Prof. Dr. Karsten Urban
Dr. Timo Tonn
Dipl.-Math. oec. Klaus Stolle
Institut für Numerische Mathematik
Universität Ulm

WiSe 2023/2024
03.12.2023

Angewandte Numerik

Übungsblatt 07

Besprechung in den Tutorien von Montag, 11.12.2023 bis Freitag, 15.12.2023

Für dieses Übungsblatt gibt es 18 Theorie- und 19 Matlab-Punkte, sowie 6 Theorie- und 13 Matlab-Zusatzpunkte. Punkte, die mit einem * gekennzeichnet sind, sind Zusatzpunkte.
Die 70-Prozent-Grenzen liegen aktuell (inklusive Blatt 07) bei 100,1 Theorie- und 77,0 Matlab-Punkten.

Aufgabe 23 *(Programmieraufgabe:* Givens-*Rotationen)* (5M*+2M*+2M* Punkte)

a) Schreiben Sie eine MATLAB-Funktion `[Q, R] = qrGivens(A)`, welche eine QR-Zerlegung mittels Givens-Rotationen berechnet. Verwenden Sie dabei nicht die MATLAB-Funktion `givens`.

   Hinweis: Überlegen Sie sich, welche Elemente von A und Q durch eine einzelne Rotation jeweils verändert werden. Wie können Sie in MATLAB gezielt diesen Matrixelementen geänderte Werte zuweisen, ohne eine Drehmatrix $D \in \mathbb{R}^{m\times m}$ explizit aufzustellen?

b) Testen Sie Ihre MATLAB-Funktion `qrGivens` sowohl an der Matrix A aus Aufgabe 22 d) vom letzten Übungsblatt 06 als auch an der Matrix A aus Aufgabe 25.

c) Betrachten Sie wieder das lineare Ausgleichsproblem $\|Ax - b\|_2 \to \min$ aus Aufgabe 16 vom vorletzten Übungsblatt 05 und erweitern Sie Ihr MATLAB-Skript aus Aufgabe 16 und Aufgabe 20:

   Berechnen Sie die benötigte QR-Zerlegung jetzt auch mit Hilfe Ihrer MATLAB-Funktion `qrGivens` und lösen Sie damit das lineare Ausgleichsproblem. Erhalten Sie die gleiche Lösung und den gleichen unvermeidlichen Modellfehler wie in den beiden Aufgaben 16 und 20?

Aufgabe 24 *(Eigenschaften der Householder-Spiegelung)* (2T+2T+3T Punkte)

Sei $\omega \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ ($n \in \mathbb{N}$) ein Householder-Vektor und

$$P := I - 2\frac{\omega\omega^T}{\omega^T\omega}$$

die zugehörige Householder-Matrix (bzw. Householder-Transformation).

a) Zeigen Sie: P ist symmetrisch und orthogonal.

b) Zeigen Sie, dass für $E := \{x \in \mathbb{R}^n : Px = x\}$ gilt: $E = \{x \in \mathbb{R}^n : \omega^T x = 0\}$.

c) Zeigen Sie, dass Px die Spiegelung von $x \in \mathbb{R}^n$ an der Hyperebene $E := \{x \in \mathbb{R}^n : Px = x\}$ ist, d. h. (vgl. Bemerkung 4.4.5 im Skript)

$$x \in \mathbb{R}^n \quad \Longrightarrow \quad \exists\, t \in \mathbb{R} : \quad Px = x + t\omega \text{ und } x + \tfrac{t}{2}\omega \in E.$$

Hinweis: Um den zweiten Teil der Aussage (also $x + \frac{t}{2}\omega \in E$) zu zeigen, setzen Sie $z := x + \frac{t}{2}\omega$ und berechnen Sie Pz. Verwenden Sie hierbei den ersten Teil der Aussage (also $Px = x + t\omega$).

Aufgabe 25 *(Berechnung einer QR-Zerlegung mit Householder-Spiegelungen)* (4T*+2T* Punkte)

In dieser Aufgabe betrachten wir die Matrix

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \quad \text{und den Vektor} \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix}.$$

a) Berechnen Sie eine QR-Zerlegung der Matrix A mit Householder-Spiegelungen. Geben Sie dabei alle Transformations-Matrizen H_i sowie die Matrix Q und R explizit an.

b) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2^2$ mittels Ihrer QR-Zerlegung.

