作业4

(数值算法与案例分析)

李维杰

2024 年 10 月 12 日

题目1. 对于$x, y \in \mathbb{C}^n$,我们知道$\|x\|_2 = \|y\|_2 > 0$无法保证Householder矩阵的存在.请给出Householder矩阵存在的充要条件,并证明.

解答. Householder矩阵存在的充要条件是$\|x\|_2 = \|y\|_2 > 0$且$x \neq y$.下面对此加以证明:

必要性. 当$H(\omega) = I - \frac{2\omega\omega^*}{\omega^*\omega}$存在时,即有

$$\omega^*\omega = \|\omega\|_2^2 \neq 0.$$

其中$\omega = x - y$,故必有$x \neq y$.另外,由于

$$\begin{aligned} H(\omega)^* H(\omega) &= (I - \frac{2}{\omega^*\omega}(\omega\omega^*)^*)H(\omega) \\ &= (I - \frac{2}{\omega^*\omega}\omega\omega^*)^2 \\ &= I - \frac{4}{\omega^*\omega}\omega\omega^* + \frac{4}{(\omega^*\omega)^2}\omega(\omega^*\omega)\omega^* \\ &= I. \end{aligned}$$

因此

$$\begin{aligned} \|y\|_2^2 &= \|H(\omega)x\|_2^2 \\ &= (H(\omega)x)^*(H(\omega)x) \\ &= x^* H(\omega)^* H(\omega) x \\ &= x^* x = \|x\|_2^2. \end{aligned}$$

故有$\|x\|_2 = \|y\|_2 > 0$.

充分性. 当$x \neq y$时,必有$\omega^*\omega = \|\omega\|_2^2 \neq 0.$,于是Householder矩阵存在.

题目2. 说明在复矩阵的Householder三角化算法中如何避免有效数字的抵消.

解答. 对于Householder矩阵$H(\omega)=I-\frac{2\omega\omega^*}{\omega^*\omega}$,其中

$$\omega=x-y=x-\|x\|_2e_1.$$

当x很接近基向量e_1时,会产生有效数字的抵消.设$x=(x_k,x_{k+1},...,x_n)^T$,则在$x$很接近$e_1$时,可作恒等变换

$$\omega=x-\|x\|_2=\frac{x^2-\|x\|_2^2}{x+\|x\|_2}=-\frac{\sum_{i=k+1}^n x_i^2}{x+\|x\|_2}.$$

即可避免相近数相减造成的有效数字抵消问题.

题目3. 分别用以下方法编写计算复矩阵$A\in\mathbb{C}^{n\times n}$的$QR$分解的程序.
(1) Cholesky QR (例如:通过A^*A的Cholesky分解).
(2) Householder triangularization.
并分别以良态和病态的例子表现算法的正交性损失(即$|Q^*Q-I_n|$)

解答. (1) 由

$$LL^*=A^*A=R^*Q^*QR=R^*R,$$

得$R=L^*$.且有$R^*Q^*=A^*\Rightarrow LQ=A^*$.从而可通过Cholesky分解求出$A$的$QR$分解.
(2) 利用Householder变换迭代即可求出A的QR分解.

在本题中,选用良态矩阵为($\kappa(A_1)=6.494$):

$$A_1=\begin{bmatrix}2+3i & 1 & 0 & 0 & 0\\ 1 & 4-i & 1 & 0 & 0\\ 0 & 1 & 3+2i & 1 & 0\\ 0 & 0 & 1 & 5 & 1-i\\ 0 & 0 & 0 & 1 & 6+i\end{bmatrix},$$

此时,算法(1)的正交性损失为1.624×10^{-1},算法(2)的正交性损失为1.463×10^{-15}.

选用病态矩阵为($\kappa(A_2) = 4.540 \times 10^3$):

$$A_2 = \begin{bmatrix} 1 & 0.999+0.001i & 0.999+0.002i & 0.999+0.003i & 0.999+0.004i \\ 0.999+0.001i & 1 & 0.999+0.005i & 0.999+0.006i & 0.999+0.007i \\ 0.999+0.002i & 0.999+0.005i & 1 & 0.999+0.008i & 0.999+0.009i \\ 0.999+0.003i & 0.999+0.006i & 0.999+0.008i & 1 & 0.999+0.010i \\ 0.999+0.004i & 0.999+0.007i & 0.999+0.009i & 0.999+0.010i & 1 \end{bmatrix},$$

此时,算法(1)的正交性损失为4.160,算法(2)的正交性损失为1.041×10^{-15}.

