

УДК 517.98

СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ ПРОЦЕДУР ОРТОГОНАЛИЗАЦИИ БАЗИСОВ ЕВКЛИДОВЫХ И ГИЛЬБЕРТОВЫХ ПРОСТРАНСТВ

Пеньков В.Б., Левина Л.В.

Липецкий государственный технический университет, Липецк, e-mail: vbpenkov@mail.ru

Для описания состояний многих объектов физики вообще и механики сплошных сред в частности используются евклидовы и сепарабельные гильбертовы пространства, содержащие соответственно конечные либо счетные базисы. Наиболее трудоемким и ответственным шагом при использовании аппаратов пространств является процедура ортогонализации базиса, сводящегося к построению матрицы Шмидта, декомпозирующей симметричную матрицу Грама перекрестных скалярных произведений базиса. Традиционно для ортогонализации используется процесс Грама – Шмидта, строящий ортонормированный базис из исходного. Существуют иные матричные подходы для разложения матрицы Грама. Для сопоставления с таковыми процесс Шмидта представлен в форме матричного алгоритма Шмидта. Выполнено сопоставление процедур ортогонализации по Шмидту, Холецкому и сингулярному разложению. Сравниваются показатели эффективности алгоритмов: время счета, точность. Статистически обработаны и графически сопоставлены показатели эффективности алгоритмов. Сделаны выводы о преимуществах подхода Холецкого и, иногда для гильбертовых пространств, способа сингулярного разложения перед традиционно применяемым разложением, осуществляемым на основе теоремы Грама – Шмидта. Зависимости от размерности исходного базиса позволяют подобрать точность представления чисел для эффективного применения методов ортогонализации.

Ключевые слова: ортогонализация, ортонормированный базис, исходный базис, ортогонализация Грама-Шмидта, теорема Шмидта, метод Холецкого, метод сингулярного разложения, спектральные методы

COMPARATIVE ANALYSIS OF ORTHOGONALIZATION PROCEDURES FOR BASES OF EUCLIDEAN AND HILBERT SPACES

Penkov V.B., Levina L.V.

Lipetsk State Technical University, Lipetsk, e-mail: vbpenkov@mail.ru

To describe the states of many objects of physics in general and continuum mechanics in particular, Euclidean and separable Hilbert spaces are used, containing finite or countable bases, respectively. The most time-consuming and responsible step when using space devices is the procedure of orthogonalization of the basis, which reduces to the construction of a Schmidt matrix decomposing a symmetric Gram matrix of cross-scalar products of the basis. Traditionally, the Gram – Schmidt process is used for orthogonalization, which builds an orthonormal basis from the original one. There are other matrix approaches for decomposing the Gram matrix. For comparison with these, the Schmidt process is presented in the form of a matrix Schmidt algorithm. Comparison of orthogonalization procedures for Schmidt, Cholesky, and singular decomposition is performed. Performance indicators of algorithms are compared: counting time, accuracy. Statistically processed and graphically compared performance indicators of algorithms. Conclusions are drawn about the advantages of the Cholesky approach and, sometimes for Hilbert spaces, the method of singular decomposition over the traditionally used decomposition based on the Gram – Schmidt theorem. Dependences from the dimension of the basis allow to choose the accuracy of the representation of numbers for effective use of orthogonalization methods.

Keywords: orthogonalization, orthonormal basis, initial basis, Gram-Schmidt orthogonalization, Schmidt theorem, Cholesky method, singular decomposition method, spectral methods

Процесс ортогонализации позволяет построить ортонормированный базис Ψ как для евклидова, так и для сепарабельного гильбертова пространства на основе исходного базиса Φ того же пространства. Реально базис строится для евклидова пространства. В случае гильбертова пространства приходится проводить усечение счетного базиса, а при недостаточной точности вычислений наращивать удерживаемый отрезок базиса. В любом варианте отрезок исходного базиса будем обозначать $\Phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$, $\varphi_j \in \Xi$, где Ξ – пространство, в котором выполняется ортогонализация в соответствии со скалярным произведением (φ_1, φ_2) .

