QR-Zerlegung mit Householder-Transformationen

Numerische Mathematik 1 WS 2011/12

Orthogonales Eliminieren

Sei $x \in \mathbb{R}^n$ ein Vektor $x \neq 0$.

Ziel: Ein orthogonales $H \in \mathbb{R}^{n,n}$ bestimmen, sodass

$$Hx = \pm ||x||e_1,$$

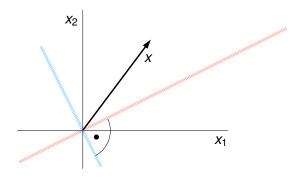
ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors

$$e_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

ist.

Householder-Transformation

Das kann man durch Drehungen (Givens-Rotationen) oder durch Spiegelungen (Householder-Transformationen) erreichen.



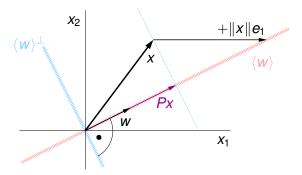
Householder-Transformation

Setzt man

$$\tilde{w} := x + \operatorname{sgn}(x_1) \|x\| e_1, \quad \text{und } w := \frac{\tilde{w}}{\|\tilde{w}\|}$$

dann ist der Orthogonalprojektor auf $\langle w \rangle := \mathrm{span}(w)$ gegeben durch

$$P := ww^T = \left(\frac{\tilde{w}}{\|\tilde{w}\|}\right) \left(\frac{\tilde{w}^T}{\|\tilde{w}\|}\right) = \frac{\tilde{w}\tilde{w}^T}{\tilde{w}^T\tilde{w}}.$$



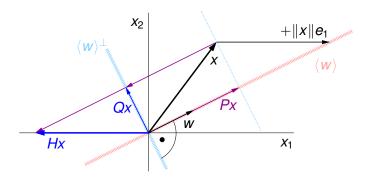
Householder-Transformation

Damit ist der (duale) Orthogonalprojektor auf $\langle w \rangle^{\perp}$ gegeben durch

$$Q := I - P = I - ww^T$$
,

und entsprechend die Householder-Spiegelung (an $\langle w \rangle^{\perp}$)

$$H:=I-2P=I-2ww^T.$$



Alternative Darstellung

Die Householder-Transformation $H \in \mathbb{R}^{n,n}$ hat also die Darstellung

$$H = I - 2ww^T = I - 2\frac{ww^T}{w^Tw},$$

wobei $w \in \mathbb{R}^n$ mit ||w|| = 1.

Ist $v \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ aber ein linear abhängiger Vektor $v = \alpha \cdot w$, mit $\alpha \in \mathbb{R} \setminus \{0\}$ so gilt ebenfalls

$$I - 2\frac{vv^{T}}{v^{T}v} = I - 2\frac{\alpha^{2}ww^{T}}{\alpha^{2}w^{T}w}$$
$$= I - 2\frac{ww^{T}}{w^{T}w} = H.$$

Normalisierte Darstellung

Ist $x \neq 0$ so ist der erste Eintrag von

$$\tilde{w} := x + \operatorname{sgn}(x_1) \|x\| e_1$$

ebenfalls nicht 0, d.h. $\tilde{w}_1 \neq 0$.

Dann erfüllt der Vektor

$$v := \frac{1}{\tilde{w}_1} \cdot \tilde{w} \in \mathbb{R}^n$$

die Bedingung $v_1 = 1$.

Normalisierte Darstellung

Somit ist die Householder-Transformation gegeben durch

$$H = I - 2P = I - 2\frac{vv^{T}}{v^{T}v} = I - \frac{2}{\|v\|^{2}}vv^{T}$$

= $I - \beta vv^{T}$,

wobei

$$\beta:=\frac{2}{\|v\|^2}.$$

Berechnung von ν und β

```
function [beta, v] = house(x)
n = length(x);
if(norm(x) < n*eps)
   beta = 0;
   v = eye(n,1);
else
   % bereche w
   w = \dots
   % berechne v
   v = w/w(1);
   % berechne beta
   beta = ...
end
```

Vorteil

Die Householder-Transformation kann man also als

$$H = I - \beta v v^T$$

schreiben, wobei $\beta \in \mathbb{R}$ und $v \in \mathbb{R}^n$ die Form

$$v = \begin{bmatrix} 1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix}$$

hat.

	Н	$I - \beta v v^T$
Speicherbedarf:	n ²	n

H anwenden

Es sei $\beta \in \mathbb{R}$, $v \in \mathbb{R}^n$ und die Householder-Transformation

$$H = I - \beta vv^T \in \mathbb{R}^{n,n}$$
.

