§4.5 QR-Zerlegung (Householder-Transformation)

Wieder Faktorisierung $A = QR$ mit orthogonaler Matrix Q, $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$.

<u>Def. 4.9</u> $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ orthogonal, falls $Q^T Q = I$, also $Q^{-1} = Q^T$

Orthogonale Matrizen beschreiben Drehungen und Spiegelung (Längen und Winkel bleiben erhalten).

Konditionsdefinition (siehe Satz 2.10, Bem. 2.11)

$$\kappa_2(A) := \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \Big/ \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}$$

($\kappa_2(A) = \infty$ zugelassen)

<u>Eigenschaften:</u>

<u>Satz 4.9</u> Sei $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonal.

Dann gilt

a) Q^T orthogonal

b) $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ für alle $x \in \mathbb{R}^n$

c) $\kappa_2(Q) = 1$

d) Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, dann

$\kappa_2(A) = \kappa_2(QA)$ und

$\|A\|_2 = \|QA\|_2$

(Konditionserhaltung)

Ziel: Faktorisierung $A = QR$

mit Q orthogonal, R obere

Dreiecksmatrix.

Dann $Ax = b \iff QRx = b \iff$

$Rx = Q^T b$ (lösbar durch

Rückwärtseinsetzen)

Householder-Transformation

Sei $v \in \mathbb{R}^n$, $v \neq 0$. Definiere das sog. dyadische Produkt:

$$v v^T := \begin{pmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{pmatrix} \cdot (v_1, \dots, v_n)$$

$$= \begin{pmatrix} v_1 v_1 & \cdots & v_1 v_n \\ \vdots & & \vdots \\ v_n v_1 & \cdots & v_n v_n \end{pmatrix}$$

Beachte: $\operatorname{rang}(v v^T) = 1$!

$$Q_v := \underline{I} - 2 \cdot \frac{v v^T}{v^T v}$$

(Transformationsvorschrift Householder / HH-Transf.)

<u>Eigenschaften</u> der HH-Transformation

(4.10)