Цель исследования: обоснование выбора метода эффективной ортогонализации базисов евклидова/гильбертова пространств.

*Классическая ортогонализация
Грама-Шмидта*

Результатом перекрестных скалярных произведений элементов строится матрица Грама

$$G = [g_{ij}]_{n \times n}, \quad g_{ij} = (\varphi_i, \varphi_j). \quad (1)$$

Процесс построения матрицы Грама является наиболее энергоемким во всех энергетических методах вычислений, в которых требуется проводить ортогонализа-

цию. Он опирается на теорему Шмидта [1]. Она конструктивна: процесс доказательства одновременно является эффективным алгоритмом ортогонализации.

Теорема Шмидта

Пусть $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n, \dots$ – линейно независимая система элементов в евклидовом пространстве Ξ . Тогда в Ξ существует система элементов $\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n, \dots$, удовлетворяющая условиям:

1) она ортонормированная: $(\psi_k, \psi_j) = \delta_{kj}$ (δ_{kj} – символ Кронекера);

2) каждый элемент ψ_n есть линейная комбинация элементов $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$:

$$\psi_n = h_{n1}\varphi_1 + h_{n2}\varphi_2 + \dots + h_{nn}\varphi_n, \quad h_{nn} \neq 0;$$

3) каждый элемент φ_n представим в виде

$$\varphi_n = p_{n1}\psi_1 + p_{n2}\psi_2 + \dots + p_{nn}\psi_n, \quad p_{nn} \neq 0.$$

Каждый элемент системы 1)–3) определен однозначно с точностью до множителя ± 1 .

Доказательство и алгоритм ортогонализации являются рекурсией.

Шаг 1. Элемент ψ_1 определим так:

$$\psi_1 = \pm \frac{\varphi_1}{\|\varphi_1\|} = \pm \frac{\varphi_1}{\sqrt{(\varphi_1, \varphi_1)}}.$$

Отсюда видно, что $h_{n1} = \frac{1}{\|\varphi_1\|}$.

Шаг k. В n -мерном векторном пространстве оцениваются «проекции» элемента ψ_k на уже построенные ортонормированные «направления», соответствующие всем предыдущим ψ_j , благодаря чему оценивается остаток b_k (не равный нулю из-за линейной независимости векторов ψ_j базиса)

$$b_k = \varphi_k - h_{k1}\varphi_1 - h_{k2}\varphi_2 - \dots - h_{k,k-1}\varphi_{k-1};$$

$$h_{kj} = (\varphi_k, \psi_j),$$

после чего делением на $\|b_k\|$, ($\|b_k\|^2 = (b_k, b_k)$) выполняется нормирование нового ортогонального элемента: $\psi_k = \pm \frac{b_k}{\|b_k\|}$.

Отметим важную особенность процесса ортогонализации Шмидта: на k -ом шаге используется новый независимый элемент φ_k исходного базиса, через него и построенные ранее элементы $\psi_1, \dots, \psi_{k-1}$ строится ортонормированный элемент ψ_k . Можно существенно поднять эффективность процесса ортогонализации, переписав его в форме, удобной для машинного счета, использующей лишь перекрестные скалярные произведения элементов исходного базиса, которые сведены в матрицу Грама (1). Рассмотрим некоторые подходы.

Матричный алгоритм Шмидта

Классический алгоритм Шмидта предполагает вычисление скалярных произведений на каждом шаге процесса ортогонализации. Алгоритмически более удобным представляется предварительное вычисление матрицы Грама. После этого ставится вопрос о разложении ее на матричные множители, позволяющие явно выражать элементы ортонормированного базиса через элементы исходного базиса:

$$\Psi = H\Phi, \quad H = [h_{ij}]_{n \times n}. \quad (2)$$

Детальное рассмотрение классической процедуры ортогонализации позволяет описать алгоритм, в котором используется матричная форма представления промежуточной информации. Для удобства интерпретации нижеизложенного введем специальные матричные обозначения, сопутствующие вычислительному процессу. В частности, для краткости будем обозначать конструкциями вида $a, (a), [a]$ скаляр, вектор-столбец и матрицу соответственно. Условимся для этих объектов единичной размерности использовать упрощенную запись $a = (a)_1 = [a]_{1 \times 1}$, чтобы не возникало иллюзии, что в результате матричных операций появляется скаляр.

