

УДК 519.622

МЕТОДЫ НАХОЖДЕНИЯ УСТОЙЧИВЫХ ПРИБЛИЖЕННЫХ РЕШЕНИЙ СИСТЕМ ЛИНЕЙНЫХ АЛГЕБРАИЧЕСКИХ УРАВНЕНИЙ С ПРИБЛИЖЕННО ЗАДАННОЙ ПРАВОЙ ЧАСТЬЮ, ДОПУСКАЮЩИЕ ГЛУБОКОЕ РАСПАРАЛЛЕЛИВАНИЕ ВЫЧИСЛЕНИЙ

В. Н. Страхов¹, А. В. Страхов²

Рассмотрены вопросы применения теории регуляризации систем линейных алгебраических уравнений к прикладным задачам геофизики. Предложены способы редукции исходных линейных систем к системам в нормальной канонической форме, допускающим применение эффективных итерационных методов нового типа. Обсуждаются новые ортогональные преобразования, на основе которых строятся методы нахождения устойчивых приближенных решений. Приводится анализ предложенных методов с точки зрения возможностей глубокого распараллеливания вычислений и эффективного использования многопроцессорных вычислительных систем.

Ключевые слова: линейные алгебраические уравнения, численный анализ, численные методы, метод регуляризации, прикладные задачи геофизики, итерационные алгоритмы, распараллеливание вычислений, многопроцессорные вычислительные системы.

Введение. В настоящее время в гравиметрии и магнитометрии происходит процесс глубокой перестройки теории и практики интерпретации данных наблюдений, и прежде всего — изменения информационного базиса. Происходит это в связи с колоссальным повышением мощности персональных компьютеров. Действительно, уже сегодня персональные компьютеры типа Pentium-3 имеют быстродействие порядка 1 Гц и оперативную память в 4 Гбайта. Такие параметры персональных компьютеров позволяют эффективно использовать идеи и методы аппроксимационного подхода к решению практически всех задач в гравиметрии и магнитометрии. Именно в связи с этим и появилась возможность ставить вопрос об изменении информационного базиса гравиметрии и магнитометрии, о переходе от карт элементов внешних аномальных полей к метрологическим аналитическим аппроксимациям этих элементов, что позволит повысить точность и создаст возможность эффективного решения большого числа задач на этапе построения интерпретационных моделей.

Поскольку уравнения для элементов внешних аномальных гравитационных и магнитных полей линейны, то основная вычислительная проблема, которая возникает при построении аналитических аппроксимаций элементов полей, — это проблема нахождения устойчивых приближенных решений систем линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) с приближенными данными, как правило — с точно заданной матрицей и аддитивной помехой в задании вектора правой части. При этом обычно СЛАУ являются плохо обусловленными и имеют большую ($P = NM = 10^8 \div 10^9$) или даже сверхбольшую ($P = NM > 10^9$) размерность. Поэтому принципиальное значение имеет проблема быстродействия. Анализ классической теории регуляризации СЛАУ и традиционных методов, используемых в рамках этой теории (метод М. М. Лаврентьева, метод А. Н. Тихонова и другие, см. [1]) показывает неадекватность классической теории регуляризации СЛАУ и ее основных методов потребностям геофизической практики и, в частности, чрезмерную трудоемкость указанных методов. Поэтому первым из авторов данной статьи была предложена новая теория регуляризации СЛАУ [2–6], в рамках которой и оказывается возможным создание принципиально новых методов — весьма экономичных и, вдобавок, допускающих глубокое распараллеливание вычислений. Именно такие методы и описываются в данной статье.

План изложения в статье таков. В разделе 1 (“Использование аппроксимационного подхода при решении задач гравиметрии”) описываются методы редукции ряда важнейших задач к проблеме нахождения устойчивых приближенных решений СЛАУ с приближенными данными. В разделе 2 (“Новая теория регуляризации СЛАУ с приближенными данными”) излагается, во-первых, критика методов классической теории регуляризации СЛАУ, а во-вторых, основные положения принадлежащей В. Н. Страхову

¹ Объединенный институт физики Земли им. О. Ю. Шмидта РАН, ул. Б. Грузинская, 10, 123810, Москва; e-mail: strakhov@uipе-ras.scgis.ru

² Вычислительный центр РАН, ул. Вавилова, 40, 117967, Москва; e-mail: strakhov@uipе-ras.scgis.ru

новой теории регуляризации. Содержание раздела 3 (“Методы нахождения приближенных решений СЛАУ, допускающие глубокое распараллеливание вычислений”) ясно из его названия. В “Заключении” к статье даются некоторые выводы и намечается программа дальнейшей работы.

1. Использование аппроксимационного подхода при решении задач гравиметрии. Задачи гравиметрии в существенном проще задач магнитометрии, хотя в случае слабых магнитных аномалий сложность задач примерно та же, что и в гравиметрии.

Основная идея использования аппроксимационного подхода в гравиметрии состоит в следующем. Пусть $u(x)$ — некоторый элемент внешнего аномального гравитационного поля, и пусть известны приближенные значения

$$f_{i,\delta} = f_i + \delta f_i, \quad 1 \leq i \leq N, \tag{1}$$

где

$$f_i = u(x^{(i)}), \tag{2}$$

а δf_i суть значения погрешностей (помех) в задании величин f_i . Допустим, что нам требуется найти значения некоторых линейных функционалов $F_k(\bullet)$, $k = 1, 2, \dots, K$, на функции $u = u(x)$, т.е. значения величин $F_k(u)$. В этом случае можно поступить так:

- а) сначала по заданным величинам $f_{i,\delta}$, $1 \leq i \leq N$, строится аппроксимация $u_{\text{аппр}}(x)$ функции $u(x)$;
- б) далее используются соотношения

$$F_k(u) \approx F_k(u_{\text{аппр}}). \tag{3}$$

Наиболее общим и эффективным методом построения линейных аналитических аппроксимаций различных элементов внешнего аномального гравитационного поля, который может быть использован при решении многих задач гравиметрии, является *метод линейных интегральных представлений*, обобщающий классический метод линейных интегральных уравнений.

Действительно, метод линейных интегральных уравнений

$$f(x) = \int_M \rho(\xi) K(\xi, x) d\mu(\xi), \quad x \in m, \tag{4}$$

состоит в нахождении неизвестной функции $\rho(\xi)$, принадлежащей априорно заданному классу функций P , по заданным функциям $K(\xi, x)$ и $f(x)$, $x \in m$, принадлежащих априорно заданным классам Q и F . Ясно, что в (4) имеется всего одна неизвестная функция $\rho(\xi)$.

Метод же линейных интегральных представлений состоит в том, что заданными являются N величин $f_{i,\delta} = f_i + \delta f_i$, при этом имеют место представления

$$f_i = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \rho_r(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) d\mu_r(\xi), \quad 1 \leq i \leq N, \tag{5}$$

где в общем случае $R > 1$, $\rho_r(\xi)$ суть неизвестные (подлежащие определению) функции, $Q_r^{(i)}(\xi)$ — заданные функции, M_r — заданные точечные множества, μ_r — заданные меры на M_r . Ясно, что если

$$u(x) = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \rho_r(\xi) Q_r(\xi, x) d\mu_r(\xi) \tag{6}$$

и $f_i = u(x^{(i)})$, то имеем

$$Q_r^{(i)}(\xi) = Q_r(\xi, x^{(i)}), \quad 1 \leq i \leq N. \tag{7}$$

Из (5) и (6)–(7) с очевидностью следует тот факт, что метод линейных интегральных представлений является обобщением классического метода линейных интегральных уравнений.

Способ нахождения искомых функций $\rho_r(\xi)$, $1 \leq r \leq R$, состоит в следующем. Пусть априорно известно, что существуют интегралы

$$J_r = \int_{M_r} \frac{\rho_r^2(\xi)}{p_r^2(\xi)} d\mu_r(\xi) < +\infty, \quad 1 \leq r \leq R, \tag{8}$$

где $\rho_r(\xi)$ — искомые, а $p_r^2(\xi)$ — априорно заданные функции, при этом чем меньше значения J_r , тем “лучшей” является функция $\rho_r(\xi)$. В этом случае ставится условная вариационная задача:

$$\Phi(\rho) = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \frac{\rho_r^2(\xi)}{p_r^2(\xi)} d\mu_r(\xi) = \min_{\rho_r(\xi)}, \quad f_{i,\delta} - \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \rho_r(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) d\mu_r(\xi) = 0, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (9)$$

Этой условной вариационной задаче методом множителей Лагранжа ставится в соответствие семейство безусловных вариационных задач:

$$\sum_{r=1}^R \int_{M_r} \frac{\rho_r^2(\xi)}{p_r^2(\xi)} d\mu_r(\xi) + \sum_{i=1}^N \lambda_i \left(f_{i,\delta} - \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \rho_r(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) d\mu_r(\xi) \right) = \min_{\rho_r(\xi)}; \quad (10)$$

здесь λ_i , $1 \leq i \leq N$, суть множители Лагранжа, являющиеся компонентами вектора λ . Использование необходимого (а в данном случае и достаточного) условия экстремума, см. [7–9], позволяет найти выражения для искомых функций $\rho_r(\xi)$ через вектор λ :

$$\rho_r(\xi) = \tilde{\rho}_r(\xi; \lambda) = p_r^2(\xi) \sum_{i=1}^N \lambda_i Q_r^{(i)}(\xi), \quad 1 \leq r \leq R. \quad (11)$$

Используя условия-равенства, фигурирующие в исходной условной экстремальной задаче (9), получаем для нахождения вектора λ СЛАУ

$$A\lambda = f_\delta = f + \delta f, \quad (12)$$

в которой $(N \times N)$ -матрица A имеет свойство

$$A = A^T \geq 0, \quad (13)$$

и элементы которой выражаются соотношениями

$$a_{ij} = a_{ji} = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} p_r^2(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) Q_r^{(j)}(\xi) d\mu_r(\xi). \quad (14)$$

Ясно, что если

$$\int_{M_r} p_r^2(\xi) (Q_r^{(i)}(\xi))^2 d\mu_r(\xi) < +\infty, \quad 1 \leq r \leq R, \quad 1 \leq j \leq N, \quad (15)$$

то интегралы, выражающие элементы матрицы A , имеют конечные значения.

Понятно также, что в (12) векторы f и δf суть N -векторы с компонентами f_i и δf_i соответственно.

Несколько слов относительно точечных множеств M_r и, соответственно, весовых функций $p_r^2(\xi)$. Очевидно, что множества M_r могут быть двух типов:

1) множества без краев; например, это замкнутые (быть может, через бесконечность) поверхности или кривые;

2) множества с краями — куски поверхностей или кривых, конечные объемы.