Dann ist für $X \in \mathbb{R}^{n,\ell}$ gerade

	Н	$I - \beta v v^T$
Laufzeit, Matrix-Vektor-Multiplikation:	$\mathcal{O}(n^2)$	$\mathcal{O}(n)$
Laufzeit, Matrix-Matrix-Multiplikation:	$\mathcal{O}(n^3)$	$\mathcal{O}(n^2)$

H anwenden in Matlab

```
function Y = h_anwenden(v, beta, X)
Y = zeros(size(X));
% X1 in der ersten Zeile von Y speichern
% X2 in Y speichern
% Y ausrechnen
Y = ...
```

Wir wollen eine QR-Zerlegung der Matrix

$$\textbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \\ a_{41}^{(1)} & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} \\ a_{51}^{(1)} & a_{52}^{(1)} & a_{53}^{(1)} \end{bmatrix} \in \mathbb{R}^{5,3}$$

mittels Householder-Transformationen berechnen.

$$A = egin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \ a_{41}^{(1)} & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} \ a_{51}^{(1)} & a_{52}^{(1)} & a_{53}^{(1)} \end{bmatrix}$$

Schritt 1: Berechne $v_1 \in \mathbb{R}^5$ und β_1 sodass mit

$$H_1 := I - \beta_1 v_1 v_1^T \in \mathbb{R}^{5,5}$$

und

$$\hat{H}_1 := H_1$$
 gilt $\hat{H}_1 A = egin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & a_{13}^{(2)} & 0 \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} & 0 \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} & 0 \\ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} & 0 \\ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} & 0 \end{bmatrix}$

14/33

$$\hat{H}_1 A = egin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} \ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} \ 0 & a_{52}^{(2)} & a_{53}^{(2)} \end{bmatrix}$$

Schritt 2: Berechne $v_2 \in \mathbb{R}^4$ und β_2 sodass mit

$$H_2 := I - \beta_2 v_2 v_2^T \in \mathbb{R}^{4,4}$$

und

$$\hat{H}_2 := egin{bmatrix} 1 & & & & \\ H_2 \end{bmatrix} \qquad \qquad \text{gilt} \qquad \qquad \hat{H}_2 \hat{H}_1 A = egin{bmatrix} a^{(3)}_{11} & a^{(3)}_{12} & a^{(3)}_{13} \\ 0 & a^{(3)}_{22} & a^{(3)}_{23} \\ 0 & 0 & a^{(3)}_{43} \\ 0 & 0 & a^{(3)}_{52} \end{bmatrix}.$$

15/33

$$\hat{H}_2\hat{H}_1A = egin{bmatrix} a_{11}^{(3)} & a_{12}^{(3)} & a_{13}^{(3)} \ 0 & a_{22}^{(3)} & a_{23}^{(3)} \ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \ 0 & 0 & a_{43}^{(3)} \ 0 & 0 & a_{53}^{(3)} \end{bmatrix}$$

Schritt 3: Berechne $v_3 \in \mathbb{R}^3$ und β_3 sodass mit

$$H_3:=I-\beta_3v_3v_3^T\in\mathbb{R}^{3,3}$$

und

$$\hat{H}_3 := \begin{bmatrix} 1 & & & \\ & 1 & & \\ & & H_3 \end{bmatrix} \qquad \text{gilt} \qquad \hat{H}_3 \hat{H}_2 \hat{H}_1 A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(4)} & a_{12}^{(4)} & a_{13}^{(4)} \\ 0 & a_{22}^{(4)} & a_{23}^{(4)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(4)} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

$$\underbrace{\hat{\mathcal{H}}_{3}\hat{\mathcal{H}}_{2}\hat{\mathcal{H}}_{1}}_{=:\mathcal{Q}^{T}}A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(4)} & a_{12}^{(4)} & a_{13}^{(4)} \\ 0 & a_{22}^{(4)} & a_{23}^{(4)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(4)} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} =: R.$$

Dann ist Q orthogonal, R obere Dreiecksmatrix und somit

$$A = QR$$

eine QR-Zerlegung von A.

QR-Zerlegung (im Rechner)

Es werden die H_i , \hat{H}_i , etc. **nicht** explizit gebildet.

Man rechnet nur sog. Elementarreflektoren $v_1, v_2, ...$ aus und speichert diese in den frei werdenden Null-Elementen (die erste 1 muss nicht gespeichert werden).

Dabei braucht man ein extra Array für die β_1 , β_2 , ...

