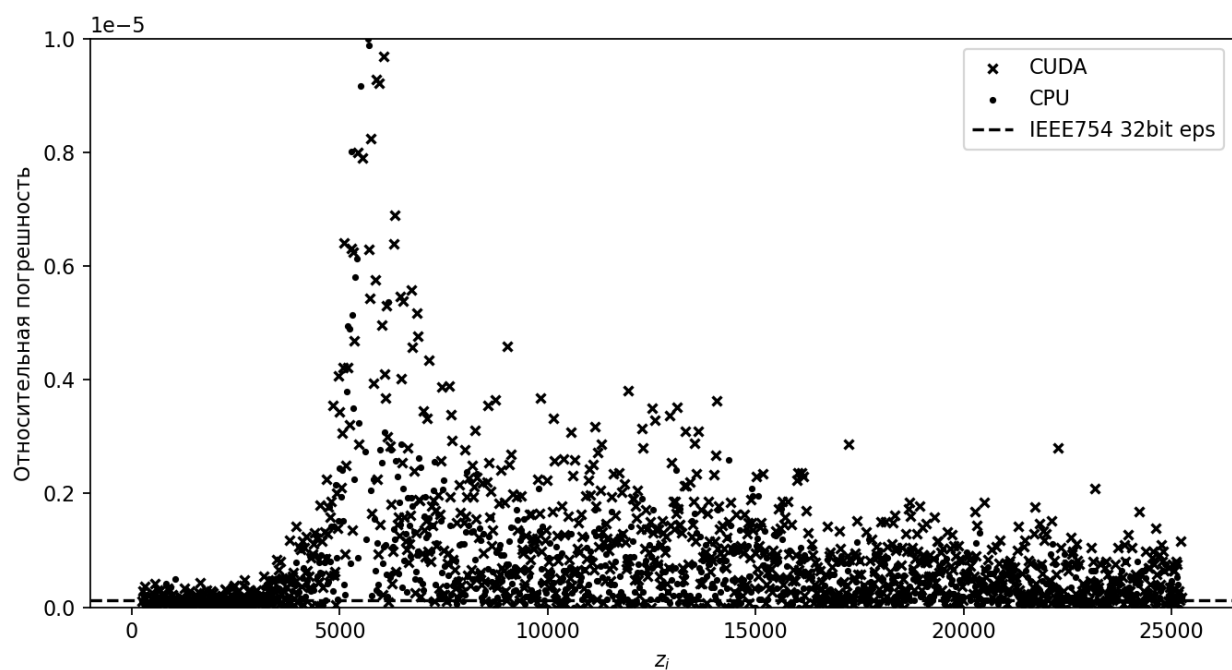


Рисунок 3.9. Относительная ошибка расчёта $r_L(\mu)$ для сетки Ω_1 с $n = 100$.

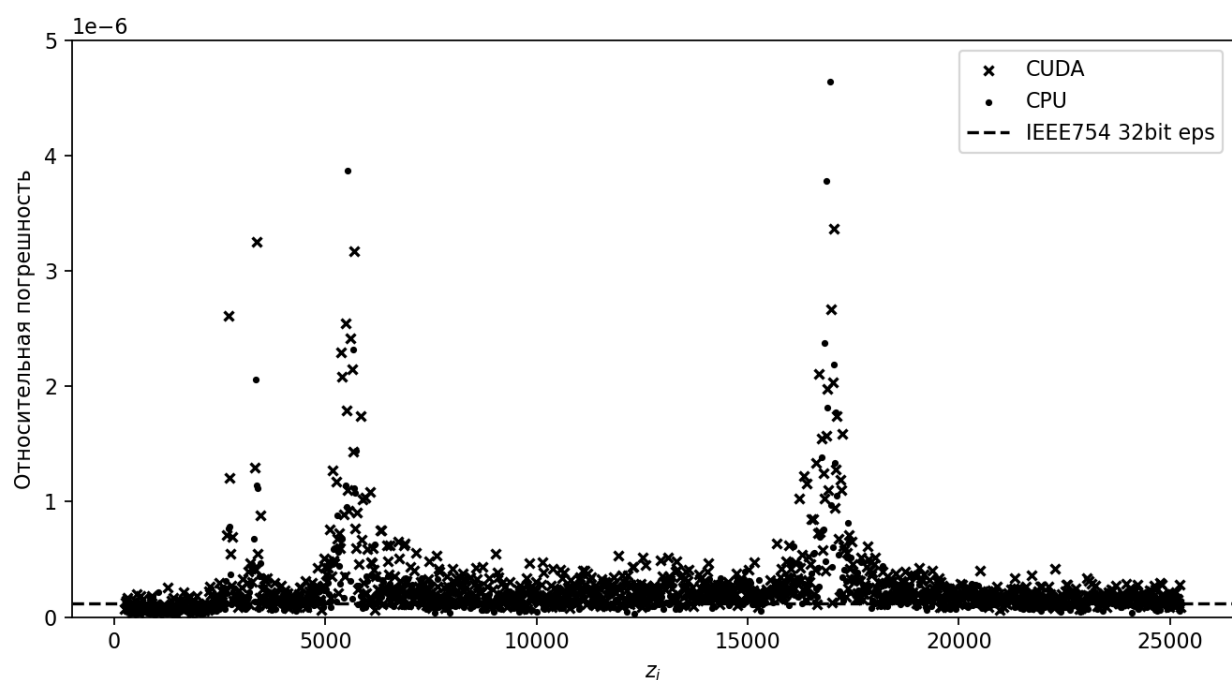


Рисунок 3.10. Усреднённая относительная ошибка расчёта $r_L(\mu)$ для сетки Ω_1 с $n = 100$.

Расчёт $r_L^{(Precise)}(\mu)$ (рис. 10) демонстрирует переход функции $r_L(\mu)$ через 0 (рис. 3.11), а расчёт абсолютной погрешности $\left| r_L^{(X)}(\mu) - r_L^{(Precise)}(\mu) \right|$ (рис. 3.12) показывает отсутствие больших погрешностей в районе пика,

находящегося на рисунке 3.8 в районе отметки в 6000 м. При расчёте значения $r_L^{(Precise)}(\mu)$ и абсолютные погрешности были умножены на глубину z_i элемента с целью нормировки.

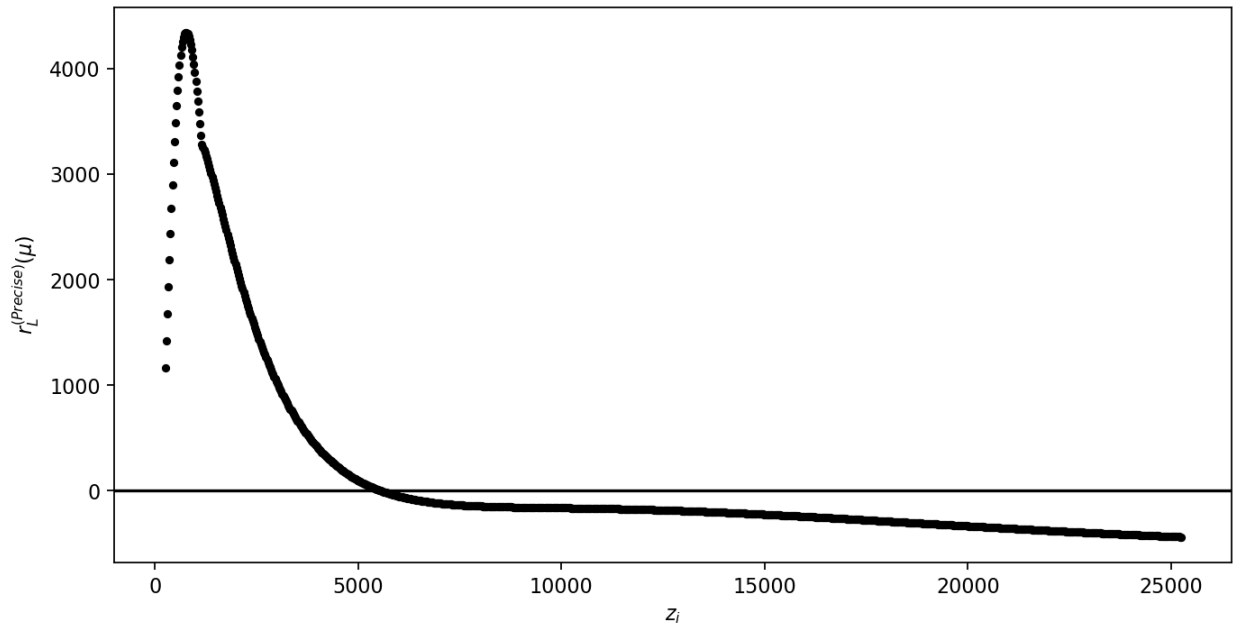


Рисунок 3.11. $r_L^{(Precise)}(\mu)$, умноженная на z_i , для сетки Ω_1 с $n = 100$.

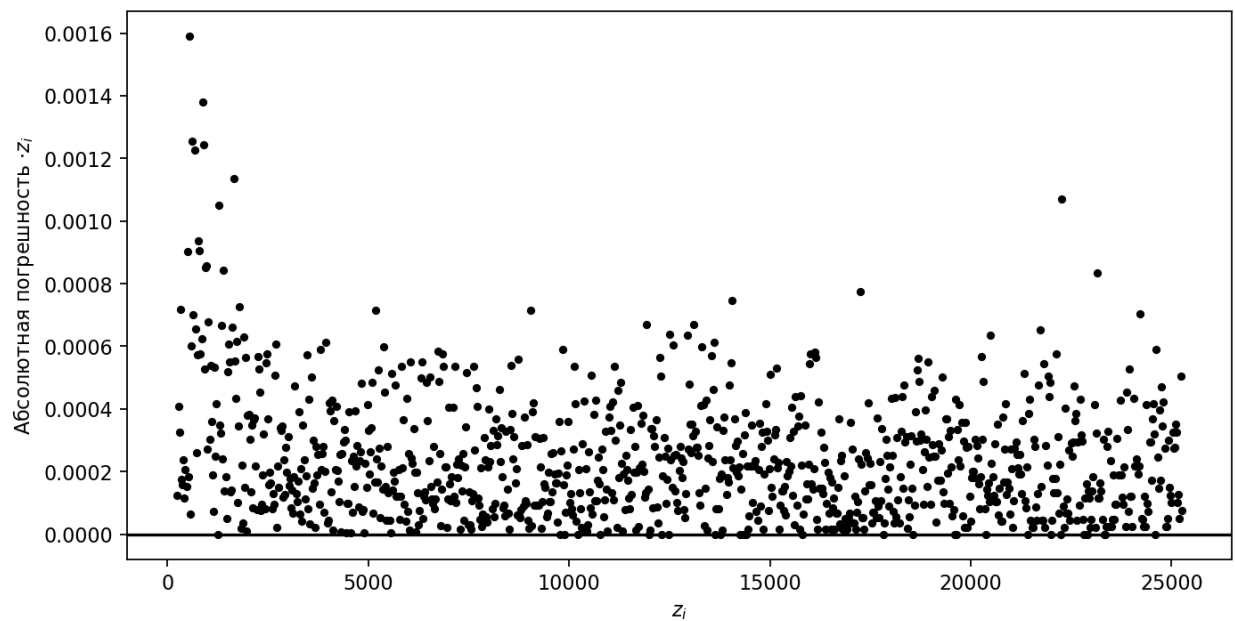


Рисунок 3.12. Абсолютные погрешности расчёта $r_L(\mu)$, умноженные на z_i , для сетки Ω_1 с $n = 100$.

