

# Numerische Mathematik für Elektrotechniker

## Lineare Ausgleichsrechnung

Benjamin Berkels

Karl-Heinz Brakhage, Thomas Jankuhn, Christian Löbbert

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik  
RWTH Aachen

Wintersemester 2019/2020

## Zusammenfassung der letzten Vorlesung

Eine Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  heißt **orthogonal**, falls

$$Q^T Q = I.$$

Eigenschaften:

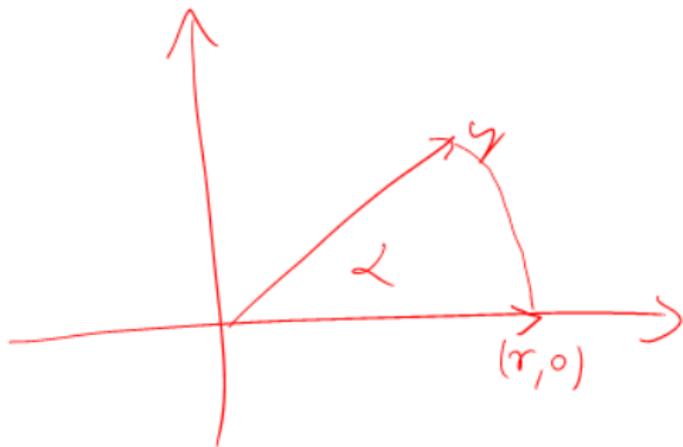
- ▶  $Q^{-1} = Q^T$ .
- ▶  $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ ,  $\kappa_2(Q) = 1$ .
- ▶  $\|QA\|_2 = \|A\|_2$ ,  $\kappa_2(QA) = \kappa_2(A)$ .

### Satz $QR$ -Zerlegung

Zu  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  existiert eine Orthogonale Matrix  $Q$ , so dass

$$A = QR, \quad R = \begin{pmatrix} \nabla \\ 0 \end{pmatrix}$$

mit  $R$  obere Dreiecksmatrix.



# Zusammenfassung der letzten Vorlesung

## Grundaufgabe

Gegeben sei  $(a, b)^T \in \mathbb{R}^2 \setminus \{0\}$ . Finde  $c, s, r \in \mathbb{R}$  mit

$$\begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r \\ 0 \end{pmatrix}$$

und

$$c^2 + s^2 = 1.$$

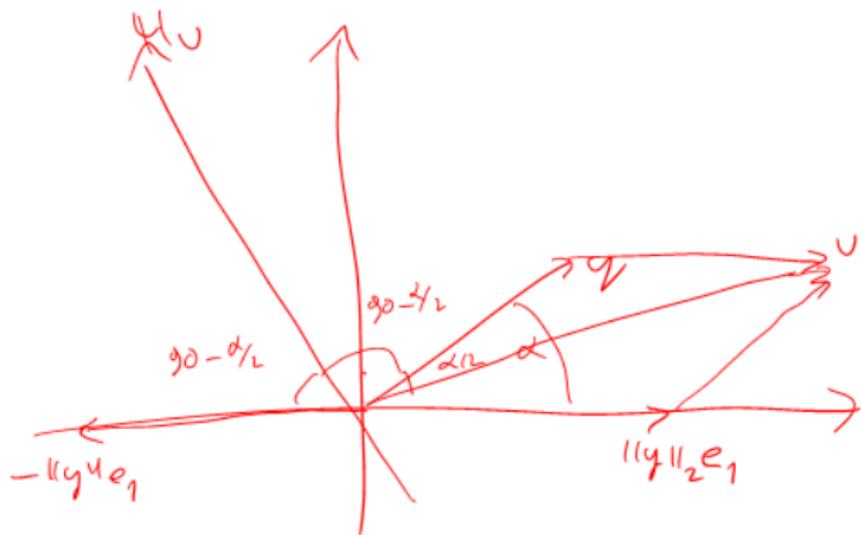
Die Lösung ist:  $r = \pm \sqrt{a^2 + b^2}$ ,  $c := \frac{a}{r}$ ,  $s := \frac{b}{r}$

## Beachte

Drehung verändert nicht die Euklidische Länge eines Vektors, d.h.

$$\|(r, 0)^T\|_2 = |r| = \sqrt{a^2 + b^2} = \|(a, b)^T\|_2.$$

- ▶ Die obige (Rotations-)Matrix ist **orthogonal**.