Полагаем $\Phi = \{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$, $\Psi = \{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$ вектор-столбцами. Введем матричное обозначение для скалярного произведения (векторов, квадратных матриц) в виде

$$(\Phi, \Psi) = [\Phi \cdot \Psi^T], \quad (3)$$

так что результатом свертки (3) является $n \times n$ -матрица. Такая запись удобна тем, что позволяет расшифровывать процедуру перемножения векторов или матриц из элементов пространства Ξ через матричную операцию. Например, матрица Грама есть скалярное произведение вектор-столбцов Φ

$$G = (\Phi, \Phi) = [\Phi \cdot \Phi^T] = [(\varphi_i, \varphi_j)]_{n \times n}.$$

Очевидны свойства однородности операции при работе со скалярными числовыми множителями α, β , векторами \mathbf{a}, \mathbf{b} из чисел, $n \times n$ -матрицами A, B :

$$(\alpha\Phi, \beta\Psi) = \alpha[\Phi \cdot \Psi^T]\beta,$$

$$(\mathbf{a}\Phi, \mathbf{b}\Psi) = [(\mathbf{a}\Phi) \cdot (\mathbf{b}\Psi)^T] = \mathbf{a}[\Phi \cdot \Psi^T]\mathbf{b}^T, \quad (4)$$

$$(A\Phi, B\Psi) = [(A\Phi) \cdot (B\Psi)^T] = A[\Phi \cdot \Psi^T]B^T.$$

Свойства (4) устанавливают цель построения матрицы Шмидта H , выражающей ортонормированный базис Ψ через исход-

ный Φ (2). Поскольку скалярное произведение ортонормированного вектора Ψ на себя должно давать единичную матрицу E :

$$E = [\Psi \cdot \Psi^T] = [(H\Phi) \cdot (H\Phi)^T] = H[\Phi \cdot \Phi^T]H^T = HGH^T,$$

то разложение Шмидта состоит в представлении матрицы Грама в форме

$$G = H^{-1}H^T{}^{-1}. \quad (5)$$

Рекурсивный матричный алгоритм

Его суть состоит в последовательном наполнении матрицы Шмидта $H = [h_{ij}]_{n \times n}$ и ей сопутствующей матрицы $T = [t_{ij}]_{n \times n}$ посредством приращения строк. Обозначим $H^{(h)}, T^{(h)}$ верхнетреугольные квадратные матрицы (подматрицы H, T соответственно) размерностью $k \times k$. Изначально обе матрицы полагаем обнуленными: $H = T = [0]_{n \times n}$. Через $H_j, T_j, H_j^{(k)}, T_j^{(k)}$ обозначаем j -е строки соответствующих матриц.

Шаг $k = 1$. Полагаем $T^{(1)} = [1]$, $H^{(1)} = [1/\sqrt{g_{11}}]$. Далее – по индукции.

Шаг k . Перебираем строки матриц в последовательности $l \in \{1, 2, \dots, k\}$ и назначаем значения матрицы $T^{(k)}$ по правилу

$$t_{kl} = \begin{cases} -\sum_{j=1}^{k-1} \sum_{i=1}^j H_j^{(k-1)} G_i^{(k)} H_i^{(k-1)T}, & l < k \\ 1, & l = k \end{cases}.$$

Оцениваем норму остатка разложения по уже построенному отрезку базиса $\|b_k\|^2 = T_k G T_k^T$ и нормируем коэффициенты строки к матрицы Шмидта

$$H_k = \frac{1}{\|b_k\|} T_k.$$

При достижении k предела n процесс построения матрицы Шмидта окончен. Погрешность вычисления можно оценить вычислением любой матричной нормы $\|HGH^T - E\|$ или использовать ресурсы, предусмотренные конкретной вычислительной системой (например, в Mathematica [2] для такой цели можно использовать оператор Assigasy).