В случае множеств M_r первого типа никакие дополнительные условия на искомые функции $\rho_r(\xi)$ не ставятся. В случае же множеств M_r второго типа на краях (границах) ∂M_r множеств M_r как правило ставятся условия типа:

$$\rho_r(\xi)|_{\xi \in \partial M_r} = 0. \quad (16)$$

Ясно, из (11), что в этом случае краевые условия (16) выполняются, если функции $p_r^2(\xi)$ подчинены условиям

$$p_r^2(\xi)|_{\xi \in \partial M_r} = 0. \quad (17)$$

Очевидно, если требуется найти значения функций вида

$$\nu(x) = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \rho_r(\xi) K_r(\xi, x) d\mu_r(\xi), \quad (18)$$

причем функции $\rho_r(\xi)$, $1 \leq r \leq R$, суть те же, что в (5) и (6), то тогда имеем

$$\begin{aligned} \nu(x) &\approx \sum_{r=1}^R \int_{M_r} \left(p_r^2(\xi) \sum_{i=1}^N \lambda_i Q_r^{(i)}(\xi) \right) K_r(\xi; x) d\mu_r(\xi) = \\ &= \sum_{i=1}^N \lambda_i \left(\sum_{r=1}^R \int_{M_r} p_r^2(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) K_r(\xi; x) d\mu_r(\xi) \right) = \sum_{i=1}^N \lambda_i S_i(x), \end{aligned} \tag{19}$$

где положено

$$S_i(x) = \sum_{r=1}^R \int_{M_r} p_r^2(\xi) Q_r^{(i)}(\xi) K_r(\xi; x) d\mu_r(\xi). \tag{20}$$

Ясно, что нахождение значений функций $S_i(x)$ сводится к вычислению r интегралов (по заданным множествам M_r и мерам $\mu_r(\xi)$ на этих множествах) от произведений известных функций, т.е. проведению счета с помощью кубатурных процессов.

Теперь о физической сущности интегральных представлений (5) и (6). Ясно, что если $u(x)$ суть элемент внешнего аномального поля, обычно

$$u(x) = -\frac{\partial V_a(x)}{\partial r} \tag{21}$$

(в случае глобальных или региональных задач, когда требуется исходить из представления нормальной Земли в виде шара) или

$$u(x) = -\frac{\partial V_a(x)}{\partial x_3} \tag{22}$$

(в случае локальных задач, когда можно исходить из представления о нормальной Земле в форме нижнего полупространства при оси Ox_3 , направленной вверх), при этом $V_a(x)$ в обоих случаях суть потенциал внешнего аномального поля, то возможно использование интегральных представлений вида (6), основанных на так называемой основной интегральной формуле теории гармонических функций, см. [10–12]. При этом для других элементов поля $\nu(x)$ эта же основная формула обычно дает интегральные представления вида (18); так, например, обстоит дело в случае, когда $\nu(x)$ суть более высокие производные того же потенциала $V_a(x)$ аномального поля.

Остается лишь пояснить выбор множеств M_r и мер $\mu_r(\xi)$ в интегральных представлениях (5) и (6).

В случае локальных задач и метрологических аппроксимаций функции $-\frac{\partial V_a(x)}{\partial x_3}$ множества M_r суть бесконечная горизонтальная плоскость $x_3 = -H$, $H \geq 0$, либо конечный набор подобных плоскостей; при этом основная интегральная формула теории гармонических функций для каждой из плоскостей дает две функции $\rho_r(\xi)$. Равным образом в случае глобальной или региональной метрологической аппроксимации функции $-\frac{\partial V_a(x)}{\partial r}$ множества M_r суть заданные замкнутые поверхности, обычно — сферические, с центром в центре Земли; число поверхностей может быть различным, каждой из поверхностей, в соответствии с основной формулой теории гармонических функций, соответствует две подлежащих определению функции $\rho_r(\xi)$.

Наконец, в случае решения задач разделения и нахождения пространственного распределения полей используются интегральные представления, в которых M_r суть априорно заданные поверхности S_q , $1 \leq q \leq Q$, при этом снова используется основная интегральная формула теории гармонических функций и поэтому каждой поверхности S_q соответствуют две функции $\rho_r(\xi)$. (Понятно, что S_q попарно не имеют общих точек и содержат источники аномального поля строго внутри, заданными же являются значения $-\frac{\partial V_a(x)}{\partial x_3}$, порожденные всеми источниками аномального поля сразу.) В данном случае M_r совпадают с S_q и не имеют краев.

Однако в задачах разделения и нахождения пространственного распределения полей возможен и другой подход, в котором в качестве M_r принимаются объемы D_r , ограниченные поверхностями S_r ; ясно, что в этом случае M_r имеют края S_r . В этом случае в $M_r = D_r$ ищутся объемные плотности масс, которые обращаются в нуль на $\partial M_r = S_r$.

Имеются еще и другие варианты интегральных представлений, которые могут быть использованы при решении различных задач гравиметрии, но недостаток места не позволяет останавливаться на их рассмотрении.

2. Новая теория регуляризации систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданной правой частью. Итак, пусть требуется найти устойчивое приближенное решение СЛАУ вида

$$Ax = f_\delta = f + \delta f, \quad (23)$$

где в общем случае A есть $(N \times M)$ -матрица с точно заданными элементами a_{ij} , $1 \leq i \leq N$, $1 \leq j \leq M$, x есть искомым M -вектор, f_δ есть заданный N -вектор, f и δf суть N -векторы полезного сигнала и помехи соответственно.

Нахождение устойчивого приближенного решения \hat{x} системы (23) возможно лишь при наличии определенной априорной информации о помехе δf и искомом решении x . Принимается, что априорно известны:

а) постоянные δ_{\min}^2 и δ_{\max}^2 ($\delta_{\min}^2 < \delta_{\max}^2$) в неравенствах

$$0 < \inf_{x \in R^M} \|f_\delta - Ax\|_E^2 < \delta_{\min}^2 \leq \|\delta f\|_E^2 \leq \delta_{\max}^2 < +\infty; \quad (24)$$

б) равенство

$$(f, \delta f) = (Ax, \delta f) = 0; \quad (25)$$

в) функционал

$$\Omega(x) = \|Rx\|_E^2, \quad (26)$$

задающий отношение предпочтения на множестве приближенных решений системы (23), при этом R есть заданная $(P \times M)$ -матрица, такая, что матрица $R^T R$ является невырожденной и достаточно хорошо обусловленной (R именуется *регуляризующей матрицей*). При этом понятие “функционал, задающий отношение предпочтения на множестве приближенных решений системы (23)” имеет следующее содержание. Пусть $x^{(1)}$ и $x^{(2)}$ суть два приближенных решения системы (23) и при этом

$$\|f_\delta - Ax^{(1)}\|_E^2 = \|f_\delta - Ax^{(2)}\|_E^2; \quad (27)$$

тогда если

$$\Omega(x^{(2)}) = \|Rx^{(2)}\|_E^2 < \|Rx^{(1)}\|_E^2 = \Omega(x^{(1)}), \quad (28)$$

то приближенное решение $x^{(2)}$ считается предпочтительнее приближенного решения $x^{(1)}$.

Прежде чем излагать новую теорию регуляризации СЛАУ (23), приведем ряд соображений по поводу неадекватности методов классической теории регуляризации СЛАУ, разработанной в трудах А. Н. Тихонова, М. М. Лаврентьева, В. К. Иванова и их учеников, см. [13–25].

В рамках классической теории регуляризации СЛАУ принимается, что априорно известна величина

$$\delta^2 = \|\delta f\|_E^2; \quad (29)$$

это — гораздо более жесткое допущение по сравнению с (24) и в геофизической практике оно никогда не выполняется. Далее, весьма важное условие (25), как правило всегда имеющее место в геофизической практике, в классической теории не учитывается вовсе.

Наиболее общим и важным в классической теории регуляризации СЛАУ считается так называемый вариационный метод А. Н. Тихонова, основанный на постановке условной экстремальной задачи

$$\Omega(x) = \|Rx\|_E^2 = \min_x \|\rho\|_E^2 = \|f_\delta - Ax\|_E^2 = \delta^2, \quad (30)$$

где δ^2 суть заданная величина (та же самая, что в (29)), а $\Omega(x)$ — некоторый функционал, задающий отношение предпочтения на множестве приближенных решений системы (23).

Ясно, что условной экстремальной задаче методом Лагранжа ставится в соответствие семейство безусловных экстремальных задач

$$\alpha \|Rx\|_E^2 + \|f_\delta - Ax\|_E^2 = \min_x, \quad (31)$$

где $\alpha > 0$ — так называемый *параметр регуляризации*. Решение задачи (31) при заданном значении параметра α удовлетворяет системе линейных алгебраических уравнений

$$(\alpha R^T R + A^T A) x_a = A^T f_\delta = \varphi_\delta = \varphi + \delta \varphi. \quad (32)$$

Для удовлетворения условию, фигурирующему в исходной условной экстремальной задаче (30), необходимо найти значение $\alpha = \alpha_\delta$ как решение уравнения

$$\|\rho_\alpha\|_E^2 = \|f_\delta - Ax_\alpha\|_E^2 = \delta^2. \tag{33}$$

В классической теории регуляризации доказывается, что если

$$\eta^2 = \frac{\delta^2}{\|f_\delta\|_E^2} < 1, \tag{34}$$

то решение уравнения (33) существует и единственно.

Нахождение $\alpha = \alpha_\delta$ требует многократного — для набора различных значений параметра α — решения системы (32); обычно приходится использовать от 12 до 20 значений α . Решение системы достигается с помощью построения разложения Холецкого матрицы $(\alpha R^T R + A^T A)$ в произведение нижней и верхней треугольных матриц и последующим решением двух систем с треугольными матрицами. Для каждого α затрачивается примерно $\frac{M^3}{3}$ арифметических операций, где M — число неизвестных в исходной системе (23). Даже если используется всего 12 значений параметра α , это дает $4M^3$ операций. Сверх того, нахождение произведения $A^T A$ требует выполнения (при использовании аккуратного алгоритма вычисления соответствующих скалярных произведений) примерно $\frac{3}{2}NM^2$ арифметических операций. Из сказанного следует, что вариационный метод А. Н. Тихонова весьма трудоемок и в нем нарушается следующее, достаточно понятное, методологическое требование:

нахождение устойчивого приближенного решения СЛАУ (23) должно выполняться за число арифметических операций $Q_{\text{прибл}}$, меньшее числа арифметических операций $Q_{\text{точн}}$, затрачиваемых на нахождение точного решения системы $Ax = f$ с точными данными:

$$Q_{\text{прибл}} < Q_{\text{точн}}. \tag{35}$$

Отметим далее еще один недостаток вариационного метода А. Н. Тихонова. Пусть A — матрица большой ($P = NM = 10^8 \div 10^9$) или даже сверхбольшой ($P = NM > 10^9$) размерности, причем (как это всегда имеет место на практике) A есть очень плохо обусловленная матрица. В этом случае произведение $A^T A$, в силу ошибок округления, может быть уже не положительно определенной матрицей, а так как $\alpha > 0$ — малый параметр порядка $O(\delta^2)$, то регуляризованная система $(\alpha R^T R + A^T A)$ снова может быть достаточно плохо обусловленной, и тем самым ее решение не будет иметь приемлемого качества.