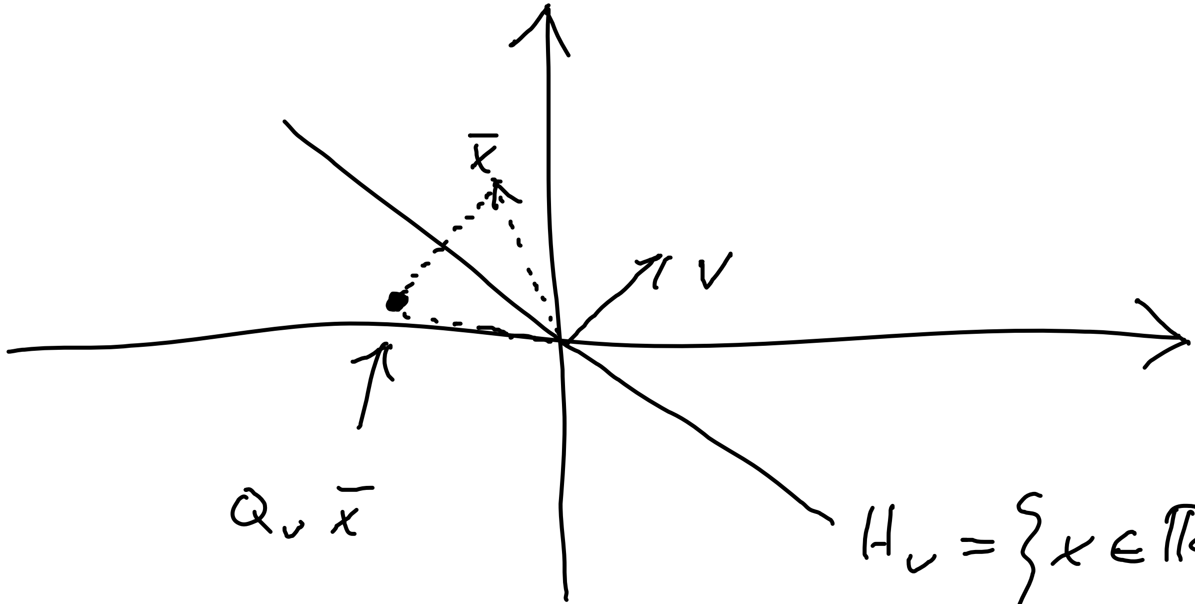
a) $Q_v^T = Q_v$

b) $Q_v^2 = \underline{I}$ (Einheitsmatrix)

c) $Q_{\alpha v} = Q_v \quad , \alpha \in \mathbb{R} \quad , \alpha \neq 0$

d) $Q_v y = y \iff y^T v = 0$

e) $Q_v v = -v$



$$H_v = \{ x \in \mathbb{R}^m \mid x^T v = 0 \}$$

Ziel der QR-Faktorisierung von A:
wähle v so, dass ein Spaltenvektor von A auf ein Vielfaches des Einheitsvektors gespiegelt wird.

Finde zu $y \in \mathbb{R}^m$, $y \notin \operatorname{span}(e^1)$
$= \{ \lambda e^1 \mid \lambda \in \mathbb{R} \}$

$e^1 := \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$ ein $v \in \mathbb{R}^m$, so dass

$$Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1$$

Norm von y bleibt weg. Orthogonalität von Q_v erhalten (Spiegelung!)

$$Q_v y = \left(I - 2 \cdot \frac{v v^T}{v^T v} \right) y = y - 2 \cdot \frac{v^T y}{v^T v} \cdot v$$

$$= \pm \|y\|_2 e^1 \qquad (4.11)$$

also ist v Linearkombination von y und e^1. Das rechtfertigt den Ansatz $v = y + \alpha e^1$ (*)

(Skalierung von v ist frei wg. 4.10c)

(*) einsetzen in 4.11 liefert

$\alpha = \pm \|y\|_2$, also $\underline{v = y \pm \|y\|_2 e^1}$

Zur Vermeidung von Auslöschung wähle

$$v = y + \operatorname{sign}(y_1) \|y\|_2 e^1$$

mit $y_1 := y \cdot e^1$

Damit folgt $Q_v y = -\alpha e^1$ (4.12)

QR-Faktorisierung: wende 4.11/4.12 sukzessive an, d.h. setze im 1. Schritt

$y = a^1$ (1. Spaltenvektor von A)

$$v^1 = a^1 + \operatorname{sign}(a_{11}) \cdot \|a^1\|_2 e^1$$

$$Q_1 := Q_{v^1}$$

$$\rightarrow \quad Q_1 A = \begin{pmatrix} * & * & \cdots & * \\ 0 & & & \\ \vdots & & \boxed{\tilde{A}^{(2)}} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

$$Q_2 := \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & & & \\ \vdots & & \boxed{\tilde{Q}^{(2)}} & \\ 0 & & & \end{pmatrix}$$

$$Q_2 Q_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & \cdots & * \\ 0 & * & * & \cdots & * \\ \vdots & 0 & & & \\ & \vdots & & \boxed{\tilde{A}^{(3)}} & \\ 0 & 0 & & & \end{pmatrix}$$

$$\ldots Q_3 Q_2 Q_1 A = R = \begin{pmatrix} \ddots & * \\ 0 & \ddots \end{pmatrix}$$

$\rightarrow$ da $Q_j = Q_j^T = Q_j^{-1}$

$$\boxed{A = Q_1 \cdot \ldots \cdot R}$$

QR-Zerlegung von A

$$v^T v \cdot y = \begin{pmatrix} v_1 v_1 & \cdots & v_1 v_n \\ \vdots & & \vdots \\ v_n v_1 & \cdots & v_n v_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} v_1 v_1 y_1 + v_1 v_2 y_2 + \dots + v_1 v_n y_n \\ \cdots\cdots \\ \\ \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} v_1 y_1 v_1 + \dots + v_1 y_n v_n \\ \vdots \\ \end{pmatrix}$$

$$= v^T y \cdot v$$ (Nachtrag dyadisches Produkt)

