

ЧИСЛЕННЫЕ МЕТОДЫ И АНАЛИЗ ДАННЫХ

Об одном методе вычисления обобщённых нормальных решений недоопределённых линейных систем

А.И. Жданов¹, Ю.В. Сидоров¹

¹Самарский государственный технический университет, г. Самара, Россия

Аннотация

В статье представлен новый метод вычисления обобщённых нормальных решений недоопределённых систем линейных алгебраических уравнений на основе специальных расширенных систем. Преимуществом данного метода является возможность решения очень плохо обусловленных (возможно разреженных) недоопределённых линейных систем большой размерности с использованием современных вариантов метода итерационного уточнения на основе метода обобщённых минимальных невязок (GMRES-IT). Представлены результаты применения рассматриваемого алгоритма для решения задачи балансировки химических уравнений (баланс масс).

Ключевые слова: недоопределённые линейные системы, обобщённое нормальное решение, расширенная система.

Цитирование: Жданов, А.И. Об одном методе вычисления обобщённых нормальных решений недоопределённых линейных систем / А.И. Жданов, Ю.В. Сидоров // Компьютерная оптика. – 2020. – Т. 44, № 1. – С. 133-136. – DOI: 10.18287/2412-6179-CO-607.

Citation: Zhdanov AI, Sidorov YV. On a method for calculating generalized normal solutions of underdetermined linear systems. Computer Optics 2020; 44(1): 133-136. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-607.

Введение

Недоопределённые системы линейных алгебраических уравнений (СЛАУ) возникают при решении различных прикладных задач, например, в сейсмической томографии [1], при обработке сигналов с утраченными фрагментами [2], при расчётах вариообъективов [3] и др.

Для нахождения нормального решения недоопределённых СЛАУ в настоящее время используются следующие подходы: методы, основанные на сингулярном разложении матриц (*SVD*-разложение), методы нормальных уравнений и метод расширенных систем. Например, в работе [4] для решения разреженных недоопределённых СЛАУ с матрицами специальной структуры предложен параллельный алгоритм с использованием ортогональных разложений. Однако перечисленные методы не позволяют вычислять обобщённые нормальные решения, минимизирующие расстояние до произвольного априори заданного вектора («пробного» решения).

Для нахождения решений переопределённых разреженных СЛАУ большой размерности существует известный подход, основанный на использовании расширенных систем, который обладает рядом преимуществ [5]. Для недоопределённых разреженных СЛАУ большой размерности в настоящее время нет подхода, позволяющего вычислять обобщённые нормальные решения.

В статье предлагается новый метод нахождения обобщённых нормальных решений недоопределённых,

возможно разреженных и плохо обусловленных, СЛАУ большой размерности на основе специальной расширенной системы.

1. Метод расширенной системы

Рассмотрим недоопределённую СЛАУ

$$Au = f, \quad (1)$$

где $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $u \in \mathbb{R}^n$, $f \in \mathbb{R}^m$, $m < n$, $\text{rank}(A) = m$.

Необходимо вычислить нормальное решение u_* относительно произвольного (априори заданного) вектора u_0 :

$$u_* = \min_{u \in U} \|u - u_0\|, \quad (2)$$

где $U = \{u \in \mathbb{R}^n : Au = f\}$ – множество решений $Au = f$, $u_0 \notin U$, $\|\cdot\| = \|\cdot\|_2$ – евклидова векторная норма. В дальнейшем (2) будем называть обобщённым нормальным решением.

Известно [6], что решение задачи (2) имеет вид

$$u_* = A^+ f + (I_n - A^+ A) u_0, \quad (3)$$

где I_n – единичная матрица порядка n , A^+ – псевдообратная матрица Мура–Пенроуза матрицы A [5].

Однако, как отмечалось во введении, непосредственное нахождение псевдообратной матрицы, например, с помощью *SVD*-разложения, для разреженных матриц большой и сверхбольшой размерности сопряжено со значительными вычислительными затратами.

