

УДК 681.5.015

Модифицированный алгоритм Грама–Шмидта ортонормирования конечномерных векторов и некоторые результаты его исследования*

А.В. МАЙСТРЕНКО, А.А. СВЕТЛАКОВ

Предложен модифицированный алгоритм Грама–Шмидта ортонормирования конечномерных векторов, предназначенный для построения математических моделей линейных статических объектов на основе поступающих в систему измеренных значений их входных и выходных переменных. В синтезированном алгоритме существенно уменьшена неустойчивость решения по отношению к ошибкам задания ортонормируемых векторов и ошибкам вычислений. Алгоритм подобного назначения был предложен в свое время Дж. Уилкинсоном, он хорошо известен и носит его имя. Существенным преимуществом предложенного алгоритма перед обобщенным алгоритмом Грама–Шмидта и Уилкинсона является то, что его применение позволяет обрабатывать измеренные значения входных переменных поступающих в систему в режиме реального времени. Адекватность получаемых при этом моделей оказывается согласованной с точностью задания значений переменных моделируемого объекта.

Ключевые слова: алгоритм Грама–Шмидта, алгоритм Уилкинсона, линейная зависимость и ортогонализация векторов, неустойчивость решения

ВВЕДЕНИЕ

В настоящей работе приводится синтез нового алгоритма построения ортонормированной системы n -мерных векторов, являющегося модификацией хорошо известного алгоритма Грама–Шмидта. Как известно [1], алгоритм Грама–Шмидта является рекуррентным и легко реализуется программно на любом из известных в настоящее время языков программирования. Данная особенность алгоритма является одним из основных его достоинств. Однако он оказывается малоустойчивым по отношению к ошибкам задания ортонормируемых векторов и ошибкам вычислений, что является его существенным недостатком. Это обстоятельство стимулировало авторов к созданию алгоритма, который бы превосходил по своим характеристикам исходный алгоритм.

1. СУЩНОСТЬ ЗАДАЧИ ПОСТРОЕНИЯ ОРТОНОРМИРОВАННОЙ СИСТЕМЫ n -МЕРНЫХ ВЕКТОРОВ И ОПРЕДЕЛЕНИЯ ОСНОВОПОЛАГАЮЩИХ ПОНЯТИЙ

Пусть в n -мерном евклидовом пространстве E^n задан некоторый базис $B = (b_1, b_2, \dots, b_n)$,
где b_j – n -мерный вектор-столбец, $j = \overline{1, n}$. Необходимо, основываясь на заданном базисе B ,
построить ортонормированный базис $V^n = (v_1, v_2, \dots, v_n)$, т. е. такой базис, векторы v_i которого удовлетворяют равенствам вида

$$(v_i, v_j) = \begin{cases} 1, & \text{если } i = j; \\ 0, & \text{если } i \neq j; \quad i, j = \overline{1, n}, \end{cases} \quad (1)$$

* Статья получена 15 декабря 2012 г.

здесь (v_i, v_j) – скалярное произведение векторов v_i и v_j . Правая часть данного равенства не что иное, как определение хорошо известного и широко используемого в линейной алгебре символа Кронекера δ_{ij} . Используя данный символ, равенство (1) можно представить в следующем более компактном виде:

$$(v_i, v_j) = \delta_{ij}, \quad i, j = \overline{1, n}. \quad (2)$$

Напомним следующие определения, являющиеся основополагающими для наших дальнейших целей:

1) n -мерное евклидово пространство E^n , по определению, является множеством всевозможных n -мерных векторов, на котором наряду с операциями сложения векторов и умножения их на скаляр (вещественное число) задана операция их скалярного умножения;

2) любым двум векторам a и c из E^n данная операция ставит в соответствие скаляр s , называемый скалярным произведением векторов a и c и определяемый равенством

$$s = (a, c) = \sum_{i=1}^n a_i c_i, \quad (3)$$

где a_i и c_i – i -е компоненты векторов a и c соответственно, $i = \overline{1, n}$;

3) евклидова норма любого вектора a из E^n обозначается символом $\|a\|$ и определяется равенством

$$\|a\| = (a, a)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^n a_i^2 \right)^{1/2}, \quad (4)$$

из которого непосредственно вытекает, что она удовлетворяет соотношению

$$\|a\| = \begin{cases} 0, & \text{если } a = 0_n; \\ d, & \text{если } a \neq 0_n, \end{cases} \quad (5)$$

где 0_n – нулевой n -мерный вектор, а d – строго положительный скаляр;

4) любой вектор a называется нормированным, если его норма $\|a\| = 1$;

5) нормированием любого вектора a из E^n называется операция, ставящая в соответствие вектору a нормированный вектор v согласно равенству

$$v = a / \|a\|; \quad (6)$$

б) обобщенная евклидова норма любого вектора a из E^n обозначается символом $\|a\|_Q$ и определяется равенством

$$\|a\|_Q = (a, Qa)^{1/2} = \left(\sum_{i=1}^n a_i \sum_{j=1}^n q_{ij} a_j \right)^{1/2}, \quad (7)$$

где Q – некоторая положительно определенная порядка n матрица; q_{ij} – (i,j) -й элемент данной матрицы, $i, j = \overline{1, n}$.