Наконец (и это в некотором смысле самое главное), методу А. Н. Тихонова присущ один принципиальный недостаток (этот недостаток присущ всем методам, в которых реализуется конструкция аддитивной параметрической регуляризации, см. работу [1]). Действительно, в представлении вектора правой части $f_\delta = f + \delta f$ векторы f и δf следует считать совершенно независимыми — не существует такой матрицы K , что всегда

$$f = K\delta f. \tag{36}$$

Ясно далее, что векторы

$$\rho_\alpha = f_\delta - Ax_\alpha \tag{37}$$

и

$$\tilde{f}_\alpha = Ax_\alpha \tag{38}$$

являются, при значениях параметра α , близких к α_δ , оценками векторов помехи δf и полезного сигнала f соответственно. Но из основного уравнения (32) метода А. Н. Тихонова следует

$$x_\alpha = \frac{(R^T R)^{-1} A^T \rho_\alpha}{\alpha} \tag{39}$$

и

$$\tilde{f}_\alpha = Ax_\alpha = \frac{A (R^T R)^{-1} A^T \rho_\alpha}{\alpha}. \tag{40}$$

Иначе говоря, вектор \tilde{f}_α , дающий оценку вектора полезного сигнала f , выражается через вектор невязки ρ_α , дающий оценку вектора помехи. Комментарий, что называется, излишни.

Итак, показано, что вариационный метод А. Н. Тихонова, являющийся самым важным методом регуляризации СЛАУ вида (23), имеет весьма существенные недостатки — он не адекватен потребностям реальной геофизической практики. То же самое может быть показано и для других методов классической теории регуляризации СЛАУ, но за недостатком места на этом не останавливаемся.

В связи со сказанным, В. Н. Страховым была предложена, см. [2–6], новая теория регуляризации СЛАУ, основанная на использовании априорной информации о помехе δf и искомом решении x в форме:

а) априорного знания постоянных в неравенствах (24);

б) априорного знания равенства (25);

в) априорного знания функционала $\Omega(x) = \|Rx\|_E^2$, см. (26), задающего отношение предпочтения на множестве приближенных решений системы (23).

В рамках новой теории регуляризации СЛАУ (23) основная стратегия нахождения искомого устойчивого приближенного решения \hat{x} системы, удовлетворяющего априорной информации, включает четыре основные вычислительные процедуры.

Первая процедура состоит в нахождении приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, для которых

$$\tilde{\rho}^{(k)} = f_\delta - A\tilde{x}^{(k)} \quad (41)$$

и

$$\|\tilde{\rho}^{(k)}\|_E^2 < \|\tilde{\rho}^{(k-1)}\|_E^2, \quad \lim_{k \rightarrow \infty} \|\tilde{\rho}^{(k)}\|_E^2 \leq \delta_{\min}^2. \quad (42)$$

Вторая процедура состоит в пересчете приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$ в приближенные решения $\hat{x}^{(k)}$, удовлетворяющие условию

$$(A\hat{x}^{(k)}, f_\delta - A\hat{x}^{(k)}) = (A\hat{x}^{(k)}, \hat{\rho}^{(k)}) = 0, \quad (43)$$

т.е. условию, следующему из априорного равенства (24). Реализуется этот пересчет простейшим соотношением

$$\hat{x}^{(k)} = \tau_k \tilde{x}^{(k)}, \quad \tau_k = \frac{(f_\delta, A\tilde{x}^{(k)})}{\|A\tilde{x}^{(k)}\|_E^2}. \quad (44)$$

Соотношения (44) и (43) следуют, как легко показать, из постановки следующей экстремальной задачи:

$$\|f_\delta - \tau A\tilde{x}^{(k)}\|_E^2 = \min_{\tau} . \quad (45)$$

Отсюда же сразу следует и неравенство

$$\|\hat{\rho}^{(k)}\|_E^2 = \|f_\delta - A\hat{x}^{(k)}\|_E^2 \leq \|f_\delta - A\tilde{x}^{(k)}\|_E^2 = \|\tilde{\rho}^{(k)}\|_E^2. \quad (46)$$

Третья процедура состоит в выделении среди приближенных решений $\hat{x}^{(k)}$ так называемых пробных приближенных решений (или короче — просто пробных решений) системы (23), т.е. таких, из числа $\hat{x}^{(k)}$, что

$$\delta_{\min}^2 \leq \|\hat{\rho}^{(k)}\|_E^2 \leq \delta_{\max}^2, \quad k_{\min} \leq k \leq k_{\max}, \quad (47)$$

и при этом

$$\|\hat{\rho}^{k_{\min}-1}\|_E^2 > \delta_{\max}^2, \quad \|\hat{\rho}^{k_{\max}+1}\|_E^2 < \delta_{\min}^2. \quad (48)$$

Наконец, *четвертая процедура* состоит в нахождении искомого (окончательного) устойчивого приближенного решения СЛАУ (23) по принципу усреднения пробных решений, т.е. с помощью соотношений

$$\hat{x} = \tau \tilde{x}, \quad \tau = \frac{(f_\delta, A\tilde{x})}{\|A\tilde{x}\|_E^2}, \quad (49)$$

где

$$\tilde{x} = \sum_{k=k_{\min}}^{k=k_{\max}} p_k \hat{x}^{(k)} \quad (50)$$

и весовые множители p_k найдены из решения условной экстремальной задачи

$$\Omega(\tilde{x}) = \|R\tilde{x}\|_E^2 = \left\| \sum_{k=k_{\min}}^{k=k_{\max}} p_k R\hat{x}^{(k)} \right\|_E^2 = \min_{p_k} , \quad \sum_{k=k_{\min}}^{k=k_{\max}} p_k = 1 \quad \forall p_k > 0. \quad (51)$$

Итак, легко понять, что так построенное решение \hat{x} удовлетворяет соотношениям

$$\delta_{\min}^2 \leq \|f_\delta - A\hat{x}\|_E^2 \leq \delta_{\max}^2, \quad (A\hat{x}, f_\delta - A\hat{x}) = 0, \quad (52)$$

т.е. всей имеющейся априорной информации. Именно по этой причине новая теория регуляризации является адекватной реальной геофизической практике.

Очевидно, что в описанной стратегии нахождения \hat{x} основное значение имеет метод генерации приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$. Во-первых, им определяется трудоемкость метода в целом. Во-вторых, от качества приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$ существенно зависит и качество окончательного приближенного решения \hat{x} . Действительно, если все $\tilde{x}^{(k)}$ имеют приемлемое качество (которое должно оцениваться величинами $\Omega(\tilde{x}^{(k)})$), то тогда приемлемое качество имеют и все $\hat{x}^{(k)}$, а использование принципа усреднения пробных решений только улучшает качество окончательного решения \hat{x} .

Более того, если приемлемое качество имеет решение $\hat{x}^{(k_{\max})} = x^{(\text{оп})}$ (опорное решение, для которого $\|f_\delta - Ax^{(\text{оп})}\|_E^2 \leq \delta_{\min}^2$), то можно использовать более мощный (по сравнению с принципом усреднения пробных решений) прием получения окончательного решения с высоким качеством. Именно, можно ввести постановку условной экстремальной задачи

$$\Omega(x) = \|Rx\|_E^2 = \min_x \left\| x - x^{(\text{оп})} \right\|_E^2 = \gamma^2, \quad (53)$$

где γ^2 — некоторая величина (которую фактически задавать не нужно, см. ниже). Условной экстремальной задаче (53) стандартным образом ставится в соответствие семейство безусловных экстремальных задач

$$\alpha \|Rx\|_E^2 + \left\| x - x^{(\text{оп})} \right\|_E^2 = \min_x, \quad (54)$$

где α — снова параметр регуляризации. Решение задачи (54) удовлетворяет СЛАУ

$$(\alpha R^T R + E) x_\alpha = x^{(\text{оп})}. \quad (55)$$

Задается последовательность значений $\alpha = \alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_k$ и находится множество приближенных решений x_{α_k} , среди которых отбираются пробные решения — а именно такие, для которых

$$\delta_{\min}^2 \leq \|f_\delta - A\hat{x}_{\alpha_k}\|_E^2 \leq \delta_{\max}^2, \quad (56)$$

где, как обычно,

$$\hat{x}_{\alpha_k} = \tau_k x_{\alpha_k}, \quad \tau_k = \frac{(f_\delta, Ax_{\alpha_k})}{\|Ax_{\alpha_k}\|_E^2}. \quad (57)$$

После нахождения пробных решений \hat{x}_{α_k} окончательное приближенное решение находится с помощью простейшего правила усреднения пробных решений

$$\hat{x} = \tau \tilde{x}, \quad \tau = \frac{(f_\delta, A\tilde{x})}{\|A\tilde{x}\|_E^2}, \quad (58)$$

где

$$\tilde{x} = \frac{1}{K} \sum_k \hat{x}_{\alpha_k} \quad (59)$$

и K есть просто число пробных решений.

Ясно, что описанный прием (применяемый в том случае, когда все приближенные решения $\tilde{x}^{(k)}$ имеют достаточно приемлемое качество) представляет собой модификацию вариационного метода А. Н. Тихонова — в ней осуществляется необходимая фильтрация найденного опорного решения $x^{(\text{оп})}$. При этом, если матрица $R^T R$ — ленточная (с небольшой шириной ленты $2m + 1$, условно — при $2m + 1 \leq 11$), то решение систем (55) весьма экономично. Кроме того, эти системы (в силу малости параметра α и достаточно хорошей обусловленности матрицы $R^T R$) всегда очень хорошо обусловлены.