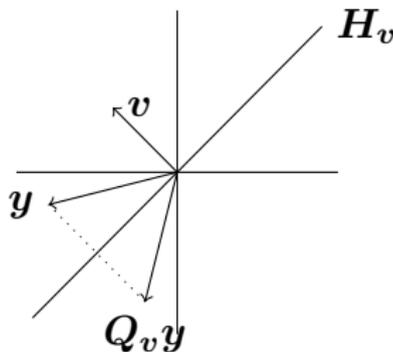


# Zusammenfassung der letzten Vorlesung

## Definition

Für  $v = (v_1, \dots, v_n)^T \in \mathbb{R}^n \setminus \{0\}$ , ist die Householder-Transformation definiert als

$$Q_v = I - 2 \frac{v v^T}{v^T v}.$$



$$H_v = \{x \in \mathbb{R}^n \mid x^T v = 0\}.$$

Lösung von  $Q_v y = \pm \|y\|_2 e^1$

$$v = y + \alpha e^1$$

$$\alpha = \text{sign}(y_1) \|y\|_2$$

$$Q_v y = -\alpha e^1$$

# Heute in der Vorlesung

Themen:

Dahmen & Reusken Kap. 4.1-4.4

- ▶ Lineare Ausgleichsrechnung
  1. Problemstellung
  2. Kondition
  3. Lösungsverfahren
    - ▶ über Normalgleichungen
    - ▶ über  $QR$ -Zerlegung

Was Sie mitnehmen sollten:

- ▶ Was ist ein lineares Ausgleichsproblem?
- ▶ Wie ist das lineare Ausgleichsproblem konditioniert?
- ▶ Welche Lösungsverfahren gibt es und wie stabil sind diese?

# Problemstellung

## Notation:

$\mathbb{R}^{m \times n}$  ist die Menge der  $(m \times n)$ -Matrizen

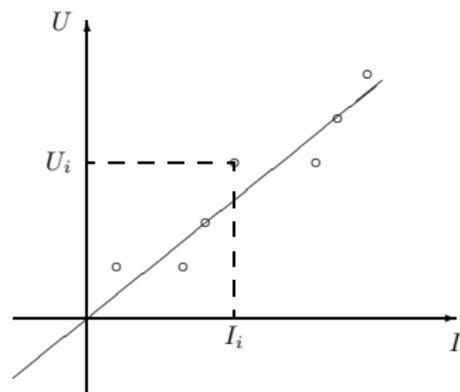
$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1} & \cdots & a_{m,n} \end{pmatrix}$$

mit Einträgen

$$a_{i,j} \in \mathbb{R}.$$

# Bestimmung des elektrischen Widerstands (Beispiel 4.1.)

- ▶ Ohmsches Gesetz:  $U = RI$
- ▶ Aufgabe: Bestimme Widerstand  $R$  im Stromkreis aus einer Reihe von Messungen:
  - $(U_i, I_i)$  (Spannung, Stromstärke),  $i = 1, \dots, m$ .
- ▶ **Problem:** Messungen (Daten) sind mit Fehlern behaftet, d.h.
  - $U_i \neq RI_i$ , für fast alle  $i = 1, \dots, m$ .



# Beispiel 4.1.

## Vorgehen:

- ▶ Fehler in Messung  $i$  (Residuum)

$$r_i = R I_i - U_i, \quad i = 1, \dots, m$$

- ▶ Ein Maß für den Gesamtfehler: Summe der Fehlerquadrate

$$f(R) := \sum_{i=1}^m r_i^2 = \sum_{i=1}^m (R I_i - U_i)^2$$

- ▶ Bestimme Widerstand  $R^*$  so, dass Gesamtfehler minimal wird

$$R^* = \arg \min_R f(R)$$

$$f'(R) = 2 \sum_{i=1}^m (R I_i - U_i) I_i = 2 R \sum_{i=1}^m I_i^2 - 2 \sum_{i=1}^m U_i I_i$$

$$\stackrel{!}{=} 0$$

# Beispiel 4.1.

## Vorgehen:

- ▶ Fehler in Messung  $i$  (Residuum)

$$r_i = R I_i - U_i, \quad i = 1, \dots, m$$

- ▶ Ein Maß für den Gesamtfehler: Summe der Fehlerquadrate

$$f(R) := \sum_{i=1}^m r_i^2 = \sum_{i=1}^m (R I_i - U_i)^2$$

- ▶ Bestimme Widerstand  $R^*$  so, dass Gesamtfehler minimal wird

$$R^* = \arg \min_R f(R)$$

- ▶ Extremum der quadratischen Funktion  $f(R)$

$$f'(R^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad R^* = \left( \sum_{i=1}^m U_i I_i \right) / \left( \sum_{i=1}^m I_i^2 \right)$$