Заметим, что если в (7) положить $Q = E_n$, где E_n – единичная порядка n матрица, то можно видеть, что обобщенная евклидова норма $\|a\|_Q$ вектора a трансформируется в его евкли-

дову норму $\|a\|$. Данное обстоятельство, а также то, что единичная матрица E_n является одним из частных случаев бесконечного множества положительно определенных матриц Q и является поводом и логическим обоснованием использования в данном случае прилагатель-

ного «обобщенная» в определении величины $\|a\|_Q$. При использовании любой положительно определенной матрицы Q естественным образом обобщаются и понятия нормированного вектора и операции нормирования векторов: для их обобщения, очевидно, достаточно заменить в их определениях евклидову норму $\|a\|$ обобщенной евклидовой нормой $\|a\|_Q$. Здесь a – произвольный вектор из E^n .

Заметим также, что, используя любую положительно определенную матрицу Q , можно так же легко, как и в случае с евклидовой нормой $\|a\|$ вектора a , обобщить понятие операции скалярного умножения и, соответственно, скалярного произведения произвольных векторов a и c из E^n . Для этого, очевидно, необходимо и достаточно заменить равенство (3) равенством вида

$$S_Q = \sum_{i=1}^n a_i \sum_{j=1}^n q_{ij} a_j. \quad (8)$$

Совершенно аналогичным образом обстоит дело и с обобщением отношения ортогональности любых двух векторов a и c из E^n . Данное отношение обобщается заменой равенства (1) равенством вида

$$(v_i, Qv_j) = \delta_{ij}; \quad i, j = \overline{1, n}. \quad (9)$$

На простейших примерах легко убедиться в том, что ортогональность и неортогональность двух векторов при использовании любой положительно определенной матрицы Q будут существенно определяться не только данными векторами, но и используемой матрицей Q . Учитывая данную зависимость, будем, как это и принято делать в линейной алгебре [1], называть

векторы v_i и v_j , удовлетворяющие равенству (9), ортогональными с матрицей Q или, что то же самое, по отношению к матрице Q .

2. СИНТЕЗ НОВОГО АЛГОРИТМА ОРТОГОНАЛИЗАЦИИ

Как известно [1], для решения рассматриваемой задачи можно воспользоваться алгоритмом Грама–Шмидта [3]. Однако данный алгоритм обладает существенным недостатком, который выражается в том, что алгоритм оказывается малоустойчивым по отношению к ошибкам задания ортонормируемых векторов и ошибкам вычислений [2]. Неустойчивость данного алгоритма можно если не устранить полностью, то хотя бы существенно уменьшить, воспользовавшись идеей предложенной Дж. Уилкинсоном и лежащим в основе алгоритма построения ортонормированных векторов, называемого алгоритмом Уилкинсона [2]. Полученные в результате модифицированные алгоритмы естественно и вполне оправдано назвать обобщенными алгоритмами Грама–Шмидта и Дж. Уилкинсона.

Обобщенный алгоритм Грама–Шмидта и Уилкинсона обладает уникальными возможностями и позволяет с высокой точностью вычислять устойчивые по отношению как к ошибкам задания ортонормируемых векторов, так и к ошибкам вычислений решения, однако и он не лишен недостатков. Один из его недостатков заключается в том, что данный алгоритм сложно применять в системах управления, функционирующих в реальном времени, когда измеренные значения векторов поступают в систему последовательно. В алгоритме Уилкинсона все векторы, входящие в базис, обрабатываются одновременно, но такая ситуация возможна лишь в том случае, когда исходные данные были получены заблаговременно, что в системах реального времени практически никогда не встречается. Предлагаемый алгоритм избавлен от этого недостатка. Он позволяет обрабатывать векторы как по одному, так и группами по мере их поступления.