Aufgabe 26 *(Programmieraufgabe: QR-Zerlegung mit Householder-Spiegelungen)* (4M+(2M+2M)+2M*+4M+2M* Punkte)

a) Im Material zu diesem Übungsblatt finden Sie die MATLAB-Funktionen `HouseholderVector.m`, `qr_Householder.m` und `prod_qtx.m` aus der Vorlesung.

Erklären Sie Ihrem Tutor diese MATLAB-Funktionen. Gehen Sie dabei insbesondere auch auf die Klammersetzung in Zeile 4 der Funktion `qr_Householder.m` ein.

b) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem aus Aufgabe 25,

   i) indem Sie die MATLAB-Funktion `qr_Householder.m` so aufrufen, dass sie die QR-Zerlegung der Matrix A in zwei Matrizen Q und R zurück gibt, und

   ii) indem Sie die MATLAB-Funktion `qr_Householder.m` so aufrufen, dass sie die QR-Zerlegung der Matrix A kompakt in einer Matrix gespeichert zurück gibt.

Zum Rückwärtseinsetzen können sie jeweils die MATLAB-Funktion `Rinvb2.m` verwenden.

c) Betrachten Sie wieder das lineare Ausgleichsproblem $\|Ax - b\|_2 \to \min$ aus Aufgabe 16 vom vorletzten Übungsblatt 05 und erweitern Sie Ihr MATLAB-Skript aus Aufgabe 16, Aufgabe 20 und Aufgabe 23:

Berechnen Sie die QR-Zerlegung jetzt auch mit Householder-Spiegelungen und lösen Sie damit das lineare Ausgleichsproblem. Erhalten Sie die gleiche Lösung und den gleichen unvermeidlichen Modellfehler wie in den Aufgaben 16, 20 und 23?

d) Welche der MATLAB-Funktionen aus Aufgabenteil a) müssen Sie anpassen, um die QR-Zerlegung als Thin-QR-Zerlegung (siehe Folie 38) zu erhalten?

Kopieren Sie diese Funktionen und passen Sie sie entsprechend an.

Testen Sie Ihre angepassten Funktionen, indem Sie das lineare Ausgleichsproblem aus Aufgabe 25 auch mit diesen Funktionen lösen.

e) Lösen Sie das lineare Ausgleichsproblem $\|Ax - b\|_2 \to \min$ aus Aufgabe 16 abschließend auch mit Ihren MATLAB-Funktionen aus Aufgabenteil d).

Aufgabe 27 *(Aufwand zur Berechnung einer QR-Zerlegung)* ((4T+4T)+1T Punkte)

Seien $m, n \in \mathbb{N}$ und sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ eine vollbesetzte Matrix.

a) Geben Sie jeweils den Aufwand an, der zur Berechnung einer QR-Zerlegung der Matrix A mittels Givens-Rotationen bzw. mittels Householder-Spiegelungen notwendig ist.

   Hinweis: Bei Fallunterscheidungen im Algorithmus bzw. im Code genügt es, wenn Sie sich auf den aufwändigeren Fall beschränken.

b) Vergleichen Sie diese beiden Aufwände.

Aufgabe 28 *(Programmieraufgabe: QR-Zerlegung einer oberen Hessenbergmatrix)* (2T+4M+3M Punkte)

Sei $n \in \mathbb{N}$ und sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Hessenbergmatrix. A habe also die Struktur

$$A = \begin{pmatrix} * & * & \dots & \dots & * \\ * & * & & & \vdots \\ 0 & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \vdots & \ddots & * & * & * \\ 0 & \dots & 0 & * & * \end{pmatrix}.$$

a) Wie können Sie effizient eine QR-Zerlegung einer oberen Hessenbergmatrix A berechnen?

   Begründen Sie Ihre Aussage.

b) Implementieren Sie Ihre Idee in einer MATLAB-Funktion `[Q, R] = qrHessenberg(A)`.

c) Schreiben Sie ein MATLAB-Skript `testQrHessenberg`, mit dem Sie Ihre Funktion `qrHessenberg` an verschiedenen Matrizen testen. Testen Sie auch mit zufälligen Matrizen.

Hinweise:

Teamarbeit ist bei der Bearbeitung der Übungsblätter erlaubt und erwünscht. Falls Sie die Aufgaben im Team lösen, muss jedes Teammitglied eine eigene Lösung votieren und abgeben. Geben Sie dann bitte auf Ihrer Lösung alle an der Aufgabe beteiligten Teammitglieder an.