# Fourierapproximation (Beispiel 4.2.)

In der Fourieranalyse wird eine  $T$ -periodische Funktion  $f$  durch eine Linearkombination der  $T$ -periodischen trigonometrischen Polynome

$$1, \cos(ct), \sin(ct), \cos(2ct), \sin(2ct), \dots, \cos(Nct), \sin(Nct)$$

mit  $c := \frac{2\pi}{T}$  in der Form

$$g_N(t) = \frac{1}{2}\alpha_0 + \sum_{k=1}^N \left( \alpha_k \cos(kct) + \beta_k \sin(kct) \right)$$

approximiert.

## Beispiel 4.2.

**Annahme:** nicht  $f$ , sondern nur eine Reihe vom Messdaten

$$b_i \approx f(t_i), \quad 0 \leq t_1 < t_2 < \dots < t_m \leq T,$$

ist bekannt, wobei  $m > 2N + 1$ .

Ansatz zur Bestimmung der Koeffizienten

$\alpha_0, \alpha_1, \beta_1, \alpha_2, \beta_2, \dots, \alpha_N, \beta_N$ :

$$\sum_{i=1}^m \left( g_N(t_i) - b_i \right)^2 \rightarrow \min_{\alpha_k, \beta_k} .$$

$g_N$  ist linear in den Koeffizienten!

# Allgemeines lineares Ausgleichsproblem

## Definition

Zu gegebenen  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $b \in \mathbb{R}^m$ , bestimme  $x^* \in \mathbb{R}^n$ , für dass

$$\|A x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A x - b\|_2$$

gilt. Diese Problemstellung heißt das **lineare Ausgleichsproblem**.

oder:

## Lineares Ausgleichsproblem

Zu gegebenen  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $b \in \mathbb{R}^m$ , bestimme  $x^* \in \mathbb{R}^n$ , so dass

$$x^* \in \arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A x - b\|_2^2.$$

# Allgemeines lineares Ausgleichsproblem

Warum 2-Norm?

- ▶  $\|Ax - b\|_2^2$  ist differenzierbar und Ableitung ist linear
- ▶ Statistischer Hintergrund ("BLUE", erwartungstreu, Kap. 4.5).
- ▶ Euklidische Norm bleibt bei orthogonalen Transformationen erhalten, d.h. für jede orthogonale Matrix  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  ist

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Q(Ax - b)\|_2$$

⇒ führt auf lineares Optimierungsproblem

Auch möglich:

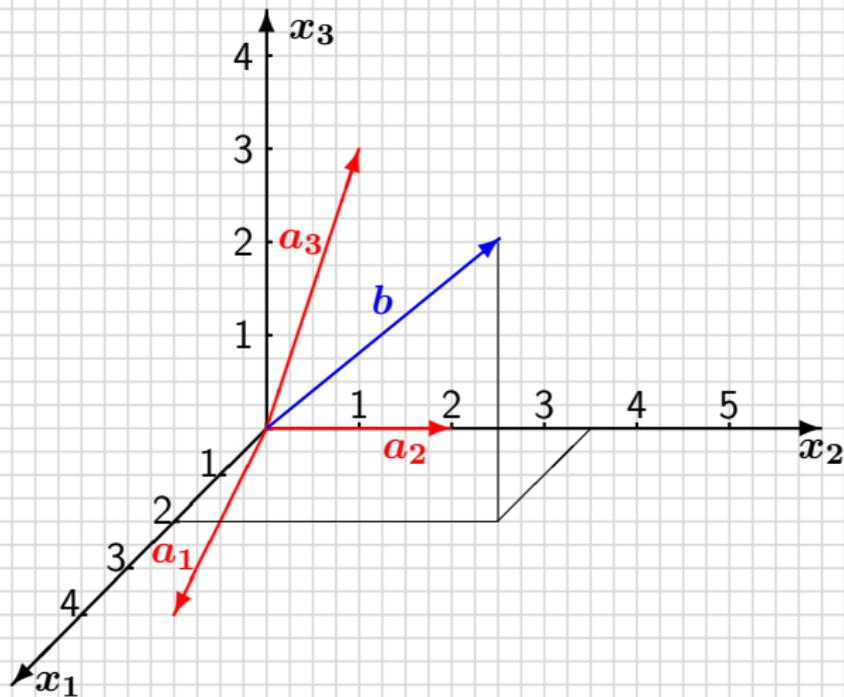
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_1 \text{ oder } \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_\infty$$

