数值代数　第四次上机作业

李佳 2100010793

1　问题描述

实现 QR 分解, 并编制基于 QR 分解的求解线性方程组和线性最小二乘问题的通用子程序, 并利用该通用子程序完成下面三个计算任务.

(1) 求解以下三个线性方程组, 并将第一个方程组的计算结果与 Guass 消去法和列主元 Guass 消去法得到的计算结果进行对比, 将后两个方程组的计算结果与平方根法和改进的平方根法进行对比.

$$\begin{bmatrix} 6 & 1 & & & & & \\ 8 & 6 & 1 & & & & \\ & 8 & 6 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 8 & 6 & 1 & \\ & & & & 8 & 6 & 1 \\ & & & & & 8 & 6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{82} \\ x_{83} \\ x_{84} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 7 \\ 15 \\ 15 \\ \vdots \\ 15 \\ 15 \\ 14 \end{bmatrix} \quad (1)$$

$$\begin{bmatrix} 10 & 1 & & & & & \\ 1 & 10 & 1 & & & & \\ & 1 & 10 & 1 & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & 10 & 1 & \\ & & & & 1 & 10 & 1 \\ & & & & & 1 & 10 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{98} \\ x_{99} \\ x_{100} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 11 \\ 12 \\ 12 \\ \vdots \\ 12 \\ 12 \\ 11 \end{bmatrix} \quad (2)$$

$$\begin{bmatrix} \frac{1}{1} & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \cdots & \frac{1}{38} & \frac{1}{39} & \frac{1}{40} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \cdots & \frac{1}{39} & \frac{1}{40} & \frac{1}{41} \\ \frac{1}{3} & \frac{1}{4} & \frac{1}{5} & \cdots & \frac{1}{40} & \frac{1}{41} & \frac{1}{42} \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ \frac{1}{38} & \frac{1}{39} & \frac{1}{40} & \cdots & \frac{1}{75} & \frac{1}{76} & \frac{1}{77} \\ \frac{1}{39} & \frac{1}{40} & \frac{1}{41} & \cdots & \frac{1}{76} & \frac{1}{77} & \frac{1}{78} \\ \frac{1}{40} & \frac{1}{41} & \frac{1}{42} & \cdots & \frac{1}{77} & \frac{1}{78} & \frac{1}{79} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \\ \vdots \\ x_{38} \\ x_{39} \\ x_{40} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^{40} \frac{1}{k} \\ \sum_{k=2}^{41} \frac{1}{k} \\ \sum_{k=3}^{42} \frac{1}{k} \\ \vdots \\ \sum_{k=38}^{77} \frac{1}{k} \\ \sum_{k=39}^{78} \frac{1}{k} \\ \sum_{k=40}^{79} \frac{1}{k} \end{bmatrix} \quad (3)$$

(2) 求一个二次多项式 $y = at^2 + bt + c$, 使得在残向量的 2 范数最小的意义下拟合表中数据

t_i	-1	-0.75	-0.5	0	0.25	0.5	0.75
y_i	1.00	0.8125	0.75	1.00	1.3125	1.75	2.3125

(3) 在房产估价的线性模型

$$y = x_0 + a_1x_1 + a_2x_2 + \cdots + a_{11}x_{11}$$

中,$a_1, a_2, ..., a_{11}$ 分别表示税、浴室数目、占地面积、车库数目、房屋数目、居室数目、房龄、建筑类型、户型及壁炉数目,y 代表房屋价格. 现根据表中给出的 28 组数据, 求出模型中参数的最小二乘结果.

y						
25.9	29.5	27.9	25.9	29.9	29.9	30.9
28.9	84.9	82.9	35.9	31.5	31.0	30.9
30.0	28.9	36.9	41.9	40.5	43.9	37.5
37.9	44.5	37.9	38.9	36.9	45.8	41.0

2 数值方法

2.1 Householder 方法约化矩阵

我们希望通过 Householder 方法实现 QR 分解, 即用 Householder 变换作为约化矩阵为上三角形. 通过公式

$$w = \frac{x - \alpha e_1}{\|x - \alpha e_1\|_2}$$

来计算 Householder 向量 w.

在计算中, 为避免第一分量上两个相近的数相减, 考虑在 $x_1 > 0$ 时调整第一分量的计算方式:

$$v_1 = x_1 - \|x\|_2 = \frac{x_1^2 - \|x\|_2^2}{x_1 + \|x\|_2} = \frac{-(x_2^2 + ... + x_n^2)}{x_1 + \|x\|_2}$$

另外, 为避免计算 $\|x\|_2$ 时发生上溢或下溢, 考虑先对 x 归一化, 用 $x/\|x\|_\infty$ 代替 x 进行计算 (由计算公式可知, 这不影响计算结果).

