Hinweise zur Q-R Zerlegung und zum linearen Ausgleich

Givens-Rotationen: Grundaufgabe: Zu gegebenem Vektor $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$ finde s und c mit $c^2 + s^2 = 1$ und somit eine orthogonale Matrix $G = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$ und $G \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$

Lösung: $r = \pm\sqrt{a^2 + b^2}$, $c = \dfrac{a}{r}$ und $s = \dfrac{b}{r}$. Da $\det(G) = 1$ ist G eine Rotation/Drehung (als Matrix).
Auf die stabilere Variante (aus älteren Skripten) wird im aktuellen Skript nicht mehr eingegangen.
Wendet man den Algorithmus auf $[A|b]$ an, so läuft das grob wie folgt ab:
A-Givens

Für alle Spalten von A (Index j)

Für alle Zeilen von A unterhalb der Diagoinalen (Index $i > j$)

$a = A_{jj}$, $b = A_{ij}$, s und c wie oben
bearbeite die i-te und j-te Zeile von A und b (als ob man mit G multipliziert)

$$\begin{pmatrix} a_i \\ a_j \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} c\, a_i & + & s\, a_j \\ -s\, a_i & + & c\, a_j \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad \begin{pmatrix} b_i \\ b_j \end{pmatrix} \leftarrow \begin{pmatrix} c\, b_i & + & s\, b_j \\ -s\, b_i & + & c\, b_j \end{pmatrix}$$

end i

end j

Beispiel:

$$(A|b) = \begin{pmatrix} 4 & 5 & | & 15 \\ 3 & 5 & | & -10 \end{pmatrix} \xrightarrow[r=5, c=4/5, s=3/5]{} \begin{pmatrix} 5 & 7 & | & 6 \\ 0 & 1 & | & -17 \end{pmatrix} \to x = \begin{pmatrix} 25 \\ -17 \end{pmatrix}$$

Householder-Reflektionen: Grundaufgabe: Zu gegebenem Vektor $y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}$ finde eine orthogonale $m \times m$-Matrix Q mit $Q\,y = \begin{pmatrix} r \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

Lösung: Wir definieren $v := y + \operatorname{sign}(y_1)\,\|y\|_2\, e_1$ und setzten $Q_v = I - \dfrac{2}{v^T\, v}\left(v\, v^T\right)$.

Für die so erhaltene Matrix Q_v gilt: $Q_v\, y = y - \dfrac{2}{v^T\, v}\left(v\, \left(v^T\, y\right)\right) = \begin{pmatrix} -\operatorname{sign}(y_1)\,\|y\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$

Da weiterhin $\det(Q_v) = -1$ ist, ist Q_v eine Reflektion/Spiegelung (als Matrix).
Wendet man diesen Algorithmus auf $[A|b]$ an, so läuft das grob wie folgt ab:
A-Householder

Für alle Spalten von A (Index j)

$v = y =$ *erste Spalte* von A

$\alpha = \operatorname{sign}(y_1)\,\|y\|_2$

$v_1 = v_1 + \alpha$

$\beta = 2/(v^T\, v)$

$h = v^T\, [A|b] \quad \rightarrow$ Zeilenvektor

$r = (\beta\, v)\, h$ *Spalten- mal Zeilenvektor*

$[A|b] = [A|b] - r$

streiche die erste Zeile und Spalte von $[A|b] \rightarrow$ *Ergebnis*

end j

Sowohl **A-Givens** als auch **A-Householder** führen auf eine obere Dreicksmatrix R und eine modifizierte rechte Seite (y). Mittels Rückwärtseinsetzen erhalten wir das Ergebnis.
Ist ausnahmsweise auch die Matrix Q (zu $A = Q\, R$) zu berechnen, so geschieht dies wie folgt: Wir starten mit $Q = I$ und führen alle Operationen nicht nur mit $[A|b]$ sondern auch mit Q aus, wobei wir aber **nicht** die erste Spalte streichen dürfen. Zum Schluss wird dann (Zeilen wieder einsammeln) noch $Q = Q^T$ gebildet.

Der Übergang zum Ausgleich
Sind mehr Gleichungen (Messungen) als Unbekannte vorhanden (überbestimmt), so kann man zumindest die Gaußelimination/LR nicht mehr direkt anwenden.

$$\|A\, x - b\|_2 \rightarrow \min \qquad \text{(so ist } x \text{ zu bestimmen)}$$

1) Mit der Norm wird auch ihr Quadrat minimal:

   $f(x) := \|A\, x - b\|_2^2 = (A\, x - b)^2 = x^T\, A^T\, A\, x - 2x^T\, A^T\, b + b^T\, b$

   Notwendige Bedingung für ein Minimum: $f'(x) = 2\,(A^T\, A\, x - A^T\, b) = 0$

   Letztere Bedingung führt zu den Normalgleichungen: $A^T\, A\, x = A^T\, b$

   Bem. 1: Hinreichend für ein Minimum ist, dass (zusätzlich) $A^T A$ positiv definit ist.

   Bem. 2: Das Residuum erhalten wir, indem wir $\|A\, x - b\|_2$ berechnen.

2) Wir benutzen die Q-R-Zerlegung:

   $\|A\, x - b\|_2 = \|Q\, R\, x - b\|_2 = \|R\, x - Q^T b\|_2$ (Eigenschaft orthogonaler Matrizen!)

   Dabei hat R die ***Gestalt*** $R = \begin{pmatrix} \overline{R} \\ 0 \end{pmatrix}$ und wir zerlegen $Q^T\, b = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix}$.

   Dann wird die Norm von $\left\| \begin{pmatrix} \overline{R} \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \end{pmatrix} \right\|_2$ minimal, wenn wir durch Rückwärtseinsetzen das Gleichungssystem $\overline{R}\ x = y_1$ lösen. $\|y_2\|_2$ ist dann das Residuum.