Prof. Dr. Frank Noé
Dr. Christoph Wehmeyer
Tutoren:
Florian Litzinger (Di. 10-12; Di. 12-14)
Maikel Nadolski (Mi. 12-14; Mi. 14-16)

4. Übung zur Vorlesung **Numerik I**

Abgabe: Donnerstag, 15. Mai 2014, 16:00 Uhr, Tutorenfächer

Aufgabe 1 *(QR-Zerlegung 2 + 1 + 2 P):*

In dieser Aufgabe wollen wir den Algorithmus zur Lösung der Normalengleichung mit Hilfe der QR-Zerlegung umsetzen.
a) Schreiben Sie eine Funktion zur Berechnung der QR-Zerlegung einer Matrix A mit Hilfe von Householder-Reflexionen. Überlegen Sie sich dazu, dass es nicht nötig ist, die orthogonale Matrix Q explizit abzuspeichern. Gehen Sie stattdessen folgendermaßen vor:

- Speichern Sie im k-ten Schritt die berechneten Updates der Spalten von A direkt in die Matrix A.
- Speichern Sie das Diagonalelement r_{kk} in einen separaten Vektor ab.
- Überschreiben Sie dann die eliminierte Subspalte $A(k : end, k)$ durch den k-ten Householder Vektor v^k.

Geben Sie am Ende die überschriebene Matrix und den Vektor der Diagonalelemente zurück.
Bemerkung: Sie können dieses Vorgehen auch im Buch von Deuflhard und Hohmann in Kapitel 3.2.2 noch einmal nachlesen. Für realistische Datenmengen mit $m \gg n$ ist eine $m \times m$-Matrix zu groß, während wir es uns noch leisten können, eine $m \times n$-Matrix abzuspeichern. Deshalb wollen wir dieses Vorgehen umsetzen.
b) Schreiben Sie nun noch eine Funktion, die mit Hilfe des Ergebnisses aus a) zu gegebener rechter Seite b die benötigte Transformation $Q^T b$ berechnet (wiederum ohne die Matrix Q direkt aufzustellen).
c) Wenden Sie die Methoden aus a) und b) an, um gegebene Messdaten durch ein Polynom zu approximieren. Betrachten Sie wie auf dem letzten Übungszettel ein Gitter auf dem Intervall $(0, 5]$, zur Schrittweite $h = 0.01$, bestehend aus den Punkten $t_i = ih$ für $i = 1, \ldots, 500$. Die Daten erzeugen Sie diesmal bitte als $b_i = \frac{\sin(8t_i)}{t_i}$. Lösen Sie nun das lineare Ausgleichsproblem für ein Polynom vom Grad $n = 20$ mit Hilfe der QR-Zerlegung der Matrix A und indem Sie die Normalengleichung direkt mit Hilfe des Backslash-Befehls in Matlab lösen. Plotten Sie die beiden Approximationen im Vergleich zu den echten Daten und berechnen Sie auch das Residuum. Was können Sie feststellen?

Aufgabe 2 *(Aufwand der QR-Zerlegung, 3 P):*

Bestätigen Sie die Aufwandsabschätzung für den Algorithmus zur Berechnung der QR-Zerlegung. Zeigen Sie also, dass die Berechnung der Matrizen Q und R in der oben beschriebenen Form (also ohne explizite Berechnung von Q) für $m \gg n$ etwa $\approx C \cdot n^2 m$ Rechenoperationen benötigt, wenn man Terme kleinerer Ordnung weglässt.