

作业6

(数值算法与案例分析)

李维杰

2024 年 10 月 26 日

题目1. 设有瘦高上双对角矩阵 $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ (即 $a_{i,j} \neq 0$ 当且仅当 $i - j \in \{0, -1\}$). 设计一个基于Givens Rotations的算法解决岭回归问题

$$\min \|Ax - b\|_2^2 + \lambda \|x\|_2^2,$$

其中 λ 是一个给定的正数.

解答. 问题等价于标准最小二乘问题

$$\min_{Cx=d} \left\| \begin{bmatrix} A \\ \sqrt{\lambda}I \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix} \right\|_2.$$

此问题的法方程为

$$\begin{bmatrix} A \\ \sqrt{\lambda}I \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} A \\ \sqrt{\lambda}I \end{bmatrix} x = \begin{bmatrix} A \\ \sqrt{\lambda}I \end{bmatrix}^* \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}.$$

即

$$(A^*A + \lambda I)x = A^*b.$$

其中, $A^*A + \lambda I$ 是一个三对角阵, 故可以使用 n 次Givens Rotations, 将 $A^*A + \lambda I$ 变换为上双对角阵, 也即上三角阵 R . 同时, 将这 n 次Givens Rotations作用于 A^*b 得到向量 c , 最后解线性方程组 $Rx = c$ 即可.

题目2. 设计一个基于Gaussian elimination消去约束系统的算法解决带约束的最小二乘问题

$$\min_{Cx=d} \|Ax - b\|_2.$$

解答. 对 $Cx = d$ 做Gaussian elimination,得

$$\begin{bmatrix} R & C_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix} = d'.$$

其中, $\begin{bmatrix} R & C_2 \end{bmatrix}$ 是一个梯形矩阵. 于是解得

$$x_1 = R^{-1}(d' - C_2 x_2).$$

按 $\begin{bmatrix} x_1 & x_2 \end{bmatrix}$ 的规模大小对 A 分块为 $A = \begin{bmatrix} A_1 & A_2 \end{bmatrix}$, 则

$$\begin{aligned} \min_{Cx=d} \|Ax - b\|_2 &= \min \|A_1 x_1 + A_2 x_2 - b\|_2 \\ &= \min \|(A_2 - A_1 R^{-1} C_2) x_2 - (b - A_1 R^{-1} d')\|_2. \end{aligned}$$

题目3. 最小二乘问题 $\min \|Ax - b\|_2$ 等价于Hermite不定增广线性系统

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^* & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix},$$

对于带约束的最小二乘问题 $\min_{Cx=d} \|Ax - b\|_2$, 同样存在类似的增广线性系统, 请找出它.

解答. 算法1. $\min_{Cx=d} \|Ax - b\|_2$ 对应的增广线性系统为

$$\begin{bmatrix} A^* A & C^* \\ C & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{x} \\ z \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^* b \\ d \end{bmatrix}.$$

事实上, 假设存在其它满足 $Cx = d$ 的 x , 且有 $x \neq \hat{x}$, 下面证明

$$\|Ax - b\|_2 \geq \|A\hat{x} - b\|_2$$

即可.

由于 $A^* A\hat{x} + C^* z = A^* b$, 可知 $A^*(A\hat{x} - b) = -C^* z$, 故

$$\begin{aligned} 2(x - \hat{x})^* A^*(A\hat{x} - b) &= -2(x - \hat{x})^* C^* z \\ &= -2[C(x - \hat{x})]^* z \\ &= 0. \end{aligned}$$

于是

$$\begin{aligned}
 \|Ax - b\|_2^2 &= \|A(x - \hat{x}) + A\hat{x} - b\|_2^2 \\
 &= \|A(x - \hat{x})\|_2^2 + \|A\hat{x} - b\|_2^2 + 2(x - \hat{x})^* A^* (A\hat{x} - b) \\
 &= \|A(x - \hat{x})\|_2^2 + \|A\hat{x} - b\|_2^2 \\
 &\geq \|A\hat{x} - b\|_2^2
 \end{aligned}$$

当且仅当 $x = \hat{x}$ 时取等.

算法2. 设Lagrange函数

$$L(x, \lambda) = \frac{1}{2}(\|Ax - b\|_2^2 + \lambda\|Cx - d\|_2^2),$$

令

$$\begin{cases} \frac{\partial L}{\partial x} = A^*(A\hat{x} - b) + \lambda C^*(Cx - d) = 0 \\ C\hat{x} - d = 0 \end{cases},$$

则 $\min_{Cx=d} \|Ax - b\|_2$ 对应的增广线性系统为

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^* & 0 \\ 0 & C \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b - A\hat{x} \\ \hat{x} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \\ d \end{bmatrix}.$$

题目4. 分别使用CGS/CGS2/MGS/MGS2算法进行Arnoldi过程并可视化正交性损失. 使用的样例可以是随机生成的 1000×1000 矩阵和30维的Krylov subspace.

解答. (代码见Problem4.m)

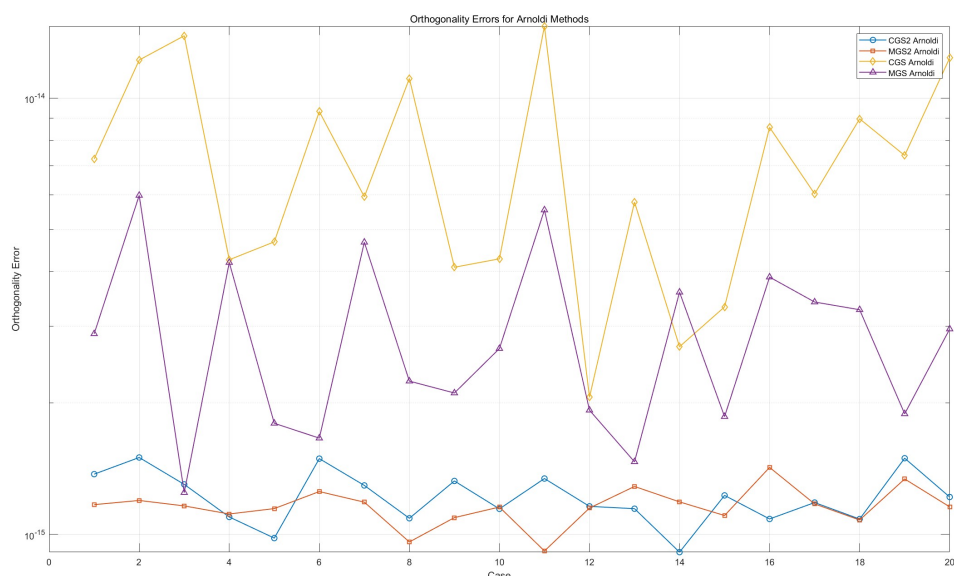


图 1: 四种算法在20种随机样例下的正交性损失 $\|Q^*Q - I_n\|_F$

题目5. 假设矩阵的秩已经给定,编写一个程序来解决亏秩最小二乘问题.

解答. 通过列选主元的QR分解求得亏秩条件下的最小二乘解为 \hat{x} , 并设满秩条件下的最小二乘解为 $\tilde{x} = (A^*A)^{-1}A^*b$. 对于随机生成的亏秩最小二乘问题 (A, b) ,两种解与观测值之间的差异度为

$$\|A\hat{x} - b\|_2 = \|A\tilde{x} - b\|_2 = 0.2723.$$

且 $\hat{x}_i \neq 0$ 当且仅当 $\text{col}(A)_i$ 是列空间 $C(A)$ 的一个基.(代码见Problem5.m)