Rozdział 10

LZNK. Rozkład QR. Metoda Householdera

W tym rozdziale zajmiemy się liniowym zadaniem najmniejszych kwadratów (LZNK).

Dla danej macierzy A wymiaru $M \times N$ i wektora b wymiaru M chcemy znaleźć wektor x wymiaru N taki, że

$$\|Ax - b\|_2 = \min_y \|Ay - b\|_2.$$

Jeśli A jest macierzą kolumnami regularną (rząd A jest maksymalny równy N), to zadanie to ma jednoznaczne rozwiązanie i nazywamy je regularnym LZNK (RLZNK).

Podstawowym algorytmem służącym jego rozwiązaniu jest metoda Householdera, czyli znalezienia rozkładu QR macierzy A, gdzie Q to macierz ortogonalna - iloczyn macierzy Householdera, a R to macierz górnotrójkątna.

W tym rozdziale przetestujemy podstawowy operator octave'a służacy do rozwiązywania dowolnego LZNK, tzn. operator $\backslash$. Zauważmy, że jeśli $M = N$ i A jest macierzą kolumnami regularną, to A jest nieosobliwa i to regularne LZNK jest równoważne rozwiązaniu układu równań liniowych $Ax = b$.

Przetestujemy w zadaniach funkcję octave'a **qr**() służącą znajdowaniu rozkładu QR macierzy, kilka własności macierzy (przekształceń) Householdera i rozwiążemy kilka konkretnych LZNK.

Zadanie 1 Operator octave'a $\backslash$ służący m.in. do rozwiązywaniu układów równań liniowych i LZNK w octavie.

- Przetestuj operator octave'a $\backslash$ rozwiązując RLZNK dla macierzy A ze znanym konkretnym rozwiązaniem x:

$$A = [1, 1; 1, -1; 1, 3], \qquad x = [1; 2]$$

przyjmując, że $f = Ax$.

Czy y=A\f jest rozwiązaniem tego układu?

Policz normy residualną $\|Ay - f\|_2$ i normę błędu $\|x - y\|_2$.

- Przetestuj ten operator dla nieregularnego LZNK dla macierzy A^T z $x = [1; 1; 1]$ i $f = Ax$.

  Czy y=A'\f jest rozwiązaniem tego układu?

  Policz normy residualną $\|A^T y - f\|_2$ i normę błędu $\|x - y\|_2$.

Zadanie 2 Rozkład QR w octave. Funkcje **qr**().

(a) Zapoznaj się z pomocą do funkcji: **qr**().

(b) Dla macierzy $A = [1, 1; 1, -1; 1, 3]$ znajdź jej rozkład $A = QR$ z pomocą funkcji **qr**().

(c) Sprawdź, czy uzyskana Q jest ortogonalna - policz normy Frobeniusa $QQ^T - I$ i $Q^T Q - I$.

(d) Sprawdź ten rozkład licząc normy macierzowe: normę drugą i normę Frobeniusa błędu $A - QR$.

(e) Zastosuj ten rozkład do znalezienia rozwiązania LZNK $Ax = f$ ze znanym rozwiązaniem, np. $x = [1; 0]$ i $f = [1; 1; 1]$.

(f) Policz normę drugą wektorową pomiędzy x, a wynikiem algorytmu w, polegającym na zastosowaniu odpowiedniego rozkładu oraz takie same normy residualne, tzn. normy drugie $Aw - f$ oraz $Rw - Q^T f$.

Zadanie 3 Układ równań normalnych, a rozkład QR.

Rozpatrzmy macierz $A_{2n,k}$ - pod-macierz wymiaru $2n \times k$ macierzy Vandermonde'a $A_{2n,2n}$ dla $2n$ węzłów równoodległych na $[0, 1]$.

LZNK z $A_{2n,k}$ z wektorem prawej strony f równym pierwszej kolumnie tej macierzy (rozwiązanie to pierwszy wersor) rozwiąż trzema sposobami:

(a) używając operator \,

(b) używając rozkład QR uzyskanym funkcją **qr**(),

(c) poprzez rozwiązanie układu równań normalnych:

$$Bx = g$$

dla

$$B = A_{2n,k}^T A_{2n,k}, \qquad g = A_{2n,k}^T f,$$

tzn. tworzymy macierz układu równań normalnych B, wektor prawej strony g układu równań normalnych, a następnie rozwiązujemy układ równań normalnych operatorem $\backslash$.

Macierz Vandermonde'a można w octave'ie utworzyć za pomocą funkcji **vander**().

Przeprowadź testy dla $N = 10, 20, 40, 80$ i $k = 2, 4, n$. Porównaj

- czas obliczeń
- błąd - $\|x - y\|_2$
- błąd residualny $\|Ax - f\|_2$

dla x rozwiązania dokładnego LZNK, f wektora prawej strony LZNK, y przybliżenia rozwiązania uzyskanego daną metodą.

Zadanie 4 Rozkład QR a operator $\backslash$ przy rozwiązywaniu układów równań liniowych,

Rozpatrzmy macierz $A_{n,n}$ Vandermonde'a dla n węzłów równoodległych na $[0, 1]$.

Układ równań liniowych z wektorem prawej strony równym pierwszej kolumnie tej macierzy (rozwiązanie to pierwszy wersor) rozwiąż dwoma sposobami:

(a) operatorem $\backslash$,

(b) rozkładem QR uzyskanym funkcją **qr**(),

Przetestuj dla $N = 10, 20, 40, 80$. Porównaj

- czas obliczeń,
- błąd $\|x - y\|_2$,
- błąd rezydualny: $\|Ax - f\|_2$,

dla x rozwiązania dokładnego tego układu równań, f wektora prawej strony układu i y przybliżenia rozwiązania uzyskanego daną metodą.