Итак, главное состоит в использовании эффективных (по быстрдействию и точности) методов нахождения приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$. Заметим сразу же, что у систем (23) соотношение между N (числом уравнений) и M (числом неизвестных) может быть любым. Этот факт имеет большое значение также в связи с тем, что в рамках новой теории регуляризации рекомендуется прием нахождения \hat{x} по подсистеме, т.е. прием выделения из системы некоторого количества уравнений, которые не

используются при нахождении \hat{x} , а используются для контроля найденного \hat{x} . Именно, вводится представление системы (23) в блочной форме

$$Ax = \begin{vmatrix} A_1 \\ - \\ - \\ A_2 \end{vmatrix} \times x = f_\delta = \begin{vmatrix} f_\delta^{(1)} \\ - \\ - \\ f_\delta^{(2)} \end{vmatrix}, \quad (60)$$

при этом вектор \hat{x} ищется как устойчивое приближенное решение подсистемы

$$A_1 x = f_\delta^{(1)}, \quad (61)$$

а вектор

$$\rho^{(2)} = f_\delta^{(2)} - A_2 x \quad (62)$$

используется для характеристики точности найденного решения \hat{x} . Если

$$\rho^{(1)} = f_\delta^{(1)} - A\hat{x}, \quad (63)$$

то должно быть

$$\gamma(\hat{x}) = \frac{\frac{1}{N_2} \|f_\delta^{(2)} - A\hat{x}\|_E^2}{\frac{1}{N_1} \|f_\delta^{(1)} - A\hat{x}\|_E^2} < \text{Crit}, \quad (64)$$

где Crit — заданное число (обычно Crit = 1 + ε , $\varepsilon > 0$ — достаточно мало); при этом в (64) N_1 и N_2 суть числа уравнений в подсистемах с матрицами A_1 и A_2 . Если (64) не выполняется, то осуществляется переход к новым подсистемам A'_1 и A'_2

$$A = \begin{vmatrix} A'_1 \\ - \\ - \\ A'_2 \end{vmatrix} \quad (65)$$

путем перевода части уравнений из подсистемы с матрицей A_2 в подсистему с матрицей A_1 . Этот прием может применяться несколько раз, пока не будет получен результат по контрольной подсистеме, удовлетворяющий принятому критерию.

3. Методы нахождения приближенных решений систем линейных алгебраических уравнений, допускающие глубокое распараллеливание вычислений. Сформулируем прежде всего три методологических положения (или общих принципа), которыми следует руководствоваться при разработке методов генерации приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$

1. Операции нахождения матриц $A^T A$ или AA^T в методах генерации приближенных решений *использоваться не должны*.

2. Методы генерации приближенных решений должны в главном определяться *последовательностями ортогональных преобразований* исходной системы (23); при этом наряду с классическими ортогональными преобразованиями, реализующими некоторые последовательности *гивенсовых вращений*, обеспечивающих аннулирование тех или иных элементов вектора f_δ и матрицы A , должны использоваться ортогональные преобразования в форме произведений элементарных матриц плоского вращения — с параметрами, задаваемыми существенно иначе, чем в гивенсовых вращении, что обеспечивает существенно большую устойчивость преобразований.

3. Методы генерации приближенных решений должны быть *универсальными* — в том смысле, что они применимы как в случаях систем (23) с $N \leq M$, так и в случаях систем с $N > M$.

Далее отметим следующий принципиальный момент: описываемые ниже методы генерации приближенных решений применяются не непосредственно к исходной системе (23)³, а к эквивалентной (23) системе вида

$$Bz = \kappa_\delta \check{e}_N, \quad (66)$$

где матрица B имеет тот же размер ($N \times M$), причем, если b_{ij} суть элементы этой матрицы, то

$$b_{N,j} = 0, \quad 1 \leq j \leq M - 1, \quad b_{N,M} > 0; \quad (67)$$

³Конечно, в силу сказанного в конце предыдущего раздела, речь фактически идет не о системе (23), а о некоторой ее подсистеме

$$A_1 x = f_\delta^{(1)}, \quad (*)$$

но на этом моменте каждый раз специально останавливаться не будем (он должен все время иметься читателем в виду).

что же касается вектора правой части системы (66), то он определяется следующими соотношениями:

$$\kappa_\delta = \|f_\delta\|_E \tag{68}$$

и

$$\check{e}_N = \left| \begin{array}{c|c} 0 & \begin{array}{c} \uparrow \\ N-1 \\ \downarrow \end{array} \\ \hline 1 & \begin{array}{c} \uparrow \\ 1 \\ \downarrow \end{array} \end{array} \right. . \tag{69}$$

Иначе говоря, система (66) есть *система в нормальной канонической форме*. При этом оборот “в . . . канонической форме” обозначает, что отличной от нуля является только одна компонента вектора правой части (в данном случае последняя), а оборот “нормальная . . .” утверждает то обстоятельство, что переход от (23) к (66) осуществляется в три этапа, из которых первый состоит в реализации диагонального преобразования

$$\hat{A} = AD^{-1}, \quad y = Dx, \tag{70}$$

где

$$D = \text{diag } d_j, \quad 1 \leq j \leq M, \quad d_j = \|a^{(j)}\|_E, \tag{71}$$

и $a^{(j)}$ суть j -й, $1 \leq j \leq M$, вектор-столбец матрицы A , так что

$$\|\hat{a}^{(j)}\|_E = 1, \quad 1 \leq j \leq M, \tag{72}$$

где $\hat{a}^{(j)}$ суть j -й столбец матрицы \hat{A} .

Что касается двух следующих этапов — преобразования системы

$$\hat{A}y = f_\delta \tag{73}$$

в систему (66), то имеется два различных варианта этих этапов.

I вариант (процедуры преобразования системы (73) в систему (66)) состоит в последовательном выполнении двух ортогональных преобразований (в этом и состоят указанные два этапа). В первом из них, которое имеет вид

$$\hat{\hat{A}} = V^T \hat{A}, \quad V^T f_\delta = \kappa_\delta \check{e}_N, \tag{74}$$

где κ_δ и \check{e}_N — те же, что и в (66) (т.е. определены соотношениями (68) и (69)), система (73) преобразуется в систему в канонической форме:

$$\hat{\hat{A}}y = \kappa_\delta \check{e}_N. \tag{75}$$

Второе из равенств (74) фактически определяет ортогональную по столбцам $(N \times N)$ -матрицу V , которая представима в форме произведения элементарных матриц плоского вращения:

$$V = \prod_{r=1}^{N-1} T_{j_r, N}(\varphi_r). \tag{76}$$

При этом ясно, что:

а) каждая из матриц $T_{j_r, N}(\varphi_r)$ реализует гивенсово вращение, обеспечивающее аннулирование компоненты $f_{i_r, \delta}$, $1 \leq i_r \leq N-1$, вектора правой части; при этом индекс r задается по принципу неубывания величин $|f_{i_r, \delta}|$;

б) преобразования $\hat{\hat{A}} = V^T \hat{A}$ в (74) эффективно распараллеливаются, если матрицу \hat{A} представить в блочной форме (каждый блок A_q содержит M_q столбцов, $\max_q |M_q| - \min_q |M_q| = \min$:

$$\hat{A} = \left| \hat{A}_1 \mid \hat{A}_2 \mid \dots \mid \hat{A}_Q \right| \tag{77}$$

и преобразования с матрицей V осуществляются параллельно по блокам).

Итак, рассмотренное первое преобразование переводит систему (23) в систему \hat{A} в нормальной (в силу (72) – (74)) канонической форме (в силу отличия от нуля лишь последней компоненты вектора правой части в (75)).

Второе ортогональное преобразование имеет вид

$$B = \hat{A}U, \quad z = U^T x \quad (78)$$

и обеспечивает переход к системе (66), у которой последняя строка имеет специальную форму, см. (67). Достигается это тем, что ортогональная по столбцам $(M \times M)$ -матрица представима в форме произведений матриц элементарного плоского вращения:

$$U = \prod_{s=1}^{M-1} T_{j_s, M}(\psi_s), \quad (79)$$

при этом каждая из матриц элементарного плоского вращения, фигурирующих в правой части (79), обеспечивает аннулирование соответствующей компоненты b_{N, j_s} , $1 \leq j_s \leq M-1$, последней строки матрицы B ; как обычно, индекс s выбирается по величине $|b_{N, j_s}|$, $1 \leq j_s \leq M-1$ (чем меньше эта величина, тем меньше значение s).

Итак, *первый вариант* перехода от системы (73) к системе (66) (в нормальной канонической форме, со свойством (67) матрицы B) описан полностью. Поэтому переходим к описанию *второго варианта*. В нем сначала осуществляется преобразование столбцов матрицы (73), и в этом состоит первый этап, а затем уже осуществляется преобразование, обеспечивающее переход к системе (66) в канонической форме.

Итак, во II варианте первый этап состоит в использовании преобразования

$$\hat{A}W = \mathcal{A}, \quad z = W^T y, \quad (80)$$

где W суть ортогональная по столбцам матрица, обеспечивающая выполнение соотношений

$$(\alpha^{(j)}, f_\delta) = 0, \quad 1 \leq j \leq M-1, \quad (\alpha^{(M)}, f_\delta) > 0, \quad (81)$$

где $\alpha^{(j)}$, $1 \leq j \leq M-1$, суть векторы-столбцы матрицы \mathcal{A} . Фактически матрица W представима в форме произведения матриц элементарного плоского вращения:

$$W = \prod_{r=1}^{M-1} T_{j_r, M}(\gamma_r), \quad (82)$$

где каждая из матриц $T_{j_r, M}(\gamma_r)$ обеспечивает раскоррелирование некоторого (j_r -го) столбца матрицы \hat{A} с вектором правой части f_δ ; при этом назначение индекса r осуществляется по величине $|(\hat{a}^{(j)}, f_\delta)|$ — чем меньше эта величина, тем меньше значение r .

В итоге получается система

$$\mathcal{A}z = f_\delta, \quad (83)$$

столбцы которой $\alpha^{(j)}$ удовлетворяют условиям (81). Систему (83) естественно именовать системой *в нормальной адаптивной форме* (адаптация задается условиями (81)).

Наконец, второй этап во втором варианте состоит в переходе от системы (83) к системе (66), которую в данном случае следует именовать системой *в нормальной адаптивной канонической форме*. Суть перехода с очевидностью состоит в использовании ортогонального преобразования матрицы \mathcal{A} и вектора правой части системы (83):

$$B = \Phi^T \mathcal{A}, \quad \Phi^T f_\delta = \kappa_\delta \check{e}_N, \quad \kappa_\delta = \|f_\delta\|_E, \quad (84)$$

где Φ — ортогональная по столбцам матрица, представимая в форме произведений матриц элементарного плоского вращения:

$$\Phi = \prod_{s=1}^{N-1} T_{j_s, N}(\eta_s), \quad (85)$$

с помощью которых (как это подробно описано выше, при рассмотрении первого варианта) последовательно аннулируются компоненты $f_{i, \delta}$ вектора правой части системы.

Итак, оба варианта перехода от системы (73) к эквивалентной ей системе (66) в нормальной канонической форме (с матрицей B , у которой элементы последней строки удовлетворяют условиям (67)) описаны

полностью; поэтому остается описать лишь полуитерационные методы генерации приближенных решений $\tilde{z}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, системы (66). Имеется целый ряд подобных методов, здесь будут описаны лишь два из них — а именно те, которые допускают достаточно глубокое распараллеливание вычислений.

Оба эти метода сначала описываются в простейшей форме — реализуемой при последовательном счете; варианты методов, в которых используется распараллеливание вычислений, обсуждаются в дальнейшем.

