

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

$$A = Q R,$$

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.

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

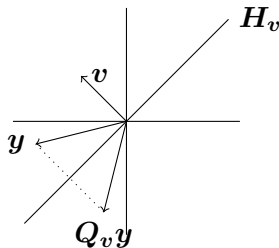
- Die obige (Rotations-)Matrix ist **orthogonal**.

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

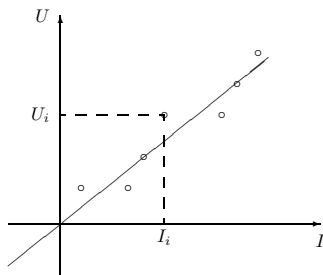
$$A = \begin{pmatrix} a_{1,1} & \cdots & a_{1,n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m,1} & \cdots & a_{m,n} \end{pmatrix}$$

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

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

- ▶ 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

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

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

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

$\Rightarrow$ führt auf lineares Optimierungsproblem

Auch möglich:

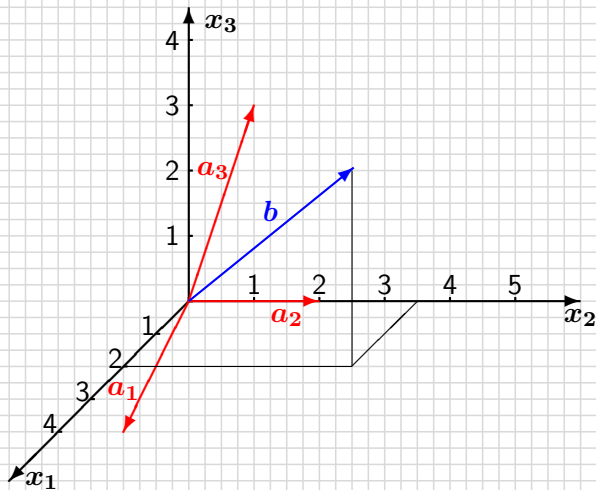
$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_1 \text{ oder } \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_\infty$$

Geometrische Interpretation $Ax = b$

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

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

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

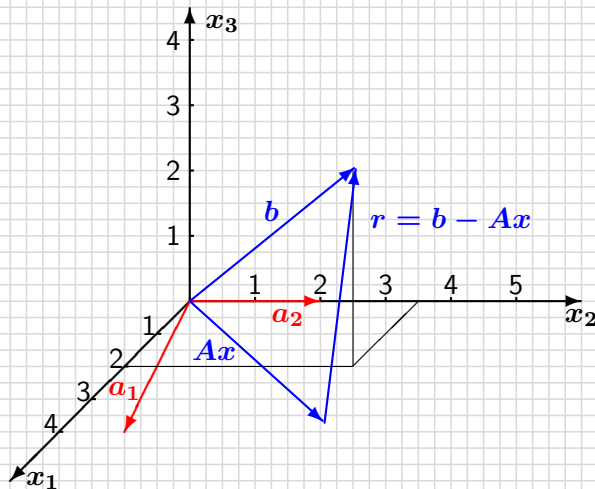


Geometrische Interpretation $\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$



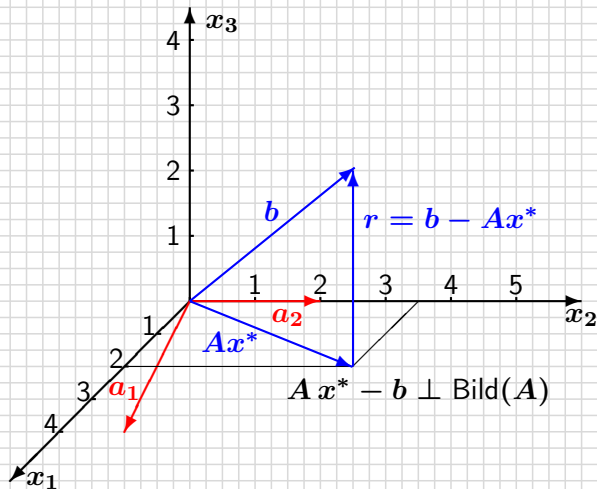
Geometrische Interpretation $\min_{x \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1.5 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \|r\|_2 = 3$$



Beispiel 4.3.

Man vermutet, dass die Messdaten

t	0	1	2	3
y	3	2.14	1.86	1.72

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.

