# СРАВНИТЕЛЬНЫЙ АНАЛИЗ МЕТОДОВ ОРТОГОНАЛИЗАЦИИ СИСТЕМЫ ВЕКТОРОВ

*Плотников В. В., Ахмед А. Н.*

*Белорусский государственный университет информатики и радиоэлектроники*
*г. Минск, Республика Беларусь*

*Шамына А. Ю. – старший преподаватель кафедры ПОИТ, м. т. н.*

В работе было проведено исследование двух методов решения задачи QR-разложения в теории линейной алгебры. Были исследованы общие принципы работы алгоритма Грамма-Шмидта, преобразований Хаусхолдера, их свойства и недостатки, практические области применения. Проведен анализ скорости работы двух модификаций алгоритмов с применением распараллеливания.

Проблема ортогонализации возникает в обширном круге прикладных задач: текстурировании в компьютерной графике, методе наименьших квадратов для приблизительного решения системы линейных уравнений, расположении молекулы в пространстве в квантовой химии, ортогональных глубоких нейронных сетях в машинном обучении и др.

Пусть задана несовместимая система линейных уравнений $Ax = b$. Необходимо найти наилучшее приблизительное решение $\hat{x}$. Методом наименьших квадратов ищется такой $\hat{x}$, что разница $\|b - A\hat{x}\|^2$ будет наименьшей. Осуществим переход к $A^T A\hat{x} = A^T b$. Проведя ортогонализацию матрицы $A$ алгоритмом Грамма-Шмидта, найти $\hat{x}$ станет заметно легче [1]. Пусть столбцы матрицы $A$ заданы как $a_1, \dots, a_n$. Алгоритм Грамма-Шмидта преобразует векторы $a_i$ в ортонормированные векторы $q_i$, а исходная матрица теперь может быть представлена в виде $A = QR$. Для матрицы $A$ размером 3x3:

$$\begin{bmatrix} a_1\ a_2\ a_3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_1 & q_2 & q_3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{11} & r_{12} & r_{13} \\ 0 & r_{22} & r_{23} \\ 0 & 0 & r_{33} \end{bmatrix} \quad (1)$$

Из (1) следует, что $\hat{x} = R^{-1}Q^T b.$ На первом шаге алгоритма $q_1 = a_1/\|a_1\|.$ Затем следует, что $A_2 = a_2 - (a_2^T q_1)q_1,\ q_2 = A_2/\|A_2\|$. Общие формулы для $i$-ого вектора представлены следующим образом:

$$A_i = a_{\mathrm{i}} - \sum_{k=1}^{i-1}(a_i^T q_{\mathrm{k}})q_{\mathrm{k}} \quad (2)$$

$$q_i = A_{\mathrm{i}}/\|A_i\| \quad (3)$$

К сожалению, вычисленные таким образом (2) (3) $q_i$ могут выйти не полностью ортогональными. Для повышения вычислительной точности, в алгоритме Хаусхолдера, чтобы найти $Q$, предлагается произвести последовательное умножение матриц отражения вида (4):

$$H = I - 2(vv^T/\|v\|^2) = I - 2uu^T \quad (4)$$

$$H_{n-1} \dots H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} r_1\ r_2\ \dots\ r_{\mathrm{n}} \end{bmatrix} = Q^T A = R \quad (5)$$

При выполнении последовательного умножения матриц отражения в обратном порядке (5) можно получить треугольную матрицу $R$. Найдя таким образом $R$, можно найти $\hat{x}$ [2].

В общем случае, алгоритм Хаусхолдера (сложность $O(n^4)$ [3], где n – размерность матрицы $A$) работает медленнее, но дает более точные результаты, чем алгоритм Грамма-Шмидта (сложность $O(n^3)$ [4]) в силу наличия большей вычислительной устойчивости. Однако, если осуществить модификацию алгоритма Грамма-Шмидта с помощью реортогонализации, то его точность не будет уступать точности алгоритма Хаусхолдера. Примечательно, что алгоритм Грамма-Шмидта также заметно проще в реализации и легче подается распараллеливанию. Можно сделать вывод, что в наибольшем числе случаев стоит отдавать предпочтение алгоритму Грамма-Шмидта в связи с его простотой и эффективностью.

***Список использованных источников:***

1. *Trefethen, Lloyd N. (Lloyd Nicholas) Numerical linear algebra / Lloyd N. Trefethen, David Bau III – P. 56-62.*
2. *Stewart, G. W. (Gilbert W.) Matrix Algorithms / G. W. Stewart – P. 277-292.*
3. ***Wellesley – Cambridge Press / Strang, Gilbert, Linear Algebra and Learning from Data/Gilbert Strang – P. 128-131.***
4. ***Cambride University Press / William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Numerical Recipes - P. 578-583.***