1 метод (в варианте последовательного счета). В нем используется последовательность вычислительных процедур (циклов), в каждом из которых находятся приближения $\tilde{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$ (и далее $\hat{x}^{(k)}$, как об этом сказано выше, см. формулы (44)–(46)). Принимается (B — матрица системы (66))

$$B = B_1, \quad z = z^{(1)}, \quad B_k = B_{k-1}\Phi_k, \quad z^{(k)} = \Phi_k^T z^{(k-1)}, \quad k = 2, 3, \dots, M-1, \quad (86)$$

где Φ_k суть ортогональные по столбцам матрицы, описываемые ниже. Матрицы B_k имеют столбцы $b_{(k)}^{(j)}$, $1 \leq j \leq M$, при этом столбцы представляются в такой форме:

$$b_{(k)}^{(j)} = \left| \begin{array}{c|c} \circ & \uparrow \\ b_{(k)}^{(j)} & N-1 \\ \hline & \downarrow \\ & \uparrow \\ b_{N,j}^{(k)} & 1 \\ & \downarrow \end{array} \right|, \quad (87)$$

т.е. $b_{N,j}^{(k)}$ суть элементы последней строки матрицы B_k . При этом имеем

$$b_{N,j}^{(k)} = 0, \quad 1 \leq j \leq M-k, \quad b_{N,j}^{(k)} \neq 0, \quad M-k+1 \leq j \leq M. \quad (88)$$

В соответствии с ортогональными преобразованиями матриц и векторов неизвестных (86) возникают системы линейных алгебраических уравнений

$$B_k z^{(k)} = \kappa_\delta \check{e}_N, \quad k = 1, 2, \dots, M-1. \quad (89)$$

Приближенные решения $\tilde{z}^{(k)}$ этих систем ищутся в форме

$$\tilde{z}^{(k)} = \left| \begin{array}{c|c} 0 & \uparrow \\ & M-1 \\ \hline & \downarrow \\ z_M^{(k)} & 1 \\ & \downarrow \end{array} \right|, \quad k = 1, 2, \dots, \quad (90)$$

а скалярные величины $z_M^{(k)}$ находятся из условий

$$F(z_M^{(k)}) = (b_{N,M}^{(k)} z_M^{(k)} - \kappa_\delta)^2 + (z_M^{(k)})^2 \left\| \overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} \right\|_E^2 = \min_{z_M^{(k)}}. \quad (91)$$

Решение задачи (91) с очевидностью дается соотношением, следующим из условия

$$\frac{dF(z_M^{(k)})}{dz_M^{(k)}} = 0, \quad (92)$$

т.е. соотношением

$$z_M^{(k)} = \frac{b_{N,M}^{(k)} \kappa_\delta}{(b_{N,M}^{(k)})^2 + \left\| \overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} \right\|_E^2}. \quad (93)$$

Соответственно имеем

$$\min_{z_M^{(k)}} F(z_M^{(k)}) = \frac{\left\| \overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} \right\|_E^2 / \left(b_{N,M}^{(k)} \right)^2}{1 + \left\| \overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} \right\|_E^2 / \left(b_{N,M}^{(k)} \right)^2} \kappa_\delta^2. \quad (94)$$

Отсюда с очевидностью следует, что ортогональные преобразования (86), т.е. ортогональные матрицы Φ_k , должны обеспечивать выполнение неравенств

$$\gamma_{k+1}^2 = \frac{\left\| \overset{\circ}{b}_{(k+1)}^{(M)} \right\|_E^2}{\left(b_{N,M}^{(k+1)} \right)^2} < \frac{\left\| \overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} \right\|_E^2}{\left(b_{N,M}^{(k)} \right)^2} = \gamma_k^2, \quad (95)$$

причем убывание величин γ_k^2 с ростом k должно быть достаточно быстрым (надо, чтобы неравенство $\min F(z_M^{(k)}) < \delta_{\min}^2$ достигалось, по крайней мере, при $k \leq M$, а желательно, при $k \ll M$; вопрос о том, как следует продолжать вычисления, если $\min F(z_M^{(M)}) > \delta_{\min}^2$, обсуждается ниже, но он имеет сугубо теоретическое значение).

Если приближенное решение $\tilde{z}^{(k)}$, определенное формулами (90) и (93), найдено, то приближенное решение $\tilde{x}^{(k)}$ системы (23) восстанавливается по нему в случае первого варианта редукции (23) к (66) с помощью соотношений:

$$\tilde{x}^{(1)} = D^{-1} U z^{(1)}, \quad \tilde{x}^{(k)} = D^{-1} \{ U \{ \Phi_2 \{ \dots \{ \Phi_k \tilde{z}^{(k)} \} K \} \} \}, \quad k = 2, 3, \dots \quad (96)$$

В случае использования второго варианта редукции (23) к (66) осуществляется замена: U на W и D^{-1} на E .

Итак, по существу остается лишь описать: во-первых, формирование матриц Φ_k , фигурирующих в ортогональных преобразованиях (86), $k = 2, 3, \dots, M$, а во-вторых, продолжение процедуры поиска приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$ в случае, когда неравенство $\min F(z_M^{(M)}) \leq \delta_{\min}^2$ не выполнилось.

Что касается матриц Φ_k , то они имеют следующую структуру:

$$\Phi_k = P_k T_{M-k+1, M}(\varphi_k), \quad k = 2, 3, \dots, M, \quad (97)$$

при этом P_k суть матрица перестановок, обеспечивающая получение столбца $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M-k+1)}$ (определение столбцов $\overset{\circ}{b}_{(k)}^{(j)}$ см. выше, формула (87)⁴, для которого величина

$$\left(\theta_{(k-1)}^{(j)} \right)^2 = \frac{\left(\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(j)}, \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \right)^2}{\left\| \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(j)} \right\|_E^2 \left\| \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \right\|_E^2}, \quad 1 \leq j \leq M - k + 1, \quad (98)$$

является максимальной. Иными словами, сначала для всех столбцов $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(j)}$, $1 \leq j \leq M - k + 1$, вычисляются значения величины $\left(\theta_{(k-1)}^{(j)} \right)^2$, см. (98), и определяется номер j^* -го столбца, для которого эта величина максимальна. Далее, если $j^* \neq M - k + 1$, столбцы $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(j^*)}$ и $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M-k+1)}$ переставляются. Что же касается матрицы $T_{M-k+1, M}(\varphi_k)$, то параметры этой матрицы элементарного плоского вращения ($\cos \varphi_k, \sin \varphi_k$) выбираются из условия

$$\frac{\left\| \overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} \right\|_E^2}{\left(b_{N,M}^{(k)} \right)^2} = \min_{\varphi_k}. \quad (99)$$

⁴Здесь через $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(N-k+1)}$ обозначен $(N - k + 1)$ -й столбец матрицы $\hat{B}_{k-1} = B_{k-1} P_k$, т.е. полученный после описанной выше процедуры получения столбца с номером $(M - k + 1)$ со значением $\max_j \left(\theta_{(k)}^{(j)} \right)^2$, $1 \leq j \leq M - k + 1$.

Очевидно, имеем

$$\overset{\circ}{b}_{(k)}^{(M)} = -\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(N-k+1)} \sin \varphi_k + \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \cos \varphi_k, \quad b_{N,M}^{(k)} = b_{N,M}^{(k-1)} \cos \varphi_k, \quad (100)$$

откуда следует развернутая формулировка задачи (99):

$$\mathcal{F}(t_k) = \frac{\left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(N-k+1)} \right\|_E^2 \operatorname{tg}^2 \varphi_k - 2 \left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(N-k+1)}, \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \right) \operatorname{tg} \varphi_k + \left\| \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \right\|_E^2}{\left(b_{N,M}^{(k)} \right)^2} = \min_{\varphi_k}. \quad (101)$$

Положив

$$\operatorname{tg} \varphi_k = t_k, \quad (102)$$

легко найдем, что использование необходимого признака экстремума дает

$$t_k = \frac{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M-k+1)}, \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \right)}{\left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M-k+1)} \right\|_E^2} \quad (103)$$

и

$$\min_{t_k} \mathcal{F}(t_k) = \frac{\left\| \overset{\circ}{b}_{(k-1)}^{(M)} \right\|_E^2}{\left(b_{N,M}^{(k)} \right)^2} \left(1 - \left(\theta_{(k-1)}^{(M-k+1)} \right)^2 \right) = \gamma_{k-1}^2 \left(1 - \left(\theta_{(k-1)}^{(M-k+1)} \right)^2 \right), \quad k = 2, 3, \dots, M \quad (104)$$

при само собой понятном смысле величины $\left(\theta_{(k-1)}^{(M-k+1)} \right)^2$. Из (104) и следует, что имеет место неравенство (95).

Таким образом, с ростом k величины γ_k^2 убывают, однако гарантии того, что выполнится неравенство $\gamma_M^2 < \delta_{\min}^2$, нет (хотя в случае, когда число M подлежащих определению неизвестных велико, например, когда $M \geq 10000$, вероятность достижения нужного неравенства, как правило, очень велика; однако значение того k_{\max} , для которого $\gamma_{k_{\max}}^2 < \delta_{\min}^2$, очень сильно зависит от вида матрицы $B = B_1$). Поэтому рассмотрим продолжение вычислительной процедуры тогда, когда фактически имеет место неравенство $\gamma_M^2 > \delta_{\min}^2$. В этом случае сначала осуществляется ортогональное преобразование

$$B_1^{(1)} = B_M \Psi_1, \quad z^{(M+1)} = \Psi_1^T z^{(M)}, \quad (105)$$

в котором ортогональная по столбцам матрица Ψ_1 , представляемая в форме произведения элементарных матриц плоского вращения

$$\Psi_1 = \prod_{\nu=1}^{M-2} T_{j_\nu, M-1} \left(\theta_\nu^{(1)} \right), \quad (106)$$

обеспечивает аннулирование всех, кроме двух последних, элементов последней (N -й) строки матрицы B_M , т.е. выполнение равенств

$$b_{N,j}^{(1;1)} = 0, \quad 1 \leq j \leq M-2, \quad (107)$$

где $b_{N,j}^{(1;1)}$ суть элементы матрицы $B_1^{(1)}$. Далее осуществляется последовательность ортогональных преобразований матрицы $B_1^{(1)}$, по смыслу аналогичных преобразованиям (86):

$$B_k^{(1)} = B_{k-1}^{(1)} \Phi_k^{(1)}, \quad z^{(M+k)} = \Phi_k^{(1),T} z^{(M+k-1)}, \quad k = 2, 3, \dots, M-1, \quad (108)$$

где $\Phi_k^{(1)}$ суть ортогональные матрицы, имеющие структуру

$$\Phi_k^{(1)} = P_k^{(1)} T_{M-k, M} \left(\varphi_k^{(1)} \right), \quad k = 2, 3, \dots, M-1, \quad (109)$$

где $P_k^{(1)}$ является матрицей перестановки, обеспечивающей получение $(M - k)$ -го столбца матрицы $\hat{B}_k^{(1)} = P_k^{(1)} B_{k-1}^{(1)}$ со свойством $(\hat{\theta}_{(k-1;1)}^{(M-k)})^2 = \max_j (\theta_{(k;1)}^{(j)})^2$,

$$(\theta_{(k-1;1)}^{(j)})^2 = \frac{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;1)}^{(j)}, \overset{\circ}{b}_{(k-1;1)}^{(M)} \right)^2}{\|b_{(k-1;1)}^{(j)}\|_E^2 \|b_{(k-1;1)}^{(M)}\|_E^2}. \quad (110)$$

Параметры матриц элементарного плоского вращения $T_{M-k,M}(\varphi_k^{(1)})$, фигурирующих в (109), с очевидностью определяются из условий, аналогичных (99), а именно

$$\frac{\|b_{(k;1)}^{(M)}\|_E^2}{(b_{N,M}^{(k;1)})^2} = \min_{\varphi_k^{(1)}}, \quad k = 2, 3, \dots, \quad (111)$$

при само собой понятных обозначениях.

