УДК 519.65

М.С. Баранова, В.В. Гладков, Е.Ф. Ромашевская

ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ТОЧНОСТИ РАЗЛИЧНЫХ АЛГОРИТМОВ ПОСТРОЕНИЯ ОРТОНОРМИРОВАННОГО БАЗИСА

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е.Алексеева

В прикладной математике часто встречается необходимость решать задачи, известные под названием задачи сжатия информации. В статье рассматривается следующая задача такого типа из вычислительной алгебры. Для заданного множества S векторов n-мерного евклидова пространства E^n требуется найти подпространство $E^k \subset E^n$, линейные комбинации векторов которого аппроксимируют элементы множества S. Дается новый алгоритм решения этой задачи вместе с алгоритмом нахождения ортонормированного базиса. Произведена проверка этого алгоритма и еще четырех известных алгоритмов на экспериментальном материале. Экспериментальные данные были получены компьютерным моделированием нормально распределенных систем случайных величин.

Результаты проверки показывают, что новый алгоритм позволяет работать с гораздо большей начальной информацией.

Ключевые слова: линейное пространство, ортонормированный базис, процесс ортогонализации, аппроксимация.

В данной работе исследуются пять алгоритмов построения ортонормированного базиса:
1. Классический модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта (kogh).
2. Модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта с выбором ведущего столбца (ortgh).
3. Алгоритм, основанный на вычислении собственных векторов (orth).
4. Модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта с формированием ведущего столбца (mort).
5. Классический алгоритм Грамма-Шмидта с повторной ортогонализацией (kpogh).

Постановка задачи

Пусть задана матрица X $m{\times}n (m \le n)$. Пусть $M(X)$ – подпространство, натянутое на столбцы X. Необходимо построить ортонормированный базис в $M(X)$. Важность разработки экономичных в вычислительном отношении алгоритмов, обладающих приемлемой точностью подчеркивается в работах [1, 2].

Опишем исследуемые алгоритмы, используя символику MATLAB.

1. Классический модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта (kogh).

Известно, что этот алгоритм отличается от классической процедуры ортогонализации Грамма-Шмидта значительно большей устойчивостью. Геометрически алгоритм означает, что на каждом шаге очередной базисный вектор выбирается из проекций всех векторов на ортогональное дополнение к уже построенным. Порядок векторов (столбцы матрицы X), из которых формируется ортонормированный базис, фиксирован и соответствует их расположению в исходной матрице X. Одним из основных методов решения задачи наименьших квадратов является метод, основанный на QR разложении с помощью отражений [1, 2]. Этот метод также может использоваться для построения ортонормированного базиса. Показано, что QR–разложение эквивалентно ортогонализации Грамма-Шмидта [1]. Кроме того, затраты этих различных алгоритмов мало отличаются друг от друга [1].

Алгоритм kogh

```
k1 = 0;
for k = 1:n
  if norm(X(:, k)) >= tol1
  k1 = k1+1;
  Q(:, k1) = X(:,k)/norm(X(:,k));
  X(:, k+1:n) = (eye(m) - Q(:, 1:k1)* Q(:, 1:k1)')* X(:,k+1:n);
  end
  if k1>=m
  break
  end
end,
```

где

– $X(:, k)$ – k-тый столбец исходной матрицы X размеров mxn;

– $X(:, k+1:n)$ – подматрица матрицы X, состоящая из столбцов с номерами от k+1 до n;

– Q –матрица $m \times k1$, состоящая из ортонормальных векторов образующих базис в $M(X)$.

Это результат работы алгоритма.

2. Модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта с выбором ведущего столбца (ortgh).

В этом алгоритме на каждом шаге из проекций исходных векторов на ортогональное дополнение к уже построенным базисным векторам выбирается вектор с наибольшей длиной, и он вводится в базис.

Алгоритм ortgh

```
for k = 1:m;
  [x, k1] = max(sqrt(sum(X(:,k:n).^2)),[ ],2);
  if mx < tol1;
  break
  end
  if k1~=1
  r = X(:, k)
  X(:, k) = X(:,k1+k-1);
  X(:,k1+k-1) = r;
  end
  Q(:, k) = X(:,k)/norm(X(:,k));
  X(:, k+1:n) = (eye(m) - Q(:, 1:k)* Q(:, 1:k)')* X(:,k+1:n);
end.
```

3. Алгоритм (orth).