Расчёт относительной погрешности для большой сетки Ω_1 с $n = 4000$ (рисунок 3.13) позволяет сделать вывод, что величина погрешности не

превышает 0.05% и позволяет использовать данную реализацию монтажного метода

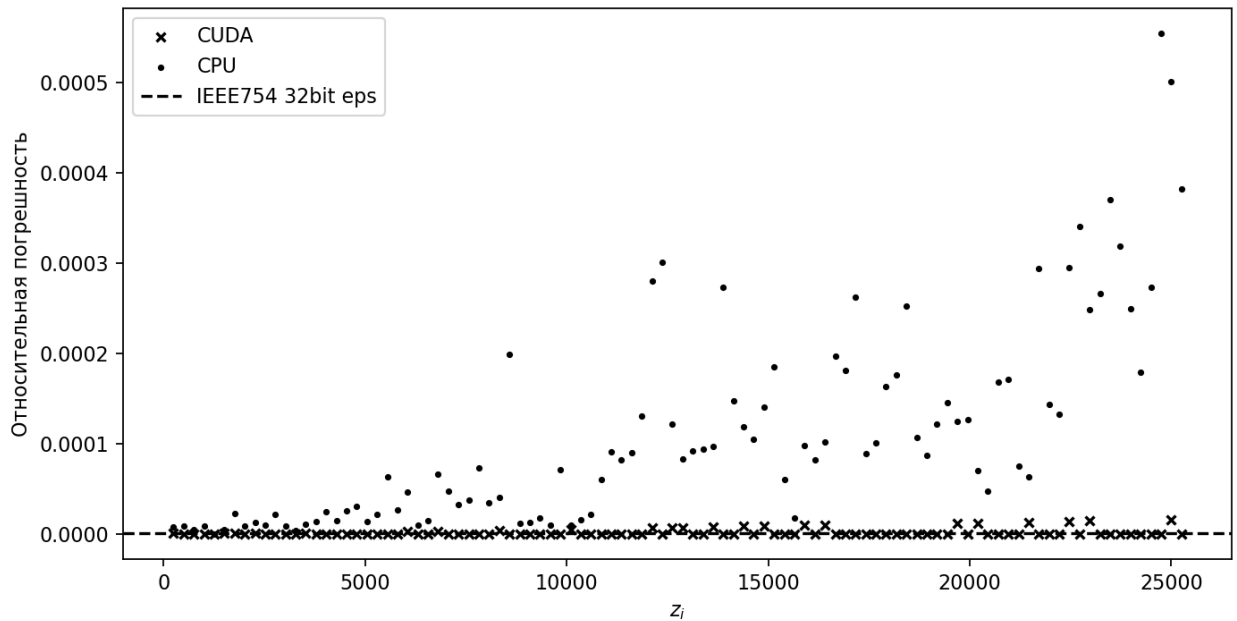


Рисунок 3.13. Относительная ошибка расчёта $r_L(\mu)$ для сетки Ω_1 с $n = 4000$.

Для моделирования магнитных аномальных полей, приведённых к полюсу, используется следующая формула:

$$u'(v) = u'(z_i, r) = 10^{-1} \left(3 \left(\frac{z}{r} \right)^2 - 1 \right) \left(\frac{1}{r} \right)^3$$

где r – длина радиус-вектора от центра аномалообразующего элемента до точки сетки с координатами (x, y) , $r = |x^2 + y^2 + z_i^2|$. Несмотря на то, что в случае непрерывных функций $\bar{u}'(v) = 0$ (понимая под знаком черты первый начальный момент), ввиду того, что значения рассчитываются на сетке, то при усреднении по точкам сетки $\bar{u}'(v) \neq 0$, поэтому требуется расчёт $u(v) = u'(v) - \bar{u}'(v)$. Следовательно, отдельно необходимо рассчитывать и средние значения $\bar{u}'(v)$, и использовать их при расчётах $r_L(\mu)$.

Расчёт значений $\bar{u}(v)$ для магнитного поля не имеет смысла для вырожденной сетки Ω_0 ввиду того, что граничные характеристики потери точности можно оценить соответствующим образом через потери точности

для «обычной» сетки Ω_1 и полученные ранее точностные характеристики для Ω_0 для гравитационного поля. На рисунке 3.14 представлена относительная ошибка расчёта среднего значения поля для сетки Ω_1 с $n = 100$ и на рисунке 13 – для сетки Ω_1 с $n = 4000$. В целом, можно сделать те же выводы о применимости CUDA и вычислений с одинарной (32-битной) точностью для вычислений постоянной составляющей магнитного аномального поля. При этом по рисунку 3.15 видно, что при расчётах на сетке размером 4000 на 4000 точек монтажный метод находится близко к пределу по точности.

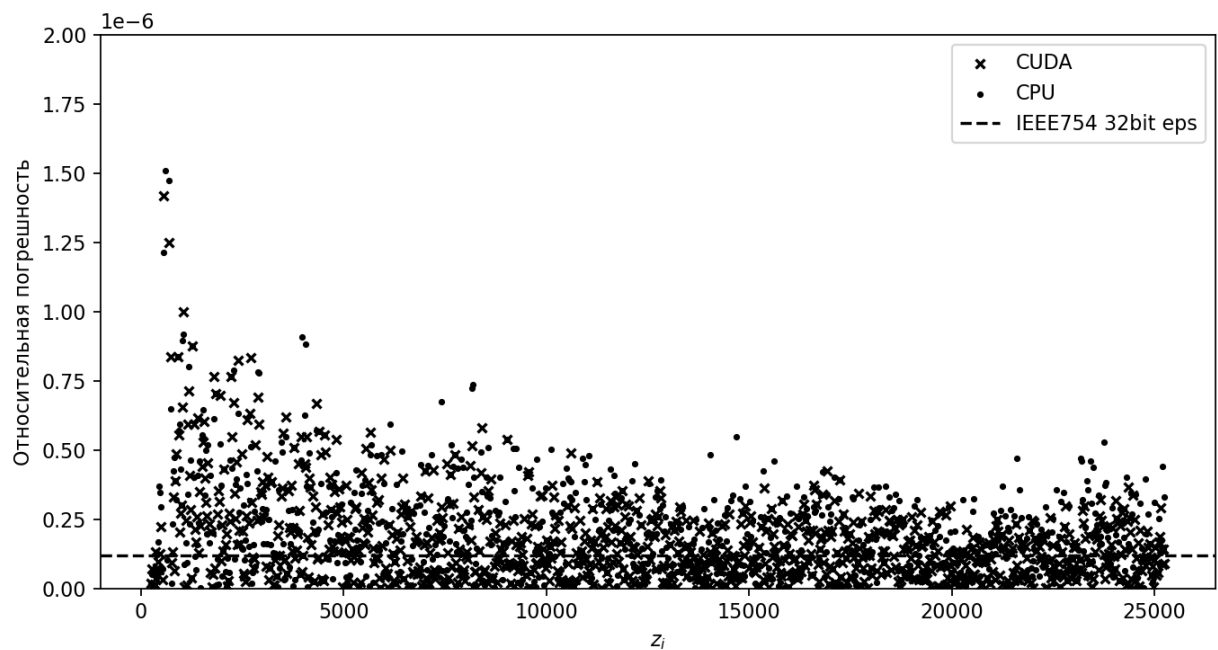


Рисунок 3.14. Относительная ошибка расчёта $\bar{u}(v)$ магнитного поля для сетки Ω_1 с $n = 100$.

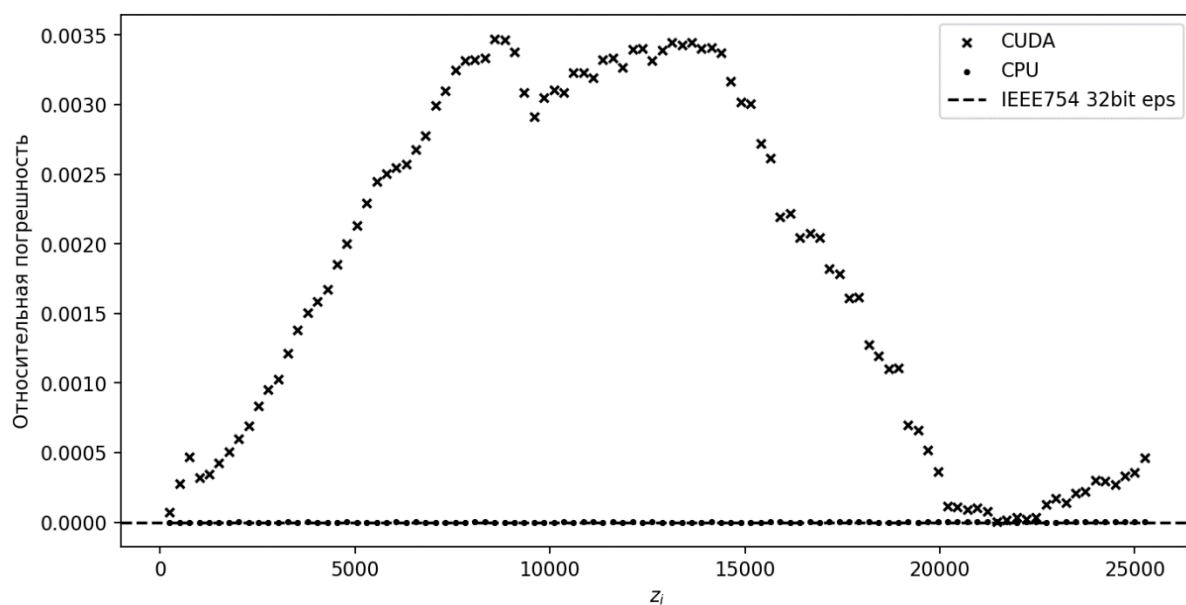


Рисунок 3.15. Относительная ошибка расчёта $\bar{u}(v)$ магнитного поля для сетки Ω_1 с $n = 4000$.

На рисунках 3.16-3.18 изображены погрешности расчёта $r_L(\mu)$ для магнитных аномальных полей для сетки Ω_1 с $n = 100$, при этом имеется картина, полностью аналогичная расчёту для поля силы тяжести: для $r_L(\mu)$ имеется переходы через 0 (рис. 3.18), где относительная погрешность уходит в бесконечность (рис. 3.16), при этом абсолютная погрешность меняется не сильно (рис. 3.17).

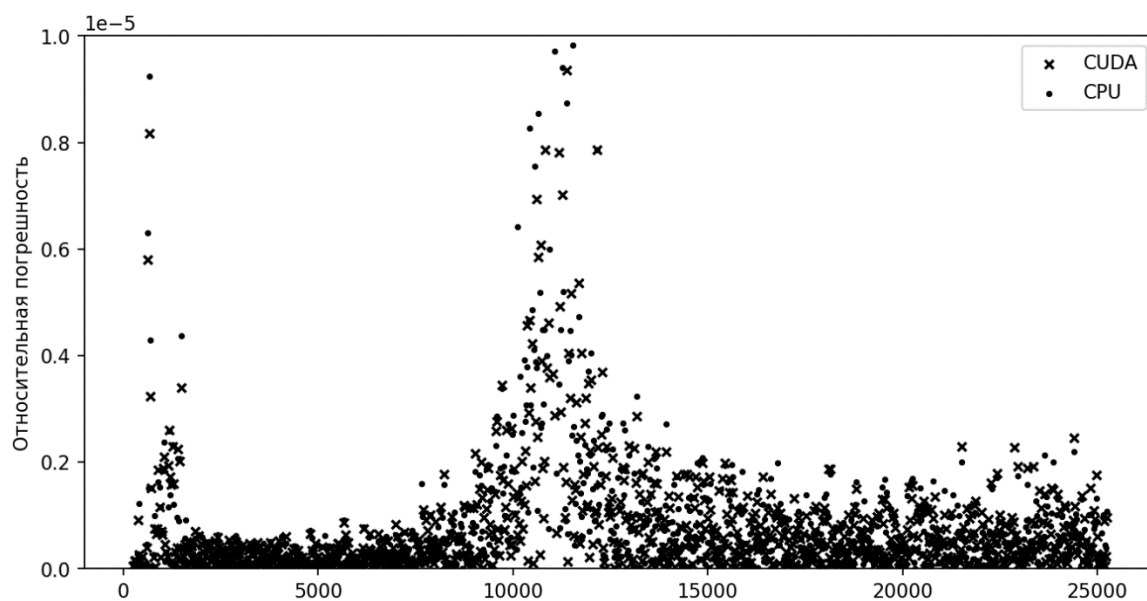


Рисунок 3.16. Относительная ошибка расчёта $r_L(\mu)$ магнитного поля для сетки Ω_1 с $n = 100$.