Ясно далее, что имеем последовательность систем линейных алгебраических уравнений (продолжающих последовательность систем (89))

$$B_k^{(1)} z^{(M+k)} = \kappa_\delta \check{e}_N, \quad (112)$$

приближенные решения которых ищутся в форме

$$\tilde{z}^{(M+k)} = \left| \begin{array}{c|c} & \begin{array}{c} \uparrow \\ M-1 \\ \downarrow \\ \uparrow \\ 1 \\ \downarrow \end{array} \\ \hline 0 & \\ \hline \dots & \\ \hline z_{M+k}^{(k;1)} & \end{array} \right|, \quad k = 1, 2, 3, \dots, \quad (113)$$

а скаляры $z_{M+k}^{(k;1)}$ находятся из условий, полностью аналогичных (91). Отсюда ясны аналоги формул (92)–(94), (95), (96), (100)–(104), вывод которых предоставляется читателю. Ясно также, каким образом надо продолжать вычислительный процесс дальше, если выполнены все ортогональные преобразования (108)–(109), а величина квадрата евклидовой нормы вектора невязки для приближенного решения $\tilde{z}^{(2M-1)}$ оказалась больше δ_{\min}^2 . Однако можно утверждать, что с очень большой вероятностью в случае больших N и M ($P = NM \geq 10^8$) на практике такая ситуация места не имеет.

2 метод (в варианте последовательного счета). В нем также используется последовательность вычислительных процедур (циклов), в каждом из которых находятся приближения $\hat{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$ (и далее $\hat{x}^{(k)}$, как об этом сказано выше, см. формулы (44)–(46)). Принимается, как и в первом методе, что строится последовательность ортогональных преобразований матриц B_k и векторов $z^{(k)}$, определяемых соотношениями (86), но только теперь ортогональные по столбцам $(M \times M)$ -матрицы Φ_k определены по-другому, а именно

$$\Phi_k = \overset{\bullet}{\Phi}_k^{(1)} \overset{\bullet}{\Phi}_k^{(2)} T_{M-k+1,M}(\sigma_k), \quad (114)$$

где $\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(1)}$ и $\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(2)}$ суть ортогональные по столбцам $(M \times M)$ -матрицы, представимые в форме произведений элементарных матриц плоского вращения:

$$\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(1)} = \prod_{r=1}^{M-k} T_{r,M-k+1}(\psi_r^{(k)}), \quad k = 2, 3, \dots, M-1, \quad (115)$$

$$\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(2)} = \prod_{s=1}^{M-k} T_{s,M-k+1}(\varphi_s^{(k)}), \quad k = 2, 3, \dots, M-1. \quad (116)$$

Ясно, что теперь имеем следующую детализацию основных ортогональных преобразований (86):

$$\hat{B}_{k-1} = B_{k-1} \overset{\bullet}{\Phi}_k^{(1)}, \quad \hat{\hat{B}}_{k-1} = \hat{B}_{k-1} \overset{\bullet}{\Phi}_k^{(2)}, \quad B_k = \hat{B}_{k-1} T_{M-k+1, M}(\sigma_k), \quad k = 2, 3, \dots, M-1, \quad (117)$$

и

$$z^{(k)} = \Phi_k z^{(k-1)}, \quad k = 2, 3, \dots, M-1. \quad (118)$$

Итак, теперь необходимо привести условия на параметры матриц элементарного плоского вращения, фигурирующих в соотношениях (114)–(116), т.е. указать условия, которыми определяются параметры $(\cos \psi_r^{(k)}, \sin \psi_r^{(k)})$ и $(\cos \varphi_s^{(k)}, \sin \varphi_s^{(k)})$, а также $(\cos \sigma_k, \sin \sigma_k)$. В случае матриц $\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(1)}$ соответствующие условия таковы:

$$\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(r)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right) = 0, \quad r = 1, 2, 3, \dots, M-k, \quad \left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M-k+1)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right) > 0, \quad (118a)$$

где смысл векторов $\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(r)}$ должен быть читателю совершенно ясен — это векторы-столбцы матрицы \hat{B}_{k-1} с отброшенной последней (нулевой) компонентой. Что же касается матриц элементарного плоского вращения, фигурирующих в представлении ортогональной по столбцам матрицы $\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(2)}$, см. (116), то их параметры $(\cos \varphi_s^{(k)}, \sin \varphi_s^{(k)})$ определяются из условий

$$\frac{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;s)}^{(M-k+1)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)^2}{\left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;s)}^{(M-k+1)} \right\|_E^2 \left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right\|_E^2} = \max_{\varphi_s^{(k)}}, \quad (119)$$

где $\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;s)}^{(M-k+1)}$, $1 \leq s \leq M-k$, суть $(M-k+1)$ -й вектор-столбец (с отброшенной последней компонентой, равной нулю) матрицы, получаемой после преобразования с матрицей элементарного плоского вращения $T_{s, M-k+1}(\varphi_s^{(k)})$.

Читатель, несомненно, легко проведет необходимые (вполне элементарные) выкладки и получит следующие формулы для параметров описанных элементарных преобразований матриц B_{k-1} в матрицы \hat{B}_{k-1} с помощью матриц элементарного плоского вращения, фигурирующих в соотношениях (114)–(117):

$$\begin{aligned} \cos \psi_r^{(k)} &= \frac{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;r-1)}^{(M-k+1)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)}{\sqrt{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(r)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)^2 \left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;r-1)}^{(M-k+1)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)^2}}, \\ \sin \psi_r^{(k)} &= - \frac{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(r)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)}{\sqrt{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(r)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)^2 \left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;r-1)}^{(M-k+1)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(M)} \right)^2}} \end{aligned} \quad (120)$$

и

$$\begin{aligned} \cos \varphi_s^{(k)} &= \frac{\left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(s)} \right\|_E}{\sqrt{\left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(s)} \right\|_E^2 + \left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(s)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;s-1)}^{(M-k+1)} \right)^2}}, \\ \sin \varphi_s^{(k)} &= - \frac{\left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(s)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;s-1)}^{(M-k+1)} \right)}{\sqrt{\left\| \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(s)} \right\|_E^2 + \left(\overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1)}^{(s)}, \overset{\circ}{\hat{b}}_{(k-1;s-1)}^{(M-k+1)} \right)^2}} \end{aligned} \quad (121)$$

при само собой понятных обозначениях.

Теперь относительно преобразования матриц \hat{B}_{k-1} в матрицы B_k с помощью одной матрицы элементарного плоского вращения, а именно — матрицы $T_{M-k+1, M}(\sigma_k)$, см. (114) и (117). Ясно, что здесь имеется полная тождественность с тем преобразованием, см. (86), (97), (99)–(104), которое было подробно описано при изложении первого метода. Действительно, и во втором методе оно полностью определяется условием (99), которое обеспечивает максимальное убывание вектора невязки для приближенного решения $\tilde{z}^{(k)}$ (здесь напомним читателю, что во втором методе по-прежнему используются системы (89), приближенные решения которых опять-таки находятся по соотношениям (90)–(94)).

Остается лишь указать на то, что хотя каждая из процедур ортогональных преобразований (86) (для фиксированного значения k) во втором методе существенно более трудоемка, чем в первом методе (приблизительно в четыре раза), но зато сходимость приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$ (которые находятся по соотношениям (96), при само собой понятном различии в определении ортогональных матриц Φ_k) по невязке существенно быстрее, и именно по этой причине второй метод — в варианте последовательного счета — существенно предпочтительнее первого. В нем при больших значениях N и M (порядка 10^4) с вероятностью 1 неравенство $\|\hat{\rho}^{(k)}\|_E^2 \leq \delta_{\min}^2$ достигается при значениях k , существенно меньших M (как правило, требуется проведение лишь нескольких десятков циклов ортогональных преобразований).

Остается рассмотреть проблему распараллеливания вычислений, т.е. трансформации вычислительных процедур (подготовительных и нахождения последовательных приближений $\tilde{x}^{(k)}$ и далее $\hat{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$), описанных выше в варианте последовательного счета, в вычислительные процедуры с использованием параллельного счета.

В основе вычислительных процедур с использованием параллельных вычислений лежит конструктивная идея наделения исходной матрицы A , а также получаемых из нее матриц $A, \hat{A}, \hat{\hat{A}}, B, B_k, k = 1, 2, \dots$, блочной структурой:

$$\begin{aligned} A &= |A_1 |A_2| \dots |A_Q|, \\ \hat{A} &= |\hat{A}_1 | \hat{A}_2| \dots | \hat{A}_Q|, \\ \hat{\hat{A}} &= |\hat{\hat{A}}_1 | \hat{\hat{A}}_2| \dots | \hat{\hat{A}}_Q|, \\ B &= |B_1 |B_2| \dots |B_Q|, \end{aligned} \quad (122)$$

при этом $A_q, \hat{A}_q, \hat{\hat{A}}_q, B_q, q = 1, 2, \dots, Q$, суть матрицы размерностей $N \times M_q$, при этом в общем случае числа M_q неравные, но

$$\max_q M_q - \min_q M_q \leq 2. \quad (123)$$

Ясно, что все матрицы $A_q, \hat{A}_q, \hat{\hat{A}}_q, B_q$ трактуются как совокупности столбцов и хранятся по столбцам. При этом в диагональной матрице D , см. (70)–(71), также вводится блочная структура

$$D = |D_1 |D_2| \dots |D_Q|, \quad (124)$$

где D_q суть снова диагональные матрицы размера $N \times M_q$. Поэтому первое из соотношений в (70) переписывается в следующей форме:

$$\hat{A}_q = A_q D_q^{-1}, \quad q = 1, 2, \dots, Q, \quad (125)$$

из которой очевидно, что переход от матрицы A к матрице \hat{A} осуществляется с помощью использования Q процессоров — с параллельными вычислениями матриц \hat{A}_q по (124)–(125).