Этот алгоритм основан на вычислении собственных векторов, использует сингулярное разложение матрицы X и является стандартной программой в MATLAB. Известно, что этот алгоритм, в настоящее время является наиболее устойчивым, однако требует большого объема вычислений для матриц больших размеров.

4. Модифицированный алгоритм Грамма-Шмидта с формированием ведущего столбца (mort).

В этом алгоритме на каждом шаге из проекций исходных векторов на ортогональное дополнение к уже построенным базисным векторам находится вектор максимальной длины. Затем все векторы, образующие с ним острый угол, не изменяются, а все векторы, образующие тупой угол, «переворачиваются» (умножаются на –1), затем все векторы суммируются. Полученный вектор нормируется и принимается за очередной базисный вектор.

Алгоритм (mort)

```
r1 = 0; k2 = 0;
for k = 1 : n
    [mx, k1] = max(sqrt(sum)X(:, k : n).^2)),[ ],2);
    if mx < tol1
       break
end
if k ~= k1
   r = X(:, k); X(:, k) = X(:, k + k1–1) = r ;
end
    for j = k + 1 : n
        r1 = X(:, k)'* X(:, j);
        if r1 > 0
        X(:, k) = X(:, k) + X(:, j);
         else
         X(:, k) = X(:, k) – X(:, j);
      end
end
      k2 = k2 + 1; Q(:, k2) = X(:, k)/norm(X(:, k));
X(:, k + 1 : n) = (eye(m) – Q(:,1 : k2)* Q(:,1 : k2)')* X(:, k + 1 : n);
      if k2 >= m
        break
      end
end .
```

5. Классический алгоритм Грамма-Шмидта с повторной ортогонализацией (kpogh).

Это классическая процедура Грамма-Шмидта – на каждом шаге после нахождения очередного базисного вектора повторно ищется его ортогональная составляющая к уже построенным базисным векторам. Аналитическое исследование устойчивости этого алгоритма приведено в [5].

Алгоритм (kpogh)

```
k1 = 0
for k = 1 : n
    if norm(X(:, k)) < tol1
       continu
    end
    if k ~= 1
        for j = 1 : 2
    X(:, k) = (eye(m) – Q(:, 1: k1)* Q(:,1: k1)')* X(:, k);
       end
     end
    k1 = k1 + 1
    Q(:, k1) = X(:, k)/ norm(X(:, k));
            if k1 >= m
             break
    end
end.
```

Оценка качества построенного ортонормированного базиса

Качество построенного ортонормированного базиса оценивается тем, насколько он близок к ортогональному, и тем, насколько точно с его помощью можно восстановить столбцы исходной матрицы *X*. За меру ортогональности можно принять величину

$$o = \mathrm{norm}\left(\mathrm{eye}(k) - Q^{*'}Q\right),$$

где $\mathrm{eye}(k)$ – единичная $k \times k$ – матрица;

Q – $m \times k$ – матрица, столбцы которой образуют ортонормированный базис в $M(X)$.

Пусть X – исходная $m\times m$ матрица. Q – $m \times k$ матрица, столбцы которой образуют ортонормированный базис в $M(X)$.

Матрица $Y = X - Q^{*}Q^{'*}X$ – есть матрица ошибок. j-тый столбец этой матрицы есть разность j-го столбца матрицы X и его проекции на $M(Q)$.

$e1 = \max(abc(Y))$ – это вектор-строка, состоящая из максимальных по модулю элементов в каждом столбце матрицы ошибок.

$e2 = \mathrm{sum}(abc(Y))$ – это вектор-строка, состоящая из суммы модулей элементов каждого столбца матрицы ошибок.

$e3 = \mathrm{sqrt}(\mathrm{sum}(Y.\hat{}2))$ – это вектор-строка, состоящая из эвклидовых норм каждого столбца матрицы ошибок.

Векторы строки $e1, e2, e3$ характеризуют, насколько точно совпадают $M(X)$ и $M(Q)$. В экспериментах элементы этих векторов упорядочивались по возрастанию и выводились на график.

Во всех исследуемых алгоритмах предусмотрено «игнорирование» векторов, норма которых меньше некоторого задаваемого порога $(\mathrm{tol1})$, при построении базиса. Результатом работы всех алгоритмов является матрица Q, столбцы которой образуют ортонормированный базис в $M(X)$.

