2.3.1 Il metodo di Gram-Schmidt modificato

L'algoritmo di Gram-Schmidt nella sua formulazione classica (*Classical Gram-Schmidt, CGS*) è numericamente instabile. Ciò significa che tende ad amplificare gli errori di arrotondamento commessi dal computer quando opera su numeri in virgola mobile. In particolare, i vettori $\mathbf{q}_i$ generati dall'algoritmo tendono a perdere la reciproca ortogonalità al procedere delle iterazioni. Per questo motivo è stata studiata una differente versione dell'algoritmo, detta **metodo di Gram-Schmidt modificato** (*Modified Gram-Schmidt, MGS*), ideato inizialmente da Laplace nel 1816 e riscoperto da Bauer circa 150 anni dopo.

Analogamente all'algoritmo di Gram-Schmidt classico, assumiamo di avere un insieme di n vettori indipendenti di $\mathbb{R}^m$ $(n \leq m)$ $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2, \dots, \mathbf{v}_n$. e costruiamo n vettori $\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_n$, che soddisfano le proprietà (2.9).

Il *primo passo* dell'algoritmo modificato, consiste nella normalizzazione del primo vettore,

$$r_{11} = \|\mathbf{v}_1\| \quad \text{e} \quad \mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{v}_1}{r_{11}},$$

e nell'ortogonalizzazione dei vettori $\mathbf{v}_2$, $\mathbf{v}_3$, ..., $\mathbf{v}_n$ rispetto al vettore appena costruito $\mathbf{q}_1$. A tal fine definiamo, quindi, $n-1$ vettori $\mathbf{v}_k^{(2)}$, con $k = 2, \dots, n$,

$$\mathbf{v}_k^{(2)} = \mathbf{v}_k - r_{1k}\mathbf{q}_1, \qquad k = 2, \dots, n,$$

dove gli scalari r_{1k} sono da determinare in modo che $\langle \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_k^{(2)} \rangle = 0$. Nello specifico, applicando le proprietà del prodotto scalare, si deduce che

$$\langle \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_k^{(2)} \rangle = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_k \rangle - r_{1k} \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 \rangle = 0,$$

da cui, essendo $\langle \mathbf{q}_1, \mathbf{q}_1 \rangle = 1$, si ricava

$$r_{1k} = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_k \rangle.$$

Al termine del primo passo si ottiene così l'insieme dei vettori

$$\{\mathbf{q}_1, \mathbf{v}_2^{(2)}, \dots, \mathbf{v}_n^{(2)}\},$$

in cui il primo ha norma unitaria e i rimanenti sono tutti ortogonali a $\mathbf{q}_1$.

Al *secondo passo* normalizziamo il vettore $\mathbf{v}_2^{(2)}$ calcolando la sua norma $r_{22} = \|\mathbf{v}_2^{(2)}\|$ definendo così

$$\mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{v}_2^{(2)}}{r_{22}}.$$

In aggiunta, rendiamo ortogonali i vettori $\mathbf{v}_k^{(2)}$ con $k = 3, \dots, n$ rispetto al vettore $\mathbf{q}_2$ appena costruito. Definiamo, quindi i vettori

$$\mathbf{v}_k^{(3)} = \mathbf{v}_k^{(2)} - r_{2k}\mathbf{q}_2, \qquad k = 3, \dots, n,$$

dove lo scalare r_{2k} è da determinare in modo che $\langle \mathbf{q}_2, \mathbf{v}_k^{(3)} \rangle = 0$. Procedendo come fatto al primo passo, risulta

$$r_{2k} = \langle \mathbf{q}_2, \mathbf{v}_k^{(2)} \rangle, \qquad k = 3, \dots, n.$$

Questo step termina con la costruzione dell'insieme

$$\{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{v}_3^{(3)}, \dots, \mathbf{v}_n^{(3)}\},$$

caratterizzato dai primi due vettori che sono ortogonali tra di essi e hanno norma unitaria, i rimanenti sono tutti ortogonali ai primi due.

Al terzo passo, si dovrebbe normalizzare il vettore $\mathbf{v}_3^{(3)}$ per ottenere $\mathbf{q}_3$, e poi ortogonalizzare i vettori $\mathbf{v}_k^{(3)}$, per $k = 4, \dots, n$, rispetto a $\mathbf{q}_3$. L'algoritmo procede in modo analogo.

Esempio 2.9 *Consideriamo nuovamente l'esempio* (2.7) *e applichiamo questa volta l'algoritmo di Gram-Schmidt modificato ai vettori assegnati*

$$\mathbf{v}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{v}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

1. *Normalizziamo il primo vettore calcolando* $r_{11} = \|\mathbf{v}_1\| = \sqrt{2}$, *da cui*

$$\mathbf{q}_1 = \frac{\mathbf{v}_1}{r_{11}} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ \frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}.$$

In aggiunta ortogonalizziamo gli altri due. Poichè $r_{12} = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_2 \rangle = \frac{\sqrt{2}}{2}$ *e* $r_{13} = \langle \mathbf{q}_1, \mathbf{v}_3 \rangle = \sqrt{2}$, *abbiamo*

$$\mathbf{v}_2^{(2)} = \mathbf{v}_2 - r_{12}\mathbf{q}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ \frac{1}{2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} \\ 0 \\ -\frac{1}{2} \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{v}_3^{(2)} = \mathbf{v}_3 - r_{13}\mathbf{q}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

2. *Rendiamo il vettore* $\mathbf{v}_2^{(2)}$ *di norma unitaria. Essendo* $r_{22} = \|\mathbf{v}_2^{(2)}\| = \sqrt{\frac{1}{2}}$*,*

$$\mathbf{q}_2 = \frac{\mathbf{v}_2^{(2)}}{r_{22}} = \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ 0 \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{bmatrix}.$$

Calcolato $r_{23} = \langle \mathbf{q}_2, \mathbf{v}_3^{(2)} \rangle = -\sqrt{2}$*, ortogonalizziamo* $\mathbf{v}_3^{(2)}$ *rispetto a* $\mathbf{q}_2$

$$\mathbf{v}_3^{(3)} = \mathbf{v}_3^{(2)} - r_{23}\mathbf{q}_2 = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

3. *All'ultimo passo normalizziamo* $\mathbf{v}_3^{(3)}$ *ponendo* $r_{33} = \|\mathbf{v}_3^{(3)}\| = 1$ *e*

$$\mathbf{q}_3 = \frac{\mathbf{v}_3^{(3)}}{r_{33}} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}.$$