Метод Холецкого

Разложение Холецкого построено для класса эрмитовых матриц, для которых транспонирование в сочетании с комплексным сопряжением возвращает исходную

матрицу. Матрица Грама относится к более узкому классу симметричных ($G = G^T$), состоящих из действительных чисел.

Ассоциация с разложением Холецкого [3]

$$G = X X^T, \quad (6)$$

которое для любой положительно определенной матрицы G существует и единственно [4], устанавливает связь матрицы Шмидта и нижнетреугольной матрицы Холецкого

$$H = X^{-1}. \quad (7)$$

Прямой алгоритм разложения таков.

Квадратная $n \times n$ -матрица изначально полагается равной нулю: $X = 0$.

1. Перебирается последовательность строк $i \in \{1, \dots, n\}$.

2. Для каждого i перебираются номера столбцов $j \in \{1, \dots, i\}$.

Вычисляется частичная сумма

$$S_j = \begin{cases} 0, & j = 1 \\ \sum_{k=1}^{j-1} x_{ik} x_{jk}, & j > 1. \end{cases}$$

Значение элемента x_{ij} матрицы X равно

$$x_{ij} = \begin{cases} (g_{ij} - s) / x_{ij}, & j < i \\ \sqrt{g_{ij} - s}, & j = i \end{cases}.$$

Нижнетреугольная матрица X построена. Точность разложения можно оценить нормой невязки разложения $\|X X^T - G\|$.

Замечание. В силу симметрии матриц X, X^T последовательность действий можно организовать не по столбцам, а по строкам (реализовано в Mathematica процедурой CholeskyDecomposition).

Способ сингулярного разложения

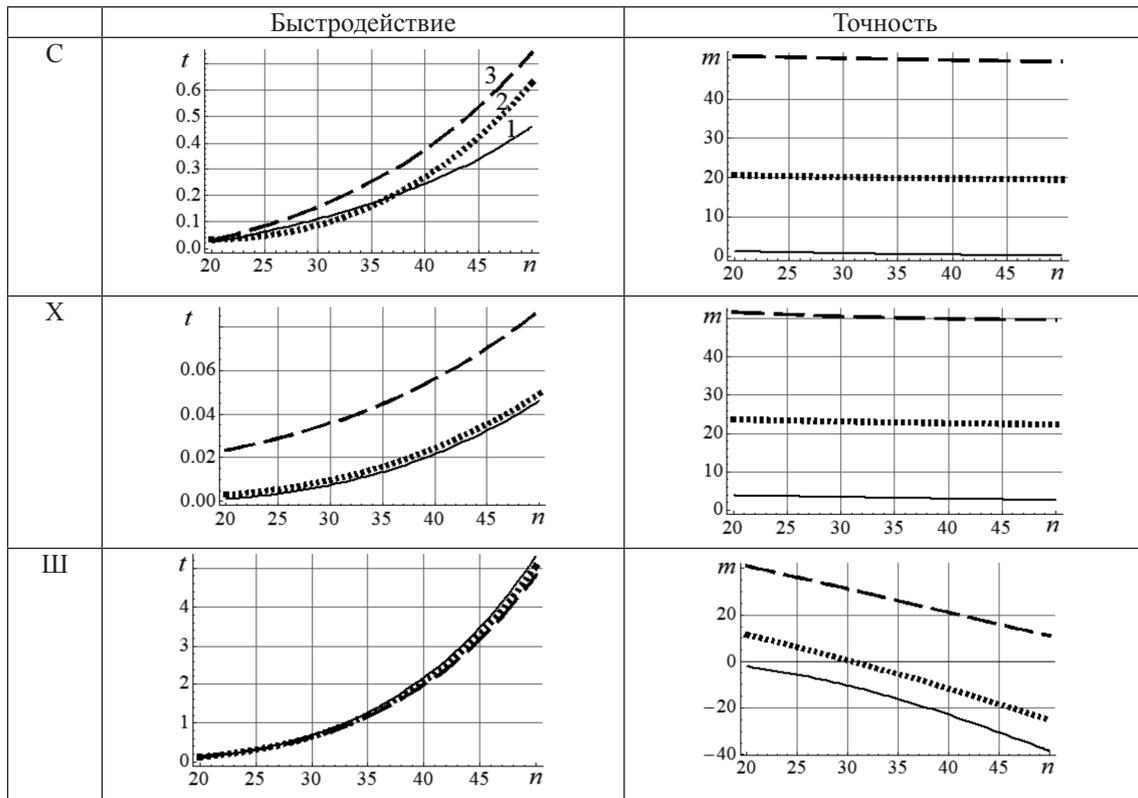
В силу эрмитовости неотрицательно определенная матрица имеет сингулярное разложение [3]. Положительно определенная симметричная матрица Грама, как частный случай эрмитовой, может быть представлена в спектральной форме:

$$G = U \Lambda U^T, \quad (8)$$

где Λ – диагональная матрица спектра, состоящая из положительных собственных чисел G , т.е. $\Lambda = \text{diag}\{\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n\}$, $\lambda_j > 0$. При этом спектр Λ может быть упорядочен в любой последовательности с учетом кратности (например, в порядке невозрастания значений λ_j). Унитарная (в случае матрицы Грама – ортогональная) матрица U удовлетворяет условию

$$U U^T = E.$$

Зависимости от размерности матрицы Грама



Представим Λ в виде произведения двух функций от матрицы, обозначенных $\sqrt{\Lambda}$ и состоящих из соответствующих корней из положительных собственных чисел: $\sqrt{\Lambda} = \text{diag}\{\sqrt{\lambda_1}, \sqrt{\lambda_2}, \dots, \sqrt{\lambda_n}\}$. Тогда

$$G = U \sqrt{\Lambda} (U \sqrt{\Lambda})^T = S S^T, \quad S = (U \sqrt{\Lambda}). \quad (9)$$

Здесь матрица H не является нижнетреугольной матрицей Холецкого. Тем не менее подстановка

$$\Psi = S^{-1} \Phi$$

ортогонализирует исходный базис Φ пространства Ξ .

Замечание. В системе Mathematica сингулярное разложение реализуется операцией SingularValueDecomposition. При этом собственные числа матрицы упорядочиваются по убыванию.

Сравнительный анализ эффективности алгоритмов декомпозиции

Проведен сравнительный анализ эффективности методов разложения (сингулярного (С), Холецкого (Х), Шмидта (Ш)) в зависимости от размерности n (ось абсцисс) матрицы Грама при различных значениях мантисс μ действительных величин, уча-

ствующих в разложениях, в их десятичном представлении. Графически обработанные результаты численного эксперимента сведены в таблице, где метками 1, 2, 3 обозначены значения $\mu = 10, 30, 60$ соответственно. В левом столбце таблицы по оси ординат отложено время счета (секунды), в правом – гарантированное количество m доверительных разрядов после запятой в десятичном представлении результатов счета. Кривые построены на основе обработки статистической информации методом наименьших квадратов. Для сбора статистики для каждой размерности n генерировалась случайным образом система линейно независимых векторов $\mathbf{a} = (a_i)_n$ количеством $N \gg 1$ раз (практически принималось $N = 20$) и строились матрицы Грама посредством скалярного произведения $(\mathbf{a}, \mathbf{a}) = [\mathbf{a}, \mathbf{a}^T] = [a_i a_j]_{n \times n}$. Затем выполнялись действия в соответствии с анализируемым методом и оцениваемые характеристики статистически усреднялись и аппроксимировались полиномами четвертой степени от размерности n и резервируемой длины мантиссы представления десятичных чисел m . Результаты представлены сериями кривых таблицы при $\mu \in \{10, 30, 60\}$. Анализ результатов позволяет сделать ряд выводов.