# Geometrische Interpretation $Ax = b$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

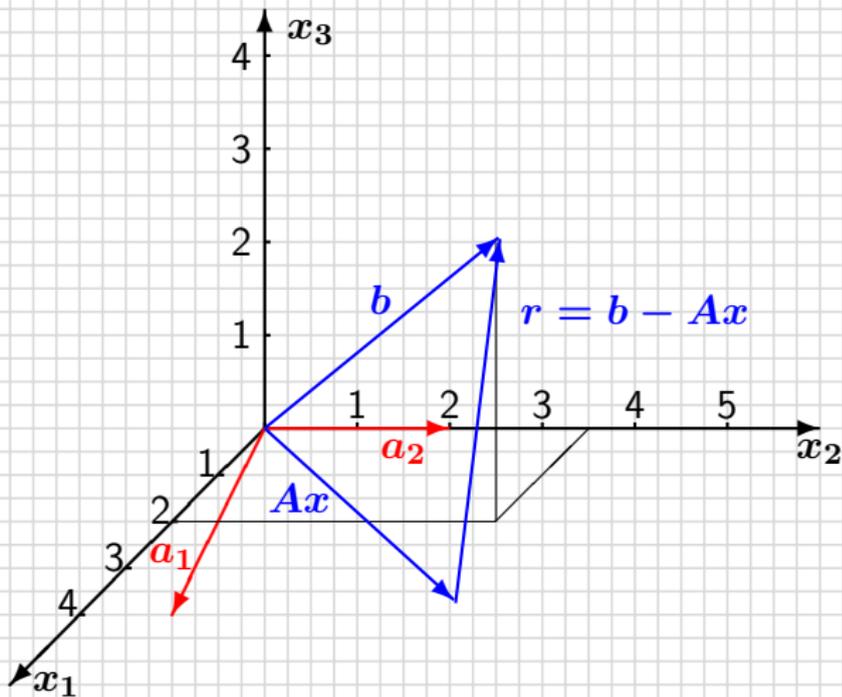


# Geometrische Interpretation $\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x^* = ?$$





## Beispiel 4.3.

Man vermutet, dass die Messdaten

$t$	<b>0</b>	<b>1</b>	<b>2</b>	<b>3</b>
$y$	<b>3</b>	<b>2.14</b>	<b>1.86</b>	<b>1.72</b>

einer Gesetzmäßigkeit der Form

$$y = f(t) = \alpha \frac{1}{1+t} + \beta$$

mit noch zu bestimmenden Parametern  $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$  gehorchen.

### Frage/Problem

- ▶ Wie lautet das zugehörige lineare Ausgleichsproblem?

# Beispiel 4.3.

Meßdaten

$t$	0	1	2	3
$y$	3	2.14	1.86	1.72

Gesetzmäßigkeit

$$y = f(t) = \alpha \frac{1}{1+t} + \beta$$

Das Ausgleichsproblem lautet  $\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$ ,

wobei

$$x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \frac{1}{1+0} & 1 \\ \frac{1}{1+1} & 1 \\ \frac{1}{1+2} & 1 \\ \frac{1}{1+3} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{3} & 1 \\ \frac{1}{4} & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 2.14 \\ 1.86 \\ 1.72 \end{pmatrix}.$$

Matlab-Demo

# Normalgleichungen

Die Lösung des linearen Ausgleichsproblems lässt sich auf die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A^T A x = A^T b$$

reduzieren, das häufig als **Normalgleichungen** bezeichnet wird.

$$D(x) := \|Ax - b\|_2^2$$

$$0 \stackrel{!}{=} \nabla D(x) = 2A^T(Ax - b) = 2(A^T A x - A^T b)$$

$$\Leftrightarrow A^T A x = A^T b$$

# Normalgleichungen

Die Lösung des linearen Ausgleichsproblems lässt sich auf die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A^T A x = A^T b$$

reduzieren, das häufig als **Normalgleichungen** bezeichnet wird.