Результаты экспериментов

Эксперимент 1

Генерировалась выборка объема $n = 3000$ из стомерного распределения с нулевым математическим ожиданием и единичной ковариационной матрицей, рассчитывались векторы ошибок e_1, e_2, e_3. Компоненты этих векторов упорядочивались по возрастанию. Выборка генерировалась десять раз, и полученные данные усреднялись. Для каждого алгоритма рассчитывалась величина, характеризующая качество построенного базиса

$$o = \mathrm{norm}\left(\mathrm{eye}(k) - Q^{*'}Q\right).$$

Эксперимент 2

То же, что и эксперимент 1, только выборка генерировалась из 100–мерного нормального распределения с нулевым средним вектором и диагональной ковариационной матрицей с элементами (дисперсиями) 1, 2, …, 100 на диагонали.

Эксперимент 3

То же, что и эксперимент 2, только выборка генерировалась один раз.

Выводы

Анализируя результаты экспериментов, можно сделать следующие выводы.

1. Алгоритм orth обладает наилучшими показателями качества ортогональности и точности восстановления, но требует большого объема вычислений для матриц больших размеров.

2. Алгоритм ortgh, проигрывая по качеству восстановления и ортогональности построенного базиса алгоритму orth, из-за большего быстродействия может быть применим

для матриц значительно больших размеров.

3. Алгоритм mort более устойчив, чем ortgh, и также применим для матриц значительно больших размеров чем orth.

4. Алгоритм kpogh применим для матриц с любым количеством столбцов, так как строит базис по мере поступления векторов столбцов исходной матрицы.

Библиографический список

1. **Уоткинс, Д.** Основы матричных вычислений / Д. Уоткинс. – М.: БИНОМ, 2006. – 600 с.
2. **Голу, Дж.** Матричные вычисления / Дж. Голу, Ч. Ван Лоун. – 2-е изд.–М.: Мир, 1999, 548 с.
3. **Хорн, Р.** Матричный анализ / Р. Хорн, Ч. Джонсон. – М.: Мир, 1989. – 655 с.
4. **Лоусон, Ч.** Численное решение задач методом наименьших квадратов / Ч. Лоусон, Р. Хансон. – М.: Наука, 1986. – 232 с.
5. **Парлетт, Б.** Симметричная проблема собственных значений / Б. Парлетт. – М.: Мир, 1983. – 382 с.
6. **Воеводин, В.В.** Вычислительные основы линейной алгебры / В.В. Воеводин. – М.: Наука, 1977. – 303 с.
7. **Вержбицкий, В.М.** Численные методы. Линейная алгебра и нелинейные уравнения / В.М. Вержбицкий. – М.: Оникс XXI век, 2005. – 431 с.
8. **Ануфриев, И.** MATLAB 7 / И. Ануфриев, А. Смирнов, Е.Смирнова. – СПб.: БХВ–Петербург, 2005. – 1080 с.
9. **Гладков, В.В.** Методы последовательной ортогонализации и их применение к обработке больших массивов экспериментальных данных // Техника средств связи. Серия РКТ, М., 1983. С. 43–54.

Дата поступления
в редакцию 25.10.2013

M.S. Baranova, V.V. Gladkov, E.F. Romashevskaja

THE EXPERIMENTAL INVESTIGATION OF THE ACCURACY OF DIFFERENT ALGORITHMS FOR ORTHONORMAL BASIS CONSTRUCTION

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeev

Purpose: In applied mathematics often they need to decide the problems that are known as problems of data compression. In this paper following problem of such sort from computional algebra is considered.

Design/methodology/approach: For given set S of the vectors from n–dimensional Euclidian space E^n it is need to find the subspace $E^k \subset E^n$ so that the linear combination of vectors from E^k are approximating the elements of S. New algorithms for the solution of this problem and for the finding of the orthonormal basis are given.

Findings: The testing of these algorithms and four known ones (so called Kogh, ortgh, orth, kpogh) for experimental data is done.

Research limitation/ implications: The experimental data were generated by computer modelling of normal distributed random variable systems.

Originality/value: The results of the testing are showing that new algorithms are not worser than other ones but are allowing to work with much more volume of the initial information.

Key words: linear space, orthonormal basis, orthogonalisation process, approximation.