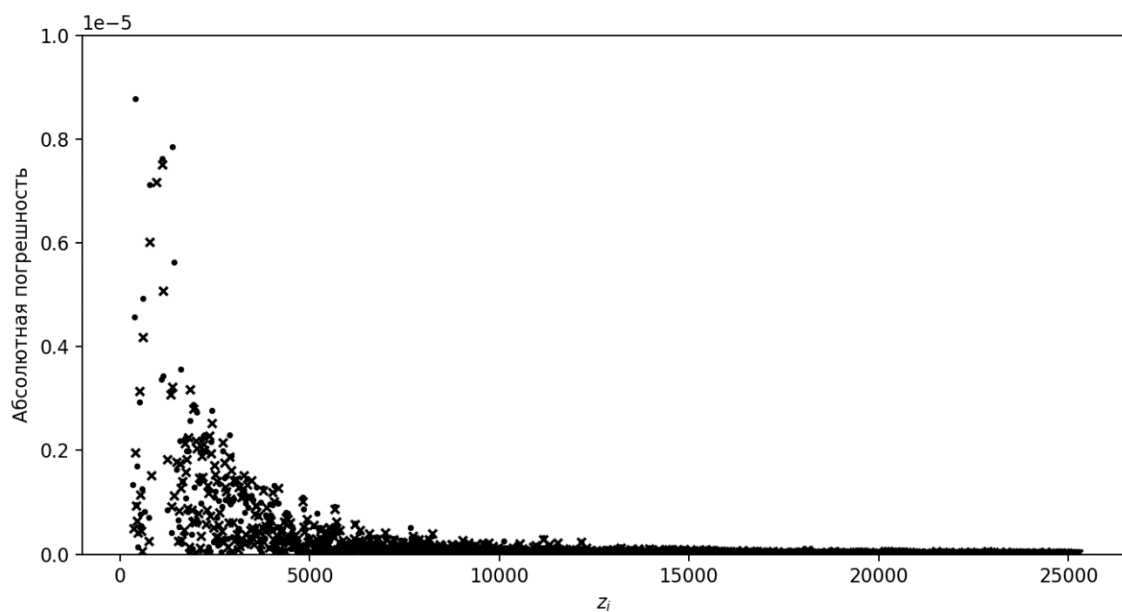


Рисунок 3.17. Абсолютная ошибка расчёта $r_L(\mu)$ магнитного поля для сетки Ω_1 с $n = 100$.

При расчёте $r_L(\mu)$ для магнитного поля для большой сетки Ω_1 с $n = 4000$ результаты также аналогичны случаю с расчётами для гравитационного поля: хотя ошибка и увеличивается, она всё ещё на уровне 0.2% и имеет случайный характер.

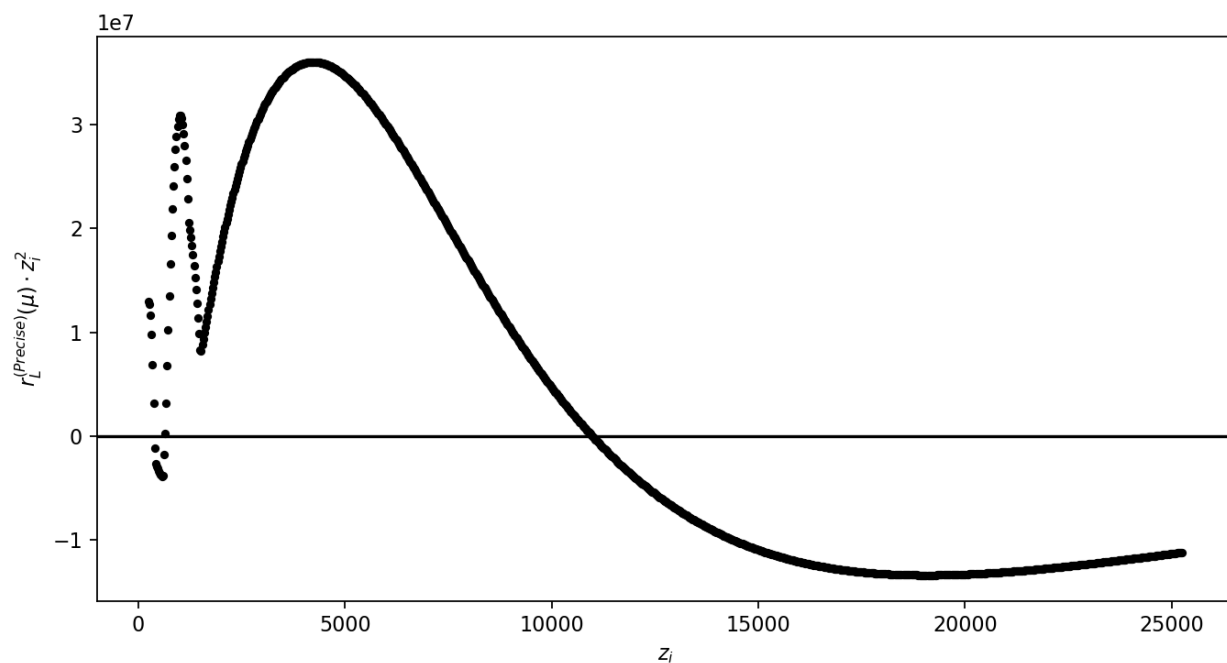


Рисунок 3.18. Значения расчёта $r_L(\mu)z_t^2$ магнитного поля для сетки Ω_1 с $n = 100$, переходы через 0.

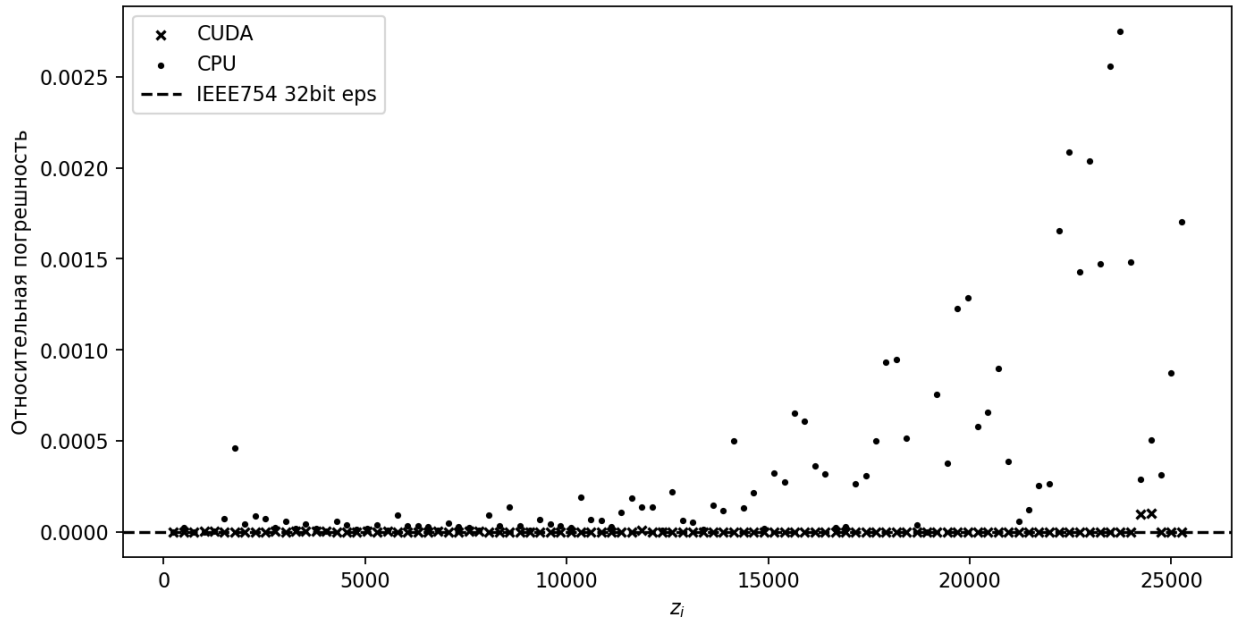


Рисунок 3.19. Значения расчёта $r_L(\mu)$ магнитного поля для сетки Ω_1 с $n = 4000$.

В связи с потенциально большими накладными расходами при вычислении невязок $r_L(\mu)$ и параметра $\bar{u}(v)$ на графических ускорителях вычисления реализованы в пакетном формате: поток исполнения для вычислений на графическом ускорителе собирает до kl модификаций из $Q^{(\text{in})}$, или до момента опустошения списка необработанных доступных модификаций. Здесь k – максимальное количество вычислительных блоков CUDA (CUDA block), доступных для исполнения одновременно, а параметр l – целое число, определяющее баланс между относительным уменьшением накладных расходов и латентностью операции пакетной обработки: чем l больше, тем больше латентность, но тем меньше относительная доля накладных расходов на запуск операции по сравнению с длительностью самой операции.

Схема вычислений представлена на рисунке 3.20. Смысл схемы в том, что модификации μ_i из пакета статически и равномерно распределяются между блоками, а блоки вычисляют значения $r_L(\mu)$ последовательно.

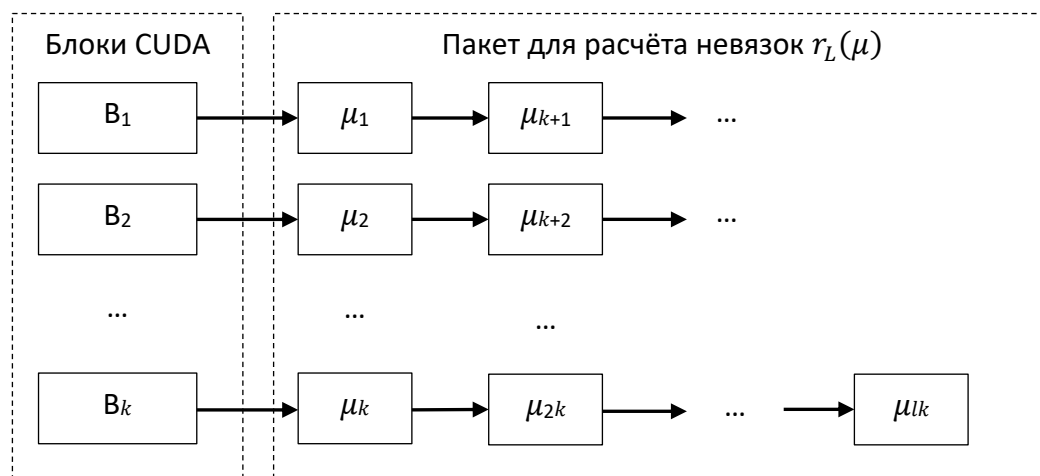


Рис. 3.20. Схема реализации вычислений на графическом ускорителе.

Плюсом такой схемы является отсутствие синхронизации между блоками. Минусы:

1. Существует потолок для максимального размера сетки поля. Так, обычно параметрами операционной системы определено максимальное время вычислений для одного пакета – обычно 5 секунд, после чего программа принудительно завершается в аварийном режиме. Это соответствует общему числу точек сетки поля в примерно 2^{16} при $l = 1$, что, в свою очередь, совпадает с практическим потолком моделирования данной программной реализацией монтажного метода.
2. Скорость обработки всего пакета равно скорости самого медленного блока. Эта проблема может быть актуальна для новых архитектур CUDA, согласно которым возможна вытесняющая многопоточность. На более старых архитектурах (до 7.0) блоки обрабатывают задания с примерно одинаковой скоростью, различия обосновываются лишь разделяемой шиной до общей памяти графического ускорителя. При этом имея в виду то, что операции отображения и свёртки списка объединены в одну, и поэтому программная реализация не хранит вычисленные значения $u(v)$ во временном списке, этот фактор практически не влияет на скорость вычислений.

В рамках одного блока вычисления производятся в 128 потоках, поэтому суммирование (в рамках операции свёртки) производится в 128 потоках исполнения CUDA, что позволяет повысить точность вычислений $\bar{u}(v)$ при использовании 32-битной аккумулирующей переменной, что было продемонстрировано на рисунках 3.2 и 3.3.

Оценка производительности была проведена для расчёта $r_L(\mu)$ для поля силы тяжести. Производительность операций вычисления $\bar{u}(v)$ примерно в 2.5 раза больше для всех указанных графических ускорителей. Для оценки были взяты несколько графических ускорителей потребительского сегмента разных эпох: Nvidia GeForce 750 Ti, GeForce 1650 GT, GeForce 3060 GTX. Заметим, что, хоть первый вариант ускорителя достаточно старый, он всё ещё может быть актуален в геофизической практике в задачах на геопотенциальные поля.

Результаты представлены на рисунках 3.21-3.23: для графического ускорителя Nvidia GeForce 750 Ti (рисунок 3.21), GeForce 1650 GT (рисунок 3.22), и GeForce 3060 GTX (рисунок 3.23). Единицы – млрд. точек сетки поля в секунду; «nan» – отсутствующее значение ввиду ограничений операционной системы. Для каждого случая удалось добиться максимальной утилизации (не менее 95%) при оптимальных размерах пакетов.