QR-Zerlegung (im Rechner)

Mit obigen Bezeichnungen durchläuft man die Abfolge

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \\ a_{41}^{(1)} & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} \\ a_{51}^{(1)} & a_{52}^{(1)} & a_{53}^{(1)} \end{bmatrix} \xrightarrow{} \begin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} \\ v_{1,2} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ v_{1,3} & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \\ v_{1,4} & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} \\ v_{1,4} & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} \\ v_{1,5} & a_{52}^{(2)} & a_{53}^{(2)} \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\begin{array}{c} \begin{bmatrix} a_{11}^{(3)} & a_{12}^{(3)} & a_{13}^{(3)} \\ v_{1,2} & a_{22}^{(3)} & a_{23}^{(3)} \\ v_{1,3} & v_{2,2} & a_{33}^{(3)} \\ v_{1,4} & v_{2,3} & a_{43}^{(3)} \\ v_{1,5} & v_{2,4} & a_{53}^{(3)} \end{bmatrix} \\ \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & 0 \end{bmatrix} \qquad \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \end{bmatrix}$$

wobei $v_{i,j} := v_i \Big|_i$ den j-ten Eintrag von v_i bezeichnet.

QR-Zerlegung (in LAPACK)

L.D.A

(input) INTEGER

```
SUBROUTINE DGEQRF ( M , N , A , LDA , TAU , WORK , LWORK , INFO )
   .. Scalar Arguments ..
   INTEGER
                      INFO. LDA. LWORK. M. N
   .. Arrav Arguments ..
   DOUBLE PRECISION A(LDA. *), TAU(*), WORK(*)
Purpose
-----
DGEORF computes a QR factorization of a real M-bv-N matrix A:
A = Q * R.
Arguments
-----
       (input) INTEGER
        The number of rows of the matrix A. M >= 0.
N
        (input) INTEGER
        The number of columns of the matrix A. N >= 0.
        (input/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (LDA,N)
        On entry, the M-by-N matrix A.
        On exit, the elements on and above the diagonal of the array
        contain the min(M,N)-by-N upper trapezoidal matrix R (R is
        upper triangular if m >= n): the elements below the diagonal.
        with the array TAU, represent the orthogonal matrix Q as a
        product of min(m,n) elementary reflectors (see Further
        Details).
```

QR-Zerlegung in Matlab

```
function [QR, betas] = qr_zerlegung(A)
[n, m] = size(A);
min nm = min([n-1, m]);
betas = zeros(1, min_nm);
for i=1:min_nm
   [beta_i, v_i] = house(...);
   A^{(i)} --> A^{(i+1)}
   ... h_anwenden(...) ...
   A(i+1:n,i) = v_i(2:end);
   betas(i) = beta_i;
end
QR = A;
```

Problem

Hat man die QR-Zerlegung in der Form

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(4)} & a_{12}^{(4)} & a_{13}^{(4)} \\ v_{1,2} & a_{22}^{(4)} & a_{23}^{(4)} \\ v_{1,3} & v_{2,2} & a_{33}^{(4)} \\ v_{1,4} & v_{2,3} & v_{3,2} \\ v_{1,5} & v_{2,4} & v_{3,3} \end{bmatrix}$$

$$\beta = \begin{bmatrix} \beta_1 & \beta_2 & \beta_3 \end{bmatrix}$$

gespeichert, so kann man

$$Q = \hat{H}_1 \hat{H}_2 \hat{H}_3$$

und ebenso (da Householder-Transformationen symmetrisch sind)

$$Q^T = \hat{H}_3 \hat{H}_2 \hat{H}_1$$

nicht so einfach mit einem Vektor (oder mit einer Matrix) Multiplizieren.

Lösung

```
function Y = q_anwenden(QR, betas, X, transponiert)
if( transponiert )
   % hier soll Q^T X ausgerechnet werden
   for i = ...
      ... h_anwenden(...) ...
   end
else
   % hier soll Q X ausgerechnet werden
   for i = . . .
      ... h_anwenden(...) ...
   end
end
```

Q-Anwenden (in LAPACK)

SIDE

(input) CHARACTER * 1

```
SUBROUTINE DORMOR ( SIDE, TRANS, M, N, K, A, LDA, TAU, C, LDC,
                      WORK, LWORK, INFO )
Purpose
-----
DORMOR overwrites the general real M-by-N matrix C with
                SIDE = 'L'
                           SIDE = 'R'
              Q * C
                              C * D
TRANS = 'N':
TRANS = 'T': Q**T * C
                              C * O**T
where Q is a real orthogonal matrix defined as the product of k
elementary reflectors
      0 = H(1) H(2) . . . H(k)
as returned by DGEQRF. Q is of order M if SIDE = 'L' and of order N
if SIDE = 'R'
Arguments
TRANS (input) CHARACTER * 1
        = 'N': No transpose, apply Q;
        = 'T': Transpose, apply Q**T.
       (input) DOUBLE PRECISION array, dimension (LDA,K)
Α
        The i-th column must contain the vector which defines the
        elementary reflector H(i), for i = 1,2,...k, as returned by
        DGEORF in the first k columns of its array argument A.
        A is modified by the routine but restored on exit.
```

Lineares Ausgleichsproblem

Sei $A \in \mathbb{R}^{n,m}$ eine Matrix mit vollem Spaltenrang und $b \in \mathbb{R}^n$. Meistens ist auch $n \gg m$.