Задача (2) также может быть решена на основе подхода, известного как вторая трансформация Гаусса.

По условию задачи имеем $u \in U$ и в соответствии с (2) $(u - u_0) \perp \ker A$, из этого следует, что

$$(u - u_0) \in \text{Im } A^T, \tag{4}$$

или

$$u = A^T z + u_0. \tag{5}$$

Подставив u в (1), получаем

$$A(A^T z + u_0) = f \tag{6}$$

или

$$AA^T z = f - Au_0. \tag{7}$$

Решая (6), находим вектор $z = (AA^T)^{-1}(f - Au_0)$. Подставив этот вектор в (5), получаем искомое решение u^* .

Если вектор $u_0 = 0$ то из (3) следует, что $u^* = A^+ f$.

Одним из главных недостатков при переходе к системе (7) является значительное увеличение спектрального числа обусловленности матрицы AA^T , так как

$$\mu_2(AA^T) = \mu_2^2(A) = \frac{\sigma_1^2(A)}{\sigma_m^2(A)},$$

где $\sigma_1(A)$ и $\sigma_m(A)$ – максимальное и минимальное сингулярные числа матрицы A , $\sigma_m(A) > 0$, так как $\text{rank}(A) = m$.

При больших числах обусловленности матрицы системы (6) имеет место численная неустойчивость решения задачи известными прямыми методами.

С другой стороны, в общем случае трудно предсказать степень разреженности матрицы AA^T при её формировании. Как показано в [7], матрица AA^T может оказаться сильно заполненной даже в случае, когда среднее число ненулевых элементов в строке матрицы A примерно равно \sqrt{m} . Например, матрицы с такой структурой возникают в задачах реконструкции двумерных изображений из проекций [8].

В данной работе для решения задачи (2) предлагается подход, основанный на использовании специальной расширенной системы.

Запишем уравнение (5) в виде

$$u - A^T z = u_0. \tag{8}$$

Тогда, объединяя уравнения (8) и (1), приходим к расширенной системе вида

$$\begin{pmatrix} I_n & -A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ f \end{pmatrix}. \tag{9}$$

Заменяя в (9) $z = -y$, получаем её симметричную форму

$$\begin{pmatrix} I_n & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_0 \\ f \end{pmatrix} \Leftrightarrow B\theta = g, \tag{10}$$

где

$$B \in \mathbb{R}^{(n+m) \times (n+m)}, \theta = \begin{pmatrix} u \\ y \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+m}, g = \begin{pmatrix} u_0 \\ f \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{n+m}.$$

Утверждение 1. Решение системы (10) существует и притом единственно $\theta_* = (u_*^T, y_*^T)^T$, где u_* является решением (2), т.е. обобщённым нормальным решением.

Доказательство. Для доказательства этого утверждения достаточно показать невырожденность матрицы B в расширенной системе (10).

Покажем, что матрица B в расширенной системе (10) всегда невырожденная.

В [9] показано, что собственные значения $\lambda_i(B)$ матрицы B равны

$$\lambda_i(B) = \begin{cases} \frac{1}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{1}{4} + \sigma_i^2\right)}, & i = 1, 2, \dots, m; \\ 1, & i = m + 1, \dots, m + n, \end{cases} \tag{11}$$

где σ_i – сингулярные числа матрицы A , $i = 1, 2, \dots, m$.

Так как $\text{rank}(A) = m < n$, все сингулярные числа матрицы A отличны от нуля, т.е. $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_m > 0$. Следовательно, все собственные значения $\lambda_i(B) \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, m + n$ и $\det(B) \neq 0$. Таким образом, система (10) имеет единственное решение $\theta_* = (u_*^T, y_*^T)^T$. □

Из условия (4) следует, что $\omega(u - u_0) \in \text{Im } A^T$ для любого $\omega > 0$. Тогда систему (10) можно представить в виде:

$$\begin{pmatrix} \omega I_n & A^T \\ A & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u \\ z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega u_0 \\ f \end{pmatrix} \Leftrightarrow B_\omega \theta = g_\omega, \tag{12}$$

здесь

$$g_\omega = \begin{pmatrix} \omega u_0 \\ f \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(n+m)}, \omega > 0.$$

Параметр ω позволяет контролировать число обусловленности системы (12), что может быть использовано для повышения вычислительной устойчивости решения расширенной системы (12).