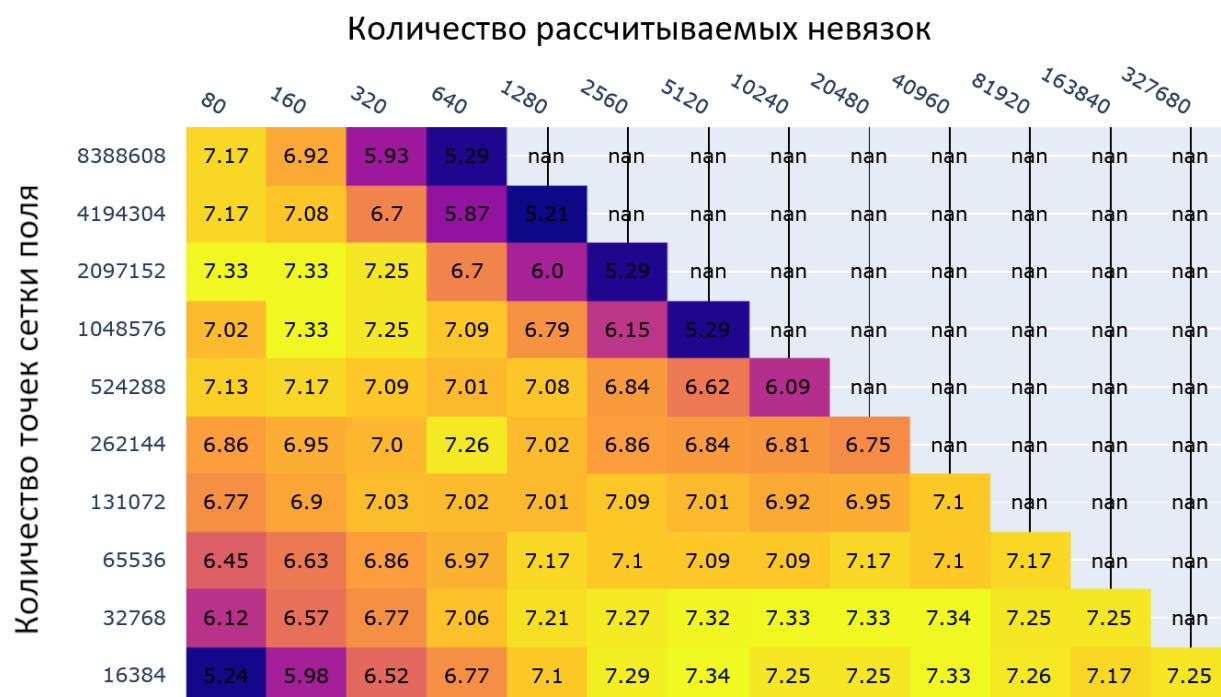


Рис. 3.21. Производительность графического ускорителя GeForce 750 Ti.



Рис. 3.22. Производительность графического ускорителя GeForce 1650 GT.

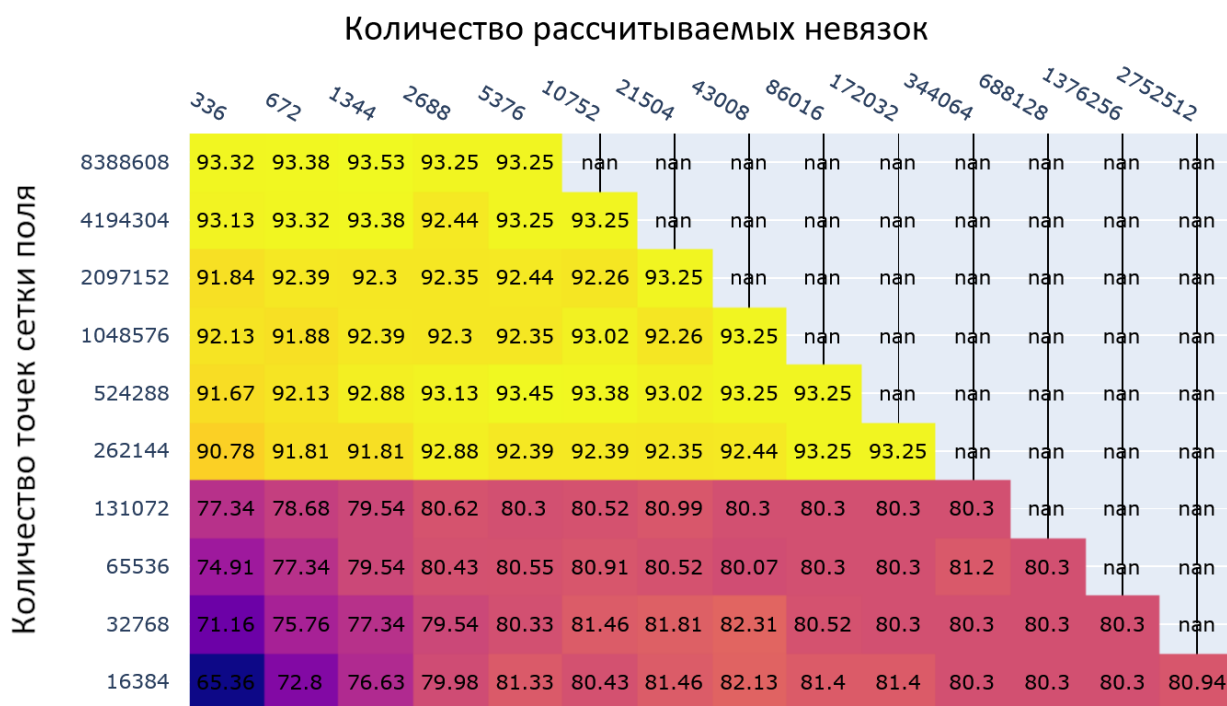


Рис. 3.23. Производительность графического ускорителя GeForce 3060 GTX.

Можно заметить, что для всех случаев достаточно «хорошую» оценку оптимального размера пакета можно получить из выражения $n_u l = 2^{16}$, или $l = 2^{16} n_u^{-1}$, где n_u – количество точек в сетке аномального поля. При этом латентность вычисления одной пакетной операции составляет около 300 мс.

Также надо учитывать другую практическую составляющую оптимального размера пакета: возможность совершать другую работу, не нагружающую вычислительные ресурсы рабочего компьютера. Как уже указывалось ранее, для вычислений достаточно персонального компьютера или рабочей станции, и, как следствие, на практике вычисления часто производятся на рабочем компьютере специалиста-геофизика или даже геолога. В связи с большой длительностью вычислений желательно не выключать специалиста из работы и предоставить возможность выполнять другие рабочие операции, не нагружающие вычислительные ресурсы. Для ускорителей более старых архитектур без вытесняющей многозадачности латентность пакетной операции вычисления $r_L(\mu)$ и $\bar{u}(v)$ тесно связана с латентностью всех операций, связанных с графическим вводом-выводом. Для комфортной работы латентность в 300 мс может оказаться слишком

большой, поэтому, возможно, оптимальные значения для размера пакетов следует брать меньше.

3.8 Стабилизация с помощью механизма приоритетов

В этом параграфе продемонстрирована особенность механизма приоритетов, связанная со стабилизацией алгоритма монтажного метода., на модельных примерах. Рассматривается простая модель – эллипсоид равномерной плотности в гомогенной вмещающей среде, и продуцируемое им аномальное гравитационное поле. Было синтезировано две сеточные конечноэлементные модели, аппроксимирующие соответствующие эллипсоиды – один большой эллипсоид и один малый внутри большого (рис. 3.24а). От эллипсоидов было рассчитано поле решением прямой задачи по формуле (1.1), и в различных вариантах модельных примеров либо малый эллипсоид будет использоваться как начальное приближение, а большой – как целевая модель (обозначим такую модельную задачу как « $\epsilon \rightarrow E$ »), либо большой – начальное приближение, а малый – целевая модель (« $E \rightarrow \epsilon$ »). В идеале, получаемое решение должно быть похоже на целевую модель.

С помощью разработанной методики на основе монтажного метода была решена обратная задача (рис. 3.24-3.30) несколько раз в семи вариантах с различными параметрами приоритета и ограничениями:

1. $\epsilon \rightarrow E$; приоритет по глубине $\beta = 0.25$.
2. $\epsilon \rightarrow E$; $\beta = 0.5$.
3. $\epsilon \rightarrow E$; $\beta = 1$.
4. $\epsilon \rightarrow E$; $\beta = 1$; добавлено дополнительное ограничение – тело не должно быть ниже большого эллипсоида.
5. $E \rightarrow \epsilon$; $\beta = 0.5$, приоритет окрестности $\alpha = 0.05$.
6. $E \rightarrow \epsilon$; $\beta = 0.5$, $\alpha = 0.25$.
7. $E \rightarrow \epsilon$; $\beta = 0.5$, $\alpha = 0.05$, радиус окрестности $L_\eta = 2$ (во всех остальных вариантах $L_\eta=1$).

Результаты – начальное приближение и различные снимки эволюции модели L_{in} – представлены на рисунках 3.24-3.30.

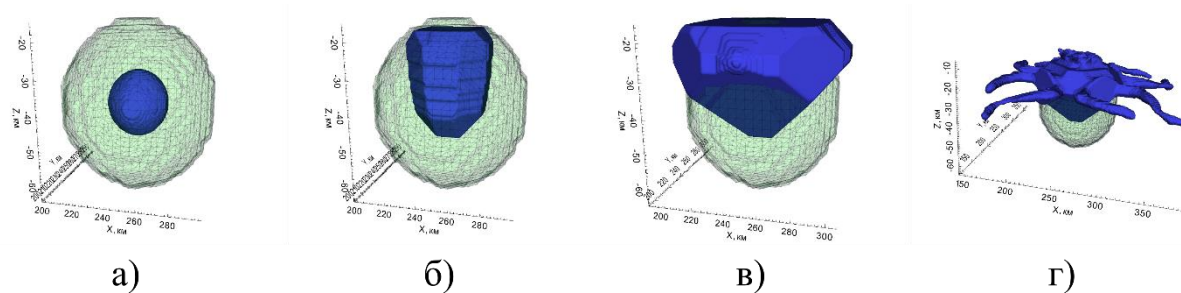


Рис. 3.24. Начальное приближение для вариантов 1-4 и эволюция модели для варианта 1

