Rezept zur Berechnung der QR-Zerlegung

Gegeben sei eine Matrix $A\in\mathbb{R}^{m\times n}$ (bzw. $A\in\mathbb{C}^{m\times n}$) mit $m\geqslant n$. Gesucht ist die QR-Zerlegung von A, also eine orthogonale Matrix $Q\in O(m)$ (bzw. eine unitäre Matrix $Q\in U(m)$) und eine obere Dreiecksmatrix $R\in\mathbb{R}^{m\times n}$ (bzw. $R\in\mathbb{C}^{m\times n}$) mit A = Q·R. Diese kannst du wie folgt berechnen:

1. Berechnung von Q: Seien a_1, ..., $a_n\in\mathbb{R}^n$ die Spaltenvektoren von A. Führe nun folgende Variante des Gram-Schmidtschen Orthogonalisierungsverfahren durch:

   a) Beginne mit $k_1:=1$.

   b) Wiederhole für $j=1,...,n$.

      - Berechne $\tilde{a_j}:=a_j-\sum_{i=1}^{k_j-1}\langle q_i,a_j\rangle$
      - Falls $\tilde{a_j}=0$, so setze $k_{j+1}:=k_j$.
      - Falls $\tilde{a_j}\neq 0$, so setze $q_{k_j}:={}^{\tilde{a_j}}/_{\|\tilde{a_j}\|}$ und $k_{j+1}:=k_j+1$.

   c) Ergänze die orthonormalen Vektoren q_1, ..., $q_{k_{n+1}}\in\mathbb{R}^n$ zu einer Orthonormalbasis $q_1,...,q_m$ von $\mathbb{R}^n$. Es sei $Q\in\mathbb{R}^{n\times n}$ die Matrix mit diesen Vektoren als Spalten.

2. Berechnung von A: Sei $A=(a_{\mathrm{ij}})\in\mathbb{R}^{n\times n}$ definiert durch

$$a_{\mathrm{ij}}:=\langle q_i,a_j\rangle$$

   Du musst dafür fast nichts rechnen: Die Werte a_{ij} für $i<k_j$ hast du in Schritt 1 schon berechnet. Außerdem gilt $a_{k_jj}=\|\tilde{a_j}\|$ und $a_{\mathrm{ij}}=0$ für $i>k_j$ (insbesondere also für $i>k_{n+1}$).

Beispiel. Sei

$$A=\begin{pmatrix}1&1&0\\0&1&1\\1&0&-1\\0&0&0\end{pmatrix}.$$

Dann berechnen wir

$$\begin{aligned}
\tilde{a_1} &= \begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix}\\
q_1 &= {}^{\tilde{a_1}}/_{\|\tilde{a_1}\|}=\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\tilde{a_1}\\
\tilde{a_2} &= \begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}-\left\langle\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}\right\rangle\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix}\\
&= \begin{pmatrix}1\\1\\0\\0\end{pmatrix}-\frac{1}{2}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1/2\\1\\-1/2\\0\end{pmatrix}\\
q_2 &= {}^{\tilde{a_2}}/_{\|\tilde{a_2}\|}=\frac{1}{\sqrt{3/2}}\cdot\tilde{a_2}\\
\tilde{a_3} &= \begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix}-\left\langle\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix}\right\rangle\cdot\frac{1}{\sqrt{2}}\cdot\begin{pmatrix}1\\0\\1\\0\end{pmatrix}\\
&\quad-\left\langle\frac{1}{\sqrt{3/2}}\cdot\begin{pmatrix}1/2\\1\\-1/2\\0\end{pmatrix},\begin{pmatrix}0\\1\\-1\\0\end{pmatrix}\right\rangle\cdot\frac{1}{\sqrt{3/2}}\cdot\begin{pmatrix}1/2\\1\\-1/2\\0\end{pmatrix}=...=0
\end{aligned}$$

Wir ergänzen q_1, q_2 zu einer ONB von $\mathbb{R}^4$ mit

$$q_3 := \frac{1}{\sqrt{3}} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad q_4 := \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

Als Ergebnis haben wir dann

$$Q = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} & 0 \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad R = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3}/\sqrt{2} & \sqrt{3}/\sqrt{2} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$