

A Gram–Schmidt-ortogonalizáció numerikus viselkedése

Géczi Aletta

Témavezető: Horváth Róbert

BSc szakdolgozat kivonata

A dolgozatban a Gram–Schmidt-ortogonalizáció ortogonalitásvesztésével és olyan eljárások vizsgálatával foglalkoztam, amelyek megpróbálják kiküszöbölni a klasszikus eljárás gyengeségeit. Az ortogonalizáció során egy mátrix a_k oszlopvektorai által generált téren vagy altéren q_k ortogonális bázist konstruálunk. Az is igaz, hogy a q_1, \dots, q_i vektorok rendre ugyanazt az alteret feszítik ki, mint az a_1, \dots, a_i vektorok.

A Jørgen Pedersen Gram és Erhard Schmidt által is ismertetett eljárás meg-hökentő eredménnyel érhet véget ha nem egzakt számításokat használunk, hanem egy lebegőpontos rendszerben dolgozunk. A kapott bázis végzetesen elveszítheti az ortogonalitását, esetenként a vektorok lineáris függetlensége miatt is aggódnunk kell.

Ismertettem az eljárás Laplace által is használt módosított változatát, valamint olyan ún. reortogonalizációs lépést végrehajtó algoritmusokat, amelyek az ortogonalitásvesztést képesek a gépi pontosság szintjén tartani. Egy szelektíven reortogonalizáló algoritmust is bemutattem, amely segítségével saját igényeinket figyelembe véve dolgozhatunk.

A dolgozat utolsó fejezetében az Arnoldi-eljárást vizsgáltam ortogonalitásvesztés szempontjából. Ez egy olyan sajátértékeket közelítő iteratív eljárás, amelyben szükség van egy ortogonális bázisra. A számítógépes kísérletek is jól mutatják, hogy ebben az eljárásban végzetes hibát véthetünk, ha nem ügyelünk arra, hogy a Gram–Schmidt-algoritmusok széles palettájáról melyiket választjuk.

Az elméleti ismertető után rövid példákon mutattam be az algoritmusok hibáját, amit Octave-ban végzett kísérletekkel is szemléltettem. A szakdolgozatom végén javaslatot tettem, hogy milyen körülmények között, mely eljárásokat érdemes alkalmazni, ha ortogonális bázist szeretnénk konstruálni.