UNIVERSIDADE ESTADUAL PAULISTA
“JÚLIO DE MESQUITA FILHO”
Campus Presidente Prudente

LARISSA VITÓRIA RIBEIRO DE ANDRADE

ESTUDO SOBRE ORTOGONALIZAÇÃO

PRESIDENTE PRUDENTE
2025

LARISSA VITÓRIA RIBEIRO DE ANDRADE

Estudo sobre ortogonalização

Tarefa desenvolvido na disciplina de Álgebra Linear para Ciências de Dados no Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional da Universidade Estadual Paulista Júlio de Mesquita Filho, UNESP-FCT.
Professor: Cássio Machiaveli Oishi

PRESIDENTE PRUDENTE
2025

Sumário

1 Lecture 7 – Ortogonalização e Algoritmo de Gram–Schmidt

A Lecture 7 aborda o problema da ortogonalização de vetores e sua relevância em métodos numéricos, em particular na construção da decomposição QR. O foco principal está no algoritmo clássico de Gram–Schmidt (CGS) e em sua versão modificada (MGS), com ênfase na análise de estabilidade numérica.

Inicialmente, o algoritmo clássico de Gram–Schmidt é apresentado como um procedimento direto para transformar um conjunto de vetores linearmente independentes em uma base ortonormal. Contudo, em aritmética de ponto flutuante, o método pode sofrer perda significativa de ortogonalidade, especialmente quando as colunas da matriz são quase linearmente dependentes, evidenciando limitações importantes do CGS em aplicações práticas.

Em seguida, introduz-se o algoritmo de Gram–Schmidt modificado, que reorganiza as projeções sucessivas de modo a reduzir o acúmulo de erros de arredondamento. Embora ambos os algoritmos sejam matematicamente equivalentes em aritmética exata, o MGS apresenta melhor comportamento numérico, preservando de forma mais eficaz a ortogonalidade dos vetores computados.

A lecture destaca que pequenas variações na formulação algorítmica podem resultar em diferenças significativas de estabilidade numérica, reforçando a necessidade de análise cuidadosa dos métodos empregados em cálculos computacionais.

2 Lecture 8 – Decomposição QR por Transformações Ortogonais

A Lecture 8 aprofunda o estudo da decomposição QR, apresentando métodos numericamente mais estáveis baseados em transformações ortogonais, com destaque para as reflexões de Householder.

Nesse contexto, a decomposição QR é construída por meio de reflexões sucessivas que eliminam os elementos abaixo da diagonal da matriz, formando uma matriz triangular superior. As transformações de Householder possuem a propriedade fundamental de preservar normas e ortogonalidade, o que resulta em excelente estabilidade numérica, mesmo para matrizes mal condicionadas.

Em comparação com os métodos baseados em Gram–Schmidt, o uso de reflexões ortogonais evita a amplificação de erros de arredondamento, sendo considerado o procedimento padrão em bibliotecas numéricas modernas. Embora o método apresente maior complexidade conceitual, seu desempenho e robustez justificam sua ampla utilização em aplicações práticas.

Por fim, a lecture reforça que a escolha de algoritmos numericamente estáveis é essencial em álgebra linear computacional, consolidando a decomposição QR via transformações ortogonais como uma ferramenta fundamental em problemas de mínimos quadrados e em diversas aplicações científicas e de engenharia.

3 Lecture 9 – Estabilidade Numérica e Experimentos Computacionais

A Lecture 9 tem como objetivo consolidar os conceitos de estabilidade numérica discutidos nas lectures anteriores por meio de experimentos computacionais. O foco principal está na comparação prática do comportamento numérico de diferentes algoritmos para problemas de álgebra linear, evidenciando os efeitos de erros de arredondamento e condicionamento.

Os experimentos apresentados investigam, em particular, a perda de ortogonalidade em algoritmos baseados em Gram–Schmidt e o impacto dessas perdas na qualidade das soluções computadas. Por meio de exemplos cuidadosamente construídos, demonstra-se que algoritmos matematicamente equivalentes podem apresentar desempenhos numéricos bastante distintos quando implementados em aritmética de ponto flutuante.

Neste trabalho, são reproduzidos no ambiente *MATLAB* os Experimentos 2 e 3 da Lecture 9. O Experimento 2 analisa a ortogonalidade das matrizes resultantes da decomposição QR, permitindo avaliar quantitativamente o erro associado a diferentes métodos. Já o Experimento 3 investiga o comportamento de algoritmos iterativos aplicados a matrizes mal condicionadas, destacando limitações práticas e dificuldades computacionais decorrentes da instabilidade numérica.

A reprodução desses experimentos em MATLAB permite verificar, de forma empírica, os resultados teóricos discutidos ao longo das lectures, reforçando a importância da escolha adequada de algoritmos em aplicações computacionais. Os resultados obtidos confirmam que métodos baseados em transformações ortogonais apresentam maior robustez numérica quando comparados a abordagens mais sensíveis a erros de arredondamento.

4 Resultados

4.1 Exercício

Estude as Lectures 7 e 8 do material complementar (Livro do autor Trefethen). Depois disso, reproduza os experimentos 2 e 3 da Lecture 9.

4.2 Resolução

4.2.1 Experimento 2 da Lecture 9: Comparação entre CGS e MGS

A Figura 1 apresenta os valores dos elementos diagonais r_{jj} da matriz R obtida pelas decomposições QR via Gram–Schmidt clássico (CGS) e Gram–Schmidt modificado (MGS), reproduzindo o Experimento 2 da Lecture 9 no *MATLAB*.