Рассмотрим подробно сущность предлагаемого алгоритма на примере, когда базис состоит из n векторов, при этом заметим, что количество векторов в базисе напрямую влияет на его быстродействие. Для этого введем в рассмотрение промежуточный базис U_n , который определяется следующим равенством:

$$U_n = \begin{pmatrix} \rightarrow \\ u_1 \\ \dots \\ \rightarrow \\ u_n \end{pmatrix}. \quad (10)$$

Такое представление базиса U_n , где $\rightarrow u_j$ является n -мерным вектором-строкой, $j = \overline{1, n}$, обусловлено тем, что в реальных условиях измерения, поступающие в систему, имеют именно такую структуру, поэтому переход от векторов-столбцов к векторам-строкам является вполне логичным и обоснованным.

Далее выполняем следующую последовательность операций:

- 1) процесс ортонормирования базиса начинаем с вычисления нормы первого вектора $\rightarrow u_1$,
затем в соответствии с алгоритмом Грама–Шмидта получаем вектор $\rightarrow v_1$;
- 2) далее строим вектор $\rightarrow u_2$, вычисляем его норму и, сохраняя неизменным вектор $\rightarrow u_1$, уточняем ортогональность данных векторов. При этом требуем, чтобы выполнялось следующее условие:

$$(\rightarrow u_1, \rightarrow u_2) \leq reg. \quad (11)$$

Здесь reg – некоторый параметр, который далее будем называть параметром регуляризации, его значения задаются, исходя из желаемой точности вычисления. При этом, чем данный па-

параметр меньше, тем точность решения выше. Однако по причинам, которые будут рассмотрены ниже, уменьшать безгранично параметр reg невозможно, так как после достижения им определенного предела алгоритм просто «зациклится» и перестанет работать;

3) далее, выполнив построение и вычислив норму вектора $\vec{u}_3$, уточняем его ортогональность к векторам $\vec{u}_1$ и $\vec{u}_2$, требуя при этом, чтобы одновременно выполнялись два условия:

$$\left. \begin{aligned} (\vec{u}_1, \vec{u}_3) &\leq reg, \\ (\vec{u}_2, \vec{u}_3) &\leq reg; \end{aligned} \right\} \quad (12)$$

4) для случая с n -векторами в базе система неравенств будет иметь n -условий вида

$$\left. \begin{aligned} (\vec{u}_1, \vec{u}_n) &\leq reg, \\ (\vec{u}_{n-1}, \vec{u}_n) &\leq reg \end{aligned} \right\} \quad (13)$$

Обоснуем целесообразность такого подхода, учитывая то, что речь идет о работе алгоритма в режиме реального времени. Известно, что любые измерительные приборы имеют погрешность измерения и она тем меньше, чем выше класс точности прибора, но даже самый совершенный прибор имеет погрешность измерения. Известно и то, что любая вычислительная техника также имеет погрешность результата решения вычислительной задачи, которая

определяется величиной разрядной сетки сумматора. Очевидно, что на практике векторы $\vec{u}_1$ и $\vec{u}_2$ никогда не будут строго ортогональны, а потому их скалярное произведение никогда не будет равно нулю. Та же ситуация будет иметь место, когда мы будем рассматривать скалярные произведения векторов, находящихся в левой части неравенств (11)–(13). В соответствии с предлагаемым алгоритмом мы добиваемся того, чтобы данные скалярные произведения были меньше или равны параметру регуляризации.

Поскольку конечной целью является увеличение устойчивости алгоритма по отношению к ошибкам задания (измерения) ортонормируемых векторов и ошибкам вычислений решений, получаемых с помощью алгоритма Грама–Шмидта, необходимо на каждом шаге работы алгоритма добиваться того, чтобы выполнялись условия (11)–(13) и при этом параметр регуляризации должен быть настолько мал, насколько это возможно. Идея предлагаемого алгоритма

заключается в том, чтобы уточнять вектор $\vec{u}_i$, $i = \overline{2, n}$, на каждом шаге работы алгоритма в соответствии со следующим условием

$$\vec{u}_i^{(1)} = \vec{u}_i^{(0)} + \Delta \vec{u}_i, \quad (14)$$

где вектор $\Delta \vec{u}_i$ – некоторая поправка к исходному вектору $\vec{u}_i$. В этом случае неравенства (12) и (13) примут следующий вид:

$$\left. \begin{aligned} (\vec{u}_1, \vec{u}_n + \Delta \vec{u}_n) &= (\vec{u}_1, \vec{u}_n) + (\vec{u}_1, \Delta \vec{u}_n) \leq reg, \\ (\vec{u}_{n-1}, \vec{u}_n + \Delta \vec{u}_n) &= (\vec{u}_{n-1}, \vec{u}_n) + (\vec{u}_{n-1}, \Delta \vec{u}_n) \leq reg \end{aligned} \right\} \quad (15)$$