Die Programmieraufgaben sind in MATLAB zu lösen. Der Source Code muss strukturiert und dokumentiert sein.

Speichern Sie Ihre Lösungen der Theorieaufgaben, Ihre MATLAB-Programme und Ihre Ergebnisse in einem Directory mit dem Namen **Blatt07_*Vorname_Nachname*** und verpacken Sie dieses in eine `.zip`-Datei. **Spätestens bis Sonntag, 10.12.2023, 23:59 Uhr** müssen Sie diese `.zip`-Datei in Moodle hochladen und für die Aufgabenteile, die Sie vorstellen können, votieren.

Aufgabe 24

a) $P = I - 2\frac{ww^T}{w^Tw}$ $\qquad P^T = P$

$$P^T = \left(I - 2\frac{ww^T}{w^Tw}\right)^T = I^T - 2\left(\frac{ww^T}{w^Tw}\right) = I - 2\frac{(ww^T)^T}{w^Tw} = I - 2\frac{ww^T}{w^Tw} = P \quad \checkmark$$

$P^TP = I$

$$P^TP = \left(I - 2\frac{ww^T}{w^Tw}\right)\left(I - 2\frac{ww^T}{w^Tw}\right) = I^2 - 4I\frac{ww^T}{w^Tw} + 4\frac{ww^T\,ww^T}{(w^Tw)^2}$$

$$= I - 4\frac{ww^T}{w^Tw} - 4\frac{w(w^Tw)w^T}{(w^Tw)^2} = I - 4\frac{ww^T}{w^Tw} - 4\frac{ww^T}{w^Tw} = I \quad \checkmark$$

b) $E := \{ x \in \mathbb{R}^n, Px = x \}$, es gilt $E := \{ x \in \mathbb{R}^n : w^T x = 0 \}$

$$Px = \left(I - 2\frac{ww^T}{w^Tw} \right) x = x - 2\frac{ww^T}{w^Tw} x = x \qquad \mid -x$$

$$\Leftrightarrow \quad -2\frac{ww^T}{w^Tw} x = 0 \qquad \mid :(-2), :(w^Tw)$$

$$\Leftrightarrow \quad ww^T x = 0 \qquad \mid :w$$

$$\underbrace{w^T x}_{\text{Skalar}} = 0 \quad \square$$

c) zeige Px ist eine Spiegelung von $x \in \mathbb{R}^n$ an $E := \{ x \in \mathbb{R}^n : Px = x \}$

$$x \in \mathbb{R}^n \Rightarrow \exists t \in \mathbb{R} : \quad Px = x + tw \quad \text{und} \quad x + \frac{t}{2} w \in E$$

1. $Px = x + tw$ mit $t \in \mathbb{R}$

$$Px = \left(I - 2\frac{ww^T}{w^Tw}\right)x = x - 2\frac{ww^T}{w^Tw}x = x - 2\frac{w^Tx}{w^Tw}w = x + tw$$

mit $t = -2\frac{\overbrace{w^Tx}^{\text{skalar}}}{\underbrace{w^Tw}_{\text{skalar}}} \Rightarrow t \in \mathbb{R}$

2. $x + \frac{t}{2}w \in E \rightarrow z := x + \frac{t}{2}w$

$$Pz = P\left(x + \frac{t}{2}w\right) = Px + P\frac{t}{2}w = x + \frac{t}{2}w + P\frac{t}{2}w$$

$$= x + tw + \left(\frac{t}{2}w - 2\frac{ww^T}{w^Tw}\frac{t}{2}w\right)$$

$$= x + tw + \frac{t}{2}w - \cancel{2}\,\cancel{\frac{ww^Tw}{w^Tw}}\,\frac{t}{\cancel{2}}$$

$$= x + tw + \frac{t}{2}w - wt$$

$$= x + tw + \frac{t}{2}w - tw = x + \frac{t}{2}w = z$$

$$\Rightarrow x + \frac{t}{2}w \in E$$

Aufgabe 25

a)
$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 2 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} \qquad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \\ 4 \\ 6 \end{pmatrix} \qquad Ax = b$$

$$\beta = 2w(1)^2 / (\sigma + w(1)^2)$$

$$w(1) = -\sigma / (x(1) + \mu)$$

$$\mu = \sqrt{x(1)^2 + \sigma} = \|x\|_2$$

$$\sigma = x(2:n)^T x(2:n)$$

QR - Zerlegung:

$$P = I_n - \beta w w^T$$

1. $\sigma = x(2:4)^T x(2:4) = 3$

$$\mu = \sqrt{1+3} = 2 \qquad w(1) = {}^{-3}/_{(1+2)} = -1$$

$$\beta = 2/(3+1) = {}^{1}/_{2}$$

$$w = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} : w(1) = \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \\ -1 \\ -1 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = P = I_4 - \beta w w^T = \begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & 1 & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix} - \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \\ -1 & 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$H_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$H_1 \cdot A = \begin{pmatrix} \frac{4}{2} & \frac{10}{2} \\ 0 & -\frac{4}{2} \\ 0 & -\frac{4}{2} \\ 0 & \frac{2}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 0 & -2 \\ 0 & -2 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

H_2 :

* ist Blockmatrix

$\Rightarrow \quad x^T = (-2, -2, 1)$

$\sigma = (-2, 1)^T \begin{pmatrix} -2 \\ 1 \end{pmatrix} = 5$

$\mu = \|(-2, -2, 1)^T\|_2 = 3$

$w(1) = x(1) - \mu$

$= -2 - 3 = -5$

$\beta = 2w(1)^2 / (\sigma + w(1)^2)$

$= 2 \cdot 25 / (5 + 25) = \frac{50}{30}$

$= \frac{5}{3}$

$w = \begin{pmatrix} -5 \\ -2 \\ 1 \end{pmatrix} : w(1) = \begin{pmatrix} 1 \\ \frac{2}{5} \\ -\frac{1}{5} \end{pmatrix}$

$$H_2 = P = I_4 - \beta w w^T = I_4 - \frac{5}{3}\begin{pmatrix} 1 & 2/5 & -1/5 \\ 2/5 & \frac{4}{25} & -2/25 \\ -1/5 & -2/25 & \frac{1}{25} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{2}{3} & -2/3 & 1/3 \\ 0 & -2/3 & \frac{11}{15} & 2/15 \\ 0 & 1/3 & 2/15 & \frac{14}{15} \end{pmatrix}$$

$$H_2 A = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 0 & 3 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = R \quad \Rightarrow \hat{R} = \begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 0 & 3 \end{pmatrix}$$

$$Q = H_1 H_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1/5 & 7/5 \\ 1 & -1/3 & -23/15 & -11/15 \\ 1 & -1/3 & 19/15 & -17/15 \\ 1 & 5/3 & 1/15 & 7/15 \end{pmatrix}$$

b) $\min_{x \in \mathbb{R}^2} : \|Ax - b\|_2^2 \to \|Rx - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2$

$$Q^T b = \begin{pmatrix} 7 \\ 3 \\ 7/5 \\ -1/5 \end{pmatrix} \qquad b_1 = \begin{pmatrix} 7 \\ 3 \end{pmatrix} \quad b_2 = \begin{pmatrix} 7/5 \\ -1/5 \end{pmatrix} \qquad \|b_2\|_2^2 = \left(\frac{7}{5}\right)^2 + \left(-\frac{1}{5}\right)^2$$

$$= \frac{49}{25} + \frac{1}{50} = \frac{50}{25} = 2$$

2. Löse $\hat{R}x = b_1$

$$\begin{pmatrix} 2 & 5 \\ 0 & 3 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 7 \\ 3 \end{pmatrix} = \left(\begin{array}{cc|c} 2 & 5 & 7 \\ 0 & 3 & 3 \end{array}\right) \Rightarrow \begin{array}{l} x_1 = 1 \\ x_2 = 1 \end{array} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

Aufgabe 27

a) Rotationsmatrizen:

$FLOP = 4 + 3 = 7$

QR - Givens:

$FLOP = n \cdot (m(6 + O(m^3) + O(m^3))) = nm(6 + O(m^3) + O(m^3)) \in O(nm^4)$

Householder Vektor

$FLOP = 2n - 3 + 3 + 7 + n - 1 = 3n + 6 \in O(n)$

QR - Householder

$FLOP = n(O(n) + O(n^2) + O(n) + O(n^2) + O(n^2)) \in O(n^3)$

$+ m(O(m^2) + O(m) + O(m^2) + O(m^2))$

$= O(n^3) + O(m^3) = O(m^3)$ da $m > n$

b) $O(nm^4)$ vs $O(m^3)$ => Householder besser

Aufgabe 28

a) Da nur eine Diagonale eleminiert werden muss reichen $(n-1)$ Rotation aus um die obere Hessenbergmatrix in die korrekte Form zu überführen.