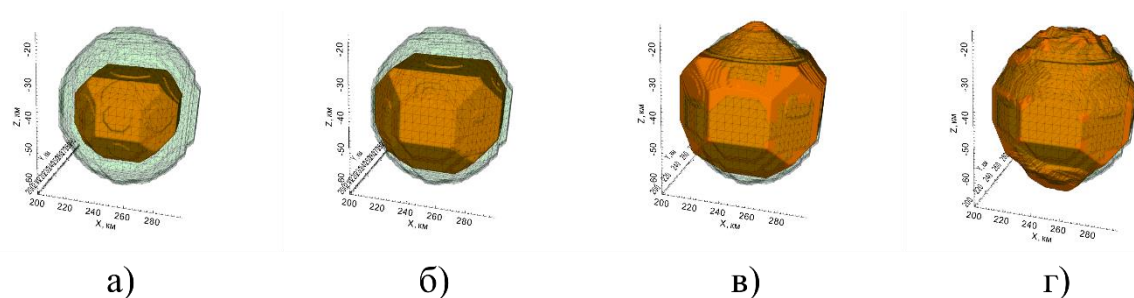


Рис. 3.25. Эволюция модели, вариант 2

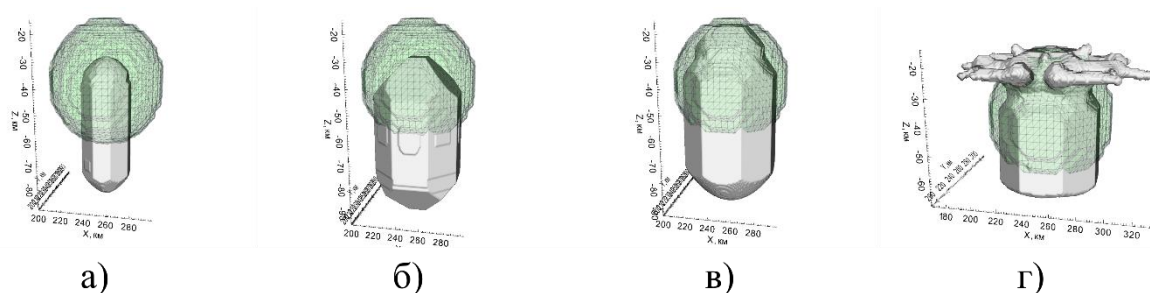


Рис. 3.26. Эволюция модели, вариант 3

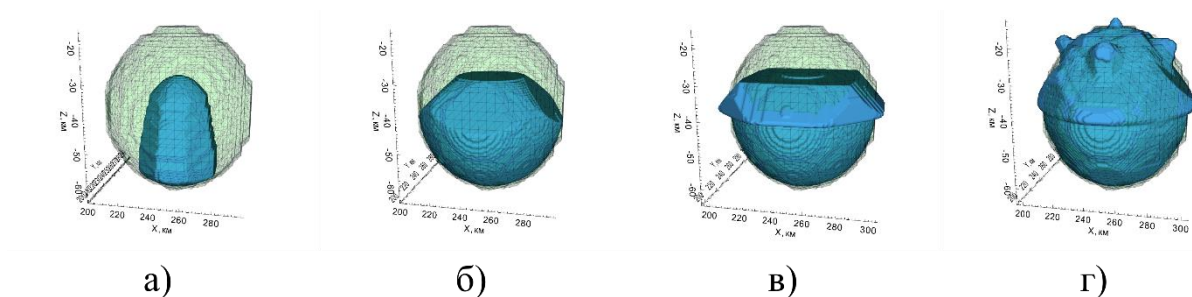


Рис. 3.27. Эволюция модели, вариант 4

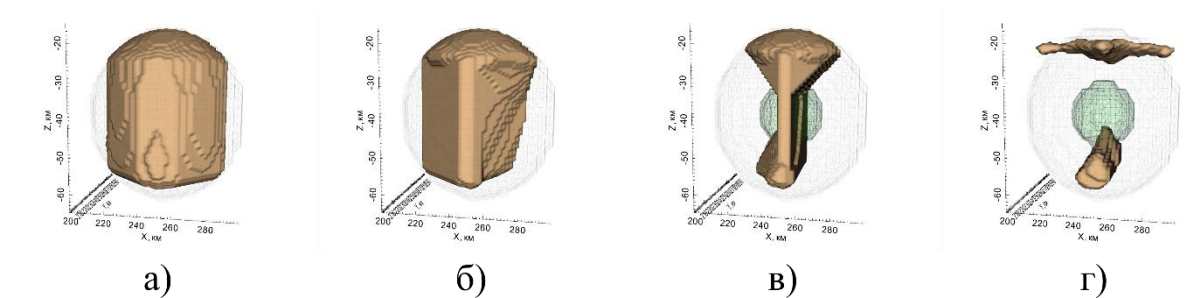


Рис. 3.28. Эволюция модели, вариант 5

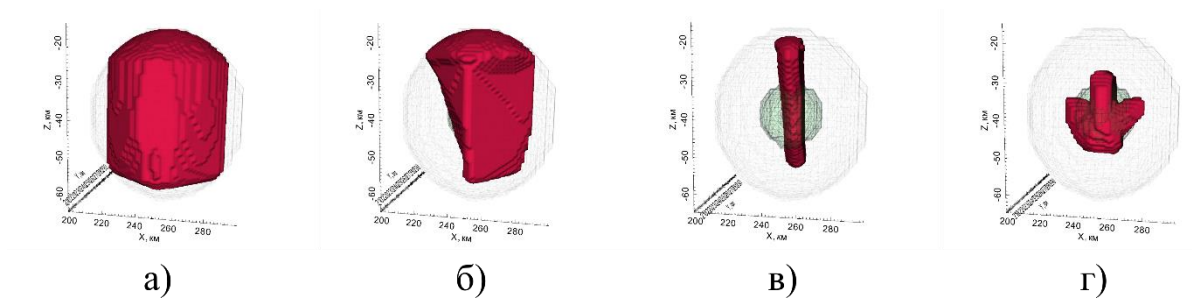


Рис. 3.29. Эволюция модели, вариант 6

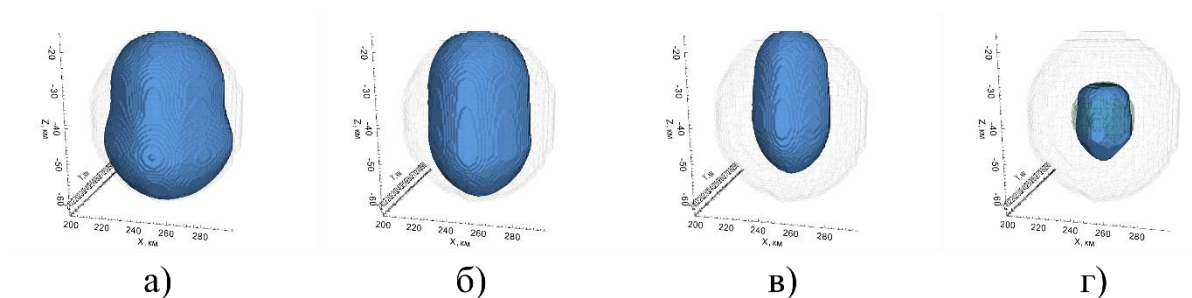


Рис. 3.30. Эволюция модели, вариант 7

Как видно из рисунков (3.24-3.27), на эволюцию модели сильно влияют параметры, задающие характер эволюции. Так, при сравнении рисунков 3.24(в), 3.25(в) и 3.26(в) видно, что параметр приоритета кардинально «меняет» ориентированность эволюции – аномалообразующий объект

«растёт» вверх, вниз или вокруг малого эллипса. Чем больше приоритет у глубоких модификаций, тем больше модификаций совершается именно на глубине тела.

Влияние введенных ограничений на эволюцию демонстрирует модель варианта 4 (рис. 3.27): в ходе своей эволюции в монтажном методе объект также начал рост вниз, как и в случае варианта 3, но, дойдя до заданной границы, начал распространяться в стороны. Начиная с 400 итерации объект «переливается» за границы целевого эллипсоида (рис. 3.27б,в), но спустя некоторое время «заполняет» целевой объём с некоторыми дефектами (рис. 4г). Это свидетельствует в пользу того, что ограничения являются не такими эффективными инструментами управления эволюцией, как приоритет.

Можно заметить явление, заключающееся в том, что, начиная с некоторого шага, решение становится всё менее адекватным (т.е., непохожим на целевой эллипсоид): в ходе эволюции монтажный метод продуцирует совершенно непохожие на целевые модельные тела, хотя при этом невязка убывает с каждой новой итерацией (рис. 3.24г, 3.26г). С одной стороны, это – проявление известного свойства скрытой эквивалентности [28], когда одно и то же поле хорошо аппроксимируется различными непохожими вариантами распределения плотностей. В случае монтажного метода, где на процедуру построение решения можно смотреть как на вычислительную динамическую систему, явление имеет сходство с другим явлением из области машинного обучения, называемым «*переобучением*» – с какого-то момента невязка ещё формально убывает, но при этом «качество» решения «ухудшается». Авторы называют его «нестабильностью» метода, или неустойчивостью решения, хотя под устойчивостью обычно понимается зависимость величины ошибки результата от ошибок в исходных данных или округлений [42].

Варианты 5-7 модельных примеров показывают важность параметра окрестности в приоритете. Так, в случае варианта 5 (рис. 3.28в) видно, что с малым параметром приоритета тело «обтачивается» в центре и далее окончательно разделяется на 2 части (рис. 3.28г). Такое действие с точки

зрения метода интуитивно понятно – поле от текущего приближения намного больше целевого поля, с целевым полем лучше всего коррелируют поля элементов, находящихся в центре тела, и можно ожидать, что именно они быстрее всего уменьшают невязку. При этом сама модель заходит в локальный минимум, глобально непохожий на целевую модель.

Рассмотрим вариант 6 (рис. 3.29): бóльший, чем в варианте 5, приоритет окрестности увеличивает приоритет у модификаций, относящихся к выступающим частям вверху и внизу. Таким образом, создаётся модель, которая представляет собой некоторый «столб», но после чего столб «скашивается» и разрастается как раз в области, занимаемой целевой моделью. Увеличение радиуса окрестности L_η , как в случае варианта 7 (рис. 3.30), позволяет создать более гладкую модель, чем в варианте 6. Надо учитывать, что увеличение радиуса окрестности автоматически увеличивает приоритет окрестности: в окрестности каждого элемента теперь суммарно не 26 элементов, а 124 – то есть, можно сказать, что «эквивалентный» приоритет окрестности $\alpha \approx 0.238$. Но при этом модель получается намного более гладкой. Действительно, в случае $L_\eta = 1$ на приоритет влияют ячейки, находящиеся непосредственно в кубе 3×3 , а их центры располагаются строго по осям или под углами в 45 градусов к осям, что отражается на промежуточных моделях: хорошо заметно, например, на рисунках 3.24(б, в), 3.25(а-г), 3.26(а-в) – промежуточные (и иногда финальные) модели имеют участки поверхности, близкие к плоскостям, находящимся под углом в 45 или 90 градусов к осям.

Важным индуктивным выводом является то, что модели с важными характеристиками – в частности, гладкостью, – удаётся получить не с помощью введения ограничений, а с помощью установки приоритетов. Так, некоторыми исследователями [40] предлагается реализовывать гладкость модели через запрет на «отростки» радиуса в 1 ячейку (при этом вводятся понятия ядра и оболочки тела, через которые определяется данное понятие

радиуса). Хотя при использовании предлагаемого метода в модельном примере «1» имеются отростки (рис. 3.24г), благодаря приоритету окрестности они намного шире одной ячейки, и описанное ограничение не нарушается. Преимуществом же приоритета по окрестности является то, что в начале эволюции отростки любой толщины вообще отсутствуют – в конкретных примерах при изменении метки приоритет имеют ячейки, окружённые ячейками, уже имеющими новую метку. Учитывая это, появление отростков предлагается связывать с переобучением.

Следствием вышесказанного является то, что метод, предоставленный сам себе, остановится на неадекватной, «нежелательной» модели, однако можно использовать различные варианты промежуточных моделей. На практике работа с монтажным методом в ГИС INTEGR0 осуществляется именно таким образом. Но работать с большим количеством моделей затруднительно. Здесь встаёт другая проблема об облегчении работы с рядом промежуточных моделей. Например, интересным полем для изучения может являться упрощение когнитивной нагрузки через анализ этого ряда. Таковым может быть классификация моделей: по обобщённому диаметру аномалообразующих объектов, по количеству связных компонент и его динамике, по связности классов и компонент (или размеру минимального множества ячеек, которых достаточно удалить из класса, чтобы изменилось количество связных компонент) и др.; по геофизическим признакам: средней плотности модели, суммарной массе или средней плотности классов или связных компонент и др.

Эффект от взятия различных значений ограничения на максимальную длину очереди продемонстрирован на следующем примере (рис. 3.31). Общая схема моделирования аналогична использованной ранее, но в качестве начального приближения взята прямоугольная призма, а в качестве целевой модели – объединение трёх пересекающихся прямоугольных призм; на рисунке 3.31(а) изображена система из исходной и целевой модели в трёхмерном виде: исходная классовая модель изображена синим цветом,

целевая – фиолетовым с установленной прозрачностью. Значения параметр n_c установлены в 1, 5, 25, 125 для четырёх разных вариантов. Так как цель примера – показать эффекты от различной длины очереди модификаций, то, чтобы избежать проблем с переобучением на результирующей модели, были специально подобраны параметры приоритета методом подбора ($\beta = 0.25$, $\alpha = 0.4$), а оптимизация проводилась с нередуцированным полем. Во всех четырёх случаях результирующие модели являются локальным оптимумом (то есть, любая разрешённая модификация увеличивает невязку), и они получились похожими (рис. 3.31б-д), но с небольшими отличиями: действительно, как указывалось ранее, выбор максимального количества применяемых модификаций за одну итерацию n_c влияет не только на скорость оптимизации, но и на её результат.

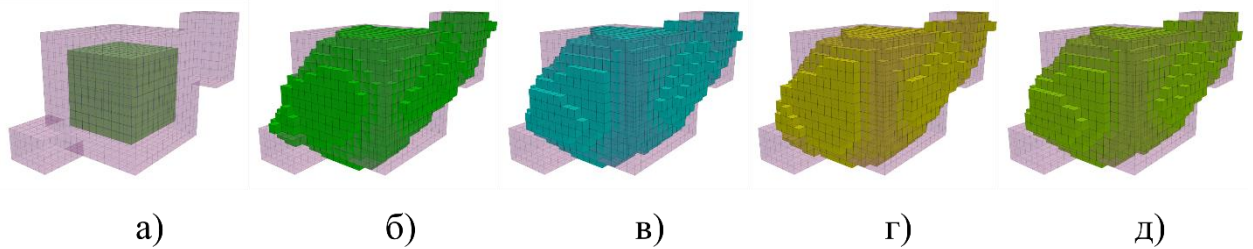


Рис. 3.31. Эффект от различных значений ограничения n_c : а) начальное приближение и целевая модель; б) $n_c=1$; в) $n_c=5$; г) $n_c=25$; д) $n_c=125$.