## Bemerkung

- ▶ Für  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  ist  $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  stets symmetrisch.
- ▶ Falls  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  vollen (Spalten-)Rang  $n$  hat, so ist die Matrix  $A^T A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  **symmetrisch positiv definit**.

## Annahme:

- ▶ Wir beschränken uns hier auf den Fall, dass  $A$  vollen Spaltenrang hat:  $\mathbf{Rang}(A) = n$  (Fall  $\mathbf{Rang}(A) < n$ , siehe SVD).

# Normalgleichungen

Die Lösung des linearen Ausgleichsproblems lässt sich auf die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$A^T A x = A^T b$$

reduzieren, das häufig als **Normalgleichungen** bezeichnet wird.

## Satz 4.5.

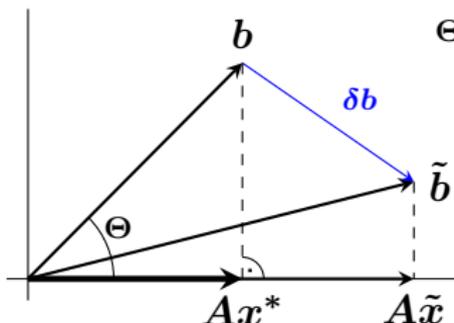
$x^* \in \mathbb{R}^n$  ist genau dann Lösung des linearen Ausgleichsproblems, wenn  $x^*$  Lösung der Normalgleichungen

$$A^T A x^* = A^T b$$

ist. Das System der Normalgleichungen hat stets mindestens eine Lösung. Sie ist genau dann **eindeutig**, wenn  $\mathbf{Rang}(A) = n$  gilt.

# Kondition des linearen Ausgleichsproblems

Für  $A \in \mathbb{R}^{m \times n} (m \neq n)$  sei  $\kappa_2(A) := \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} / \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}$ .



$\Theta$ : Winkel zwischen  $b$  und  $Ax^*$

## Satz 4.7.

Für die Kondition des linearen Ausgleichsproblems bezüglich Störungen in  $b$  gilt

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \leq \frac{\kappa_2(A)}{\cos \Theta} \frac{\|\tilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2}.$$

# Kondition des linearen Ausgleichsproblems

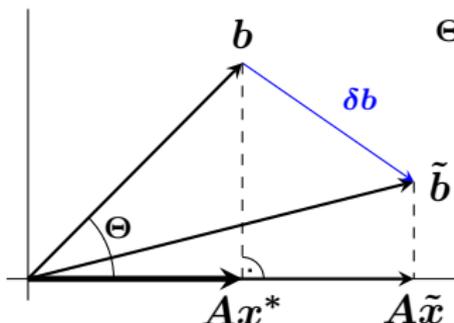
Für  $A \in \mathbb{R}^{m \times n} (m \neq n)$  sei  $\kappa_2(A) := \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} / \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}$ .

$$\kappa(A) = \|A^{-1}\| \|A\| \quad \text{für } A \in \mathbb{R}^{n \times n}, \det A \neq 0$$

$$\begin{aligned} \|A^{-1}\| &= \max_{x \neq 0} \frac{\|A^{-1}x\|}{\|x\|} \stackrel{x=Ay}{=} \max_{y \neq 0} \frac{\|y\|}{\|Ay\|} = \max_{y \neq 0} \left( \frac{1}{\frac{\|Ay\|}{\|y\|}} \right) \\ &= \frac{1}{\min_{y \neq 0} \frac{\|Ay\|}{\|y\|}} \end{aligned}$$

# Kondition des linearen Ausgleichsproblems

Für  $A \in \mathbb{R}^{m \times n} (m \neq n)$  sei  $\kappa_2(A) := \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} / \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}$ .