Выводы относительно времени счета t' :

1) t' в методе Шмидта значительно превышает таковое в методах сингулярного разложения и разложения Холецкого и длина мантиссы на нем практически не сказывается;

2) t' в сингулярном разложении существенно зависит от размерности базиса; при базисах малой размерности длина мантиссы практического значения не имеет; при любом m t' значительно превышает время счета по Холецкому;

3) в отношении t' метод Холецкого является по сравнению с использованными средствами наиболее ресурсосберегающим; при коротких мантиссах t' практически одинаково для различных n , однако для мантисс существенного размера начинает значительно увеличиваться.

Выводы относительно точности, оцениваемой количеством A доверительных знаков после десятичной точки:

1) в методах Холецкого и сингулярного разложения точность разложения слабо зависит от размерности n ; при малой длине мантиссы она может теряться;

2) точность метода Шмидта существенно падает с ростом n ; при малых размерностях n довольно быстро теряется: переход графиков через нулевую отметку свидетельствует о явной непригодности результатов решения к использованию; достичь доверия результатам можно только за счет существенного увеличения рабочего диапазона мантиссы чисел в десятичном представлении.

Замечание. Ортогонализация базиса является энергозатратным процессом в решении механических задач энергетическими методами, например, методом граничных состояний. Методом граничных состояний решались задачи для различных сред: упругих, анизотропных [5, 6], термостатики, термоупругости [7].

Выводы

1. Выигрышным во всех отношениях является метод декомпозиции Холецкого, даже не смотря на то, что конечной целью процесса ортогонализации является построение матрицы Шмидта (это достигается обращением матрицы Холецкого в соот-

ветствии с (7)). Точность вычисления при переходе от X к H не должна падать существенно (для треугольной матрицы можно указать более короткий путь для обращения, чем традиционные вычисления алгебраических дополнений элементов; вычисление определителя сводится к перемножению диагональных элементов матрицы).

2. Метод сингулярного (спектрального) разложения несколько более трудоемок, чем метод Холецкого, но он имеет практическое преимущество, состоящее в возможности упорядочения спектра матрицы Грама в соответствии с потребностями исследователя. В частности, при использовании ортонормированного базиса для решения конкретных задач можно ограничивать размерность отрезка базиса гильбертова пространства более существенно, чем без возможности упорядочения. От этого зависит размерность разрешающей бесконечной системы уравнений при слабой корректировке суммы Бесселя (левая часть неравенства Бесселя) со всеми вытекающими отсюда последствиями.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ и Липецкой области в рамках научных проектов № 19-41-480003 «р_а», № 19-48-480009 «р_а».

Список литературы

1. Колмогоров А.Н., Фомин С.В. Элементы теории функций и функционального анализа. 7-е изд. М.: Физматлит, 2004. 572 с.
2. Курбатов В.Г., Чернов В.Е. Пакет «Математика» в прикладных научных исследованиях. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2016. 240 с.
3. Курбатов В.Г., Курбатова И.В. Вычислительные методы спектральной теории. Воронеж: Издательский дом ВГУ, 2019. 323 с.
4. Голуб Д., Ч. Ван Лоун. Матричные вычисления. М.: Мир, 1999. 548 с.
5. Иванов Д.А., Бузина О.П. Решение задач анизотропной упругости для многосвязной плоской области методом граничных состояний // Вести высших учебных заведений Черноземья. 2011. № 4 (26). С. 25–29.
6. Иванов Д.А. Решение обобщенной задачи Сен-Венана для полых анизотропных стержней // Наука и бизнес: пути развития. 2014. № 5 (35). С. 66–69.
7. Пеньков В.Б., Саталкина Л.В. Метод граничных состояний с возмущениями: неоднородные и нелинейные задачи теории упругости и термоупругости // LAP LAMBERT Academic Publishing GmbH & Co., Germany. 2012. 108 с.