Отдельные характеристики процессов оптимизации представлены в таблице 1. Здесь m – количество принятых модификаций за одну итерацию, $\bar{m}$ – среднее количество модификаций за итерацию, $M^{(0)}$ и $M^{(n)}$ – начальная и результирующая модель, d – количество ячеек результирующей модели с меткой, отличающейся от отметки в исходной модели. Приведено время заполнения очереди модификаций и применения модификаций из очереди (с повторной проверкой на удовлетворение ограничениям), указанное в секундах. Процесс модификации целиком занимает бóльшее время, включая время на инициализацию и запись результата, но он не включён в таблицу, так как в реальных условиях большую часть времени занимает исполнение двух изложенных выше задач.

n_c	m			d	Количество итераций n	Время заполнения очереди, с.	Время применения очереди, с.	$r(M^{(n)})/r(M^{(0)})$
	max	Σ	$\bar{m}$					
1	1	4080	1	2202	4079	139.26	0.263611	0.00310
5	5	4153	1.983	2201	2093	73.46778	0.259994	0.00412
25	25	4158	6.466	2202	642	22.94783	0.421208	0.00375
125	125	4193	12.90	2203	324	13.04659	1.154342	0.00276

Таблица 1. Характеристики скорости исполнения программной реазилации монтажного метода на модельном примере при различных значениях n_c .

Как видно из полученных статистических результатов, общее количество принятых модификаций оказывается примерно одинаковое, хотя при бóльшей длине очереди их количество оказывается чуть больше. Количество отличающихся ячеек намного меньше модификаций, что говорит о том, что большое количество модификаций отвечали противоположным по сущности операциям (увеличивали и уменьшали аномалообразующий объект) и взаимно аннигилировались. Суммарное время исполнения значительно меньше для больших n_c ; время заполнения очереди уменьшается вместе с уменьшением n_c , так как уменьшается количества итераций, а время применения очереди растёт, так как растёт количество отвергнутых кандидатов по невязке.

Для больших n_c наблюдается явление, когда со временем количество применённых модификаций резко снижается, и, начиная с некоторой итерации, применяется только одна модификация за итерацию, и общее количество применённых модификаций после этого момента очень мало (рис. 3.32).

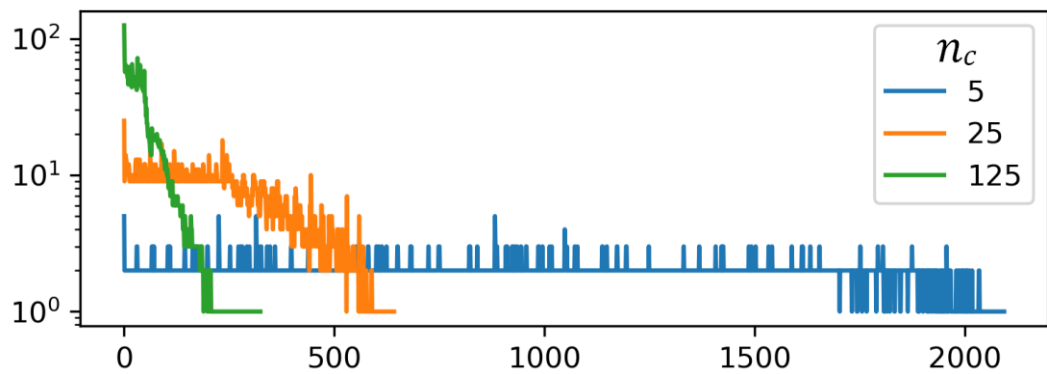


Рис. 3.32. Количество применённых кандидатов в зависимости от номера итерации на приведённом модельном примере.

В соответствии с обсуждениями выше делается вывод, что следует прекращать оптимизацию, когда количество применённых модификаций становится ниже некоторого порога в течение одной или нескольких итераций подряд.

В итоге, доказано **третье защищаемое положение**: разработана методика и программное обеспечение построения сеточных моделей среды на основе монтажного метода решения обратных задач, использующего механизм приоритетов и групповые операции, чем достигается возможность построения моделей сложнопостроенных сред на персональных компьютерах.

Глава 4. Практическое применение разработок на примере моделирования Енисей-Хатангского регионального прогиба

Разработанное методическое и программное обеспечение нацелено на построение 3D моделей территории, проводимое в рамках региональных исследований. Как пример их практического применения здесь изложены отдельные этапы моделирования строения Енисей-Хатангского регионального прогиба. В последнее десятилетие активно проводится комплексное геолого-геофизическое изучение его строения с целью уточнения углеводородного потенциала центрального арктического сектора России. Оценка этого потенциала требует опоры на знания о глубинном строении региона и истории его тектонического развития, без которых нельзя обеспечить научный геологический прогноз[43], в связи с чем и требуется проведение региональных исследований.

Изложенные ниже этапы входят в исследование, сфокусированное на выделении пермотриасовых магматических образований, возникших в ключевой момент зарождения Енисей-Хатангского регионального прогиба и остающихся одним из важнейших элементов его современной глубинной архитектуры. Эти магматические структуры могут представлять интерес при прогнозе углеводородов, однако они недоступны для прямого геологического изучения, но, как правило, четко проявлены в геофизических аномалиях.

Разработанная методика инверсии геофизических полей использовалась на этапе построения слоистой модели территории[44] (параграф 4.1), а методика решения обратных задач на основе монтажного метода – при моделировании интрузий (параграф 4.2). Построенная модель отвечает имеющимся на данный момент буровым и сейсмическим данным, электроразведочной, магнитометрической и гравиметрической информации, а также представлениям о геологическом строении.

4.1 Построение структурной модели территории с использованием инверсии поля силы тяжести

В качестве базовой модели геологического пространства Енисей-Хатангского регионального прогиба была выбрана слоистая модель. В состав ее слоев вошли основные границы раздела земной коры и осадочного чехла, на которых значимо изменяются физические параметры геологической среды: а) кровля палеозойских отложений; б) кровля рифейских отложений; в) кровля верхней коры (кристаллический фундамент); г) кровля нижней (базитовой) коры; д) подошва земной коры (кровля верхней мантии).

Основу структурных построений составили привязанные в ГИС INTEGRО профильные сейсморазведочные и электроразведочные данные, а также информация по нескольким скважинам. Начальные структурные поверхности были созданы посредством интерполяции (многоуровневый билинейный метод) по массиву точечных данных. Корректировка первого приближения структурной модели геологической среды в пространстве между редкими профилями далее проводилась на основе инверсии поля силы тяжести, с использованием представленных в данной работе методики и программного обеспечения, реализованного в ГИС INTEGRО. Для этого по аномальному гравитационному полю на основе метода инверсии рассчитывались распределения эффективной/избыточной плотности. При этом сетки, соответствующие данным гравитационных полей, были изначально расширены представленным методом экстраполяции с целью подавления краевых эффектов. Важным этапом при построении инверсии был подбор параметров этой процедуры. Первый критерий их выбора заключался в обеспечении наилучшего пространственного совмещения получаемых аномалий избыточной плотности с объектами на разрезах сейсмических профилей, предположительно имеющих единую природу с плотностными неоднородностями. Вторым критерием подбора параметров инверсии служило выполнение с некоторой точностью совмещения областей

раздела различных вариантов распределения эффективных плотностей с границами разделов коры на глубинных сейсмических профилях[30].

На рис. 4.1 представлен совместный анализ построенной для ЕХРП 3D модели распределения эффективной плотности и сейсмических данных, осуществленный средствами ГИС INTEGRО. Объемный монтаж сейсмических разрезов и изоповерхностей положительных аномальных значений эффективной плотности позволил наглядно выявить важные корреляции в их пространственных распределениях. Линейные структуры повышенной эффективной плотности, ограниченные изоповерхностями $\rho_{\psi} = 0$, пересекают плоскости сейсмических разрезов в областях «прозрачности» сейсмической записи. Это позволяет связывать оба типа аномалообразующих объектов воедино.

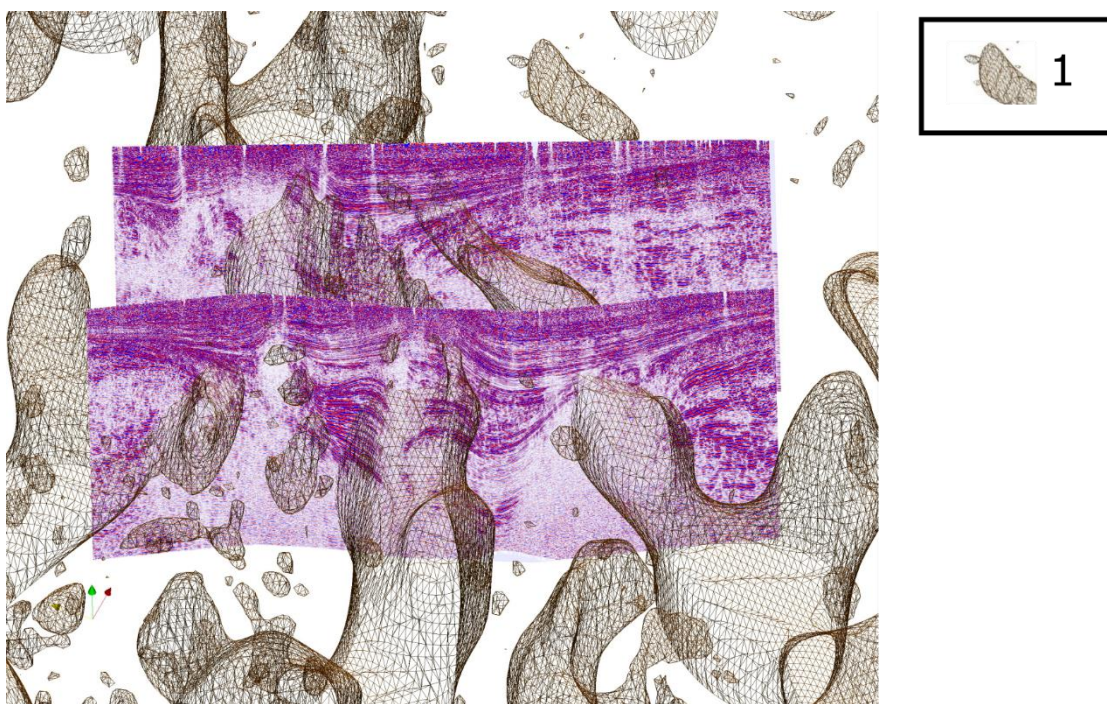


Рисунок 4.1 Пространственный монтаж изоповерхностей, ограничивающих области положительных аномалий эффективной плотности, и глубинных сейсмических разрезов: 1 - изоповерхность, ограничивающая области положительных аномалий эффективной плотности. Ориентация осей: x (желтая) – север, y (красная) – восток, -z (зеленая) – вниз.

После подбора параметров инверсии было осуществлено построение сети модельных профилей, пересекающих имеющиеся исходные профили, которым соотносятся данные сейсморазведки и электроразведки, и секущих построенную разработанной методикой инверсии 3D модель эффективного параметра. Далее по профилям проводилась корреляция глубинных границ раздела с опорой на соответствующие границы в исходных профилях и характер распределения избыточных плотностей. Впоследствии были построены поверхности методом интерполяции между модельными профилями, и значения глубин этих плотностей подвергались дальнейшей оптимизации через минимизацию невязки аномального поля (рис. 4.2).