Покажем, что матрица B_ω при всех $\omega > 0$ невырожденная и, следовательно, система (12) всегда имеет единственное решение.

Утверждение 2. Решение системы (12) при любых $\omega > 0$ существует и притом единственно $\theta_* = (u_*^T, y_*^T)^T$.

Доказательство. Доказательство этого утверждения аналогично доказательству Утверждения 1.

Покажем невырожденность матрицы B_ω расширенной системы (12).

Сингулярные числа матрицы A отличны от нуля, $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_m > 0$, следовательно, все собственные значения $\lambda_i(B) \neq 0$, $i = 1, 2, \dots, m + n$ и равны

$$\lambda_i(B_\omega) = \begin{cases} \frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{4} + \sigma_i^2\right)}, & i = 1, 2, \dots, m, \\ \omega, & i = m+1, \dots, m+n. \end{cases} \quad (13)$$

Таким образом, определитель матрицы $B_\omega \neq 0$, из чего следует, что система (12) имеет единственное решение. \square

Рассмотрим возможные способы выбора параметра ω в (12).

В работе [10] предложен способ выбора $\hat{\omega}$, который минимизирует число обусловленности матрицы B_ω расширенной системы:

$$\omega = \hat{\omega} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sigma_m(A) \Rightarrow \kappa_2(B_\omega) \approx \sqrt{2} \kappa_2(A), \quad (14)$$

где $\kappa_2(B_\omega)$ – спектральное число обусловленности матрицы B_ω расширенной системы (12), $\kappa_2(A)$ – спектральное число обусловленности матрицы A исходной задачи (1).

2. Численные результаты

В качестве иллюстративного примера рассмотрим задачу балансировки химических уравнений, которая сводится к определению (целочисленных) стехиометрических коэффициентов (баланс масс). Следует отметить, что в зависимости от рассматриваемого химического процесса вычисление целочисленных стехиометрических коэффициентов требуется не всегда.

Современные подходы [11] для определения стехиометрических коэффициентов основаны на решении однородных недоопределённых систем линейных алгебраических уравнений вида

$$Au = 0, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad u \in \mathbb{R}, \quad m < n, \quad \text{rank}(A) = m. \quad (15)$$

Здесь A – матрица коэффициентов химической реакции, u – вектор неизвестных целочисленных стехиометрических коэффициентов.

В дальнейшем будем полагать, что химические реакции возможны и имеют одну степень свободы. Это означает, что размерность пространства решений $L = \{u \in \mathbb{R}^n : Au = 0\}$ однородной СЛАУ (15) равна 1:

$$\dim(L) = n - \text{rank}(A) = n - m = 1. \quad (16)$$

Одним из недостатков известных методов решения задачи (15) является применение целочисленной арифметики, что значительно усложняет вычислительный процесс [12].

Задачу определения целочисленных стехиометрических коэффициентов с помощью специальной расширенной системы (9) можно разделить на следующие этапы [13]

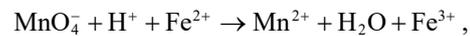
1. Решение задачи

$$u_* = \arg \min \|u - u_0\|, \\ \text{где } u_0 = \frac{1}{\sum_{i=1}^n 1} (1, \dots, 1)^T \text{ с использованием (9) при } f = (0, \dots, 0)^T.$$

Выбор единичного вектора в качестве вектора пробного решения u_0 – наиболее простой способ выбора вектора, отличного от нулевого и не принадлежащего области решений системы (15).

2. Перевод вектора u_* из вещественных чисел в целые (если необходимо).

