数值代数实验报告 3

Chase Young

2023 年 11 月 5 日

问题要求：将 QR 分解算法编写成通用的子程序, 并编写求解线性方程组和线性最小二乘问题的子程序，然后用编写的程序完成以下上机习题 1、2、3:

1 上机习题 1

1.1 问题描述

求解第一章上机习题的三个方程组，并比较计算结果，并评述各方法的优劣。要求输出计算结果和准确解的误差以及运行时间。

1.2 程序介绍

本题要求用 QR 方法求解线性方程组. 一般地，设 $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ 可逆，$\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n, \boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^n$，对于线性方程组

$$\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b} \tag{LE}$$

可以采用如下的 QR 方法求解：

(1) 计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$，其中 $\boldsymbol{Q}$ 是 n 阶正交阵，$\boldsymbol{R}$ 是对角元非负的上三角阵；其中 QR 分解可以根据算法 3.3.1，借助 Householder 变换实现.

(2) 原方程转化为 $\boldsymbol{QRx} = \boldsymbol{b}$，两边左乘 $\boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}$，将原方程转化为 $\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$.

(3) 计算 $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b}$，用回代法求解上三角方程 $\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{c}$，得到计算解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$.

将计算解 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ 和精确解 $\boldsymbol{x_0}$ 比较，根据

$$error = \|\boldsymbol{x_0} - \tilde{\boldsymbol{x}}\|_2$$

可以得出计算解和精确解之间的二范数误差 $error$.

具体实现的函数有：

- double householder(vector<double> x, vector<double>& v);

  计算向量 x 的 Householder 变换，记录用于表示 Householder 变换的向量 v，返回 beta 值

- vector<double> mat_slice_vec(vector<vector<double> > A, int i, int j, int k);

  将矩阵 A 切片，返回向量 $\boldsymbol{A}(i:j,k)$

- vector<vector<double> > mat_slice_mat(vector<vector<double> > A, int i1, int i2, int j1, int j2);

  将矩阵 A 切片，返回子矩阵 $\boldsymbol{A}(i1:i2, j2:j2)$

- vector<vector<double> > mat_sub(vector<vector<double> > A, vector<vector<double> > B);

  计算矩阵减法 A-B，返回计算结果

- vector<vector<double> > mat_I_sub_beta_vvT(double beta, vector<double> v);

  在算法 3.3.1 中，计算矩阵 $\boldsymbol{I} - \beta \boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^{\mathrm{T}}$ 并返回

- vector<vector<double> > mat_mul_mat(vector<vector<double> > A, vector<vector<double> > B);

  计算矩阵乘法 $\boldsymbol{AB}$，返回计算结果 (这里要求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的列数和矩阵 $\boldsymbol{B}$ 的行数相同)

- vector<double> QR_decomp_householder(vector<vector<double> >& A);

  计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解，按照教材 P94~P95 中的方式存储计算结果；要求矩阵 $\boldsymbol{A}$ 列满秩

- void QR_solver(vector<vector<double> > A, vector<double>& b);

  用 QR 方法求解线性方程组(LE)，计算解保存在向量 $\boldsymbol{b}$ 中

1.3 实验结果

1.3.1 1.1 中的方程组

为了便于展示结果，我们取方程组的维数 $N = 50$. 用列主元 Gauss 消去法求解和用 QR 方法求解的结果如图 1、图 2 所示.