最后, 输出的 Householder 向量不必完全算出来, 只保留系数 β 和向量 v 来输出, 以减少精度损失.

2.2 基于 Householder 方法进行 QR 分解

通过 Householder 变换对矩阵进行约化, 每一步先计算当前子矩阵第一列对应的 Householder 向量, 对子矩阵进行 Householder 变化, 使第一列除第一行外变为 0, 再继续对右下角的子矩阵进行上述操作.

计算的过程中, 不必将正交矩阵计算出来, 而是只存储对应的 Householder 向量的系数 β 和向量 v. 为将向量存储在矩阵 A 的下三角, 对 v 规格化为第一个分量为 1 的向量, 从而可以在 A 的对角线以下存储第一分量以外的分量. 此时令 $\tilde{\beta}=v_1^2\beta$, 存储在向量 d 中. 最后输出矩阵 A 和向量 d 作为 QR 分解的结果.

2.3 通过 QR 分解解线性方程组

QR 分解后, 要解的方程变为:$QRx=b$. 故只需解 $Rx=Q^Tb$. 注意到, 基于 Householder 变换的 QR 分解的 Q 满足:

$$R=Q^TA=H_{n-1}H_{n-2}...H_1A,$$

故 $Q^Tb=H_{n-1}H_{n-2}...H_1b$.

计算 Q^Tb 的过程中, 每一步需计算 $(I-\beta vv^T)b$, 可写为 $b-\beta(v^Tb)v$, 故只需计算向量的内积、数乘、相减, 一步工作量至多 $O(n)$, 避免矩阵 -向量运算带来 $O(n^2)$ 的工作量. 从而计算 Q^Tb 至多 $O(n^2)$ 的工作量.

之后再进行回代法解上三角系数矩阵方程即可.

2.4 通过 QR 分解解最小二乘问题

与解线性方程组的过程类似, 先要解出 $c=Q^Tb$, 之后再取 c 的前 n 个分量组成的向量 c_1, 解上三角形方程 $Rx=c_1$ 即可. 计算中需要注意的过程在 2.3 中已经提及.

3 理论分析结果

(1) 与其他方法相比,QR 分解法的工作量相对较大, 因此耗时预计比其他方法更长. 同时, 由于涉及更多的计算过程,QR 分解法与列主元 Guass 消去法、改进的平方根法相比可能产生更大的误差.
(2)(3) 与正则化方法相比,QR 分解处理问题的条件数更小, 因此误差更小, 残向量 2 范数更小, 求出的最小二乘结果更准.

4 具体算法实现

4.1 Householder 方法约化矩阵

```
function [v,beta] = house(x)
% 计算 Householder 变换 . 输出 H=I-beta*v*v^T 中的 beta, v
n = length(x);
x = x/max(abs(x));      % 归一化计算防止上溢下溢
sigma = x(2:n)'*x(2:n);
v = x;
if sigma == 0     % 若向量除第一分量外均为 0 则无需进行 Householder 变换
    beta = 0;     % 令 beta 为 0 不进行 Householder 变换
else
    alpha = sqrt(x(1)^2 + sigma);  % 向量 x 的模长
```

```
    if x(1) <= 0  % 若第一分量不大于 0 则进行一般的计算
        v(1) = x(1) - alpha;
    else          % 若第一分量大于 0 则调整计算方式
        v(1) = -sigma/(x(1)+alpha);
    end
    beta = 2 /(sigma + v(1)^2);  % 计算系数 beta
end
```

4.2 基于 Householder 方法进行 QR 分解

```
function [A, d] = QR_fac(A)
% 基于 Householder 变换的 QR 分解
% 输出矩阵 A 包括上三角矩阵和各次 Householder 变换向量
% 输出向量 d 为各次 Householder 变换向量中的系数
[m,n] = size(A);
d = zeros(n,1); % 存储 Householder 变换中对应的系数
for j = 1:n
    if j < m
        [v,beta] = house(A(j:m,j)); % 计算应进行的 Householder 变换
        % 对子矩阵进行 Householder 变换
        % 将矩阵矩阵运算化为矩阵向量运算与向量向量运算
        A(j:m,j:n) = A(j:m, j:n) - (beta * v) * (v' * A(j:m, j:n));
        d(j) = beta * v(1)^2;         % 存储规格化后的系数 beta
        A(j+1:m,j) = v(2:m-j+1)/v(1); % 存储规格化后的向量后面的分量
    end
end
```