Рассмотрим следующее несбалансированное уравнение химической реакции



или в математической формулировке

$$u_1 \text{MnO}_4^- + u_2 \text{H}^+ + u_3 \text{Fe}^{2+} = u_4 \text{Mn}^{2+} + u_5 \text{H}_2\text{O} + u_6 \text{Fe}^{3+}. \quad (17)$$

Для уравнения (17) матрица коэффициентов имеет вид

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 4 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 1 & 2 & -2 & 0 & -3 \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Для нахождения стехиометрических коэффициентов уравнения (17) на первом этапе вычисляется обобщённое нормальное решение задачи (2) с помощью расширенной системы (9), где $f = (0, \dots, 0)^T \in \mathbb{R}^5$, $u_0 = (1, \dots, 1)^T \in \mathbb{R}^6$.

Решение (вещественное) u_* системы (9):

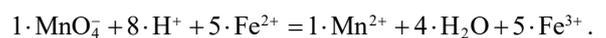
$$u_* = \begin{pmatrix} 0.181818181818182 \\ 1.45454545454545 \\ 0.909090909090910 \\ 0.181818181818182 \\ 0.727272727272727 \\ 0.909090909090909 \end{pmatrix}. \quad (19)$$

Для перевода вещественных коэффициентов в целые воспользуемся стандартным подходом [13].

Окончательно получаем вектор целочисленных стехиометрических коэффициентов:

$$u = (1, 8, 5, 1, 4, 5)^T.$$

Таким образом, сбалансированное уравнение химической реакции имеет следующий вид



Заключение

В работе представлен новый метод вычисления обобщённых нормальных решений недоопределённых систем линейных алгебраических уравнений на основе специальных расширенных систем (9) и (12).

Для нахождения решений систем (9) и (12) могут применяться известные методы, основанные на LU - или QR -разложениях.

В случае плохой обусловленности матрицы A задачи (1), (2) для нахождения устойчивых решений на основе специальной расширенной системы (12) эффективно применять итерационное уточнение, аналогично задачам наименьших квадратов (с матрицей A полного столбцового ранга), предложенное в работе [9] Бьёрком (Å. Björck).

В работе [14] предложен новый алгоритм итерационного уточнения с преобуславливанием на основе метода обобщённых минимальных невязок (GMRES-IT) для очень плохо обусловленных разреженных линейных систем большой размерности. Данный подход можно эффективно использовать для решения очень плохо обусловленных и разреженных задач (1), (2) большой размерности на основе расширенной системы (12).

