Technische Universität München
Institut für Informatik
Prof. Dr. Thomas Huckle
Michael Rippl
Fabio Gratl

SoSe 2018

Numerisches Programmieren, Übungen

Musterlösung 4. Übungsblatt: QR-Zerlegung, Lineares Ausgleichsproblem

1) QR-Zerlegung mit Givens-Rotationen

Zunächst ein paar allgemeine Bemerkungen zur QR-Zerlegung:

- Für $n \times n$-Matrizen lassen sich verallgemeinerte Drehungen $G_{i,k}$ angeben, die analog genau das Spaltenelement k zu Null machen bzw. i in r überführen (Drehung in der (i,k)-Ebene des $\mathbb{R}^n$).
  Mit der Multiplikation dieser einzelnen Matrizen $G_{i,k}^T$ zu einer Gesamtmatrix Q lässt sich das Verfahren analog zu unserem Beispiel durchführen.
- Die QR-Zerlegung mit Givens-Rotationen ist im Allgemeinen etwas teuerer als die LR-Zerlegung (ca. $\frac{4}{3}n^3$ statt $\frac{2}{3}n^3$), dafür aber stabiler. Eine Pivotsuche ist nicht nötig.
- Bei dünnbesetzten Matrizen und mit Hilfe schneller Implementierungen (fast givens) lässt sich der Aufwand wesentlich reduzieren.
- In der Praxis werden die einzelnen Rotationsmatrizen $G_{i,k}$ natürlich nie explizit aufgestellt, sondern stets nur ihre Wirkung $G_{i,k} \cdot A$ berechnet und abgespeichert. $G_{i,k}$ kann dabei durch eine einzige Zahl codiert/decodiert werden.

a) Aufstellen der Matrix G_φ mit $(a,b)^T = (1,2)$:

$$c = \frac{a}{\sqrt{a^2+b^2}} = \frac{1}{\sqrt{5}}\ , \quad s = \frac{b}{\sqrt{a^2+b^2}} = \frac{2}{\sqrt{5}}\ ; \quad \Rightarrow \quad \boxed{G_\varphi = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix}}.$$

Berechnen der Matrix R:

$$\boxed{R} = G_\varphi \cdot A = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} = \boxed{\frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}}.$$

b) Lösung des Gleichungssystems: Es gilt $Rx = Q^T b = G_\varphi b$:

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} &= \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ -2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \\
&\Leftrightarrow \\
\begin{pmatrix} 5 & 3 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ -2 \end{pmatrix} \\
&\Rightarrow \quad x_2 = 2, \quad x_1 = (1 - 3x_2)/5 = -5/5 = -1 \\
&\Rightarrow \quad x = \boxed{\begin{pmatrix} -1 \\ 2 \end{pmatrix}}.
\end{aligned}
$$

2) Ausgleichsgerade

a) Jeder Punkt (x_i, y_i) in die Gleichung $y = mx + t$ eingesetzt entspricht:

$$
\underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}_{=A} \underbrace{\begin{pmatrix} t \\ m \end{pmatrix}}_{=z} = \underbrace{\begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix}}_{=b}
$$

b)

$$
A^\top A x = A^\top b
$$

$$
\begin{aligned}
&\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 2 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} \\
&\Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 3 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 7 \end{pmatrix} \\
&\Rightarrow \begin{pmatrix} 3 & 3 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} t \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1.5 \\ 0.5 \end{pmatrix}
\end{aligned}
$$

$y = 0.5x + 1.5$

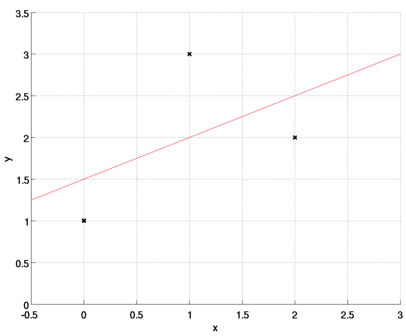

Abbildung 1: lineare Ausgleichsgerade

3) Lineares Ausgleichsproblem und QR-Zerlegung

a) Um Element (2,1) zu Null zu drehen, müssen wir Element (3,1) unverändert lassen und (1,1) als Diagonalelement wählen (also $a = A_{21} = 1$ und $d = A_{11} = 1$). Damit brauchen wir die Elementarmatrix $G_{2,1}$. Die konkreten Einträge ergeben sich zu