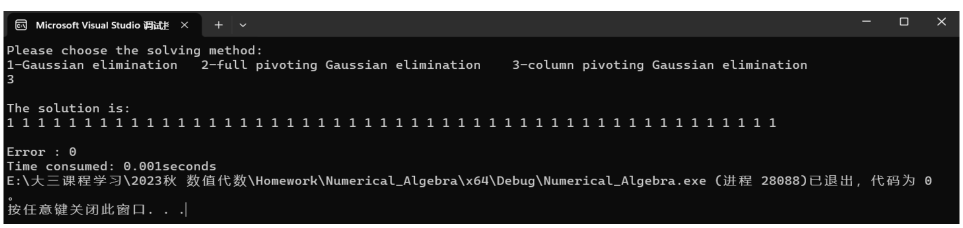

图 1: 列主元 Gauss 消去法求解 1.1 中的方程组

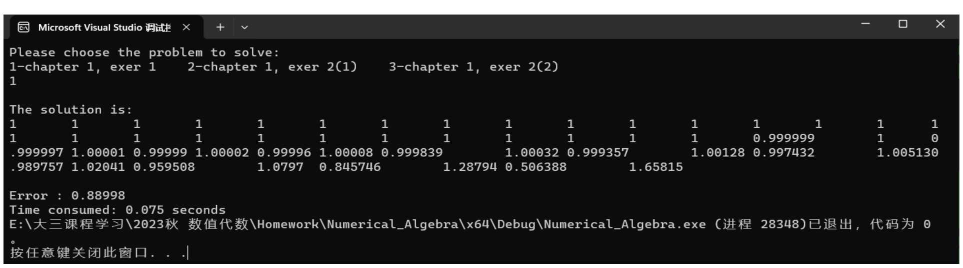

图 2: QR 方法求解 1.1 中的方程组

列主元 Gauss 消去法求解的二范数误差为 0，用时 0.001s.

QR 方法求解的二范数误差为 0.88998，用时 0.075s.

1.3.2 1.2(1) 中的方程组

对于 1.2(1) 中的方程组，将改进平方根法和 QR 方法的求解结果进行对比，如图 3、图 4 所示.

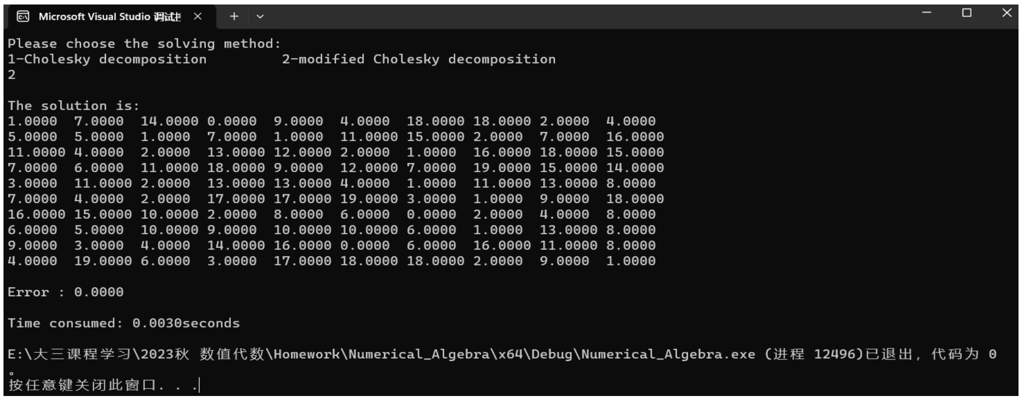

图 3: 改进平方根法求解 1.2(1) 中的方程组

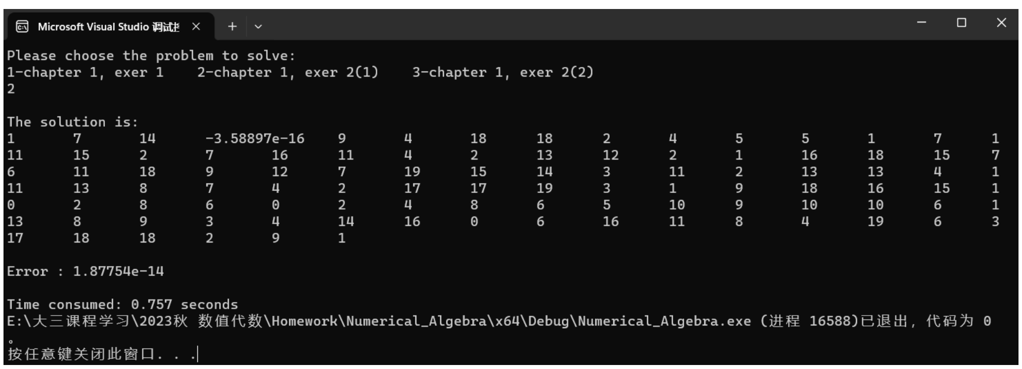

图 4: QR 方法求解 1.2(1) 中的方程组

改进平方根法求解的二范数误差为 0，用时 0.0030s.