Ясно, что если векторы x и y , см. (70), также наделить блочной структурой:

$$x = \begin{pmatrix} x^{(1)} \\ \text{---} \\ x^{(2)} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ x^{(Q)} \end{pmatrix}, \quad y = \begin{pmatrix} y^{(1)} \\ \text{---} \\ y^{(2)} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ y^{(Q)} \end{pmatrix}, \quad (126)$$

где $x^{(q)}$ и $y^{(q)}$, $q = 1, 2, \dots, Q$, суть M_q -векторы, то тогда следует использовать соотношения

$$y^{(q)} = D_q x^{(q)}, \quad q = 1, 2, \dots. \quad (127)$$

Далее. При использовании первого варианта преобразования матрицы \hat{A} в матрицу B , имеем преобразования (74) и (78). Но очевидно, что в силу (122) и (74) имеем

$$\hat{A}_q = V^T \hat{A}_q, \quad q = 1, 2, \dots, Q, \quad (128)$$

и, более того, если $\hat{a}_q^{(j)}$ и $\hat{a}_q^{(j)}$, $1 \leq j \leq M_q$, $1 \leq q \leq Q$, суть векторы-столбцы матриц \hat{A}_q и \hat{A}_q , то

$$\hat{a}_q^{(j)} = V^T \hat{a}_q^{(j)}. \quad (129)$$

При использовании же ортогонального преобразования (78) вводится блочная структура матрицы B , см. (122), а также мультипликативное представление

$$U = \left(\prod_{q=1}^Q U_q \right) \times U_0, \quad (130)$$

в котором ортогональные по столбцам матрицы U_q , очевидным образом представимые в форме произведений матриц элементарного плоского вращения, осуществляют выметание элементов последней строки блоков \hat{A}_q в один (последний) элемент этой строки в блоке, а ортогональная по столбцам матрица U_0 (также очевидным образом представимая в форме произведений матриц элементарного плоского вращения) осуществляет выметание найденных в преобразованиях

$$\hat{A}_q U_q = \mathcal{B}_q, \quad q = 1, 2, \dots, Q, \quad (131)$$

ненулевых элементов в последних строках в единственный ненулевой элемент последней строки матрицы

$$B = |\mathcal{B}_1 | \mathcal{B}_2 | \dots | \mathcal{B}_Q | U_0. \quad (132)$$

Совокупность преобразований (131) также с очевидностью допускает распараллеливание вычислений.

Во втором варианте перехода от системы (23) к системе (66) – (67) опять-таки сначала осуществляется переход от A к \hat{A} и от x к y по (122), (124), (126), а затем используется новый (допускающий распараллеливание вычислений) алгоритм перехода от матрицы \hat{A} к матрице \mathcal{A} , а также от вектора y к вектору z , т.е. обеспечивающий нахождение матрицы \mathcal{A} , фигурирующей в (80) и (83). Действительно, матрица W в (80) представляется в форме

$$W = \left(\prod_{q=1}^Q W_q \right) \times W_0, \quad (133)$$

при этом используется последовательность преобразований

$$\hat{A}_q W_q = \overset{\circ}{A}_q, \quad q = 1, 2, \dots, Q, \quad (134)$$

и далее — преобразование

$$\mathcal{A} = \left| \overset{\circ}{A}_1 \left| \overset{\circ}{A}_2 \right| \dots \left| \overset{\circ}{A}_Q \right| \right| \times W_0. \quad (135)$$

При этом очевидным образом преобразования (134) с ортогональными по столбцам матрицами W_q обеспечивают некоррелированность всех столбцов в блоках $\overset{\circ}{A}_q$, кроме последних, с вектором правой части f_δ , а матрица W_0 обеспечивает некоррелированность всех столбцов матрицы $\mathcal{A} = AW$, кроме последнего, с вектором правой части. Ясно, что все преобразования (134) могут выполняться параллельно.

Итак, остается лишь описать алгоритм перехода от матрицы \mathcal{A} к матрице B , обеспечивающий распараллеливание вычислений. Имеем с очевидностью

$$\mathcal{A} = |\mathcal{A}_1 | \mathcal{A}_2 | \dots | \mathcal{A}_Q | \quad (136)$$

и поэтому следует лишь преобразования (84) записать в такой форме

$$B_q = \Phi^T \mathcal{A}_q, \quad q = 1, 2, \dots, Q, \quad (137)$$

$$b_q^{(j)} = \Phi^T \alpha_q^{(j)}, \quad 1 \leq q \leq Q, \quad 1 \leq j \leq M_q, \quad (138)$$

где $b_q^{(j)}$ и $\alpha_q^{(j)}$ суть векторы-столбцы матриц-блоков B_q и A_q .

Итак, оба варианта перехода от систем (23) к системам (66)–(67), обеспечивающие глубокое распараллеливание вычислений, полностью описаны. Поэтому необходимо остановиться еще на двух моментах:

во-первых, на трансформации описанных выше двух методов нахождения величин $z_M^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, в режиме последовательных вычислений в методы нахождения данных величин в режиме параллельных вычислений;

во-вторых, на проблеме распараллеливания вычислений при счете преобразований величин $z_M^{(k)}$ в векторы $\tilde{x}^{(k)}$, и далее — в векторы $\hat{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, и векторы $\hat{\rho}^{(k)} = f_\delta - A\hat{x}^{(k)}$.

Наиболее просто и эффективно трансформация режима последовательного счета в режим параллельного счета осуществляется в случае первого метода. При этом необходимо сразу же указать на введение принципиально нового конструктивного элемента — *динамической блочной структуры в матрицах* B_k , $k = 2, 3, \dots$ (при разных $k \geq 2$ блочная структура различна!).

Именно, при $k \geq 1$ принимается

$$B_k = \left| B_k^{(\text{akt})} \right| \left| B_k^{(\text{pass})} \right| \left| b_{(k)}^{(M)} \right|, \quad (139)$$

при этом $B_k^{(\text{akt})}$ суть подматрица матрицы B_k , образованная первыми $M - k + 1$ столбцами $b_{(k)}^{(j)}$, а матрица $B_k^{(\text{pass})}$ суть подматрица, образованная $(k - 1)$ столбцом матрицы B_k (при $k = 1$ матрица $B_k^{(\text{pass})}$ пуста). При реализации ортогонального преобразования матрицы B_k в матрицу B_{k+1} векторы-столбцы матрицы $B_k^{(\text{pass})}$ не используются, а используются только векторы-столбцы матрицы $B_k^{(\text{akt})}$, чем и объясняются принятые обозначения ($B_k^{(\text{akt})}$ — активная часть матрицы, $B_k^{(\text{pass})}$ — пассивная часть матрицы). При использовании динамической структуры матриц B_k по (139) распараллеливание вычислений реализуется через наделение матриц $B_k^{(\text{akt})}$ блочной структурой:

$$B_k^{(\text{akt})} = \left| B_1^{(k),(\text{akt})} \right| \left| B_2^{(k),(\text{akt})} \right| \dots \left| B_Q^{(k),(\text{akt})} \right|, \quad (140)$$

при этом блоки $B_q^{(k),(\text{akt})}$ имеют размеры $(N \times m_q)$, где

$$\sum_{q=1}^Q m_q = M - k + 1 \quad (141)$$

и величины m_q различны, однако и в данном случае

$$\max_q m_q - \min_q m_q \leq 2. \quad (142)$$

Что касается вектора-столбца $b_{(k)}^{(M)}$, то он хранится в отдельном, $(Q+1)$ -м блоке, в котором проводятся вычисления по нахождению величины $z_M^{(k)}$. Кроме того, необходимо выделение еще $(Q + 1)$ блоков для нахождения векторов $\hat{x}^{(k)}$ и векторов невязок $\hat{\rho}^{(k)}$ и величин $\|\hat{\rho}^{(k)}\|_E^2$.

Опишем теперь те модификации первого и второго методов, описанных выше в варианте последовательного счета для нахождения приближенных решений $\tilde{z}^{(k)}$, $k = 2, 3, \dots$, которые допускают глубокое распараллеливание вычислений на основе использования динамической блочной структуры (139).

Модификация первого метода состоит в том, что в каждом из блоков $B_q^{(k-1),(\text{akt})}$, помещенном в отдельный процессор, находится номер того столбца, который имеет наибольшее значение величины $\theta_{(k-1)}^{(j)}$, см. (98), для столбцов, принадлежащих данному блоку. Ясно, что подобные вычислительные процедуры выполняются параллельно. Найденные для всех Q блоков векторы-столбцы (со значениями параметров $\theta_{(k-1)}^{(j)}$, максимальных по блокам $B_q^{(k-1),(\text{akt})}$) передаются в тот $(Q+1)$ -й блок, в котором хранится вектор $b_{(k-1)}^{(M)}$. В этом блоке далее осуществляется процедура нахождения величины $z_M^{(k)}$. Найденное значение $z_M^{(k)}$ передается в группу из $(Q + 1)$ блоков, в которых осуществляется вычисление $\tilde{x}^{(k)}$, $\hat{x}^{(k)}$ и вектора невязки $\hat{\rho}^{(k)}$, что подробно описывается ниже. Ясно, что в эту группу процессоров передаются и соответствующие параметры ортогональных преобразований векторов искомым неизвестных.

Модификация второго метода состоит в том, что в каждом из блоков $B_q^{(k-1),(\text{akt})}$, также помещенных в отдельные процессоры (при этом в каждый процессор одновременно помещается и вектор-столбец $b_{(k-1)}^{(M)}$),

осуществляется парциальное ортогональное преобразование того самого типа, которое описано в варианте последовательного счета, см. (114) – (118)⁵, т.е. сначала осуществляется процедура раскорреляции всех столбцов каждого блока, кроме последнего, с вектором-столбцом $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^M$, последний же столбец имеет максимальное значение квадрата скалярного произведения с вектором-столбцом $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^M$, а затем осуществляется процедура нахождения последнего столбца в блоке, имеющего максимальное значения квадрата коэффициента корреляции с вектором-столбцом $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^M$. Полученные таким образом последние векторы-столбцы в каждом из Q блоков (процессоров) передаются в $(Q + 1)$ -й процессор, в котором осуществляется вычислительная процедура по этим Q векторам-столбцам, полностью аналогичная процедурам, выполненным в каждом из блоков. Ясно, что и в рассматриваемой модификации второго метода ортогональные преобразования, выполняемые для каждого блока в отдельном процессоре, реализуются в режиме параллельного счета. Наконец, после получения единственного столбца, максимально коррелированного со столбцом $\overset{\circ}{b}_{(k-1)}^M$, осуществляется окончательная процедура получения вектора-столбца $b_{(k)}^{(M)}$ на основе решения задачи (99), и далее — нахождения величины $z_M^{(k)}$, см. (93). Полученное значение величины $z_M^{(k)}$, равно как и параметры тех ортогональных преобразований, которые были выполнены в каждом из Q блоков (в каждом из Q процессоров), а также заключительного ортогонального преобразования в $(Q + 1)$ -м процессоре, передаются в $(Q + 1)$ процессор, в которых осуществляется нахождение векторов $\tilde{x}^{(k)}$ и $\hat{x}^{(k)}$, а также вектора $\hat{\rho}^{(k)} = f_\delta - A\hat{x}^{(k)}$ и величины $\|\hat{\rho}^{(k)}\|_E^2$.