4.3 通过 QR 分解解线性方程组

```
function [b] = QR_sol(A,b)
% 基于 Householder 方法的 QR 分解方法解方程组
% 输出方程组的解
[A,d] = QR_fac(A);   % 对矩阵进行 QR 分解
[~,n] = size(A);
for i = 1:n-1        % 计算向量 Q^Tb
    c = d(i)*(b(i) + A(i+1:n,i)'*b(i+1:n)); % 计算 beta(v^Tb)
    b(i) = b(i) - c; % 分别计算 b(i) 和 b(i+1:n)
    b(i+1:n) = b(i+1:n) - c * A(i+1:n,i);
end
for j = n:-1:2       % 回代法解 Rx=c
    b(j) = b(j)/A(j,j);
    b(1:j-1) = b(1:j-1) - b(j)* A(1:j-1,j);
end
b(1) = b(1)/A(1,1);
```

4.4 通过 QR 分解解最小二乘问题

```
function [x] = LS_sol(A,b)
% LS_SOL QR 法求解最小二乘问题
[m,n] = size(A);
[A,d] = QR_fac(A); % 对矩阵进行 QR 分解
for i = 1:n         % 计算向量 Q^Tb
    if i<m
        c = d(i)*(b(i) + A(i+1:m,i)'*b(i+1:m)); % 计算 beta(v^Tb)
        b(i) = b(i) - c; % 分别计算 b(i) 和 b(i+1:n)
        b(i+1:m) = b(i+1:m) - c * A(i+1:m,i);
    end
end
for j = n:-1:2 % 回代法解 Rx=c1
    b(j) = b(j)/A(j,j);
    b(1:j-1) = b(1:j-1) - b(j)* A(1:j-1,j);
end
b(1) = b(1)/A(1,1);
x = b(1:n);
```

5 数值结果及相应分析

(1) 最终各方法计算的误差 (∞ 范数) 与耗时如下表所示:

Table 1: ∞ 范数误差

	QR 法	Guass 消去法	列主元 Guass 消去法	平方根法	改进的平方根法
方程组 (1)	2.00	5.37 e+08	2.80 e-06	\	\
方程组 (2)	8.88 e-16	\	\	2.22 e-16	1.11 e-16
方程组 (3)	162.58	\	\	3.51 e+12	67.53

Table 2: 计算耗时 (s)

	QR 法	Guass 消去法	列主元 Guass 消去法	平方根法	改进的平方根法
方程组 (1)	3.19 e-3	0	1.87 e-3	\	\
方程组 (2)	5.48 e-3	\	\	1.32 e-2	3.59 e-3
方程组 (3)	1.11 e-3	\	\	5.03 e-3	4.62 e-4

由此可知:

- QR 分解的误差相比列主元 Guass 消去法和改进的平方根法均更大, 这可能与其更多的计算步骤有关.QR 法在方程组 (2)、(3) 的计算误差与后两种方法相差没有很大, 这说明 QR 法具有一定的数值稳定性. 但在方程组 (1) 的误差相差较大. 经检查 QR 分解结果发现,R 的最后一行最后一列的元素数量级已经到了 1e-15, R 已经接近奇异, 因此产生了较大的误差. 这可能是由于每一次的正交变换将每一列的模长集中在对角线上, 而正交变换不改变行列式, 从而使得对角线上的最后一个元素不得不变得很小. 这是 QR 分解相比其他解法的缺点.
- 与一般的 Guass 消去法和平方根法相比,QR 分解法的误差更小, 这说明相比未进行优化的两种方法,QR 法的数值稳定性更优越.
- 除平方根法外,QR 法的计算用时比其他方法均更高, 但并没有高很多. 这是由于 QR 法本身更多的计算步骤. 平方根法的耗时主要在计算平方根的过程.

(2) QR 法得到的最小二乘结果如下:

a	b	c
1.0000	1.0000	1.0000

(3) QR 法得到的最小二乘结果如下:

x_0	x_1	x_2	x_3	x_4	x_5	x_6	x_7	x_8	x_9	x_{10}	x_{11}
2.078	0.719	9.681	0.154	13.680	1.987	-0.958	-0.484	-0.074	1.019	1.444	2.903

通过已有的通用子程序, 可计算通过正则化方法得到的最小二乘结果. 经计算, 两问题下 QR 法和正则化方法得到结果的残向量 2-范数为:

Table 3: 残向量 2-范数

	QR 法	正则化方法
问题 (2)	1.1102 e-16	3.5108 e-16
问题 (3)	16.3404	16.3404

由此可见,

- QR 法条件数更小, 得出的最小二乘结果误差更小, 残向量的 2-范数更小, 计算结果一般优于正则化方法.
- 对于较良态的问题, 正则化方法与 QR 法的结果并没有很明显的差别.