注记. 本题表明HouseholderQR分解具有相当优秀的数值稳定性.

题目4. 设

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \rho_2 & \rho_3 & \cdots & \cdots & \rho_n \\ \beta_2 & \alpha_2 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \beta_3 & 0 & \alpha_3 & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \alpha_{n-1} & 0 \\ \beta_n & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \alpha_n \end{bmatrix},$$

设计一个高效的算法,计算A的QR分解.

解答. 由于A阵是一个稀疏矩阵,故采用Givens变换进行QR分解更优.具体操作如下:

设

$$T_{1j} = \begin{bmatrix} c_j & & & & s_j & & & \\ & 1 & & & & & & \\ & & \ddots & & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ -s_j & & & & c_j & & & \\ & & & & & 1 & & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix},$$

其中非0/1元素的坐标为$(1,1),(1,j),(j,1),(j,j)$.且

$$\begin{cases} c_j = \frac{\beta_j}{\sqrt{\alpha_1^2+\beta_j^2}} \\ s_j = \frac{\alpha_1}{\sqrt{\alpha_1^2+\beta_j^2}} \end{cases}.$$

则T_{1j}是酉阵,于是

$$Q=\prod_{j=2}^{n}T_{1j}^{-1},R=\prod_{j=2}^{n}T_{1j}A=\begin{bmatrix}\alpha_1^{'} & \rho_2 & \rho_3 & \cdots & \cdots & \rho_n\\ 0 & \alpha_2 & 0 & \cdots & \cdots & 0\\ 0 & 0 & \alpha_3 & \ddots & & \vdots\\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots\\ \vdots & \vdots & & \ddots & \alpha_{n-1} & 0\\ 0 & 0 & \cdots & \cdots & 0 & \alpha_n\end{bmatrix}.$$

其中$\alpha_1^{'}=\sqrt{\alpha_1^2+\sum\limits_{j=2}^{n}\beta_j^2}$.

上述算法中,计算T_{1j}的效率是$O(1)$的,计算R阵的效率是$O(n)$的, 计算Q阵的效率是$\sum\limits_{i=2}^{n}O(n)=O(n^2)$的,故算法的总时间复杂度是$O(n^2)$的.

题目5. 设$Q\in\mathbb{R}^{n\times n}$是一个正交阵.证明:

(1) Q可以被分解为有限个Householder reflections H的乘积.

(2) 若$\det(Q)=1$,则Q可以被分解为有限个Givens rotations T的乘积.

解答. (1) 定义$col_i(A)$表示矩阵A的第i列向量.由于Q是正交阵,故$\{col_1(Q),col_2(Q),\cdots,col_n(Q)\}$是一组正交基.设

$$\omega_i=col_i(I_n)-\frac{col_i(Q)}{\|col_i(Q)\|_2},$$

则$H(\omega_i)$将I_n阵的第i行镜射到Q阵的第i列向量方向上,因此

$$Q=I_n\times\prod_{i=1}^{n}\|col_i(Q)\|_2H(\omega_i)=\prod_{i=1}^{n}H(\omega_i).$$

(2) 设Givens rotations T_{ij}中

$$\begin{cases}c=\frac{q_{ji}}{\sqrt{q_{ii}^2+q_{ji}^2}}\\ s=-\frac{q_{ii}}{\sqrt{q_{ii}^2+q_{ji}^2}}\end{cases}.$$

则T_{ij}相当于把I_n阵中的一组二维向量旋转至Q阵中对应位置,即

$$Q=I_n\times\prod_{i=1}^{n}\|col_i(Q)\|_2\prod_{j=1,j\neq i}^{n}T_{ij}=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=1,j\neq i}^{n}T_{ij}.$$

又由于$\det(T_{ij})=\det(\begin{bmatrix}\cos\theta & \sin\theta\\ -\sin\theta & \cos\theta\end{bmatrix})=1$.故要求上式成立时,应当满足前提

$$\det(Q)=\det(\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=1,j\neq i}^{n}T_{ij})=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=1,j\neq i}^{n}\det(T_{ij})=1.$$