$\Theta$ : Winkel zwischen  $b$  und  $Ax^*$

## Satz 4.9.

Für die Kondition des linearen Ausgleichsproblems bezüglich Störungen in  $A$  gilt

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \leq \left( \kappa_2(A) + \kappa_2(A)^2 \tan \Theta \right) \frac{\|\tilde{A} - A\|_2}{\|A\|_2}$$

## Beispiel 4.8.

Gegeben seien

$$A := \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b := \begin{pmatrix} 0.01 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

sowie eine gestörte rechte Seite  $\tilde{b} = (0.01, 1, 0.01)^T$ . Bestimmen Sie  $x^*$  und  $\tilde{x}$ , und diskutieren Sie die Kondition des linearen Ausgleichsproblems.

Die Lösung der Normalgleichungen liefert

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T b = \begin{pmatrix} 0.01 \\ 0 \end{pmatrix},$$

sowie für die gestörte rechte Seite

$$\tilde{x} = (A^T A)^{-1} A^T \tilde{b} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0.01 \end{pmatrix}.$$

## Beispiel 4.8.

Daraus folgt

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 141 \cdot \frac{\|\tilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2},$$

also eine schlechte Kondition des linearen Ausgleichsproblems.

Mit Hilfe von Satz 4.7. erhält man aus

$$\kappa_2(A) \approx 2.62 \quad \text{und} \quad \cos \Theta = \frac{\|Ax^*\|_2}{\|b\|_2} = 0.01$$

für die Kondition bezüglich Störungen in  $b$

$$\frac{\kappa_2(A)}{\cos \Theta} = 262,$$

d.h. eine **schlechte Kondition**, obwohl  $\kappa_2(A)$  klein ist.

# Lösung über Normalgleichungen

Da die Matrix  $A^T A$  **symmetrisch positiv definit** ist, ergibt sich folgende Methode:

## Lösung über Normalgleichungen

- ▶ Berechne  $A^T A$ ,  $A^T b$ .
- ▶ Berechne die Cholesky-Zerlegung von  $A^T A$

$$LDL^T = A^T A$$

- ▶ Löse

$$L y = A^T b, \quad L^T x = D^{-1} y$$

durch Vorwärts- bzw. Rückwärtseinsetzen.

$$A^T A x = L D L^T x = L D \cancel{D^{-1}} y = A^T b$$

## Lösung über Normalgleichungen — Nachteile

- ▶ Die Berechnung von  $A^T A$  ist für große  $m$  aufwendig und birgt die Gefahr von Genauigkeitsverlust durch Auslöschungseffekte. Die Einträge von  $A^T A$  sind also mit (möglicherweise erheblichen relativen) Fehlern behaftet.
- ▶ Bei der Lösung des Systems  $A^T A x = A^T b$  über das Cholesky-Verfahren werden die Rundungsfehler in  $A^T A$  und  $A^T b$  mit

$$\kappa_2(A^T A)$$

$$\kappa_2(A) = \frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}$$

verstärkt. Es gilt

$$\kappa_2(A^T A) = \kappa_2(A)^2.$$

Folglich wird die Rundungsfehlerverstärkung durch  $\kappa_2(A)^2$  beschrieben.

# Beispiel 4.12.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ \delta \\ \delta \end{pmatrix}, \quad 0 < \delta \ll 1.$$

Bestimmen Sie die Lösung des linearen Ausgleichsproblems über die Normalgleichungen und diskutieren Sie das Ergebnis.

$$A^T A = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \delta & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 + \delta^2 & 3 \\ 3 & 3 + \delta^2 \end{pmatrix}$$

$$A^T b = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \delta & 0 \\ \sqrt{3} & 0 & \delta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ \delta \\ \delta \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 + \delta^2 \\ 6 + \delta^2 \end{pmatrix} \Rightarrow x^e = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## Beispiel 4.12.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ \delta \\ \delta \end{pmatrix}, \quad 0 < \delta \ll 1.$$

Bestimmen Sie die Lösung des linearen Ausgleichsproblems über die Normalgleichungen und diskutieren Sie das Ergebnis.