Ziel: Das *lineare Ausgleichsproblem* lösen, d.h. ein $x^* \in \mathbb{R}^m$ bestimmen mit

$$\min_{x\in\mathbb{R}^m}\|Ax-b\|=\|Ax^*-b\|.$$

Lineares Ausgleichsproblem

Hat man eine QR-Zerlegung von $A \in \mathbb{R}^{n,m}$ berechnet so ist

$$\min_{x \in \mathbb{R}^m} ||Ax - b|| = \min_{x \in \mathbb{R}^m} ||QRx - b|| = \min_{x \in \mathbb{R}^m} ||Q(Rx - Q^T b)||$$
$$= \min_{x \in \mathbb{R}^m} ||Rx - Q^T b||,$$

d.h. mit den Bezeichnungen $R =: \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$ und $Q^T b =: \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$, wobei $R_1 \in \mathbb{R}^{m,m}$, $b_1 \in \mathbb{R}^m$, $b_2 \in \mathbb{R}^{n-m}$, hat man

$$\min_{x \in \mathbb{R}^m} ||Ax - b||^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^m} \left\| \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} x - \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \right\|^2 \\
= \min_{x \in \mathbb{R}^m} ||R_1 x - b_1||^2 + ||0 - b_2||^2 = ||b_2|| + \min_{x \in \mathbb{R}^m} ||R_1 x - b_1||^2,$$

mit der Lösung

$$x^* = R^{-1}b_1$$

und dem Residuum

$$||Ax^* - b|| = ||b_2||.$$

Ausgleichsproblem lösen (in Matlab)

```
function [x, res] = ausgleichsproblem(A, b)
[n, m] = size(A);
[QR, beta] = qr_zerlegung(A);
QTb = q_anwenden(QR, beta, b, true);
. . .
x = \ldots;
res = ...;
```

Asymptotische Laufzeit

Es sei $m \in \mathbb{N}$ fest, $n \in \mathbb{N}$ mit n > m variabel, $A \in \mathbb{R}^{n,m}$ und $b \in \mathbb{R}^n$.

Dann ist die asymptotische Laufzeit (für $n \to \infty$) zur Lösung des linearen Ausgleichsproblems

$$\min_{x\in\mathbb{R}^m}\|Ax-b\|\,,$$

nach obiger Methode

$$\mathcal{O}(n)$$
.

Würde man erst orthogonales $Q \in \mathbb{R}^{n,n}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{n,m}$ berechnen mit QR = A, so würde schon die notwendige Matrix-Vektor-Multiplikation Q^Tb

$$\mathcal{O}(n^2)$$

brauchen.

Berechnung der SVD

Um die SVD einer Matrix der Form

zu berechnen, wendet man Householder-Transformationen (von links und rechts) an.

Berechnung der SVD

Man durchläuft die Abfolge

Berechnung der SVD

Dann kann man die Eigenwerte von

$$B^{T}B = \begin{bmatrix} * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ * & * & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & * & * & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} * & * & 0 & 0 \\ * & * & * & 0 \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{bmatrix},$$

einer symmetrischen positiv semi-definiten Tridiagonalmatrix, berechnen.

Eigenwerte von B^TB (in LAPACK)

```
SUBROUTINE DSTEV ( JOBZ, N, D, E, Z, LDZ, WORK, INFO )
   .. Scalar Arguments ..
   CHARACTER
                      JOBZ
   INTEGER
                      INFO, LDZ, N
  .. Arrav Arguments ..
   DOUBLE PRECISION D(*). E(*). WORK(*). Z(LDZ. *)
Purpose
-----
DSTEV computes all eigenvalues and, optionally, eigenvectors of a
real symmetric tridiagonal matrix A.
Arguments
-------
       (input) CHARACTER * 1
JOBZ
        = 'N': Compute eigenvalues only:
        = 'V': Compute eigenvalues and eigenvectors.
N
        (input) INTEGER
        The order of the matrix N >= 0
n
        (input/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (N)
        On entry, the n diagonal elements of the tridiagonal matrix
        Δ
        On exit, if INFO = 0, the eigenvalues in ascending order.
E
        (input/output) DOUBLE PRECISION array, dimension (N-1)
        On entry, the (n-1) subdiagonal elements of the tridiagonal
        matrix A, stored in elements 1 to N-1 of E.
        On exit, the contents of E are destroyed.
```