NMB - Oefenzitting 5:
QR-factorisatie en kleinste kwadratenproblemen

Simon Telen, Daan Camps

1 Oefeningen op papier

Opgave 1. Veronderstel dat P een $n \times n$ matrix is die als volgt inwerkt op een vector $x \in \mathbb{R}^n$ (n even):

$$Px = \frac{x + Fx}{2}.$$

Hier is F de $n \times n$ matrix zodat in Fx het eerste element van x gewisseld is met het tweede, het derde met het vierde, enz. Is de matrix P een projectiematrix? Zoja, is de projectie orthogonaal of schuin? Toon de matrix P en beschrijf het resultaat Px voor een willekeurige $x \in \mathbb{R}^n$.

Oplossing. *De matrix P is een projectiematrix aangezien geldt dat $P^2 = P$:*

$$P^2 = \frac{1}{4}(I+F)(I+F) = \frac{1}{4}(I + F^2 + 2F) = \frac{1}{2}(I+F) = P.$$

Hier maken we gebruik van $F^2 = I$: twee keer omwisselen geeft namelijk de oorspronkelijke vector. Het is ook een orthogonale projectie:

$$P^* = \frac{1}{2}(I + F^*) = \frac{1}{2}(I+F) = P.$$

De matrices F en P zien er als volgt uit:

$$F = \begin{bmatrix} & 1 & & & & & & \\ 1 & & & & & & & \\ & & & 1 & & & & \\ & & 1 & & & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & & 1 \\ & & & & & & 1 & \end{bmatrix}, \quad P = \begin{bmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & & & & \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & & & & \\ & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & & \\ & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} & & & & \\ & & & & & \ddots & & \\ & & & & \ddots & & & \\ & & & & & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\ & & & & & & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

De invloed van P op een willekeurige vector x is dat in Px het eerste en tweede elementje gelijk zijn aan het gemiddelde van het eerste en tweede elementje van x, hetzelfde geldt voor het derde en vierde elementje, enz:

$$Px = \begin{bmatrix} \frac{x_1+x_2}{2} & \frac{x_1+x_2}{2} & \frac{x_3+x_4}{2} & \frac{x_3+x_4}{2} & \cdots & \frac{x_{n-1}+x_n}{2} & \frac{x_{n-1}+x_n}{2} \end{bmatrix}^T.$$

Opgave 2. Gegeven de QR-factorisatie

$$QR = A = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_n \end{bmatrix}, \quad a_i \in \mathbb{R}^m$$

Hoe zou je te werk gaan om de QR-factorisaties van $\tilde{A}$ te berekenen in de volgende gevallen?

a) kolom k verwijderd

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_{k-1} & a_{k+1} & \cdots & a_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times(n-1)}$$

Oplossing. *$Q^T\tilde{A} = H$ waarbij H kan bekomen worden door kolom k uit R te verwijderen. H is een boven-Hessenberg matrix met onderdiagonaalelementen vanaf de weggelaten kolom. Deze elementen kunnen nul gemaakt worden met Givenstransformaties : $G_{n-1}^T \cdots G_k^T H = R_1$. Stellen we $Q_1 = QG_k \cdots G_{n-1}$ dan hebben we de gevraagde QR-factorisatie $\tilde{A} = Q_1R_1$.*
Voorbeeld:

$$H = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

b) een kolom $z \in \mathbb{R}^m$ toegevoegd

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} a_1 & \cdots & a_k & z & a_{k+1} & \cdots & a_n \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times(n+1)}$$

Oplossing. *$Q^T\tilde{A} = H$ waarbij H kan bekomen worden door een kolom $w = Q^Tz$ aan R toe te voegen. De elementen onder de diagonaal kunnen weer met Givenstransformaties op nul gezet worden. Als je dit van onder naar boven doet, dan worden enkel op de diagonaal niet-nul elementen geïntroduceerd. De transformaties worden dus bepaald zodat $G_{k+1}^T \cdots G_{m-1}^T w = \begin{bmatrix} \tilde{w} \\ 0 \end{bmatrix}$, $\tilde{w} \in \mathbb{R}^{k+1}$. Met $Q_1 = QG_{k+1} \cdots G_{m-1}$ en $R_1 = G_{k+1}^T \cdots G_{m-1}^T H$ vinden we de gevraagde QR-factorisatie $\tilde{A} = Q_1R_1$.*
Voorbeeld:

$$H = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \times & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

c) een rij $w^T \in \mathbb{R}^n$ toegevoegd

$$\tilde{A} = \begin{bmatrix} w^T \\ A \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{(m+1)\times n}$$

Oplossing. *Stel* $Q_d = \begin{bmatrix} 1 & \\ & Q \end{bmatrix}$, *dan geldt dat* $Q_d\tilde{A} = \begin{bmatrix} w^T \\ R \end{bmatrix} = H$ *is boven-Hessenberg. We kunnen dus Givenstransformaties bepalen zodat* $G_n^T \cdots G_1^T H = R_1$ *bovendriehoeks is. De gewenste QR-factorisatie is dan* $\tilde{A} = Q_1 R_1$, *met* $Q_1 = Q_d G_1 \cdots G_n$.
Voorbeeld:

$$H = \begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times & \times \\ 0 & \times & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & \times & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & \times & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \times \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

d) Een rang-1 verandering aan een boven driehoeksmatrix

$$\tilde{A} = R + uv^T,$$

met $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$ een boven driehoeksmatrix, $u \in \mathbb{R}^m$, en $v \in \mathbb{R}^n$.