Далее введем в рассмотрение $(n-1)$ -мерный вектор Δ , компоненты которого представим следующими n равенствами:

$$\left. \begin{aligned} \Delta_1 &= \overset{\rightarrow}{reg} - (\vec{u}_1, \vec{u}_n) = \vec{u}_1 \overset{\downarrow}{\Delta u}_n, \\ \Delta_{n-1} &= \overset{\rightarrow}{reg} - (\vec{u}_{n-1}, \vec{u}_n) = \vec{u}_{n-1} \overset{\downarrow}{\Delta u}_n \end{aligned} \right\}, \quad (16)$$

где $\overset{\downarrow}{\Delta u}_n = (\overset{\rightarrow}{\Delta u}_n)^T$, а вектор $\overset{\downarrow}{\Delta}$, соответственно, имеет следующий вид:

$$\overset{\downarrow}{\Delta} = \begin{pmatrix} \Delta_1 \\ \dots \\ \Delta_{n-1} \end{pmatrix}; \quad (17)$$

и матрицу U_{n-1} вида

$$U_{n-1} = \begin{pmatrix} \vec{u}_1 \\ \dots \\ \vec{u}_{n-1} \end{pmatrix}. \quad (18)$$

Составим систему линейных алгебраических уравнений относительно неизвестного вектора $\overset{\downarrow}{\Delta u}_n$

$$U_{n-1} \overset{\downarrow}{\Delta u}_n = \overset{\downarrow}{\Delta}; \quad (19)$$

в качестве решения данной системы будем использовать ее псевдорешение

$$\overset{\downarrow}{\Delta u}_n = U_{n-1}^+ \overset{\downarrow}{\Delta}. \quad (20)$$

Здесь U_{n-1}^+ – псевдообратная к U_{n-1} матрица, а уточненный вектор $\vec{u}_n$ будет определяться равенством (14).

Предлагаемый алгоритм работает в режиме «скользящего окна», по мере поступления новых векторов в систему первый вектор в базисе «отбрасывается» и его место занимает второй, место второго занимает третий, последним в базисе будет новый вектор. После этого все действия, описанные формулами (10)–(20), повторяются заново. Данный алгоритм является рекуррентным, и описанную выше процедуру можно повторять неограниченное число раз.

4. РЕЗУЛЬТАТЫ ЭКСПЕРИМЕНТАЛЬНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ СИНТЕЗИРОВАННОГО АЛГОРИТМА

В данном разделе приводятся некоторые результаты экспериментальных исследований, иллюстрирующие работоспособность предлагаемого алгоритма и его преимущества перед алгоритмом Грама–Шмидта. Все эксперименты производились с помощью численного моделирования в среде Matlab.

В качестве тестовых векторов для экспериментальных исследований были взяты строки матрицы Гильберта [4]. Данная матрица хорошо известна своей плохой обусловленностью

и именно поэтому ее чаще всего используют в качестве тестовой при проведении экспериментальных исследований подобного рода. Полученные результаты представлены на рис. 1, при этом по оси абсцисс отложены значения размерности тестовой матрицы, а по оси ординат евклидова норма матрицы N , которая вычисляется в соответствии с формулами

$$\text{а) } W_n = V_n \times V_n'; \quad \text{б) } N = E_n - W_n \quad \text{и} \quad \text{в) } \|N\| = \sqrt{\sum_i \sum_j |n_{ij}|^2}, \quad (21)$$

где W_n и N – матрицы порядка n , а матрица V_n – ортонормированная матрица, порядка n . Как известно из линейной алгебры [3] и теории матриц [4], данная величина в идеальном случае, т. е. в случае, когда V_n является строго ортонормированной матрицей, должна быть равна нулю, на практике же такая ситуация ввиду ошибок задания векторов и ряда других причин встречается крайне редко.

На приведенных ниже рисунках проиллюстрировано преимущество предлагаемого алгоритма перед алгоритмом Грама–Шмидта. На графике цифрой «1» обозначены результаты, полученные с помощью алгоритма Грама–Шмидта, а цифрой «2» – результаты, полученные с помощью предлагаемого алгоритма.