QR 方法求解的二范数误差为 1.87754×10^{-14}，用时 0.757s.

1.3.3 1.2(2) 中的方程组

对于 1.2(2) 中的方程组，分别采用改进平方根法和 QR 方法求解，结果如图 5、图 6 所示.

改进平方根法求解的二范数误差为 17234.2828，用时 0.008s.

QR 方法求解的二范数误差为 456.562，用时 0.051s.

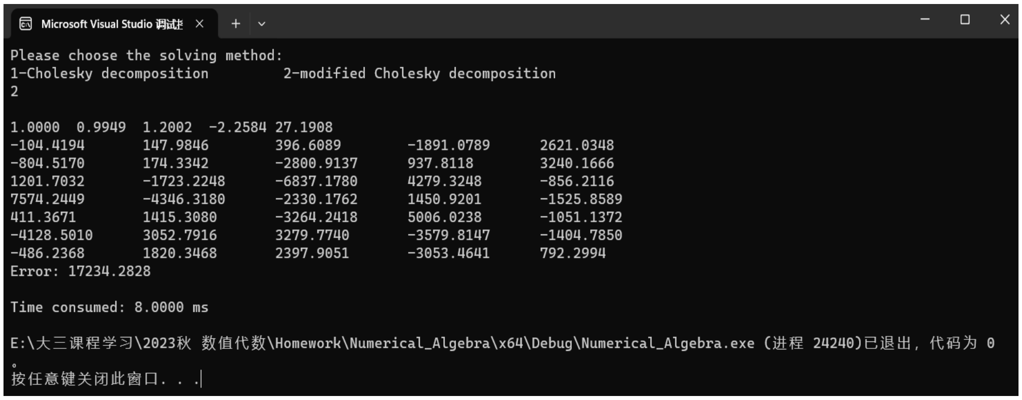

图 5: 改进平方根法求解 1.2(2) 中的方程组

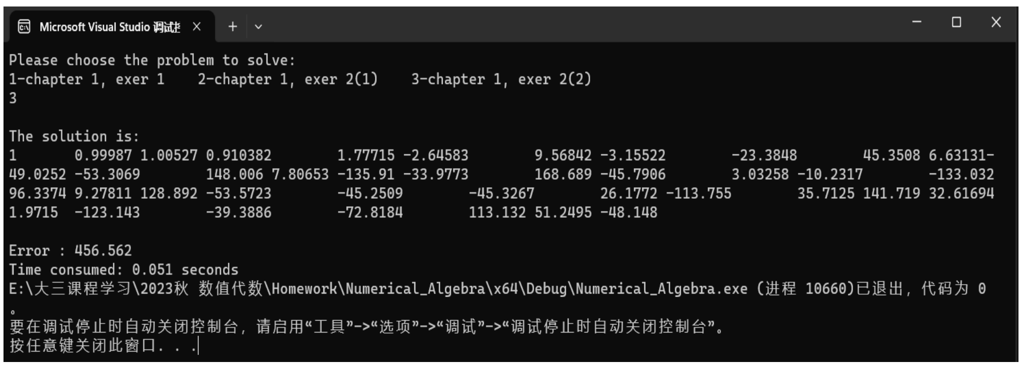

图 6: QR 方法求解 1.2(2) 中的方程组

1.4 结果分析

将上述结果总结如表 1、表 2、表 3 所示.

	二范数误差	运行时间
列主元 Gauss 消去法	0	0.001s
QR 方法	0.88998	0.075s

表 1: 问题 1.1

	二范数误差	运行时间
改进平方根法	0	0.0030s
QR 方法	1.87754×10^{-14}	0.757s

表 2: 问题 1.2(1)

	二范数误差	运行时间
改进平方根法	17234.2828	0.008s
QR 方法	456.562	0.051s

表 3: 问题 1.2(2)

可以看出，对于一般的线性方程组，列主元 Gauss 消去法和改进的平方根法无论在求解精度还是运行效率上都优于 QR 方法；但是对于一些病态的方程组，比如 1.2(2) 中的方程组，QR 方法可能在求解精度上更高.

