Отчет по численным методам: QR-разложение матрицы

Сотникова Виктория
307 группа

1 Постановка задачи

Требуется двумя различными методами получить QR-разложение данной в csv файле (вариант 8) матрицы $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$. Сравнить полученные разложения на основе матричной нормы разности $\|A - QR\|$. А также получить решение системы уравнений $Ax = f$ с использованием разложения с меньшей нормой разности.

2 Методы QR-разложения

QR-разложением матрицы A называется разложение вида:

$$A = QR,$$

где Q — ортогональная матрица, R — верхняя треугольная матрица.

Для выполнения задачи использованы следующие методы QR-разложения:

2.1 Метод Холецкого

2.1.1 Получение матрицы R

Пусть $A = QR$, где $\det(A) \neq 0$.

Тогда:

$$B = A^T A = (R^T Q^T)(QR) = R^T (Q^T Q) R = R^T R$$

Поскольку:

$$B^T = (A^T A)^T = A^T (A^T)^T = A^T A = B,$$
$$x^T (A^T A) x = (Ax)^T (Ax) = \|Ax\|^2 > 0, \quad x \in \mathbb{R}^n$$

Матрица B является симметричной и положительно определённой:

$$B^T = B \quad \text{и} \quad B > 0.$$

Из единственности разложения Холецкого следует, что:

$$R = L^T,$$

где L — транспонированный множитель Холецкого матрицы $A^T A$.

2.1.2 Формулы разложения Холецкого

Элементы матрицы L можно вычислить, начиная с верхнего левого угла матрицы, по формулам

$$
\begin{aligned}
&l_{11} = \sqrt{a_{11}} \\
&l_{j1} = \frac{a_{j1}}{l_{11}}, \quad j \in [2, n] \\
&l_{ii} = \sqrt{a_{ii} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip}^2}, \quad i \in [2, n] \\
&l_{ji} = \frac{1}{l_{ii}} \left(a_{ji} - \sum_{p=1}^{i-1} l_{ip} l_{jp} \right), \quad i \in [2, n-1], j \in [i+1, n]
\end{aligned}
$$

Выражение под корнем всегда положительно, если A - действительная положительно определённая матрица. Вычисление происходит сверху вниз, слева направо, т. е. сперва L_{ij}, а затем L_{ii}.

2.1.3 Получение матрицы Q

Для того, чтобы найти матрицу Q, можно решить:

$$LQ^T = A^T$$

Поскольку матрица L нижняя треугольная, решаем n СЛАУ с помощью прямой подстановки, итеративно получая столбцы матрицы Q^T по следующим формулам:

Начинаем с первого уравнения:

$$q_1 = \frac{b_1}{L_{11}},$$

где q_1 - первое значение в соответствующем столбце Q^T, а b_1 - первое значение в соответствующем столбце A^T.

Затем переходим к следующим уравнениям:

$$q_i = \frac{b_i - \sum_{j=1}^{i-1} L_{ij} x_j}{L_{ii}}, \quad i = 2 \ldots, n$$

2.2 Метод отражений Хаусхолдера

Рассмотрим нормированный первый столбец матрицы A

$$y_1 = [a_{11} a_{21} \ldots a_{n1}]^T / \sqrt{\sum_{i=1}^{n} a_{i1}^2},$$

и вектор $e_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \ldots \end{bmatrix}^T$. Если $a_{21} = a_{31} = \cdots = a_{n1} = 0$, то переходим к следующему шагу, положив $A^{(1)} = A, U_1 = I$ и введя обозначения $a_{ij}^{(1)} = a_{ij}$. В противном случае умножим матрицу A слева на матрицу отражения

$$U_1 = I - 2w_1 w_1^T = I_n - 2w_1 w_1^T,$$

где вектор w_1 вычисляется по формуле:

$$w_1 = \frac{y_1 + \operatorname{sign}(e_1, y_1)\, e_1}{\|y_1 + \operatorname{sign}(e_1, y_1)\, e_1\|_2}.$$

В результате получим матрицу

$$A^{(1)} = U_1 A,$$

в первом столбце которой стоят нули во всех позициях, кроме первой.