In der Praxis muss Q_j nicht explizit berechnet werden. Berechne für Q_1 z.B. das Matrix-Vektor Produkt $w^T := (v^1)^T A$ und damit

$$Q_1 A = A - 2 \cdot \frac{v^1 w^T}{(v^1)^T v^1} \qquad (4.13)$$

Vorteile:

- QR-Faktorisierung ist für nicht-quadrat. Matrizen definiert
- optimale Kondition der QR-Zerlegung

Nachteile:

- Rechenaufwand höher als bei LR-Zerlegung

$\rightarrow$ ca. $\frac{2}{3}n^3$ für vollbesetzte Matrizen A mit $m \approx n$

ca. $m n^2$, falls $m \gg n$

Beispiel:

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix}, \quad v^1 = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}}_{a^1} \overset{\operatorname{sign}(a_{11})}{+} \underset{\|a^1\|_2}{3} \cdot e^1 = \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix}$$

1. Schritt

$$w^T := (v^1)^T A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 12 & 4 \end{pmatrix}$$

(nach 4.13)

$$Q_1 := Q_{v^1}$$

$$Q_1 A \underset{4.13}{=} A - 2 \cdot \frac{v^1 w^T}{(v^1)^T v} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} -$$

$$2 \cdot \frac{1}{24} \cdot \begin{pmatrix} 4 \\ 2 \\ 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 12 & 4 \end{pmatrix}$$

$$= \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} - \frac{1}{12} \cdot \begin{pmatrix} 48 & 16 \\ 24 & 8 \\ 24 & 8 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 0 \\ 2 & 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 4 & 4/3 \\ 2 & 2/3 \\ 2 & 2/3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -3 & -\frac{1}{3} \\ 0 & -2/3 \\ 0 & -2/3 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} -3 & -1/3 \\ 0 & \boxed{\begin{matrix} -2/3 \\ -2/3 \end{matrix}} \\ 0 & \end{pmatrix}$$

$$\underbrace{}_{\tilde{A}^{(2)}}$$

2. Schritt:

$$v^2 = \underbrace{\begin{pmatrix} -2/3 \\ -2/3 \end{pmatrix}}_{\tilde{a}^1} \underbrace{-}_{\operatorname{sign}(\tilde{a}_{11})} \overbrace{\frac{2}{3}\sqrt{2}}^{\|\tilde{a}^1\|_2} \overset{e^1}{\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}}$$

. . . .

insgesamt:

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \multicolumn{2}{|c}{\tilde{Q}_2} \\ 0 & & \end{pmatrix}}_{=:Q_2} Q_1 A = \underbrace{\begin{pmatrix} -3 & -1/3 \\ 0 & \frac{2}{3}\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}}_{R}$$

$$A = \underbrace{Q_1 \cdot Q_2}_{=:Q} \cdot R$$

(QR-Zerlegung)

Kap. 5 Lineare Ausgleichsrechnung

Motivierendes Beispiel:

Messe für Stromkreis Datensatz $(U_i, I_i \mid i = 1, \dots, m)$ von Spannungen und Strömen.

