

6. Großübung

1 QR-Zerlegung

Als QR-Zerlegung wird die Zerlegung

$$A = QR$$

der Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in die rechte obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und die orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ bezeichnet.

Die Lösung des Gleichungssystems $Ax = b$ kann in der Form

$$\begin{aligned} Ax &= QRx = b \\ \Rightarrow Rx &= Q^{-1}b = Q^T b \end{aligned}$$

durch Rückwärtseinsetzen gewonnen werden. Die rechte Seite $Q^T b$ wird im Laufe der QR-Zerlegung gewonnen. Eine explizite Bestimmung der Matrix Q ist daher i.d.R. nicht erforderlich.

Wir behandeln im Folgenden zwei Verfahren zur Erzeugung der QR-Zerlegung:

- Givens-Rotationen
- Householder-Transformationen

2 Givens-Rotationen

Grundaufgabe

Das Prinzip der Givens-Rotationen beruht darauf, die Spalten von A schrittweise durch Drehungen in die (wahlweise positive oder negative) Richtung der Einheitsvektoren des Koordinatensystems abzubilden, wodurch in den Spaltenvektoren entsprechende Nulleinträge entstehen. Ggfs. wird die rechte Seite b ebenfalls mitbehandelt.

Die Grundaufgabe der Givens-Rotationen besteht folglich darin, eine orthogonale Matrix G zu finden, welche den gegebenen Spaltenvektor $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^2$ in Richtung des Einheitsvektors e^1 abbildet.

$$G \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

r entspricht, ggfs. mit abweichendem Vorzeichen, der euklidische Länge des Vektors $\begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix}$, $r = \pm\sqrt{a^2 + b^2}$, $r \in \mathbb{R}$.

Wie im Folgenden gezeigt wird, kann die Matrix G durch die Drehmatrix

$$G = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -\sin \phi & \cos \phi \end{pmatrix}$$

beschrieben werden.

Bemerkung: In der Praxis ist es nicht nötig den Drehwinkel ϕ explizit zu bestimmen. Es müssen nur Werte für c und s bestimmt werden.

Bestimmung von c und s (rechnerische Variante):

$$\begin{aligned} G = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} &\Rightarrow G^{-1} = \frac{1}{c^2 + s^2} \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} G^T = \begin{pmatrix} c & -s \\ s & c \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow c^2 + s^2 = \det(G) = 1 \quad (\star) \\ \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix} \stackrel{!}{=} G \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} ca + sb \\ -sa + cb \end{pmatrix} \\ &\Rightarrow s = c \frac{b}{a} \\ (\star) \Rightarrow 1 &= c^2 \left(1 + \frac{b^2}{a^2} \right) \\ \Rightarrow c &= \frac{a}{\pm\sqrt{a^2 + b^2}} \\ \Rightarrow s &= \frac{b}{\pm\sqrt{a^2 + b^2}} \\ r = ca + sb &= \pm\sqrt{a^2 + b^2} \end{aligned}$$

Die Vorzeichenwahl (\pm) ist irrelevant, es wird ein positives Vorzeichen gewählt.

Anwendung

Die Givens-Rotationsmatrizen $G_{i,k}$ entstehen durch Einbettung ebener Drehungen in $m \times m$ -Matrizen (s. Beispiel). Die Anwendung auf den (zur Bestimmung der Rotationsmatrix verwendeten) Spaltenvektor von A erzeugt eine Null in der k -ten Zeile.

Die Givens-Rotationsmatrizen müssen auf alle Spaltenvektoren von A und ggfs. b angewendet werden. Es gilt:

$$\begin{aligned} G_{i_N, k_N} \cdot \dots \cdot G_{i_1, k_1} \cdot A &= R \\ \Rightarrow A &= G_{i_1, k_1}^T \cdot \dots \cdot G_{i_N, k_N}^T \cdot R = QR \end{aligned}$$

Der Aufwand der Givens-Rotationen beträgt $\frac{4}{3}n^3$ Operationen für ein vollbesetztes $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Beispiel

$$[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & -1 & 5 & -2 \\ 4 & 2 & -3 & 1 \\ -2 & 6 & 1 & 3 \end{array} \right]$$

$$a = 3, b = 4, r = \sqrt{a^2 + b^2} = 5, c = \frac{a}{r} = 0.6, s = \frac{b}{r} = 0.8$$

$$G_{12} = \begin{pmatrix} 0.6 & 0.8 & 0 \\ -0.8 & 0.6 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow G_{12}[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 5 & 1 & 0.6 & -0.4 \\ 0 & 2 & -5.8 & 2.2 \\ -2 & 6 & 1 & 3 \end{array} \right]$$

$$a = 5, b = -2, r = \sqrt{29}, c = \frac{a}{r} = 0.9285, s = \frac{b}{r} = -0.3714$$

$$G_{13} = \begin{pmatrix} 0.9285 & 0 & -0.3714 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0.3714 & 0 & 0.9285 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow G_{13}G_{12}[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 5.385 & -1.3 & 0.1857 & -1.486 \\ 0 & 2 & -5.8 & 2.2 \\ 0 & 5.942 & 1.151 & 2.637 \end{array} \right]$$

$$a = 2, b = 5.942, r = 6.270, c = \frac{a}{r} = 0.3190, s = \frac{b}{r} = 0.9478$$

$$G_{23} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3190 & 0.9478 \\ 0 & -0.9478 & 0.3190 \end{pmatrix}$$

$$\rightarrow G_{23}G_{13}G_{12}[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 5.385 & -1.3 & 0.1857 & -1.486 \\ 0 & 6.270 & -0.7590 & 3.201 \\ 0 & 0 & 5.864 & -1.244 \end{array} \right]$$

Lösen durch Rückwärtseinsetzen:

$$\rightarrow x_3 = -0.2121, x_2 = 0.4848, x_1 = -0.1515$$

Bemerkung: In der Praxis ist das explizite Aufstellen der Rotationsmatrizen G_{ik} nicht erforderlich. Es genügt die Werte für c und s zu kennen, um diese, ohne formale Matrix-Matrix-Multiplikation, anzuwenden.