- ▶ Das lineare Ausgleichsproblem hat die Lösung  $x^* = (1, 1)^T$  (für alle  $\delta > 0$ ).
- ▶ Es gilt  $\Theta = \mathbf{0}$  und damit  $\cos \Theta = 1$ , d.h. die Kondition des Problems wird ausschließlich durch  $\kappa_2(A)$  beschrieben.
- ▶ Man rechnet einfach nach, dass

$$\kappa_2(A) = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^T A)}{\lambda_{\min}(A^T A)}} = \frac{\sqrt{6 + \delta^2}}{\delta} \approx \frac{\sqrt{6}}{\delta}.$$

## Beispiel 4.12.

- Ein stabiles Verfahren sollte ein Resultat  $\tilde{x}$  liefern, mit

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \lesssim \kappa_2(A) \text{ eps.}$$

(Satz 4.7+4.9 mit  $\theta = 0$ )

- Die Lösung über die Normalgleichungen und das Cholesky-Verfahren auf einer Maschine mit  $\text{eps} \approx 10^{-16}$  ergibt jedoch:

$$\delta = 10^{-4} : \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2 \cdot 10^{-8} \approx \frac{1}{3} \kappa_2(A)^2 \text{ eps}$$

$$\delta = 10^{-6} : \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2 \cdot 10^{-4} \approx \frac{1}{3} \kappa_2(A)^2 \text{ eps}$$



# Lösung über QR-Zerlegung

Zur Erinnerung:

- ▶ Für  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ,  $m > n$ , mit  $\mathbf{Rang}(A) = n$ , folgt aus der QR-Zerlegung von  $A$ , dass  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  orthogonal ex. mit

$$Q A = R = \left( \begin{array}{c} \tilde{R} \\ \mathbf{0} \end{array} \right) \left. \begin{array}{l} \} n \\ \} m - n \end{array} \right\},$$

wobei die obere Dreiecksmatrix  $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$  regulär ist.

- ▶ Multiplikation mit (einer orthogonalen Matrix)  $Q$  verändert nicht die euklidische Länge eines Vektors, d.h.

$$\|x\|_2 = \|Qx\|_2 \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

- ▶ Das lineare Ausgleichsproblem: bestimme  $x^* \in \mathbb{R}^n$ , für dass

$$\|A x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A x - b\|_2$$

gilt.

# Beispiel 4.15.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 0 & 12 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix},$$

d.h.  $m = 3, n = 2$ .

Man bestimme die Lösung  $x^* \in \mathbb{R}^2$  des zugehörigen linearen Ausgleichsproblem über QR-Zerlegung mittels Givens-Rotation.

$$r = \sqrt{a^2 + b^2}, \quad c = \frac{a}{r}, \quad s = \frac{b}{r} \quad \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$

# Beispiel 4.15.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 0 & 12 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix},$$

d.h.  $m = 3, n = 2$ .

Man bestimme die Lösung  $x^* \in \mathbb{R}^2$  des zugehörigen linearen Ausgleichsproblem über QR-Zerlegung mittels Givens-Rotation.

Annullierung von  $a_{3,1}$ :  $r = \sqrt{3^2 + 4^2} = 5$

$$A^{(2)} \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 7 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{21}{5} + \frac{4}{5} \\ -\frac{28}{5} + \frac{3}{5} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 \\ -5 \end{pmatrix}$$

## Beispiel 4.15.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 0 & 12 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix},$$

d.h.  $m = 3, n = 2$ .

Man bestimme die Lösung  $x^* \in \mathbb{R}^2$  des zugehörigen linearen Ausgleichsproblem über QR-Zerlegung mittels Givens-Rotation.

Annullierung von  $a_{3,1}$ :

$$A^{(2)} = G_{1,3} A = \begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 12 \\ 0 & -5 \end{pmatrix}, \quad b^{(2)} = G_{1,3} b = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

**Zur Erinnerung:** die Transformationen  $G_{1,3}A$  und  $G_{1,3}b$  werden in der Praxis ausgeführt, **ohne** dass  $G_{1,3}$  explizit berechnet wird.

## Beispiel 4.15.

Annullierung von  $a_{3,2}^{(2)}$ :

$$A^{(3)} = G_{2,3} A^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 13 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad b^{(3)} = G_{2,3} b^{(2)} = \begin{pmatrix} 10 \\ \frac{37}{13} \\ -\frac{55}{13} \end{pmatrix}$$

Lösung von

$$\begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ \frac{37}{13} \end{pmatrix}$$

durch Rückwärtseinsetzen liefert

$$x^* = \left( \frac{301}{169}, \frac{37}{169} \right)^T.$$

Als Norm des Residiums ergibt sich:

$$\|b_2\|_2 = \frac{55}{13}.$$

# Lösung über QR-Zerlegung — Stabilität

## Beachte

- ▶ Wegen Satz 3.41. gilt

$$\kappa_2(A) = \kappa_2(\tilde{R}),$$

d.h. das **Quadrieren der Kondition**, das bei den Normalgleichungen auftritt, wird **vermieden**.

