TP1 – Variantes du schéma d'orthogonalisation de Gram-Schmidt

Soit $A \in \mathbb{R}^{n \times m}$ avec $n \geq m$ une matrice de rang plein m. Le procédé d'orthonormalisation de Schmidt permet de construire une base orthogonale Q de l'espace image de A. Ce procédé consiste à parcourir les colonnes de A et pour chaque colonne générer un colonne de Q. Chaque nouvelle colonne de Q est obtenue en orthogonalisant la colonne courante de A par rapport aux colonnes précédemment calculées de Q puis à normaliser le vecteur ainsi obtenu. Du point de vue de la mise en œuvre sur un ordinateur, deux implantations peuvent être envisagées.

La variante dite de Gram-Schmidt classique consiste à orthogonaliser "simultanément" chaque colonne de A par rapport aux colonnes de Q déjà calculées. La description algorithmique est la suivante :

for toutes les colonnes de A **do**
  Calculer les composantes de la colonne courante de A suivant les directions des colonnes de Q précédemment calculées
  Retrancher à la colonne courante de A ses composantes suivant les directions des colonnes de Q précédemment calculées
  Normaliser le vecteur obtenu pour construire une nouvelle colonne de Q
end for

Cet algorithme peut être reformulé en ne réalisant pas "simultanément" les orthogonalisations mais en les sérialisant. La description algorithmique de cette variante, connue sous le nom d'algorithme de Gram-Schmidt modifié, s'écrit alors :

for toutes les colonnes de A **do**
  Copier la colonne courante de A dans un vecteur y
  for toutes les colonnes précédemment calculées de Q **do**
    Calculer la composante de y suivant la colonne courante de Q
    Retrancher à y sa composante suivant la direction de la colonne courante de Q
  end for
  Normaliser y, le résultat constitue la nouvelle colonne de Q
end for

Ces deux algorithmes sont rigoureusement identiques en arithmétique exacte, mais ont des comportements différents sur des ordinateurs en arithmétique finie. L'objectif de ce TP est d'étudier la perte d'orthogonalité dans les bases générées par ces deux algorithmes pour des matrices dont le conditionnement croît. La perte d'orthogonalité sera mesurée par

$$\|I - Q^T Q\|;$$

on notera que comme pour tout estimateur en arithmétique finie, il s'agit d'une quantité relative ; ici le dénominateur est $\|I\| = 1$ qui n'apparaît donc pas.

1. Ecrire une fonction Matlab `mgs` qui a pour paramètre d'entrée la matrice A et qui renvoie la matrice Q calculée par la méthode de Gram-Schmidt modifiée.
2. Ecrire une fonction Matlab `cgs` qui a pour paramètre d'entrée la matrice A et qui renvoie la matrice Q calculée par la méthode de Gram-Schmidt classique.
3. Modifier le script Matlab `tp.m` afin de générer une séquence de matrices A_k, $k = 1, \ldots, 16$, dont le conditionnement est $\kappa(A_k) = 10^k$; pour cela on utilisera des matrices orthonormales calculées par le fonction Matlab `gallery`.

   Lancer le script `tp.m` pour représenter sur un même graphique les valeurs de $\|I - Q_k^T Q_k\|$ en fonction de k pour chacun de ces deux schémas d'orthonormalisation et pour chacune de ces matrices A_k. Conjecturer la dépendance de la perte d'orthogonalité en fonction du conditionnement.
4. On considère maintenant des schémas d'orthonormalisation qui consistent à itérer deux fois chacun des deux schémas précédents. Modifier le script Matlab `tp.m` pour réaliser la question précédente pour ces deux schémas (on visualisera sur le même graphique les quatre courbes).