3 Householder-Transformationen

Grundaufgabe

Das Prinzip der Householder-Transformation ist ähnlich dem der Givens-Rotation. Statt Drehungen werden beim Householder-Verfahren jedoch Spiegelungen verwendet, und die transformierten

Spaltenvektoren y sind Elemente des \mathbb{R}^m . Die Grundaufgabe besteht entsprechend darin, eine orthogonale Matrix $Q_V \in \mathbb{R}^{m \times m}$ mit

$$Q_V y = \begin{pmatrix} \pm \|y\|_2 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

zu gegebenem $y \in \mathbb{R}^m$ zu finden.

Die Grundaufgabe wird durch die folgende Darstellung der Transformationsmatrix Q_V erfüllt (Herleitung: Dahmen, Reusken, *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, S. 103):

$$Q_V = I - \frac{2}{v^T v} v v^T$$

$$v = y + \alpha e^1$$

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

$$Q_V y = -\alpha e^1$$

Anwendung

Die QR-Zerlegung wird durch sukzessive Anwendung der Transformationsmatrizen Q_V gewonnen:

$$R = Q_{V_N} \cdot \dots \cdot Q_{V_1} A = Q^T A$$

Die QR-Zerlegung der Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ durch Householder-Transformationen benötigt $\frac{2}{3}n^3$ Operationen.

Beispiel

$$[A|b] = \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & -1 & 5 & -2 \\ 4 & 2 & -3 & 1 \\ -2 & 6 & 1 & 3 \end{array} \right]$$

$$y = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix}, \quad \alpha = \text{sign}(y_1) \|y\|_2 = 1 \cdot \sqrt{3^2 + 4^2 + (-2)^2} = 5.385$$

$$v = y + \alpha e^1 = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 5.385 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8.385 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix}$$

$$\beta := \frac{2}{v^T v} = \frac{2}{(8.385, 4, -2) \begin{pmatrix} 8.385 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix}} = 2.215 \cdot 10^{-2}$$

$$h := v^T [A|b] = (8.385, 4, -2) \left[\begin{array}{ccc|c} 3 & -1 & 5 & -2 \\ 4 & 2 & -3 & 1 \\ -2 & 6 & 1 & 3 \end{array} \right] = [45.155, -12.385, 27.925 | -18.77]$$

$$r := \beta v h = 2.215 \cdot 10^{-2} \begin{pmatrix} 8.385 \\ 4 \\ -2 \end{pmatrix} [45.16, -12.385, 27.925 | -18.77]$$

$$\rightarrow r = \left[\begin{array}{ccc|c} 8.385 & -2.30 & 5.186 & -3.486 \\ 4 & -1.097 & 2.474 & -1.663 \\ -2 & 0.549 & -1.237 & 0.8314 \end{array} \right]$$

$$[A|b] := [A|b] - r = \left[\begin{array}{ccc|c} -5.385 & 1.30 & -0.1857 & 0.1486 \\ 0 & 3.097 & -5.474 & 2.663 \\ 0 & 5.451 & 2.237 & 2.169 \end{array} \right]$$

$$y = \begin{pmatrix} 3.097 \\ 5.451 \end{pmatrix}, \alpha = \text{sign}(y_1) \|y\|_2 = 6.270$$

$$v = y + \alpha e^1 = \begin{pmatrix} 3.097 \\ 5.451 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 6.270 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 9.367 \\ 5.451 \end{pmatrix}$$

$$\beta := \frac{2}{v^T v} = 1.70 \cdot 10^{-2}$$

$$h := v^T [A|b] = (9.367, 5.451) \left[\begin{array}{ccc|c} 3.097 & -5.474 & 2.663 & 2.663 \\ 5.451 & 2.237 & 2.169 & 2.169 \end{array} \right] = [58.7286, -39.08 | 36.76]$$

$$r := \beta v h = 1.70 \cdot 10^{-2} \begin{pmatrix} 9.367 \\ 5.451 \end{pmatrix} [58.7286, -39.08 | 36.76] = \left[\begin{array}{cc|c} 9.367 & -6.233 & 5.864 \\ 5.451 & -3.627 & 3.4126 \end{array} \right]$$

$$[A|b] := [A|b] - r = \left[\begin{array}{ccc|c} -5.385 & 1.30 & -0.1857 & 1.486 \\ 0 & -6.270 & 0.7590 & -3.201 \\ 0 & 0 & 5.864 & -1.244 \end{array} \right]$$

Lösen durch Rückwärtseinsetzen:

$$\rightarrow x_3 = -0.2121, x_2 = 0.4848, x_1 = -0.1515$$

Bemerkung: In der Praxis ist es nicht erforderlich, den jeweils ersten Spaltenvektor mitzuberechnen. Dieser ist stets $(-\alpha, 0, \dots, 0)^T$. Ferner muss die Matrix r nicht explizit aufgestellt werden. Stattdessen wird direkt die Matrix $[A|b] - r$ berechnet.

4 Eigenschaften orthogonaler Matrizen

Die Eigenschaften orthogonaler Matrizen können Satz 3.41 entommen werden (s. Dozenten-Folien, Folie 3.68 oder Dahmen, Reusken, *Numerik für Ingenieure und Naturwissenschaftler*, S. 94).