Oplossing. *Bereken* $m-1$ *Givensrotaties zodanig dat* $G_1^T \ldots G_{m-1}^T u = \|u\|_2 e_1$. *Deze transformeren* $\tilde{A}$ *tot een boven Hessenberg matrix* $H = G_1^T \ldots G_{m-1}^T \tilde{A}$. *De matrix* H *kan vervolgens tot bovendriehoeksvorm worden gebracht met* $n-1$ *bijkomende Givensrotaties* $G_{n-1}^T \ldots G_1^T H = R$. *De combinatie geeft:*

$$\tilde{A} = G_{m-1} \ldots G_1 G_1 \ldots G_{n-1} R$$

2 Oefeningen op de computer

2.1 Householdertransformaties

Opgave 3. Maak de volgende matrix

```
X = rand(5,2); X(2:5,1) = X(2:5,1)*1.e-8
```

Pas de Householderspiegelingen

$$H_k = I - 2u_k u_k^T / (u_k^T u_k) \qquad k = 1, 2$$

toe met

$$\begin{aligned} u_1 &= X(:,1) + \|X(:,1)\|_2 e_1 \\ u_2 &= X(:,1) - \|X(:,1)\|_2 e_1 \end{aligned}$$

Bereken $H_1 X$ en $H_2 X$. Wat zie je? En waarom?

Tip: het commando `format short e` kan handig zijn als je matrices van getallen met sterk verschillende grootte-orde moet bestuderen.

Oplossing.
Met

$$u = X(:,1) + \text{sign}(X(1,1))\|X(:,1)\|_2 e_1$$

hebben we het minst last van afrondingsfouten. In dit geval is u_1 dus de juiste keuze. We zien inderdaad dat voor $Y_1 = H_1X$ de elementen $Y_1(2:5,1)$ van de grootte-orde 10^{-25} zijn, ruim beneden de machineprecisie. Voor $Y_2 = H_2X$ zijn de elementen $Y_2(2:5,1)$ echter van de orde 10^{-8}, een veelvoud van de machineprecisie. Op deze elementen zit dus een niet verwaarloosbare fout.
Dit komt omdat u_2 het verschil is van twee vectoren van dezelfde grootte-orde zodat er een verlies aan beduidende cijfers optreedt. In plaats van te kiezen voor u_1 kan je u_2 ook als volgt berekenen

```
uu2(1) = -sum(X(2:5,1).^2)/(X(1,1)+norm(X(:,1)))
uu2(2:5) = X(2:5,1)
```

De vector `(u2-uu2)./uu2` *(meer bepaald het eerste element) bevestigt dat er een beduidend verlies aan nauwkeurigheid is bij de berekening van u_2.*

Opgave 4.

a) Schrijf een MATLAB functie

`function [L,R] = householder(A)`

Deze berekent een impliciete voorstelling van de QR factorisatie van $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$. Hier is $L \in \mathbb{R}^{m\times n}$ een benedendriehoeksmatrix waarbij de kolommen de vectoren v van de opeenvolgende Householder transformaties bevatten en $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ een bovendriehoeksmatrix.

b) Test je implementatie door ze, samen met de op Toledo gegeven functie `applyQ`, te gebruiken voor het oplossen van een stelsel $Ax = b$. Genereer hiervoor een willekeurige matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ en oplossing $x \in \mathbb{R}^n$ en bereken $b = Ax$. De oplossing bekomen met je implementatie kan je dan vergelijken met de originele x. Varieer de grootte van A en het conditiegetal, observeer het gedrag.

c) Gebruik de op Toledo gegeven functie `formQ` om de orthogonale matrix expliciet te vormen en vergelijk de orthogonaliteit van Q met de orthogonale matrix bekomen met `mgs` voor een willekeurige matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Bestudeer de orthogonaliteit indien het conditiegetal van A toeneemt.

Oplossing. *Zie* `Opgave4.m`

2.2 Kleinste kwadratenproblemen: normaalvergelijkingen versus QR-factorisatie

Opgave 5. Construeer een voorbeeld waarvoor de normaalvergelijkingen falen en Householder niet. Kies een $A \in \mathbb{R}^{3\times 2}$ bovendriehoeks. Werk zoveel mogelijk op papier, dan maak je geen afrondingsfouten.

Oplossing. *Bijvoorbeeld*

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \varepsilon \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

met $\varepsilon = 10^{-12}$.