Остается рассмотреть лишь проблему распараллеливания вычисления векторов вида Aw . Здесь w — заданный вектор, A — матрица исходной системы (1). Очевидно, при введении в A блочной структуры по (122) и введении у вектора w соответствующей блочной структуры

$$w = \begin{pmatrix} w_1 \\ \vdots \\ w_2 \\ \vdots \\ w_Q \end{pmatrix}, \quad \dim w_q = M_q, \tag{143}$$

можно использовать соотношения

$$Aw = \sum_{q=1}^Q \nu_q, \tag{144}$$

где

$$\nu_q = A_q w_q, \quad q = 1, 2, \dots, Q. \tag{145}$$

Ясно, что вычисление всех векторов ν_q по (145) выполняется в режиме параллельного счета. Полагая $w = \hat{x}^{(k)}$, $\nu_q = \nu_q^{(k)}$, окончательно имеем соотношение

$$\hat{\rho}^{(k)} = f_\delta - \sum_{q=1}^k \nu_q^{(k)}. \tag{146}$$

Конечно, “узким местом” в описанных модификациях (с использованием параллельных вычислений) первого и второго методов является вычисление, по найденным значениям величин $z_M^{(k)}$, векторов $\tilde{x}^{(k)}$. (Очевидно, вычисление векторов $\hat{x}^{(k)}$ по векторам $\tilde{x}^{(k)}$ эффективно распараллеливается — с использованием соотношений (143)–(145), если принять $w = \hat{x}^{(k)}$). Речь, естественно, идет о соотношении (96). Но объем вычислений по этому соотношению имеет порядок $O(kM)$, и при не очень больших значениях k (условно — при $k \leq 20$) выполнение расчетов в одном выделенном процессоре не скажется существенным образом на общем времени счета.

Заключение. Остается подвести лишь некоторые общие итоги. Этих итогов пять.

Первый итог состоит в том, что классическая теория регуляризации систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданными правыми частями и точно заданными матрицами, созданная

⁵Но только фигурирующая в (114) матрица элементарного плоского вращения заменяется единицей, матрицы же $\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(1)}$ и $\overset{\bullet}{\Phi}_k^{(2)}$ заменяются на $\overset{\bullet}{\Phi}_{k,q}^{(1)}$ и $\overset{\bullet}{\Phi}_{k,q}^{(2)}$, которые для каждого блока формируются по столбцам только этого блока.

в трудах А. Н. Тихонова, М. М. Лаврентьева, В. К. Иванова, см. [15, 16, 23–25], как правило, неадекватна (по целому ряду позиций) потребностям геофизической (и, по-видимому, не только геофизической) практики. В связи с этим необходима разработка новой теории, обеспечивающей необходимую адекватность. Такая теория предложена первым из авторов данной работы (см. [2–6] и раздел 2 настоящей статьи).

Второй итог состоит в том, что предложены принципиально важные способы редукции исходных систем (23) (при любом соотношении между числом уравнений N и числом неизвестных M) к системам (66) в *нормальной канонической форме*, т.е. с вектором правой части, имеющим всего одну (последнюю) ненулевую компоненту, и матрицей B , у которой элементы последней строки описываются соотношениями (67). Именно переход от системы общего вида (23) к системе (66)–(67) является определяющим с точки зрения создания эффективных итерационных методов принципиально нового типа. В работе описаны два конкретных способа (метода) перехода от систем (23) к системам (66)–(67), из которых более предпочтительным является второй способ.

Третий итог состоит в том, что описанные в разделе 3 методы нахождения устойчивых приближенных решений систем (66)–(67) основаны на принципиально новых ортогональных преобразованиях, ранее в вычислительной линейной алгебре не рассматривавшихся и не использовавшихся. В рамках новой теории регуляризации систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданной правой частью, а также систем более общего вида (с приближенно заданными и матрицами и правыми частями) именно итерационные процессы, основанные на использовании ортогональных преобразований, имеют определяющее значение.

Четвертый итог состоит в том, что второй из описанных в разделе 3 методов нахождения последовательных приближений $\tilde{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots, k_{\max}$, является (в варианте последовательного счета) весьма экономичным. А именно, он обеспечивает нахождение всего множества приближенных решений (включая все пробные решения) за число операций порядка $O((NM)^{1+\varepsilon})$, где $0 < \varepsilon < 1$, $\varepsilon = \varepsilon(A, f_\delta)$, при этом константа, фигурирующая в символе O , не слишком велика (меньше 30).

Пятый итог состоит в том, что описанные в разделе 3 два метода нахождения последовательностей приближенных решений $\tilde{x}^{(k)}$, $k = 1, 2, \dots$, систем линейных алгебраических уравнений (23) допускают достаточно глубокое распараллеливание вычислений и тем самым позволяют эффективно использовать многопроцессорные вычислительные системы. При этом первый метод распараллеливается несколько проще, чем второй метод.

Сформулированные пять основных итогов, по мнению авторов статьи, наглядно демонстрируют тот принципиально важный факт, что в общей проблеме регуляризации систем линейных алгебраических уравнений с приближенными данными имеется еще множество возможностей, позволяющих существенно повысить устойчивость и точность получаемых приближенных решений. В частности, существует возможность (которая будет подробно рассмотрена в последующих публикациях) использования принципиально новых алгоритмов диагонализации матриц, которые, в сочетании с приемом авторегуляризации, см. [5, 26–28], должны обеспечить требуемое дальнейшее повышение устойчивости и точности искомых приближенных решений, согласованных с имеющейся априорной информацией о свойствах помех во входных данных и о свойствах искомого решения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Страхов В.Н.* Критический анализ классической теории линейных некорректных задач // Геофизика. 1999. № 3. 3–9.
2. *Страхов В.Н.* Разработка теории и методов решения некорректно поставленных задач геофизики на базе идей оптимизации и регуляризации // Основные достижения ОИФЗ РАН за 1992–1996 гг. Т. 1. М.: ОИФЗ РАН, 1996. 53–59.
3. *Страхов В.Н.* Общая теория нахождения устойчивых приближенных решений систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданными правыми частями и матрицами, возникающих при решении задач геофизики // Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей. М.: ОИФЗ РАН, 1997. 38–42.
4. *Страхов В.Н.* Математический аппарат, используемый при конструировании алгоритмов нахождения устойчивых приближенных решений систем линейных алгебраических уравнений, возникающих в задачах гравиметрии и магнитометрии // Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей. М.: ОИФЗ РАН, 1997. 43–75.
5. *Страхов В.Н.* Экстремальные задачи, непараметрическая регуляризация и фильтрация в теории нахождения устойчивых приближенных решений систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданными правыми частями и матрицами // Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей. М.: ОИФЗ РАН, 1997. 76–78.

6. *Страхов В.Н.* Обобщенные QR -алгоритмы нахождения устойчивых приближенных решений систем линейных алгебраических уравнений с приближенно заданной правой частью, возникающих при решении линейных задач гравиметрии и магнитометрии // Вопросы теории и практики геологической интерпретации гравитационных, магнитных и электрических полей. М.: ОИФЗ РАН, 1997. 87–88.
7. *Ахиезер Н.И.* Лекции по вариационному исчислению. М.: ГИТТЛ, 1955.
8. *Коша А.* Вариационное исчисление. М.: Высшая школа, 1983.
9. *Лаврентьев М.А., Люстерник Л.А.* Курс вариационного исчисления. М.; Л.: Гостоптехиздат, 1950.
10. *Соболев С.Л.* Уравнения математической физики. М., 1954.
11. *Кошляков Н.С., Глинер Э.Б., Смирнов М.М.* Основные дифференциальные уравнения математической физики. М.: Физматгиз, 1962.
12. *Михлин С.Г.* Линейные уравнения в частных производных. М.: Высшая школа, 1977.
13. *Бакушинский А.Б., Гончарский А.В.* Некорректные задачи. Численные методы и приложения. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989.
14. *Воеводин В.В.* О методе регуляризации // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1969. **9**, № 3. 673–675.
15. *Иванов В.К., Васин В.В., Тиханов В.П.* Теория линейных некорректных задач и ее приложения. М.: Наука, 1978.
16. *Лаврентьев М.М.* О некоторых некорректных задачах математической физики. Новосибирск: Изд-во СО АН СССР, 1962.
17. *Лаврентьев М.М.* Условно-корректные задачи для дифференциальных уравнений. Новосибирск: НГУ, 1973.
18. *Лаврентьев М.М., Романов В.Г., Шишатский С.П.* Некорректные задачи математической физики и анализа. М.: Наука, 1980.
19. *Леонов А.С.* Метод минимальной псевдообратной матрицы и решение на его основе некорректных задач линейной алгебры // Теория и методы решения некорректно поставленных задач и их приложения. Новосибирск: ВЦ СО АН СССР, 1983.
20. *Леонов А.С.* Метод минимальной псевдообратной матрицы // Журн. вычисл. математики и мат. физики. 1987. **27**, № 8. 1123–1138.
21. *Лисковец О.А.* Вариационные методы решения неустойчивых задач. Минск: Наука и техника, 1981.
22. *Морозов В.А.* Регулярные методы решения некорректно поставленных задач. М.: Наука, 1987.
23. *Тихонов А.Н., Арсенин В.Я.* Методы решения некорректных задач. Изд. 3 - е. М.: Наука, 1986.
24. *Тихонов А.Н.* Некорректно поставленные задачи и методы их решения. М.: Изд-во Моск. ун-та, 1974.
25. *Тихонов А.Н., Гончарский А.В., Степанов В.В., Ягола А.Г.* Регуляризирующие алгоритмы и априорная информация. М.: Наука, 1985.
26. *Страхов В.Н., Тетерин Д.Е.* Линейные трансформации гравитационных и магнитных аномалий в случае многоэлементных съемок при произвольных сетях наблюдений // Докл. АН СССР. 1991. **318**, № 3. 572–576.
27. *Страхов В.Н., Тетерин Д.Е.* О методе авторегуляризации для решения линейных задач гравиметрии и магнитометрии // Докл. АН СССР. 1991. **318**, № 4. 871–874.
28. *Страхов В.Н., Тетерин Д.Е.* Метод авторегуляризации при решении линейных трансформаций гравитационных и магнитных аномалий // Докл. АН СССР. 1991. **318**, № 4. 867–871.

Поступила в редакцию
22.02.2001