Zadanie 5 Krzywa najlepiej pasująca do danych punktów.

Zastosuj octave'a do znalezienia współczynników a, b krzywej najlepiej pasującej do zadanych punktów: (x_k, y_k), tzn. znajdź takie a, b, że

$$\sum_k |ax_k^2 + by_k^2 - 1|^2 = \min_{c,d} \sum_k |cx_k^2 + dy_k^2 - 1|^2.$$

Za (x_k, y_k) przyjmiemy zaburzone punkty z danej elipsy

$$y_k = \sqrt{1 - 4 * x_k^2} + z_k,$$

gdzie z_k to zaburzenie wylosowane z $[0, 10^{-2}]$ a $x_k = 1/k$ lub $x_k = -1 + h * k$ dla $h = 2/N$ $k = 1, ..., N$.

Czy obliczone a i b jest bliskie 4 i 1?

W jednym oknie zaznacz punkty (x_k, y_k) plusami oraz narysuj fragmenty wykresów obu elips: pierwszej - dla $a = 4, b = 1$ i drugiej elipsy - dopasowanej do zaburzonych punktów.

Powtórz obliczenia dla różnych zaburzeń z_k.

Zadanie 6 Zaprogramuj funkcję octave'a

```
function y=H(x,w,nw)
```

która dla danych wektorów $\vec{x}$ i $\vec{w}$ tego samego wymiaru N i skalaru $nw = \|w\|_2$ zwróci wektor $y = H_w \vec{x}$ dla

$$H_w = I - 2 * \frac{1}{nw} \vec{w}\vec{w}^T$$

czyli przekształcenia (macierzy) Householdera.

Skalar może być parametrem opcjonalnym. Jeśli funkcja będzie wywołana z dwoma tylko parametrami, to normę w można obliczyć w tej funkcji.

Przetestuj tę funkcję dla losowych wektorów $\vec{x}$ i $\vec{w}$ i sprawdź, czy

$$\|H_w \vec{x}\|_2 = \|\vec{x}\|_2, \qquad H_w(H_w x) = x.$$

Zadanie 7 Napisz ogólniejszą wersję funkcji z poprzedniego zadania, tzn.: funkcję:

```
function Y=Hm(X,w,nw),
```

gdzie X macierz $N \times M$ i wtedy zwracany wynik to macierz $Y = H_w * X$. Pozostałe dwa parametry funkcji pozostaną bez zmian.

Czy można zaimplementować taką funkcję bez użycia pętli?

Sprawdź, wykorzystując tę funkcję, czy mnożenie przez macierz Householder nie zmienia norm macierzowych drugiej i Frobeniusa, tzn. czy:

$$\|A\|_2 = \|H_w * A\|_2 = \|A * H_w\|_2$$

i

$$\|A\|_F = \|H_w * A\|_F = \|A * H_w\|_F$$

dla losowej macierzy A i H_w macierzy Householdera dla losowego wektora $w \neq 0$.

Zadanie 8 Znajdź wektor Householdera $\vec{w}$ taki, że odpowiednie przekształcenie Householdera przeprowadza dany wektor $\vec{u} \neq 0$ na kierunek drugiego danego niezerowego wektora $l * \vec{v} \neq 0$ dla $l = \frac{\|v\|_2}{\|u\|_2}$.

Przetestuj dla dowolnych dwóch różnych wektorów o tej samej długości, czy rzeczywiście $H_w\vec{u} = \vec{v}$.

Zadanie 9 Zastosuj metodę Householdera do rozwiązania zadania znalezienia prostej $y = ax+b$ najlepiej przybliżającej N punktów $(x_k, y_k) = (k, 1 + 2 * k + \epsilon_k)$ dla $k = 1, \ldots, N$ gdzie $(\epsilon_1, \ldots, \epsilon_N)$ to losowy wektor za zakresu $[-\epsilon, \epsilon]$, tzn.:

$$\sum_k |ax_k + b - y_k|^2 = \min_{c,d} \sum_k |cx_k + d - y_k|^2.$$

Należy testować dla wartości $\epsilon = [1, 10^{-1}, 10^{-2}, 10^{-3}]$.

Funkcja **rand**(n) generuje wektor losowy o rozkładzie jednostajnym na $[0, 1]$ w octavie.

Porównaj z wynikami otrzymanymi za pomocą standardowej funkcji octave'a, tzn. \ , oraz przy wykorzystaniu funkcji octave'a **qr**(A).

Zadanie 10 Zaprogramuj metodę Householdera rozwiązywania układu równań liniowych $A\vec{x} = \vec{b}$ dla A macierzy trójdiagonalnej $N \times N$, tzn. napisz funkcję octave'a:

function [x]=hous3diag(a,b,c,f,N)

Parametry funkcji:

- a, b, c przekątna, pod-przekątna i nad-przekątna macierzy A,
- f - wektor prawej strony,
- N - wymiar zadania - długość przekątnej a.

Funkcja zwraca x rozwiązanie $Ax = f$.

Przetestuj działanie funkcji analogicznie do zadania 4 dla macierzy trójdiagonalnej o stałych diagonalach, np. takiej, że elementy na głównej diagonali są równe dwa, a elementy na pod- i nad-diagonalach są równe minus jeden dla $N = 10^p$ z $p = 1, 2, \ldots, 9$.. Za wektor prawej strony f możemy przyjąć pierwszą kolumnę macierzy A.