2 上机习题 2

2.1 问题描述

求二次多项式 $y = at^2 + bt + c$，使得残向量在二范数最小的意义下拟合第二题数据 (见教材 P99 表 3.2)。要求输出计算结果，残向量的二范数以及运行时间。

2.2 程序介绍

对于最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2$，可以采用如下的 QR 方法求解：

(1) 计算矩阵 $\boldsymbol{A}$ 的 QR 分解 $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{QR}$.

(2) 计算 $\boldsymbol{c} = \boldsymbol{Q}^{\mathrm{T}}\boldsymbol{b} = \left(\boldsymbol{c}_1^{\mathrm{T}}, \boldsymbol{c}_2^{\mathrm{T}}\right)^{\mathrm{T}}$.

(3) 用回代法求解上三角方程 $\boldsymbol{Rx} = \boldsymbol{c}_1$，得到最小二乘解 $\boldsymbol{x}$，计算最小二乘的值 $\|\boldsymbol{c}_2\|_2$.

具体实现的函数有

- double vec_2_norm(vector<double> x);

  计算向量 $\boldsymbol{x}$ 的二范数

- double QR_LS(vector<vector<double> > A, vector<double> b, vector<double>& x);

  用 QR 方法求解最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2$，将最小二乘解保存在向量 $\boldsymbol{x}$ 中，返回最小二乘的值.

2.3 实验结果

实验结果如图 7 所示.

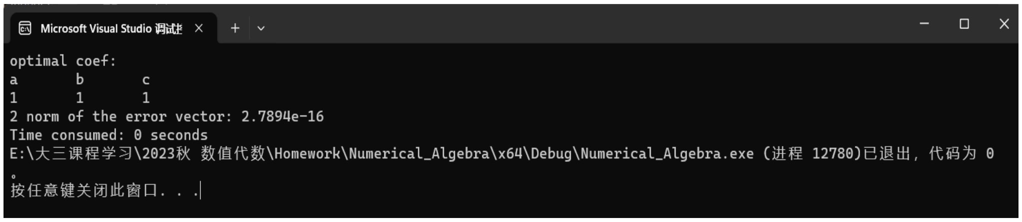

图 7: QR 方法求解最小二乘问题 2

也即所求的二次多项式为

$$y = t^2 + t + 1.$$

二范数意义下的误差为 2.7894×10^{-16}，运行时间少于 1ms.

2.4 结果分析

事实上，本问题中，由系数矩阵 $\boldsymbol{A}$ 决定的线性方程组

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$$

恰好有唯一解 $\boldsymbol{x} = (1, 1, 1)^{\mathrm{T}}$，这也印证了上述计算结果.

3 上机习题 3

3.1 问题描述

采用线性模型 $y = x_0 + a_1 x_1 + a_2 x_2 + \cdots + a_{11} x_{11}$ 拟合第三题数据 (见教材 P99 表 3.3、表 3.4)。求出模型中参数的最小二乘结果。要求输出计算结果，残向量的二范数以及运行时间。

3.2 程序介绍

和上机习题 2 类似，仍然采用 QR 方法求解最小二乘问题 $\min \|\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$.

3.3 实验结果

实验结果如图 8 所示.

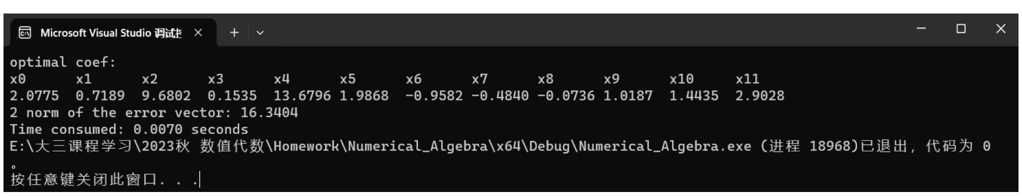

图 8: QR 方法求解最小二乘问题 3

最小二乘解如图所示. 残量的二范数为 16.3404，运行时间为 0.0070s.

3.4 结果分析

计算得到的残量的二范数为 16.3404，是一个较小的值，这印证了求解的正确性.