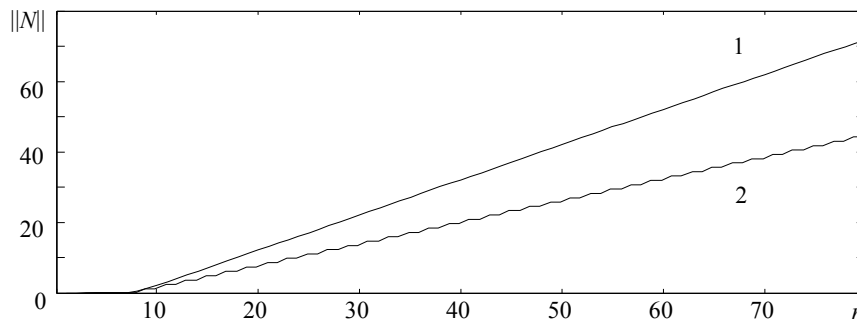


Рис. 1. Сравнительные результаты алгоритмов на примере Матрица Гильберта

Из приведенных графиков наглядно видно, что кривая 2, характеризующая точность вычисления ортогональных векторов с помощью предлагаемого алгоритма, находится существенно ниже кривой 1, а величина $\|N\|$ для предлагаемого алгоритма приблизительно в два раза меньше, чем у алгоритма Грама–Шмидта. Очевидно, что данное преимущество в системах управления реального времени, будет играть весьма существенную роль.

При проведении экспериментальных исследований, помимо матрицы Гильберта использовался ряд других тестовых матриц, при этом результаты, полученные с помощью данных матриц аналогичны приведенным результатам.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Резюмируя изложенное в предшествующих разделах, отметим три основных результата.

1. Предложена модификация известного алгоритма Грама–Шмидта ортонормирования конечномерных векторов, применяя которую можно фактически в два раза снизить неустойчивость решения по отношению к ошибкам задания ортонормируемых векторов и ошибкам вычисления решений.

2. Предложенный алгоритм позволяет существенно упростить получение математических моделей линейных статических объектов, содержащих минимально необходимое число входных переменных и обеспечивающих приемлемую точность прогнозирования значений выхода моделируемого объекта по заданным значениям его входов.

3. Результаты численного моделирования предлагаемой модификации алгоритма Грама–Шмидта наглядно иллюстрируют ее работоспособность и пригодность для решения приклад-

ных задач в режиме реального времени, что, в свою очередь, открывает широкие перспективы для ее применения в автоматических системах управления, различного типа и назначения.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] **Воеводин В.В.** Вычислительные основы линейной алгебры / В.В. Воеводин. – М.: Наука, 1977. – 304 с.
- [2] **Уилкинсон Дж.** Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра / Дж. Уилкинсон, К. Райнш; пер. с англ. под ред. д-ра техн. наук проф. Ю.И. Топчиева. – М.: Машиностроение, 1976. – 389 с.
- [3] **Ильин В.А.** Линейная алгебра / В.А. Ильин, Э.Г. Поздняк. – М.: Наука, 1974. – 296 с.
- [4] **Светлаков А.А.** Обобщенные обратные матрицы: некоторые вопросы теории и применения в задачах автоматизации управления процессами / А.А. Светлаков. – Томск: Изд-во НТЛ, 2003. – 388 с.

Майстренко Андрей Васильевич, кандидат технических наук, доцент кафедры электронных средств автоматизации и управления Томского университета систем управления и радиоэлектроники. Основное направление научных исследований – математическое моделирование процессов и объектов. Имеет более 30 публикаций, в том числе 2 учебных пособия, 1 учебник, 1 монографию. E-mail: maestro67@mail.ru.

Светлаков Анатолий Антонович, доктор технических наук, профессор кафедры электронных средств автоматизации и управления Томского университета систем управления и радиоэлектроники. Основное направление научных исследований – математическое моделирование процессов и объектов. Имеет более 200 публикаций, в том числе 2 монографии. E-mail: aas@iit.tusur.ru.

A.V. Maystrenko, A.A. Svetlakov

Gram-Schmidt's modified algorithm of orthonormalization of finite-dimensional vectors and some results of his research

Gram-Schmidt's modified algorithm of orthonormalization of the finite-dimensional vectors, intended for creation of mathematical models of linear static objects on the basis of the measured values of their entrance and output variables arriving in system is offered. In the synthesized algorithm instability of the decision in relation to errors of a task of orthonormalizing vectors and errors of calculations significantly is reduced. The algorithm of similar appointment was offered in due time to J. Wilkinson, he is well-known and bears his name. Essential advantage of the offered algorithm before Gram's generalized algorithm – Schmidt and Wilkinson is that its application allows to processing measured values of entrance variables arriving in system in real time. Adequacy of models received thus is coordinated with an accuracy of a task of values of variables of modelled object.

Key words: Gram-Schmidt's algorithm, Wilkinson's algorithm, linear dependence and orthogonalization of vectors, instability of the decision.