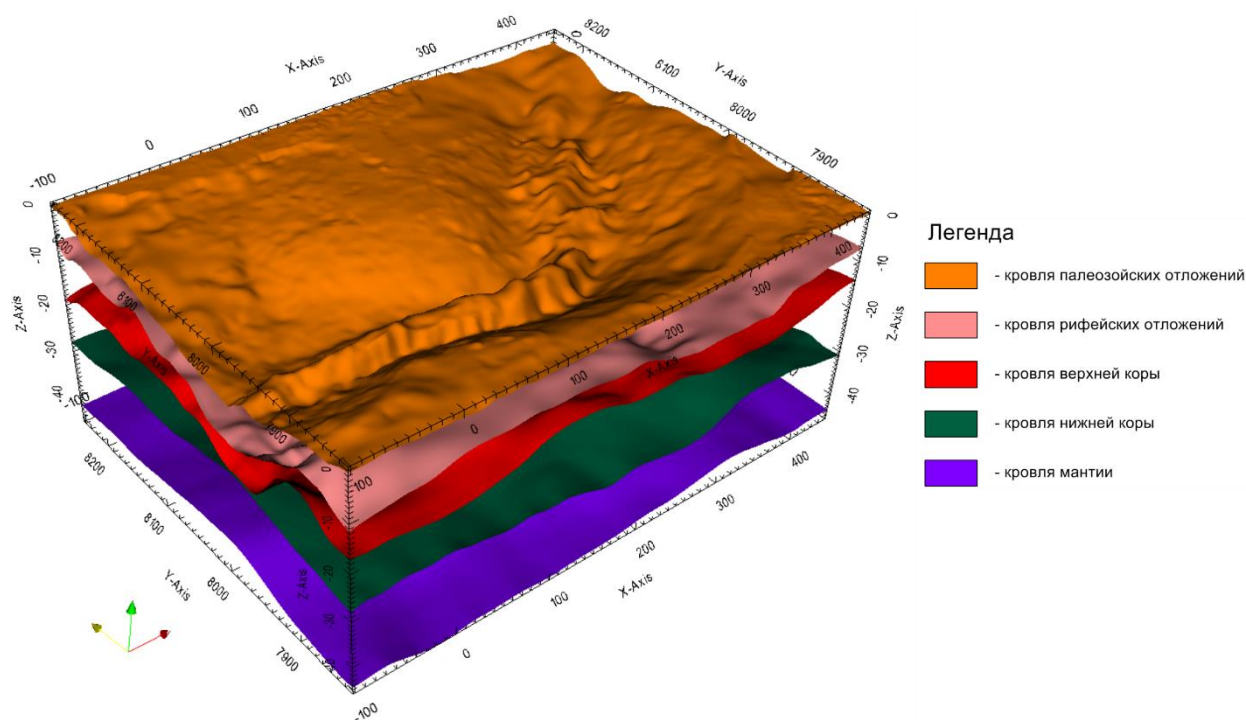


Рис. 4.2 Структурная модель, построенная межпрофильной интерполяцией с использованием инверсии поля силы тяжести.

Таким образом, подбор параметров инверсии и совместный анализ инверсии и имеющихся профильных данных позволил построить структурную модель территории, которая являлась основой для дальнейшего моделирования.

4.2 Построение модели интрузий монтажным методом

Построенная структурная модель не объясняет полностью наблюденное аномальное поле (рис. 4.3), что согласуется с представлениями о наличии значительных аномалообразующих пермотриасовых магматических интрузий. Следующим этапом дальнейшей минимизации невязки стало введение в модель локальных аномалообразующих объектов, имитирующих интрузии. Средствами ГИС INTEGRО была создана начальная грубая модель интрузий (рис. 4.4а). Эти объекты были сгруппированы в классы по плотностным характеристикам и инкорпорированы во вмещающую среду, представляющую из себя градиентно-слоистую модель, построенную на основе вышеперечисленных данных, в соответствии с модельным классом композитных моделей, описанным в параграфе 3.1.

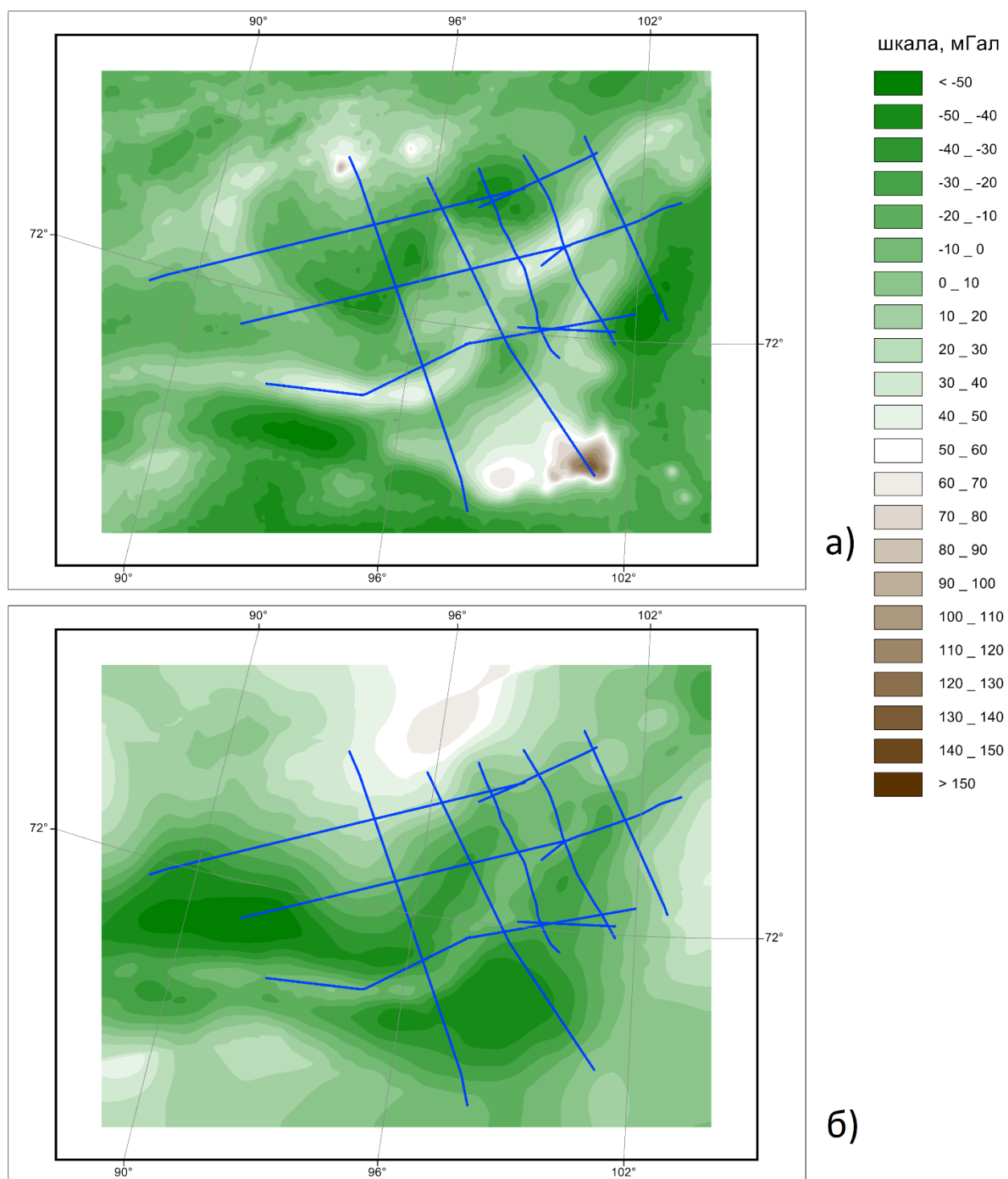


Рис. 4.3 Карты аномального поля силы тяжести: а) наблюждённое;
б) аномальное поле от структурной модели.

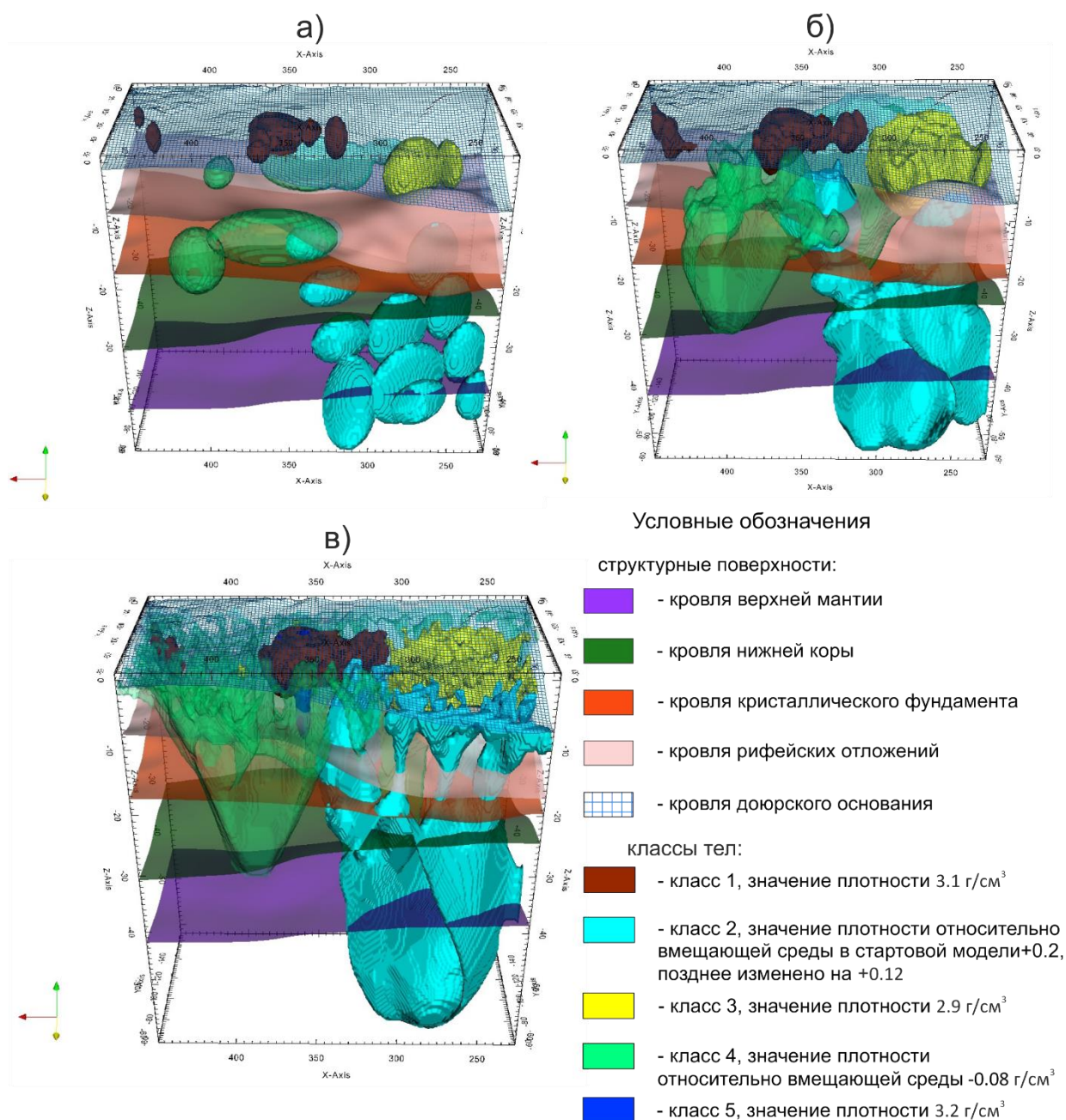


Рис. 4.4. Эволюция классово-плотностной модели в 3Д: а) стартовая модель; б) промежуточный вариант; в) итоговая модель.

Основной интерес моделирования представляли именно интрузивные тела, собственно класс 1 описывал в первом приближении сам Гулинский массив и схожие по плотностям интрузии, с заданной плотностью 3.1 г/см³. Класс 2 был присвоен объектам, залегающим на большей глубине, им задана избыточная плотность +0.2 г/см³ по отношению к вмещающей среде. Классу 3 присвоена плотность 2.9 г/см³, как относящемуся предположительно к менее плотной интрузии находящемуся на небольшой глубине к Ю-З от

Гулинского массива. Класс 4 с заданной относительной плотностью -0.08 г/см^3 добавлен для грубого описания областей разуплотнения, таких как разломные зоны и пр. Более формально, D_0 задаёт слоистую градиентную вмещающую среду, $D_1(v) = 3.1$; $D_2(v) = D_0(v) + 0.2$ и т.д. Таким образом, композитная модель имеет смысл уже не просто эффективной модели, а имеет отдельные штрихи содержательной модели.

В начальном приближении композитная модель также плохо соответствует аномальному полю, и для построения модели интрузий использовались разработанные методика и программное обеспечение подбора решения обратной задачи на основе монтажного метода.

Из анализа опорных данных вытекает, что объекты, соответствующие интрузиям, не должны быть выше доюрского основания. Для таких классов было введено ограничение на положение в конфигурацию монтажного метода.

Процесс моделирования позволил подтвердить некоторые представления о магматизме на изучаемой территории, а часть из них скорректировать, что является важнейшей задачей, так как магматические образования являются одним из важнейших критериев при поиске месторождений полезных ископаемых. Полученная трехмерная плотностная модель (рис. 4.4в) не противоречит опорным данным и описывает с достаточной точностью наблюдаемое поле.