- ▶ Die **Berechnung der QR-Zerlegung** über Givens- oder Householder-Transformationen ist ein **sehr stabiles Verfahren**, wobei die Fehlerverstärkung durch  $\kappa_2(A)$  (und nicht  $\kappa_2(A)^2$ ) beschrieben wird.

## Beispiel 4.16.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ \delta \\ \delta \end{pmatrix}, \quad 0 < \delta \ll 1.$$

Bestimmen Sie die Lösung des linearen Ausgleichsproblems über die *QR*-Zerlegung und diskutieren Sie das Ergebnis.

Auf einer Maschine mit  $\text{eps} \approx 10^{-16}$  erhält man

$$\delta = 10^{-4} : \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2.2 \cdot 10^{-16},$$

$$\delta = 10^{-6} : \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 1.6 \cdot 10^{-16}.$$

Wegen der sehr guten Stabilität dieser Methode sind die Resultate viel besser als in Beispiel 4.12.

# Zusammenfassung

	Normalgleichungen	QR-Zerlegung
Rechenaufwand $(m \gg n)$	ca. $\frac{1}{2}mn^2$	ca. $mn^2$ (Householder)
Stabilität	instabil, wenn $\kappa_2(A) \gg 1$  stabil, wenn $\kappa_2(A)$ moderat	stabil

# Zusammenfassung

- ▶ Aufgabe:

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 \Leftrightarrow A^T A x = A^T b$$

- ▶ Eindeutige Lösung  $\Leftrightarrow \text{Rang}(A) = n$
- ▶ Kondition (nur Störung in  $b$ ):

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \leq \frac{\kappa_2(A)}{\cos \Theta} \cdot \frac{\|\tilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2}$$

- ▶ Lösungsverfahren:
  - ▶ über Normalgleichungen  $A^T A x = A^T b$   
(Cholesky-Verfahren)
  - ▶ über  $QR$ -Zerlegung (Householder, Givens)

# Verständnisfragen

Es seien  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ , mit  $\text{Rang}(A) = n < m$ , und  $b \in \mathbb{R}^m$ .  
 Weiter seien  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  eine orthogonale Matrix und  $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$   
 eine obere Dreiecksmatrix so, dass  $QA = (\tilde{R}^T, 0)^T$  gilt. Weiter  
 seien  $x^* \in \mathbb{R}^n$  die eindeutige Minimalstelle des  
 Minimierungsproblems  $\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$  und  
 $\Theta \in [0, \frac{\pi}{2})$  der Winkel zwischen  $Ax^*$  und  $b$ .

**w** Es gilt  $\det \tilde{R} \neq 0$ .

**f** Es gilt  $\tilde{R}x^* = Qb$ .

**w** Es gilt  $\kappa_2(A) = \kappa_2(\tilde{R})$ .

Es seien  $A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$ ,  $b = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}$ .

Bestimmen Sie  $\Theta$ .

# Verständnisfragen

Es seien  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  mit  $\text{Rang}(A) = n < m$ ,  $b \in \mathbb{R}^m$ ,  $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$  eine orthogonale Matrix und  $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$  eine obere Dreiecksmatrix so, dass  $QA = R$  gilt. Weiterhin seien  $x^* \in \mathbb{R}^n$  die eindeutige Minimalstelle des Minimierungsproblems  $\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$  sowie  $\Theta \in [0, \frac{\pi}{2})$  der Winkel zwischen  $Ax^*$  und  $b$ .

- f** Je kleiner der Winkel  $\Theta$ , desto schlechter ist das Problem konditioniert.
- w** Es gilt  $\|Ax - b\|_2 = \|Rx - Qb\|_2$  für beliebiges  $x \in \mathbb{R}^n$ .
- f** Die Matrix  $R$  kann man über Gauß-Elimination mit Spaltenpivotisierung bestimmen.
- w** Es gilt  $Ax^* - b \perp \text{Bild}(A)$ .