Beilage zur Serie 9

QR-Zerlegung und Least Squares

Jede Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n$, besitzt eine QR-Zerlegung, d.h. es existieren Matrizen $\mathbf{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ und $\mathbf{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, so dass $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$. Dabei ist $\mathbf{Q}$ eine orthogonale Matrix, d.h. $\mathbf{Q}^\top\mathbf{Q} = \mathbf{I}$ oder auch, dass die Spalten von $\mathbf{Q}$ orthonormal zueinander sind. Die Matrix $\mathbf{R}$ ist eine obere Dreiecksmatrix der Form

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \text{ mit } \mathbf{R}_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}.$$

Falls die Matrix $\mathbf{A}$ maximalen Rang n hat, so ist $\mathbf{R}_1$ invertierbar.
Um das Problem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ im Sinne der kleinsten Fehlerquadrate zu lösen, stellen wir die Normalengleichungen auf:

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^\top\mathbf{b}.$$

Wenn wir die QR-Zerlegung von $\mathbf{A}$ kennen, d.h. $\mathbf{A} = \mathbf{QR}$ mit

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1 & \mathbf{Q}_2 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times m}, \quad \mathbf{R} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n},$$

wobei $\mathbf{Q}_1 \in \mathbb{R}^{m\times n}$ die Matrix bestehend aus den ersten n Spalten von $\mathbf{Q}$ ist und $\mathbf{R}_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ invertierbar ist, erhalten wir

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{Ax} = \mathbf{R}^\top\mathbf{Q}^\top\mathbf{QRx} \overset{\text{orth.}}{=} \mathbf{R}^\top\mathbf{Rx} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1^\top & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \mathbf{x} = \mathbf{R}_1^\top\mathbf{R}_1\mathbf{x}$$

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{b} = \mathbf{R}^\top\mathbf{Q}^\top\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{R}_1^\top & \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \mathbf{Q}_1^\top \\ \mathbf{Q}_2^\top \end{pmatrix} \mathbf{b} = \mathbf{R}_1^\top\mathbf{Q}_1^\top\mathbf{b}.$$

Weil $\mathbf{R}_1$ invertierbar ist, erhalten wir also

$$\mathbf{A}^\top\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^\top\mathbf{b} \quad \Longleftrightarrow \quad \mathbf{R}_1\mathbf{x} = \mathbf{Q}_1^\top\mathbf{b}.$$

Wir müssen demnach nur noch ein lineares Gleichungssystem mit einer oberen Dreiecksmatrix lösen.
Die QR-Zerlegung einer Matrix bestimmt man in MATLAB mit dem Befehl `[Q,R] = qr(A)`.
Die Teilmatrix bestehend aus den ersten k Zeilen von $\mathbf{A}$ extrahiert man aus $\mathbf{A}$ mit dem Befehl `A(1:k,:)`. Analog extrahiert man die Teilmatrix bestehend aus den ersten k Spalten.