Модель достаточно хорошо аппроксимирует наблюдаемое поле силы тяжести и, в целом, разумно соответствует геологическим данным. В то же время ряд характеристик этой модели существенно уточняют глубинные структурные представления[45].

Заключение

В результате исследований по решению задачи разработки методик и программного обеспечения для моделирования трехмерного строения территорий на основе интерпретации геопотенциальных полей были разработаны три методики для решения обратных задач для использования их на различных этапах построения региональных трёхмерных геофизических и геологических моделей для целей развития недропользования. Разработанное методическое и программное обеспечение в совокупности с существующими разработками в этой области позволяют повысить адекватность создаваемых моделей и решить конечную задачу.

1. Разработаны методика и программное обеспечение построения сеточных моделей эквивалентного распределения физического параметра на основе дискретного преобразования Фурье, которое отличается от метода Приезжева тем, что является корректной при применении к исходным данным, заданным в виде дискретных сеток, а также допускает параметризацию, позволяющую получать модели физической среды, согласующиеся с априорными данными, и отвечающие исходному полю. Разработанная методика позволяет согласовать инверсию с данными профильной сейсморазведки, электроразведки, буровыми данными и др.

2. Разработаны методика и программное обеспечение экстраполяции сеточных моделей потенциальных полей, обеспечивающие периодичность сеточной модели поля и непрерывность продолжения и его первой производной, что позволяет избавиться от краевых эффектов при применении методов инверсии, основанных на дискретных преобразованиях Фурье. При применении вместе с разработанной методикой построения сеточных моделей эквивалентного распределения физического параметра, она позволяет проводить интерпретацию результата инверсии в непосредственной близости к краям сеточных данных.

3. Разработана методика и программное обеспечение построения сеточных моделей эквивалентного распределения физического параметра на основе монтажного метода подбора плотностных параметров среды, отличающаяся оптимизацией с использованием механизма приоритетов, и использованием групповых операций, благодаря чему достигается возможность построения содержательных моделей на обычных персональных компьютерах. Механизм приоритетов позволяет строить содержательные модели, так как отпадает необходимость в стабилизации метода использованием формальной оптимизации по физическим параметрам, а групповые операции и реализация программ для вычислений на графических ускорителях позволяют строить большие региональные модели без использования компьютерных кластеров.

Список литературы

1. Ближайшие перспективы развития геоинформационного комплекса INTEGRO / Е.Н. Черемисина [и др.] // Геоинформатика. – 2021. – № 1.
2. Черемисина Е.Н. ГИС INTEGRO - импортозамещающий программно-технологический комплекс для решения геолого-геофизических задач / Е.Н. Черемисина, М.Я. Финкельштейн, А.В. Любимова // Геоинформатика. – 2018. – № 3.
3. Берёзкин В. М. Метод полного градиента при геофизической разведке / В. Берёзкин М. – М.: Недра, 1988. – 188 с.
4. Бычков С.Г. Связь глубины залегания источников поля и параметров векторного сканирования / С.Г. Бычков, В.М. Новоселицкий // Перспективы развития геофизических методов в XXI веке: материалы Междунар.науч.-практ. конф. Перспективы развития геофизических методов в XXI веке. – Пермь, 2004. – С. 28-33.
5. Томографическая интерпретация аномалий силы тяжести с использованием системы VECTOR / С.Г. Бычков [и др.] // Вестник Пермского федерального исследовательского центра. – 2009. – № 4.
6. Новоселицкий В.М. Система «VECTOR» и результаты её реализации / В.М. Новоселицкий, С.Г. Бычков // Горное эхо. Вестник Горного института. – 2008. – № 3-4. – С. 53-63.
7. Об интерпретации гравитационного и магнитного полей на основе трансформации горизонтальных градиентов в системе «VECTOR» / Г.В. Простолупов [и др.] // Физика Земли. – 2006. – № 6. – С. 90-96.
8. Новоселицкий В.М. Векторная обработка гравиметрических наблюдений с целью обнаружения и локализации источников аномалий / В.М. Новоселицкий, Г.В. Простолупов // Геофизика и математика: Материалы 1-й Всероссийской конференции Геофизика и математика. – М.: ОИФЗ РАН, 1999.

9. Никитин А.А. Теоретические основы обработки геофизической информации / А.А. Никитин. – М.: Недра, 1986. – 341 с.
10. Блох Ю.И. Интерпретация гравитационных и магнитных аномалий / Ю.И. Блох. – 2009. – 231 с.
11. Андреев Б.А. Геологическое истолкование гравитационных аномалий / Б.А. Андреев, И.Г. Клушин. – Ленинград: Недра, 1965. – 495 с.
12. Долгаль А.С. О гравитационной томографии и путях ее дальнейшего развития / А.С. Долгаль, А.Ф. Шархимуллин // Вестник Пермского Университета. Геология. – 2009. – № 11. – С. 114-121.
13. Новоселицкий В.М. К теории определения плотности в горизонтальном пласте по аномалиям силы тяжести : Физика Земли / В.М. Новоселицкий // Известия Академии Наук СССР. – 1965. – № 5. – С. 25-32.
14. Новоселицкий В.М. О построении плотностных границ по аномалиям силы тяжести / В.М. Новоселицкий // Прикладная Геофизика. – 1966. – № 47. – С. 120-129.
15. Кобрунов А.И. Об одном методе ε -эквивалентного перераспределения и его использовании для интерпретации гравитационного поля / А.И. Кобрунов, В.А. Варфоломеев // Физика Земли. – 1981. – Физика Земли. – № 10. – С. 25-44.
16. Булах Е.Г. Определение плотности гравитирующих масс в горизонтально слоистой модели / Е.Г. Булах, М.Н. Маркова // Физика Земли. – 2006. – № 6.
17. Бабаянц П.С. Интерпретационная томография по данным гравиразведки и магниторазведки в пакете программ «СИГМА-3D» / П.С. Бабаянц, Ю.И. Блох, А.А. Трусков // Вопр. теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей: материалы 31 сессии Междунар. семинара им. Д.Г.Успенского. – М.: ОИФЗ РАН, 2004. – С. 6-7.

18. Мартышко П.С. Технология разделения источников гравитационного поля по глубине / П.С. Мартышко, И.Л. Пруткин // Геофизический журнал. – 2003. – Т. 25. – № 3. – С. 159-168.
19. Приезжев И.И. Построение распределений физических параметров среды по данным гравиразведки, магнитометрии / И.И. Приезжев // Геофизика. – 2005. – Геофизика. – № 3. – С. 46-51.
20. Приезжев И.И. Информационные технологии комплексной интерпретации геофизических данных для геологического моделирования : доктор технических наук / И.И. Приезжев. – Москва, 2010.
21. Балк П.И. История развития и современное состояние конечноэлементного подхода в теории интерпретации гравитационных и магнитных аномалий / П.И. Балк, А.С. Долгаль // Вестник Камчатской региональной ассоциации Учебно-научный центр, Науки о земле. – 2022. – Т. 4. – № 56. – С. 19-40.
22. Страхов В.Н. Монтажный метод решения обратной задачи гравиметрии / В.Н. Страхов, М.И. Лапина // Докл. АН СССР. – 1976. – Т. 227. – № 2. – С. 344-347.
23. Страхов В.Н. О монтажном принципе построения решений обратной задачи гравиметрии / В.Н. Страхов, М.И. Лапина // Геофиз. сборник АН УССР. – № 74. – С. 3-19.
24. Балк П.И. Аддитивные методы решения обратных задач гравиразведки и магниторазведки / П.И. Балк, А.С. Долгаль. – М.: Научный мир, 2020. – 456 с.
25. Воскобойников Г.М. Методические рекомендации по применению метода особых точек для интерпретации потенциальных полей. / Г.М. Воскобойников, Н.И. Начапкин. – Свердловск: УНЦ АН СССР, 1980. – 130 с.
26. Magnetic interpretation in three dimensions using Euler deconvolution / A.B. Reid [et al.] // GEOPHYSICS. – 1990. – Vol. 55. – № 1. – P. 80-91.

27. Cooper G.R.J. Euler Deconvolution Applied to Potential Field Gradients / G.R.J. Cooper // Exploration Geophysics. – 2004. – Vol. 35. – № 3. – P. 165-170.
28. Кобрунов А.И. Математические основы теории интерпретации геофизических данных / А.И. Кобрунов. – М.: ЦентрЛитНефтеГаз, 2008. – 286 с.
29. Мицын С.В. О численной реализации спектрального метода решения обратной задачи гравirazведки / С.В. Мицын // Геоинформатика. – 2018. – № 3.
30. Пиманова Н.Н. Выбор параметров обработки при решении 3D обратной задачи гравirazведки методом дискретного преобразования Фурье в ГИС ИНТЕГРО / Н.Н. Пиманова, В.А. Спиридонов // Геоинформатика. – 2021. – Т. 2. – С. 47-52.
31. Смит С. Цифровая обработка сигналов: практическое руководство для инженеров и научных работников : Серия «Схемотехника». Цифровая обработка сигналов / С. Смит. – Москва: Додэка-XXI, 2008. – 718 с.
32. Долгаль А.С. Декомпозиция решения обратной задачи гравirazведки рудного типа монтажным методом / А.С. Долгаль // Вестник Камчатской Региональной Организации Учебно-Научный Центр. Серия: Науки О Земле. – 2019. – № 1 (41).
33. Мудрецова Е.А. Гравirazведка: справочник геофизика. Гравirazведка / Е.А. Мудрецова, К.Е. Веселов. – Москва: Недра, 1990.
34. Балк П.И. Монтажный подход В. Н. Страхова к решению обратных задач гравirazведки: современное состояние и реальные возможности / П.И. Балк, А. Йеске // Геофизический Журнал. – 2013. – Т. 35. – № 1.
35. Бычков С.Г. Методы обработки и интерпретации гравиметрических наблюдений при решении задач нефтегазовой геологии / С.Г. Бычков; ред. В.И. Костицын. – Екатеринбург: УрО РАН, 2010. – 187 с.

36. Camacho A.G. Gravity inversion by means of growing bodies / A.G. Camacho, F.G. Montesinos, R. Vieira // *Geophysics*. – 2000. – Т. 65. – № 1. – С. 95-101.
37. Nagy D. The gravitational potential and its derivatives for the prism / D. Nagy, G. Papp, J. Benedek // *Journal of Geodesy*. – 2000. – Vol. 74. – № 7-8. – P. 552-560.
38. Uieda L. 3D gravity inversion by planting anomalous densities / L. Uieda, V.C.F. Barbosa // 12th International Congress of the Brazilian Geophysical Society & EXPOGEF, Rio de Janeiro, Brazil, 15–18 August 2011 12th International Congress of the Brazilian Geophysical Society & EXPOGEF, Rio de Janeiro, Brazil, 15-18 August 2011. – Rio de Janeiro, Brazil: Brazilian Geophysical Society, 2011. – P. 867-871.
39. Широкова Т.П. Монтажный метод в ГИС INTEGRО для решения обратной задачи магнитного поля / Т.П. Широкова, И.В. Спиридонов, С.В. Мицын // *Геоинформатика*. – 2022. – № 3. – С. 30-38.
40. Использование метода конечных элементов при интерпретации данных гравиразведки и магниторазведки / А.С. Долгаль [и др.] // *Вестник Камчатской Региональной Организации Учебно-Научный Центр. Серия: Науки О Земле*. – 2012. – № 1 (19).
41. Априорная информация о помехах измерений в конечноэлементных монтажных технологиях интерпретации гравитационных аномалий / П.И. Балк [и др.] // *Геоинформатика*. – 2016. – № 4.
42. Бахвалов Н.С. Численные методы / Н.С. Бахвалов, Н.П. Жидков, Г.М. Кобельков. – 8 (эл). – М.: Бином. Лаборатория знаний, 2015.
43. Морфоструктурные и вещественные характеристики магматических образований Енисей-Хатангского прогиба: новые результаты анализа геофизических данных / В.С. Андреев [и др.] // *Геология нефти и газа*. – 2021. – Morphostructural and physical characteristics of magmatic formations within Yenisei-Khatanga Trough. – № 6. – С. 83-105.

44. Применение ГИС INTEGRО при комплексном геофизическом изучении глубинного строения нефтегазоперспективных регионов (часть 1) / Е.М. Большаков [и др.] // Геоинформатика. – 2022. – № 4. – С. 63-74.

45. Применение ГИС INTEGRО при комплексном геофизическом изучении глубинного строения нефтегазоперспективных регионов (часть 2) / Е.М. Большаков [и др.] // Геоинформатика. – 2023. – № 1. – С. 31-42.