$$c = 1/\sqrt{1^2+1^2} = 1/\sqrt{2}, \quad s = 1/\sqrt{1^2+1^2} = 1/\sqrt{2}.$$

Damit erhalten wir:

$$G_{2,1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad A_1 := G_{2,1} \cdot A = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Analoges Vorgehen für Eintrag (3,1) von A_1 mit Elementarmatrix $G_{3,1}$ und

$$c = \sqrt{2}/\sqrt{2+1} = \sqrt{2/3}, \quad s = 1/\sqrt{2+1} = \sqrt{1/3}$$

führt zu

$$G_{3,1} = \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} & 0 & \sqrt{1/3} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{1/3} & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad Q^T A := G_{3,1} \cdot A_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} & 0 & \sqrt{1/3} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{1/3} & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & -\sqrt{2} \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$= \left(\begin{array}{cc} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 0 & -\sqrt{2} \\ \hline 0 & 0 \end{array}\right)$$

Normalerweise müsste man hier nun eine dritte Drehung $G_{3,2}$ anwenden, aber in unserem Fall entstand schon bei der vorehrigen Drehung zufällig eine 0 im Feld $(3,2)$.

b) Es gilt für die QR-Zerlegung die Rücksubstitution: $Rz = \beta_1$. Dabei ist β_1 Teil des Vektors $Q^T b$, wobei Q^T die Hintereinanderausführung der Givensrotationen (zur Erzeugung von R) darstellt. In unserem Fall bedeutet das:

$$b_1 := G_{2,1} \cdot b = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$\left(\begin{array}{c} \beta_1 \\ \hline \beta_2 \end{array}\right) := G_{3,1} \cdot b_1 = \begin{pmatrix} \sqrt{2/3} & 0 & \sqrt{1/3} \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sqrt{1/3} & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3/\sqrt{2} \\ -1/\sqrt{2} \\ 3 \end{pmatrix}$$

$$= \left(\begin{array}{c} 2\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{2} \\ \hline \sqrt{3/2} \end{array}\right)$$

Damit muss nur mehr $Rz = \beta_1$ per Rückwärtssubstitution gelöst werden:

$$\begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ 0 & -\sqrt{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} t \\ m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow m = 1/2, \qquad \Rightarrow \quad t = \left(2\sqrt{3} - \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \cdot \frac{1}{\sqrt{3}} = 3/2$$

c) Für den ersten Beweis nutzen wir die folgende besondere Eigenschaft orthogonaler Matrizen
$Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ aus:

$$||Qx||_2 = ||x||_2 \ \forall x \in \mathbb{R}^n.$$

Da Q^T ebenfalls orthogonal ist, ergibt sich:

$$\begin{aligned} ||b - Az||_2^2 &= ||Q^T(b - Az)||_2^2 = \left\| \begin{pmatrix} \beta_1 - Rz \\ \beta_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &= ||\beta_1 - Rz||_2^2 + ||\beta_2||_2^2 \ \geq \ ||\beta_2||_2^2 \end{aligned}$$

Daher ist $||b - Az||_2$ minimal genau dann wenn $||\beta_1 - Rz||_2 = 0$, d.h. wenn z Lösung des linearen Gleichungssystems $Rz = \beta_1$ ist.

Für den zweiten Beweis brauchen wir nur die Eigenschaft $Q^\top Q = I$. Es gilt:

$$\begin{aligned} A^\top A x &= A^\top b \\ [R^\top|0]Q^\top Q \left[\frac{R}{\mathbf{0}}\right] x &= [R^\top|0]Q^\top b \\ \overset{Q^\top Q = I}{\Rightarrow} [R^\top|0] \left[\frac{R}{\mathbf{0}}\right] x &= [R^\top|0]Q^\top b \\ R^\top R x &= R^\top \beta_1 \\ \Rightarrow Rx &= \beta_1 \end{aligned}$$