

Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

Laboratorium 9

Faktoryzacja QR

21 maja 2020

Przydatne funkcje

- Python NumPy: `numpy.linalg.qr`

Ogólne uwagi

Każdy kolejny krok rozwiązania powinien być opisany, a na końcu każdego zadania powinny zostać przedstawione wnioski. Jeśli przedstawione są wyniki powinny być zinterpretowane. Zadanie najlepiej przesłać jako Jupyter notebook zawierający kod oraz tekst sprawozdania.

Zadanie 1 Faktoryzacja QR metodą Grama-Schmidta

1. Napisz funkcję dokonującą faktoryzacji QR macierzy $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\mathbf{A} = [\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \dots, \mathbf{a}_n]$ (\mathbf{a}_i to kolejne kolumny macierzy \mathbf{A}) klasyczną metodą ortogonalizacji Grama-Schmidta:

Dla $k = 1$:

$$\mathbf{u}_1 \leftarrow \frac{\mathbf{a}_1}{\|\mathbf{a}_1\|} \quad (1)$$

Dla $k > 1$:

$$\mathbf{u}_k \leftarrow \mathbf{a}_k - \sum_{i=1}^{k-1} \langle \mathbf{u}_i, \mathbf{a}_k \rangle \mathbf{u}_i \quad (2)$$

$$\mathbf{u}_k \leftarrow \frac{\mathbf{u}_k}{\|\mathbf{u}_k\|} \quad (3)$$

$$\mathbf{Q} = [\mathbf{u}_1, \mathbf{u}_2, \dots, \mathbf{u}_n]$$

$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix} \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{a}_1 \rangle & \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{a}_2 \rangle & \langle \mathbf{u}_1, \mathbf{a}_3 \rangle & \dots \\ 0 & \langle \mathbf{u}_2, \mathbf{a}_2 \rangle & \langle \mathbf{u}_2, \mathbf{a}_3 \rangle & \dots \\ 0 & 0 & \langle \mathbf{u}_3, \mathbf{a}_3 \rangle & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{bmatrix}$$

gdzie $\langle a, b \rangle$ oznacza iloczyn skalarny wektorów a, b .

- Przetestuj zaimplementowaną metodę porównując wyniki uzyskane z jej pomocą z wynikami zwracanymi przez funkcję biblioteczną. W testach wykorzystaj 4-5 macierzy losowych o różnym rozmiarze.
- Wygeneruj 30-50 przykładowych macierzy 8×8 o różnym wskaźniku uwarunkowania $\text{cond}(\mathbf{A}_i)$ (stosunek największej do najmniejszej wartości osobliwej). Wykorzystaj w tym celu SVD oraz biblioteczną funkcję realizującą dekompozycję QR (potrzebne będą dwie losowe macierze ortogonalne oraz diagonalna macierz odpowiednio szybko malejących wartości osobliwych).
- Dla każdej z uzyskanych w ten sposób macierzy \mathbf{A}_i wyznacz faktoryzację QR korzystając z zaimplementowanej funkcji ($\mathbf{A}_i = \mathbf{Q}_i \mathbf{R}_i$). Przedstaw zależność $\|\mathbf{I} - \mathbf{Q}_i^T \mathbf{Q}_i\|$ od $\text{cond}(\mathbf{A}_i)$.
- Zinterpretuj wyniki. Jaka jest przyczyna uzyskanych rozbieżności? Od czego zależy wielkość rozbieżności?

Zadanie 2 Rozwiązywanie układów równań metodą QR

Bezpośrednie rozwiązywanie układu równań przy pomocy równań normalnych jest obciążone dużym błędem jeśli macierz \mathbf{A} jest źle uwarunkowana (jej współczynnik uwarunkowania jest wysoki). Lepszym sposobem jest wykorzystanie dekompozycji QR w tym celu.

Napisz funkcję rozwiązującą nadokreślony układ równań liniowych metodą QR korzystając z własności macierzy ortogonalnych: $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^{-1}$, a także z mechanizmu *back substitution*. Następnie wykorzystaj ją do rozwiązania problemu aproksymacji średniokwadratowej dla zbioru punktów podanej tabeli poniżej. Przyjmij model postaci:

$$f(x) = \alpha_0 + \alpha_1 x + \alpha_2 x^2$$

. Przedstaw wizualizację uzyskanego wyniku (punkty oraz funkcja aproksymująca f).

x	-5	-4	-3	-2	-1	0	1	2	3	4	5
y	2	7	9	12	13	14	14	13	10	8	4