Литература

1. Некорректные задачи. Численные методы и приложения / А.Б. Бакушинский, А.В. Гончарский. – М.: Изд-во Моск. ун-та, 1989. – 199 с.
2. **Поспелов, В.В.** Метод восстановления утраченных фрагментов сигнала / В.В. Поспелов, А.В. Чичагов // Автометрия. – 1988. – № 1. – С. 60-64.
3. **Рожков, О.В.** Особенности теории и практики научной школы МГТУ им. Н.Э. Баумана «Разработка вариосистем» / О.В. Рожков, Д.Е. Пискунов, П.А. Носов, В.Ю. Павлов, А.М. Хорохоров, А.Ф. Ширанков // Компьютерная оптика. – 2018. – Т. 42, № 1. – С. 72-83. – DOI: 10.18287/2412-6179-2018-42-1-72-83.
4. **Sukru Torun, F.** Parallel minimum norm solution of sparse block diagonal column overlapped underdetermined systems / F. Sukru Torun, M. Manguoglu, C. Aykanat // ACM Transactions on Mathematical Software. – 2017. – Vol. 43, Issue 4. – 31. – DOI: 10.1145/3004280.
5. Numerical methods in matrix computation / Å. Björck. – New York: Springer, 2015.
6. Регрессия, псевдоинверсия и рекуррентное оценивание / А. Алберт. – М.: Наука, 1977.
7. **Björck, Å.** Accelerated projection methods for computing pseudoinverse solutions of systems of linear equations / Å. Björck, T. Elfving // BIT Numerical Mathematics. – 1979. – Vol. 19, Issue 2. – P. 145-163.
8. **Herman, G.T.** ART: Mathematics and applications / G.T. Herman, A. Lent, S.W. Rowland // Journal of Theoretical Biology. – 1973. – Vol. 42. – P. 1-32.
9. **Björck, Å.** Iterative refinement of linear least squares solutions / Å. Björck // BIT Numerical Mathematics. – 1967. – Vol. 7, Issue 4. – P. 257-278.
10. **Björck, Å.** Numerical stability of methods for solving augmented systems / Å. Björck // Proceedings of Recent Developments in Optimization Theory and Nonlinear Analysis. – 1997. – P. 51-60.
11. **Herman, W.C.** On balancing chemical equations: Past and present / W.C. Herman // Journal of Chemical Education. – 1997. – Vol. 74, Issue 11. – 1359.
12. **Sen, S.K.** Chemical equation balancing: An integer programming approach / S.K. Sen, H. Agarwal, K. Sen // Mathematical and Computer Modelling. – 2006. – Vol. 44, Issue 7. – P. 678-691. – DOI: 10.1016/j.mcm.2006.02.004.
13. **Soleimani, F.** Some matrix iterations for computing generalized inverses and balancing chemical equations / F. Soleimani, P.S. Stanimirović, F. Soleymani // Algorithms. – 2015. – Vol. 8. – P. 982-998.
14. **Carson, E.** A new analysis of iterative refinement and its application to accurate solution of ill-conditioned sparse linear systems / E.A. Carson, N.J. Higham // SIAM Journal on Scientific Computing. – 2017. – Vol. 39, Issue 6. – P. A2834-A2856. – DOI: 10.1137/17M1122918.

Сведения об авторах

Жданов Александр Иванович, в 1975 г. окончил факультет автоматики и измерительной техники Куйбышевского политехнического института, в 1983 г. – аспирантуру Института проблем управления АН СССР (г. Москва) и там же защитил кандидатскую диссертацию по специальности «Техническая кибернетика и теория информации», в 1992 г. защитил в Санкт-Петербургском техническом университете диссертацию на соискание учёной степени доктора физико-математических наук. С 1993 г. профессор по кафедре прикладной математики. С 1992 г. по 2012 г. – заведующий кафедрой прикладной математики СГАУ. С декабря 2012 заведующий кафедрой высшей математики и прикладной информатики СамГТУ. Научные интересы: вычислительная линейная алгебра, некорректные и плохо обусловленные задачи, анализ данных, математическое моделирование. E-mail: zhdanovaleksan@yandex.ru.

Сидоров Юрий Вячеславович, в 2002 году окончил магистратуру Самарской государственной архитектурно-строительной академии (СамГАСА), с 2016 года работает старшим преподавателем кафедры высшей математики и прикладной информатики СамГТУ. Область научных интересов: вычислительная линейная алгебра, параллельные вычисления, математическое моделирование. E-mail: linuxboy2007@gmail.com.

ГРНТИ: 27.41.15

Поступила в редакцию 26 июля 2019 г. Окончательный вариант – 2 декабря 2019 г.

On a method for calculating generalized normal solutions of underdetermined linear systems

A.I. Zhdanov¹, Y.V. Sidorov¹

¹ Samara State Technical University, Samara, Russia

Abstract

The article presents a novel algorithm for calculating generalized normal solutions of underdetermined systems of linear algebraic equations based on special extended systems. The advantage of this method is the ability to solve very poorly conditioned (possibly sparse) underdetermined linear systems of large dimension using modern versions of the iterative refinement method based on the generalized minimum residual method (GMRES - IT). Results of applying the considered algorithm to solve the problem of balancing chemical equations (mass balance) are presented.

Keywords: underdetermined linear systems, generalized normal solution, augmented systems.