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: $\text{Rang}(A) = n$ (Fall $\text{Rang}(A) < n$, 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.

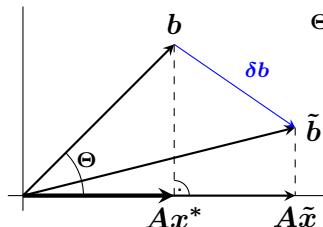
$x^* \in \mathbb{R}^n$ ist genau dann Lösung des linearen Ausgleichsproblems, wenn x^* Lösung der Normalgleichungen

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

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

Kondition des linearen Ausgleichsproblems

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



Θ : Winkel zwischen b und Ax^*

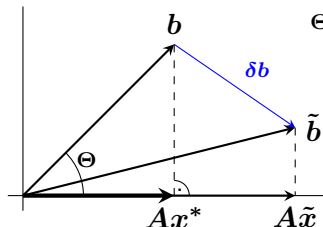
Satz 4.7.

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 $\kappa_2(A) := \max_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} / \min_{x \neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}$.



Θ : 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

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

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

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

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.

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

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

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.

- ▶ Das lineare Ausgleichsproblem hat die Lösung $x^* = (1, 1)^T$ (für alle $\delta > 0$).
- ▶ Es gilt $\Theta = 0$ 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 $\text{Rang}(A) = n$, folgt aus der QR-Zerlegung von A , dass $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ orthogonal ex. mit

$$Q A = R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} \\ \} \end{matrix} \begin{matrix} n \\ m - n \end{matrix},$$

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.

Lösung über QR-Zerlegung

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}
 \|A x^* - b\|_2 &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A x - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Q(Ax - b)\|_2 \\
 &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Q A x - Q b\|_2 \\
 &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|R x - Q b\|_2,
 \end{aligned}$$

mit $R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} n \\ \} m - n \end{matrix}$, $Q b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} n \\ \} m - n \end{matrix}$, erhält man

$$\begin{aligned}
 \|A x^* - b\|_2^2 &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\
 &= \min_{x \in \mathbb{R}^n} \left(\|\tilde{R} x - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2 \right) \\
 &= \|b_2\|_2^2 \text{ für } \tilde{R} x = b_1
 \end{aligned}$$

Lösung über QR-Zerlegung

Satz 4.13.

Seien $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $\text{Rang}(A) = n$ und $b \in \mathbb{R}^m$.

Sei $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine orthogonale Matrix und

$\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix, so dass

$$Q A = R := \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} n \\ \} m - n \end{matrix}.$$

Dann ist die Matrix $\tilde{R}$ regulär. Schreibt man

$$Q b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \} n \\ \} m - n \end{matrix},$$

dann ist $x^* = \tilde{R}^{-1} b_1$ die Lösung des linearen Ausgleichsproblems.

Die Norm $\|A x^* - b\|_2$ ist gerade durch $\|b_2\|_2$ gegeben.

Lösung über QR-Zerlegung

Aus Satz 4.13. ergibt sich nun folgende Methode:

- ▶ Bestimme die QR -Zerlegung von A

$$QA = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \quad (\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}),$$

z.B. mittels Givens-Rotationen oder Householder-Spiegelungen und berechne

$$Qb = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}.$$

- ▶ Löse $\tilde{R}x = b_1$ mittels Rückwärtseinsetzen.
- ▶ Die Norm des Residuums $\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2 = \|Ax^* - b\|_2$ ist gerade durch $\|b_2\|_2$ gegeben.

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 $(m \gg n)$	$\text{ca. } \frac{1}{2}mn^2$	$\text{ca. } mn^2$ (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 $Q A = (\tilde{R}^T, 0)^T$ gilt. Weiter seien $x^* \in \mathbb{R}^n$ die eindeutige Minimalstelle des Minimierungsproblems $\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A x - b\|_2$ und $\Theta \in [0, \frac{\pi}{2})$ der Winkel zwischen $A x^*$ und b .

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

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

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 Θ .

0

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 $Q A = R$ gilt. Weiterhin seien $x^* \in \mathbb{R}^n$ die eindeutige Minimalstelle des Minimierungsproblems $\arg \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A x - b\|_2$ sowie $\Theta \in [0, \frac{\pi}{2})$ der Winkel zwischen $A x^*$ und b .

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