Пусть мы уже осуществили $l-1 > 0$ шагов и пришли к матрице $A^{(l-1)}$ с элементами $a_{ij}^{(l-1)}$ такими, что $a_{ij}^{(l-1)} = 0$ при $i > j, j = 1, \dots, l-1$. В пространстве $\mathbb{R}_{n-l+1}$ векторов размерности $n-l+1$ рассмотрим вектор

$$y_l = \left[a_{ll}^{(l-1)} a_{l+1,l}^{(l-1)} \dots a_{nl}^{(l-1)}\right]^T / \sqrt{\left(a_{ll}^{(l-1)}\right)^2 + \dots + \left(a_{nl}^{(l-1)}\right)^2}.$$

Если $a_{l+1,l}^{(l-1)} = a_{l+2,l}^{(l-1)} = \dots = a_{n,l}^{(l-1)} = 0$, то переходим к следующему шагу, положив

$$A^{(l)} = A^{(l-1)}, \quad U_l = I.$$

В противном случае строим матрицу отражения

$$V_l = I_{n-l+1} - 2 w_l w_l^T$$

(размеры матрицы V_l и вектора w_l равны $(n-l+1)$), переводящую вектор y_l в вектор, коллинеарный $e_l = [10\dots0]^T \in \mathbb{R}_{n-l+1}$, и переходим к матрице

$$A^{(l)} = U_l A^{(l-1)},$$

где

$$U_l = \begin{pmatrix} I_{l-1} & 0 \\ 0 & V_l \end{pmatrix}$$

После $(n-1)$ шагов мы приходим к матрице

$$A^{(n-1)} = U_{n-1} U_{n-2} \dots U_1 A,$$

имеющей треугольную форму.

Обозначим

$$U_{n-1} U_{n-2} \dots U_1 = U.$$

Тогда

$$A^{(n-1)} = UA, \quad A = U^T A^{(n-1)}.$$

Для того, чтобы получить матрицу Q, необходимо действовать на единичную матрицу.

Замечание: можно более эффективно вычислить

$$U_1 A = (I_n - w_1 w_1^T) A = A - 2 w_1 (w_1^T A) = A - 2 w_1 \left[w_1^T a_1 \, \dots \, w_1^T a_n\right]$$

3 Решение СЛАУ

Система линейных уравнений (СЛАУ) представляется в виде:

$$Ax = f,$$

где A — матрица коэффициентов, x — вектор неизвестных, f — вектор правой части.

С помощью QR-разложения СЛАУ можно переписать в виде:

$$Rx = Q^T f = b$$

Система уравнений $Rx = b$ решается с помощью обратной подстановки.
Начинаем с последнего уравнения:

$$x_n = \frac{b_n}{R_{nn}}$$

Затем переходим к предыдущим уравнениям:

$$x_i = \frac{b_i - \sum_{j=i+1}^{n} R_{ij} x_j}{R_{ii}}, \quad i = n-1, n-2, \ldots, 1$$

Этот процесс продолжается до тех пор, пока не будут найдены все компоненты вектора x.

Система уравнений $Ax = f$ решается в тестовом режиме. Для этого с помощью генератора строится вектор $x \in \mathbb{R}^n$ с компонентами $x_k \in [-1, 1]$, где $k = 1, 2, \ldots, n$. Правая часть системы вычисляется как: $f = Ax$.

4 Результаты

Максимум-норма арифметического пространства $\mathbb{R}^n$:

$$\|\mathbf{x}\|_\infty = \max\{|x_1|, |x_2|, \ldots, |x_n|\}$$

где $\mathbf{x} = (x_1, x_2, \ldots, x_n)$.

Матричная норма разности:

$$||A - QR||_\infty = \max_{1 \le i \le n} \sum_{j=1}^{n} |a_{ij} - (QR)_{ij}|$$

Невязка определяется как:

$$r = f - A\tilde{x}$$

где $\tilde{x}$ — численное решение системы уравнений.

Погрешность решения:

$$\delta = \tilde{x} - x$$

где x — точное решение системы.

Получены следующие результаты:

Метод разложения	Норма разности	Время (мс)
Холецкого	5.19943×10^{-17}	29.6049
Хаусхолдера	1.71313×10^{-13}	17.8628

Таблица 1: Сравнение методов QR-разложения

Поскольку при использовании метода Холецкого норма разности $\|A - QR\|$ меньше, система уравнений $Ax = f$ решается с его помощью. Результаты решения системы:

Параметр	Значение
Время на решение системы	0.2837 мс
Максимум-норма невязки	1.10606×10^{-14}
Максимум-норма погрешности	1.66317×10^{-16}

Таблица 2: Результаты решения системы с помощью QR-разложения

5 Заключение

В данном отчете были рассмотрены два различных метода QR-разложения. Получено решение системы уравнений $Ax = f$ с помощью QR-разложения по методу Холецкого.

Исходный код приложен к отчету.
Команда для компиляции:

```
g++ 1.cpp -o 1
```

Команда для запуска:

```
./1
```

Список литературы

1. В.Б. Андреев. *Численные методы.* 2013.

2. К.Ю. Богачев. *Методы решения линейных систем и нахождение собственных значений.* 1998.