

Numerisches Programmieren, Übungen

4. Übungsblatt: QR-Zerlegung, Lineares Ausgleichsproblem

1) QR-Zerlegung mit Givens-Rotationen

Die **QR-Zerlegung** ist ein verwandtes Verfahren der LR-Zerlegung und weist eine hohe Stabilität auf. In dieser Aufgabe wollen wir sie nutzen, um ein lineares Gleichungssystem zu lösen.

Die Matrix A wird in das Produkt

$$A = Q \cdot R$$

einer orthogonalen Matrix Q (d.h. $Q^T \cdot Q = I$) und einer rechten oberen Dreiecksmatrix R zerlegt. Damit reduziert sich das Lösen des Gleichungssystems auf eine einfache Rückwärtssubstitution:

$$Ax = b \Leftrightarrow Q \cdot Rx = b \Leftrightarrow Rx = Q^T b. \quad (1)$$

In dieser Aufgabe setzen wir die QR-Zerlegung mit Hilfe der **Givens-Rotationen** um. Hierbei wird Q aus einer Folge von Drehungen aufgebaut, welche sukzessive Einträge unter der Diagonalen von A eliminieren. Für 2×2 -Matrizen ist das nur ein einziger Eintrag (und entsprechend nur eine Drehung in der Ebene \mathbb{R}^2). Eine Drehung im \mathbb{R}^2 um den Winkel φ ist durch eine orthogonale Rotationsmatrix G_φ charakterisiert:

$$G_\varphi = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}, \text{ wobei } c = \cos(\varphi) \text{ und } s = \sin(\varphi).$$

Diese Rotation soll nun auf die erste Spalte $(a, b)^T$ einer 2×2 -Matrix A angewendet werden und den Eintrag unter der Diagonalen zu Null machen:

$$\begin{aligned} G_\varphi \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}. \\ \Rightarrow c &= \frac{a}{\sqrt{a^2 + b^2}}, \quad s = \frac{b}{\sqrt{a^2 + b^2}} \end{aligned}$$

(In der Praxis benötigt man den Drehwinkel φ nicht, sondern kann c und s direkt berechnen). Unsere gesuchte Matrix Q ist nun einfach die Inverse (also Transponierte) der Rotationsmatrix: $Q = G_\varphi^T$. Die obere Dreiecksmatrix R erhalten wir durch Multiplikation von G_φ mit A :

$$A = Q \cdot R \Leftrightarrow Q^{-1} \cdot A = R \Leftrightarrow \boxed{G_\varphi \cdot A = R}.$$

- a) Berechnen Sie die Matrizen Q und R mit Hilfe der Givens-Rotation nach obigem Schema für die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix}.$$

- b) Berechnen Sie die Lösung x des Gleichungssystems $Ax = b$ mit $b = (1, 0)^T$ mit Hilfe der QR-Zerlegung aus a) (siehe auch (1))!

2) Ausgleichsgerade

In der Linearen Ausgleichsrechnung ist ein überbestimmtes lineares Gleichungssystem

$$Ax = b \text{ mit } A \in \mathbb{R}^{m \times n} \text{ und } m > n \quad (2)$$

gegeben. Dieses System versucht man über die Minimierung des Residuums

$$\min_z \|Az - b\|_2 \quad (3)$$

„so gut wie möglich“ zu lösen. Die Lösung von (3) entspricht der Lösung der sog. Normalengleichung

$$A^\top Ax = A^\top b. \quad (4)$$

Auf diesem Übungsblatt werden wir uns mit der linearen Ausgleichsrechnung, dem analytischen Lösen und der numerischen Lösung mit Hilfe der QR-Zerlegung beschäftigen.

Gegeben seien die drei Punkte

$$P_1 = \begin{pmatrix} x_1 \\ y_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix}, \quad P_2 = \begin{pmatrix} x_2 \\ y_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad P_3 = \begin{pmatrix} x_3 \\ y_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}.$$

Ziel ist es nun, eine Gerade der Form $y = mx + t$ zu konstruieren, welche „möglichst gut“ durch alle Punkte geht.

- a) Tragen Sie in ein Koordinatensystem die gegebenen Punkte ein. Stellen Sie das System $A(t, m)^\top = b$ auf, welches beschreibt, dass alle Punkte exakt auf der Geraden liegen und beachten Sie dabei die Reihenfolge der Unbekannten t und m aus der Geradengleichung.
- b) Lösen Sie nun das System mit (4) und zeichnen Sie die entsprechende Lösungsgerade ein.

3) Lineares Ausgleichsproblem und QR-Zerlegung

Man kann die QR-Zerlegung nutzen, um ein Ausgleichsproblem (2) stabil zu lösen. Wenn man die Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit Hilfe orthogonaler Transformationen auf rechte obere Dreiecksgestalt bringt,

$$Q^T A = \left[\begin{array}{ccc|c} * & \dots & * & \\ & \ddots & \vdots & \\ \mathbf{0} & & * & \\ \hline & & \mathbf{0} & \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} R \\ \mathbf{0} \end{array} \right]_1,$$

ist die Lösung des Minimierungsproblems (3) äquivalent zur Lösung des Gleichungssystems

$$Rx = \beta_1, \quad \text{wobei} \quad \left(\begin{array}{c} \beta_1 \\ \beta_2 \end{array} \right) := Q^T b. \quad (5)$$

Die rechte Seite in (5) beschreibt hier keinen Bruch, sondern die Aufteilung des Vektors in einen oberen und unteren Teil. Die Länge von β_1 entspricht der Dimension von R .

Für die Transformation der Matrix A verwenden wir Givens-Rotationen, um spaltenweise die Elemente unter der Diagonalen von A zu 0 zu machen. Für das Eliminieren eines Eintrags \mathbf{A}_{ij} macht man folgendes:

¹0 beschreibt hier eine 0-Matrix

1. Berechnen der entsprechenden Dreh-Matrix in der x_i - x_j -Ebene:

$$\begin{aligned}
 d &:= A_{jj} \text{ (Diagonalelement) und } a := A_{ij} \\
 \rho &:= \sqrt{d^2 + a^2}, \quad c = \frac{d}{\rho}, \quad s = \frac{a}{\rho}
 \end{aligned}$$

$$G_{i,j} = \begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & c & & s & \\ & & & \ddots & & \\ & & -s & & c & \\ & & & & & \ddots \\ & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow j \\ \\ \\ \leftarrow i \\ \\ \end{matrix} \in \mathbb{R}^{m \times m}$$

2. Multiplikation der Matrix $G_{i,j}$ auf das aktuelle A

Nun wollen wir die Ausgleichsgerade aus Aufgabe 1 mit Hilfe der QR-Zerlegung finden.

- Berechnen Sie die rechte obere Dreiecksmatrix R der QR-Zerlegung von A (aus Aufgabe 1)) mit Hilfe passender Elementardrehungen $G_{i,j}$. Beginnen Sie mit dem Element $A_{2,1}$.
- Berechnen Sie die Lösung $z = (t, m)^T$ des Minimierungsproblems (3) mit Hilfe der QR-Zerlegung aus a). Es reicht dabei, die Elementardrehungen $G_{i,j}$ zu nutzen, ohne eine neue Matrix explizit aufzustellen.
- Zeigen Sie, dass die Lösung des Systems $Rz = \beta_1$ basierend auf orthogonalen Transformationen Q^T tatsächlich äquivalent zur Lösung der Minimierungsaufgabe $\min_z \|b - Az\|_2$ ist.