Citation: Zhdanov AI, Sidorov YV. On a method for calculating generalized normal solutions of underdetermined linear systems. *Computer Optics* 2020; 44(1): 133-136. DOI: 10.18287/2412-6179-CO-607.

References

- [1] Bakushinsky AB, Gonchark AV. Illposed tasks. Numerical methods and applications [In Russian]. Moscow: MGU Publisher; 1989.
- [2] Pospelov VV, Chichagov AV. Method for recovering lost signal fragments [In Russian]. *Avtometriya* 1988; 1: 60-64.
- [3] Rozhkov OV, Piskunov DE, Nosov PA, Pavlov VYu, Khorokhorov AM, Shirankov AF. Bauman MSTU scientific school "Zoom lens design": features of theory and practice. *Computer Optics* 2018; 42(1): 72-83. DOI: 10.18287/2412-6179-2018-42-1-72-83.
- [4] Sukru Torun F, Manguoglu M, Aykanat C. Parallel minimum norm solution of sparse block diagonal column overlapped underdetermined systems. *ACM Trans Math Softw* 2017; 43(4): 31. DOI: 10.1145/3004280.
- [5] Björck Å. Numerical methods in matrix computation. New York: Springer; 2015.
- [6] Regression and the Moore-Penrose Pseudoinverse /A. Albert - Academic Press. New York and London, 1972.
- [7] Björck Å, Elfving T. Accelerated projection methods for computing pseudoinverse solutions of systems of linear equations. *BIT Numerical Mathematics* 1979, 19(2), 145-163.
- [8] Herman GT, Lent A, Rowland SW. ART: Mathematics and applications. *J Theor Biol* 1973; 42: 1-32.
- [9] Björck Å. Iterative refinement of linear least squares solutions. *BIT Numerical Mathematics* 1967; 7(4): 257-278.
- [10] Björck Å. Numerical stability of methods for solving augmented systems. *Proceedings of Recent Developments in Optimization Theory and Nonlinear Analysis* 1997: 51-60.
- [11] Herman WC. On balancing chemical equations: Past and present. *J Chem Edu* 1997; 74(11): 1359.
- [12] Sen SK, Agarwal H, Sen K. Chemical equation balancing: An integer programming approach. *Mathematical and Computer Modelling* 2006; 44(7): 678-691. DOI: 10.1016/j.mcm.2006.02.004.
- [13] Soleimani F, Stanimirović PS, Soleymani F. Some matrix iterations for computing generalized inverses and balancing chemical equations. *Algorithms* 2015; 8: 982-998.
- [14] Carson E, Higham NJ. A new analysis of iterative refinement and its application to accurate solution of ill-conditioned sparse linear systems. *SIAM Journal on Scientific Computing* 2017; 39(6): A2834-A2856. DOI: 10.1137/17M1122918.

Authors' information

Alexander Ivanovich Zhdanov, in 1975 graduated from Automatic Equipment and Measuring Technique faculty of Kuibyshev Polytechnical Institute, in 1983 postgraduate study of Institute of Problems of Control of Academy of Sciences of the USSR (Moscow) and in the same place defended the master's thesis in "An engineering cybernetics and the information theory", in 1992 defended at the St. Petersburg Technical University the dissertation on competition of an academic degree of the doctor of Physical and Mathematical Sciences. Since 1993 professor of Applied Mathematics department. From 1992 to 2012 – the head of Applied Mathematics department of SGAU. Since December, 2012 to the present the head of Higher Mathematics and Applied Informatics department of SAMGTU. Scientific interests: computing linear algebra, the incorrect and ill-posed problems, data analysis, and mathematical simulation.

Yury Vyacheslavovich Sidorov, in 2002 graduated from magistracy of Samara State Architectural and Construction Academy (SAMGASA, now – Samara State Architectural and Construction University – SGASA), works as the Senior Lecturer of SAMGTU. Area of scientific interests: computing linear algebra, parallel computing, and mathematical simulation.

Received July 26, 2019. The final version – December 2, 2019.