Veja que, para índices pequenos como o j, ambos os métodos apresentam comportamento bem parecidos, com valores de r_{jj} decrescendo. No entanto, a medida em que j aumenta, o comportamento numérico dos métodos passa a divergir. No caso do CGS, os valores de r_{jj} ficam estagnados em torno de 10^{-8} a 10^{-7}, indicando uma perda de ortogonalidade e uma limitação que vem pelos erros de arredondamento que fica acumulados.

O método de Gram–Schmidt modificado apresenta um decaimento contínuo dos valores de r_{jj}, atingindo magnitudes próximas a precisão de máquina, da ordem de 10^{-16}. Esse comportamento mostra a maior estabilidade numérica do MGS, que consegue preservar melhor a ortogonalidade dos vetores computados ao longo do processo.

Esses resultados confirmam o que são discutidas nas Lectures 7 e 8, na qual se destaca que algoritmos matematicamente equivalentes podem apresentar desempenhos numéricos muito distintos quando implementados em ponto flutuante, o experimento nos mostra de forma clara que o CGS é numericamente instável para matrizes mal condicionadas, enquanto o MGS é significativamente melhor.

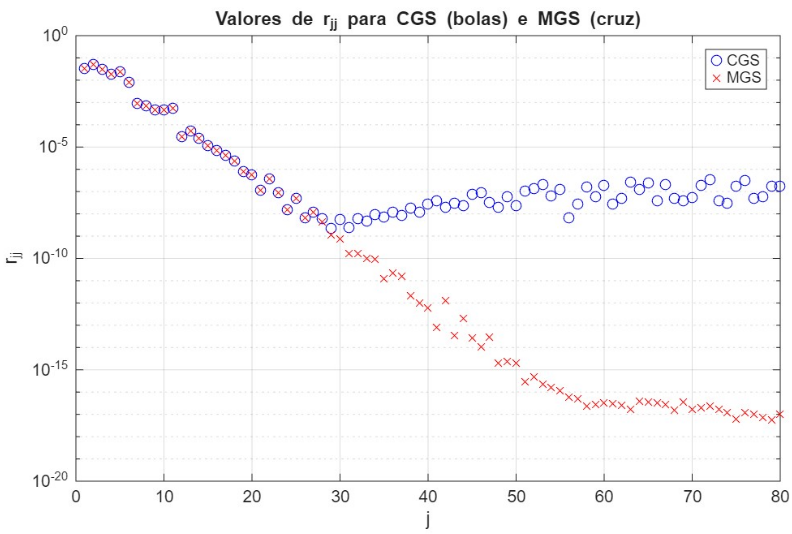

Figura 1: Experimento 2 da Lecture 9.

4.2.2 Experimento 3 da Lecture 9: Perda de Ortogonalidade

Na Tabela 1 apresentam-se os resultados da implementação realizada em *MATLAB* para o Experimento 3 da Lecture 9, que investiga a perda de ortogonalidade em métodos de decomposição QR quando aplicados a uma matriz mal condicionada. A matriz considerada possui colunas quase colineares, o que resulta em um elevado número de condicionamento,

$$\mathrm{cond}(A) \approx 2.80 \times 10^5.$$

A seguir, são apresentados os resultados obtidos a partir da implementação em *MATLAB*, permitindo a comparação entre o método baseado em reflexões de Householder (função `qr`) e o algoritmo de Gram–Schmidt modificado (MGS).

Tabela 1: Comparação da perda de ortogonalidade no Experimento 3 da Lecture 9.

Método	$\|Q^TQ - I\|_F$	Erro relativo a ε	Estabilidade
Householder (qr MATLAB)	2.36×10^{-16}	$\approx 1 \times \varepsilon$	Excelente
Gram–Schmidt Modificado (MGS)	3.25×10^{-11}	$\approx 1.47 \times 10^5\,\varepsilon$	Limitada

Decomposição QR via Householder A matriz ortogonal Q obtida pelo método de Householder satisfaz

$$Q^TQ - I \approx \begin{bmatrix} -2.22 \times 10^{-16} & -5.55 \times 10^{-17} \\ -5.55 \times 10^{-17} & 0 \end{bmatrix},$$

resultando em um erro de ortogonalidade

$$\|Q^TQ - I\|_F = 2.36 \times 10^{-16}.$$

Esse valor é da ordem da precisão da máquina, $\varepsilon \approx 2.22 \times 10^{-16}$, indicando que a ortogonalidade é preservada dentro do limite imposto pela aritmética de ponto flutuante.

Decomposição QR via Gram–Schmidt Modificado (MGS) Para o método de Gram–Schmidt modificado, obtém-se

$$Q^TQ - I \approx \begin{bmatrix} 0 & 2.30 \times 10^{-11} \\ 2.30 \times 10^{-11} & 0 \end{bmatrix},$$

com erro de ortogonalidade

$$\|Q^TQ - I\|_F = 3.25 \times 10^{-11}.$$

Esse erro corresponde a aproximadamente 1.47×10^5 vezes a precisão da máquina, evidenciando perda significativa de ortogonalidade, da ordem de cinco dígitos decimais.

Discussão Os resultados mostram que, embora o MGS apresente desempenho superior ao Gram–Schmidt clássico, ele ainda pode sofrer perda relevante de ortogonalidade quando aplicado a matrizes quase deficientes em posto. Quando tem uma proximidade linear entre as colunas da matriz A amplifica os efeitos dos erros de arredondamento.

O método de Householder mantém a ortogonalidade na precisão da máquina, confirmando sua maior estabilidade numérica. Esse experimento reforça, de forma prática, a conclusão central da Lecture 9: mesmo algoritmos considerados estáveis, como o MGS, podem falhar em problemas mal condicionados, sendo as transformações ortogonais a escolha preferencial em aplicações computacionais.