# QR-Zerlegung mit Householder-Transformationen

Numerische Mathematik1

# Orthogonales Eliminieren

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

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

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

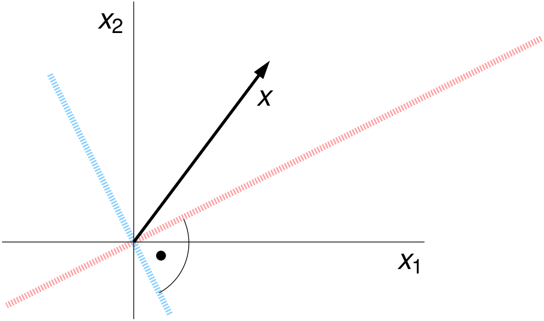
ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors

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

ist.

# Householder-Transformation

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



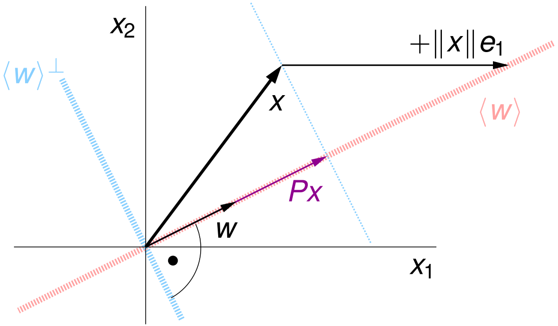
# Householder-Transformation

Setzt man

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

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

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



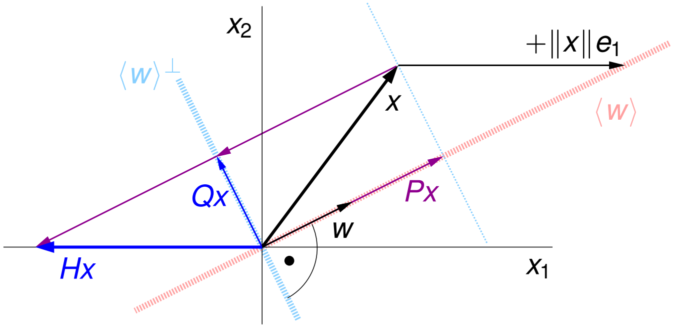
# Householder-Transformation

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

$$\begin{aligned} I - 2\frac{vv^T}{v^Tv} &= I - 2\frac{\alpha^2 ww^T}{\alpha^2 w^Tw} \\ &= I - 2\frac{ww^T}{w^Tw} = H. \end{aligned}$$

# Normalisierte Darstellung

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

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

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

$$\begin{aligned} H &= I - 2P = I - 2\frac{vv^T}{v^T v} = I - \frac{2}{\|v\|^2} vv^T \\ &= I - \beta vv^T, \end{aligned}$$

wobei

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

# Berechnung von $v$ und $\beta$

```
function [beta, v] = house(x)

n = length(x);

if( norm(x) < n*eps )
    beta = 0;
    v = eye(n,1);
else
    % bereche w
    w = ...

    % 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.

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

# H anwenden

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

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

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

$$\begin{aligned} HX &= (I - \beta v v^T)X = X - \beta v v^T X \\ &= X - \beta v \underbrace{\left(v^T X\right)}_{=:X_1 \in \mathbb{R}^{1,\ell} \text{ in } \mathcal{O}(n\ell)} = X - \beta v X_1 \\ &= X - \beta \underbrace{(v X_1)}_{=:X_2 \in \mathbb{R}^{n,\ell} \text{ in } \mathcal{O}(n\ell)} = \underbrace{X - \beta X_2}_{\text{in } \mathcal{O}(n\ell)} =: Y. \end{aligned}$$

| | $H$ | $I - \beta v v^T$ |
|---|---|---|
| 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 = ...
```

# QR-Zerlegung (Formal)

Wir wollen eine QR-Zerlegung der Matrix

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

mittels Householder-Transformationen berechnen.

# QR-Zerlegung (Formal)

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

Schritt 1: Berechne $v_1 \in \mathbb{R}^5$ und $\beta_1$ sodass mit

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

und

$$\hat{H}_1 := H_1 \qquad \text{gilt} \qquad \hat{H}_1 A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} \\ 0 & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ 0 & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \\ 0 & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} \\ 0 & a_{52}^{(2)} & a_{53}^{(2)} \end{bmatrix}.$$

# QR-Zerlegung (Formal)

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

Schritt 2: Berechne $v_2 \in \mathbb{R}^4$ und $\beta_2$ sodass mit

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

und

$$\hat{H}_2 := \begin{bmatrix} 1 & \\ & H_2 \end{bmatrix} \qquad \text{gilt} \qquad \hat{H}_2 \hat{H}_1 A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(3)} & a_{12}^{(3)} & a_{13}^{(3)} \\ 0 & a_{22}^{(3)} & a_{23}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{53}^{(3)} \end{bmatrix}.$$

# QR-Zerlegung (Formal)

$$\hat{H}_2 \hat{H}_1 A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(3)} & a_{12}^{(3)} & a_{13}^{(3)} \\ 0 & a_{22}^{(3)} & a_{23}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{43}^{(3)} \\ 0 & 0 & a_{53}^{(3)} \end{bmatrix}$$

Schritt 3: Berechne $v_3 \in \mathbb{R}^3$ und $\beta_3$ sodass mit

$$H_3 := I - \beta_3 v_3 v_3^T \in \mathbb{R}^{3,3}$$

und

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

# QR-Zerlegung (Formal)

$$\underbrace{\hat{H}_3 \hat{H}_2 \hat{H}_1}_{=:Q^T} A = \begin{bmatrix} a_{11}^{(4)} & a_{12}^{(4)} & a_{13}^{(4)} \\ 0 & a_{22}^{(4)} & a_{23}^{(4)} \\ 0 & 0 & a_{33}^{(4)} \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} =: R.$$

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 $\beta_1$, $\beta_2$, ...

# QR-Zerlegung (im Rechner)

Mit obigen Bezeichnungen durchläuft man die Abfolge

$$\begin{bmatrix} a_{11}^{(1)} & a_{12}^{(1)} & a_{13}^{(1)} \\ a_{21}^{(1)} & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} \\ a_{31}^{(1)} & a_{32}^{(1)} & a_{33}^{(1)} \\ a_{41}^{(1)} & a_{42}^{(1)} & a_{43}^{(1)} \\ a_{51}^{(1)} & a_{52}^{(1)} & a_{53}^{(1)} \end{bmatrix} \atop \beta = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \rightsquigarrow \quad \begin{bmatrix} a_{11}^{(2)} & a_{12}^{(2)} & a_{13}^{(2)} \\ v_{1,2} & a_{22}^{(2)} & a_{23}^{(2)} \\ v_{1,3} & a_{32}^{(2)} & a_{33}^{(2)} \\ v_{1,4} & a_{42}^{(2)} & a_{43}^{(2)} \\ v_{1,5} & a_{52}^{(2)} & a_{53}^{(2)} \end{bmatrix} \atop \beta = \begin{bmatrix} \beta_1 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

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

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

# 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
```

# 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

$$\begin{aligned}\min_{x\in\mathbb{R}^m} \|Ax - b\| &= \min_{x\in\mathbb{R}^m} \|QRx - b\| = \min_{x\in\mathbb{R}^m} \left\|Q(Rx - Q^T b)\right\| \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}^m} \left\|Rx - Q^T b\right\|,\end{aligned}$$

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

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

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 = ...;
res = ...;
```