Ziel: Bestimme den Widerstand R nach dem Ohm'schen Gesetz.

$$U_i = R \cdot I_i$$

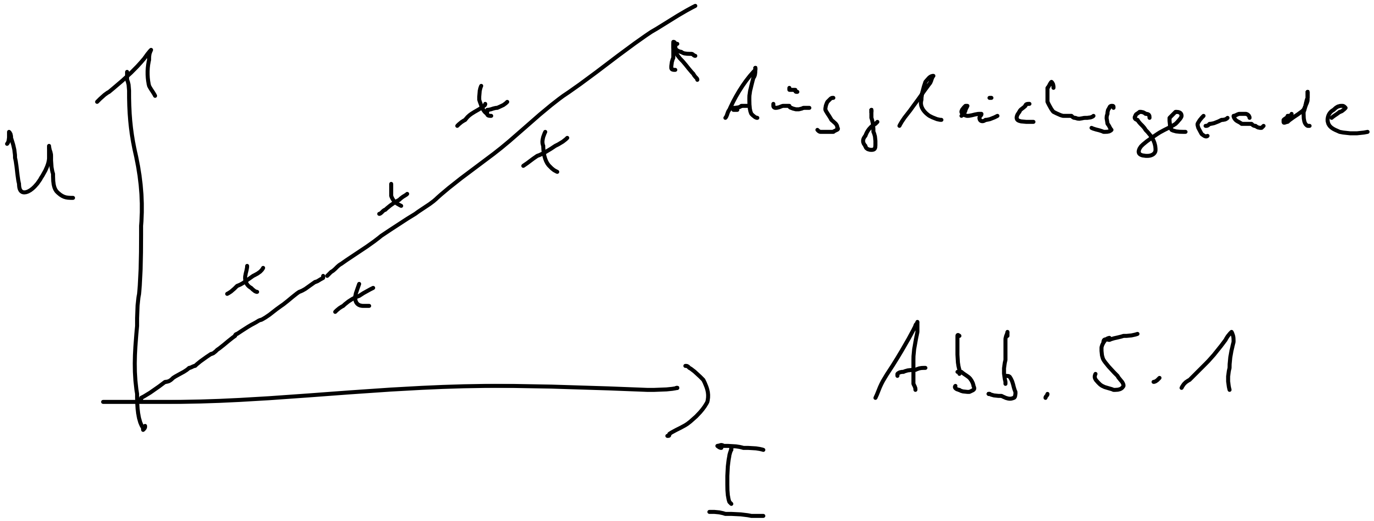


Abb. 5.1

Gauß'schen Methode der kleinsten Fehlerquadrate:

$$\min f(R) := \sum_{i=1}^{m} (R I_i - U_i)^2$$

notwendige Bed. für Minimum:

$$f'(R) = 0$$

Allgemeine Formulierung:

$y(t_i)$, $i = 1, \ldots, m$ als lineare Funktion von $x = (x_1, \ldots, x_n)$ darstellen

Ansatz: $y(t_i; x_1, \ldots, x_n) =$

$$\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j$$

und minimiere „Abweichung" von Messwerten b_i:

$$\min \sum_{i=1}^{m} \left(y(t_i; x_1, \dots, x_n) - b_i \right)^2$$

$$\underset{\text{Ansatz}}{=} \sum_{i=1}^{m} \left(\sum_{j=1}^{n} a_{ij} x_j - b_i \right)^2$$

mit $A := (a_{ij})_{\substack{1 \le i \le m \\ 1 \le j \le n}}$

in der Regel $m > n$, damit ist

$Ax = b$ überbestimmtes LGS

und damit i.a. <u>nicht</u> lösbar.

Suche zu $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$

ein $x^* \in \mathbb{R}^n$ mit

$$\|Ax^* - b\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$$

(5.2: allg. lineares Ausgleichsproblem)

Wahl der 2-Norm in 5.2:

- statistische Motivation (Maximum-Likelihood Schätzer)

- geometrische Interpretation
  (Skalarprodukt, Orthogonalität)

Lösung von (5.2)

$$f(x) := \|Ax - b\|_2^2 = \langle Ax - b, Ax - b \rangle$$

$$= x^T A^T A x - 2 b^T A x + b^T b$$

notwendige Bed. für min $f(x)$:

$$\nabla f(x) = 2\left(A^T A x - A^T b\right) = 0$$

$$\Longleftrightarrow A^T A x = A^T b \quad \text{(Normal(en)gleichung)}$$

(5.3)