8. Großübung

Lineare Ausgleichsrechnung

1. Problem:

Viele Gleichungen und zu wenig Freiheitsgrade (Variablen)

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n},\ b \in \mathbb{R}^m,\ m \text{ (Gleichungen)} > n \text{ (Freiheitsgrade)}$$

2. Idee:

Minimiere den unvermeidbaren Fehler, d.h. 'Fehler in den m Zeilen gegeneinander ausgleichen'. Gesucht wird x^* mit:

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

2.1. Hinweis:

Auch vermeintlich nichtlineare Probleme können nach zusammenfassen linear sein: z.B. Ellipse in Normallage

$$0 = \underbrace{\frac{1}{a^2}}_{=x_1} \underbrace{y_1^2}_{=\phi_1} + \underbrace{\frac{1}{b^2}}_{=x_2} \underbrace{y_2^2}_{=\phi_2} - \underbrace{1}_{=c}$$

3. Lösung des linearen Ausgleichsproblems durch Normalgleichungen:

3.1. Geometrische Interpretation:

$$\left\| \begin{pmatrix} * & * \\ * & * \\ * & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} * \\ * \\ * \end{pmatrix} \right\|_2$$

Damit der Abstand $\|Ax^* - b\|_2$ minimal ist, muss $b - Ax^*$ senkrecht auf dem $Bild(A) = \{Ax | x \in \mathbb{R}^n\}$ stehen.

3.2. Herleitung Normalgleichungen:

$$\begin{aligned}
&Ax - b \perp Bild(A) \\
\Leftrightarrow & w^T(Ax - b) = 0, && \forall w \in Bild(A) \\
\Leftrightarrow & (Ay)^T(Ax - b) = 0, && \forall y \in \mathbb{R}^n \\
\Leftrightarrow & y^T(A^TAx - A^Tb) = 0, && \forall y \in \mathbb{R}^n \\
\Leftrightarrow & A^TAx - A^Tb = 0 \\
\Rightarrow & \|Ax - b\|_2 \rightarrow \min_{x \in \mathbb{R}^n} \Leftrightarrow A^TAx = A^Tb
\end{aligned}$$

3.2.1. Bemerkung:

Es ex. genau dann eine eindeutige Lösung, wenn A vollen Rang hat.

3.2.2. Bemerkung:

Prinzipiell könnte man auch $\|Ax - b\| \rightarrow min$ für irgendeine andere Norm $\| \cdot \|$ betrachten. Die euklidische Norm ist jedoch über ein Skalarprodukt definiert ($\|x\|_2 =< x, x >^{\frac{1}{2}}$), wodurch sich das Ausgleichsproblems besonders leicht lösen lässt.

3.3. Lösungsweg:

1. $A^TA = M = LDL^T$

   Bemerkung: A^TA ist spd, da:
   $(A^TA)^T = A^TA$
   $z^TA^TAz = (Az)^TAz > 0 \forall z \in \mathbb{R}^n$, $z \neq 0$, A hat vollen Rang
2. $Ly = A^Tb \Rightarrow y$
3. $L^Tx = D^{-1}y \Rightarrow x$

3.4. Kondition von A^TA:

$$\kappa_2(A^TA) = \kappa_2(A)^2,$$

Daraus folgt, dass die Kondition von A quadriert wird und somit schlechter ist als die Kondition des Ausgangsproblems.

3.4.1. Beweis $(m = n)$:

$$
\begin{aligned}
\kappa_2(A) &= \sqrt{\frac{\lambda_{max}(A^TA)}{\lambda_{min}(A^TA)}} \\
M &:= A^TA = M^T \\
Mx &= \lambda x \Rightarrow M^TMx = M^2x = \lambda Mx = \lambda^2 x \\
&\Rightarrow \lambda(M^TM) = \lambda(M)^2 \\
\kappa_2(A^TA) = \kappa_2(M) &= \sqrt{\frac{\lambda_{max}(M^TM)}{\lambda_{min}(M^TM)}}\sqrt{\frac{\lambda_{max}(M^2)}{\lambda_{min}(M^2)}} \\
&= \frac{\lambda_{max}(M)}{\lambda_{min}(M)} = \frac{\lambda_{max}(A^TA)}{\lambda_{min}(A^TA)} = \kappa_2(A)^2
\end{aligned}
$$

3.5. Rechenaufwand Normalgleichungen:

- $A^TA : \frac{1}{2}mn^2 \leftarrow$ überwiegt f"r $m >> n$
- $A^Tb : m \cdot n$
- Cholesky von $A^TA : \frac{1}{6}n^3$
- Vorwärts-/Rückwärtseinsetzen: n^2

4. Beispiel:

$$y(t) = \alpha cos(t) + \beta sin(t) \qquad\qquad \text{Modell}$$

Messwerte

t	0	$\frac{\pi}{2}$	π	$\frac{3}{2}\pi$
y	0.25	0.8	-0.1	-0.75

Matrix aufstellen:

$$a_{i,j} := f_j(t_i) = \begin{pmatrix} cos(t_i) & sin(t_i) \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow A = \begin{pmatrix} cos(0) & sin(0) \\ cos(\frac{\pi}{2}) & sin(\frac{\pi}{2}) \\ cos(\pi) & sin(\pi) \\ cos(\frac{3}{2}\pi) & sin(\frac{3}{2}\pi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

$$\stackrel{b_i := y_i}{\Rightarrow} b = \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.8 \\ -0.1 \\ -0.75 \end{pmatrix}$$

Dies führt zum linearen Ausgleichsproblem:

$$\left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.8 \\ -0.1 \\ -0.75 \end{pmatrix} \right\|_2 = \min_{x=(\alpha,\beta)^T \in \mathbb{R}^2} \left\| \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.8 \\ -0.1 \\ -0.75 \end{pmatrix} \right\|_2$$

$$\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x=(\alpha,\beta)^T \in \mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$$

4.1. Normalgleichungen:

$$A^T A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix}$$

$$A^T b = \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.8 \\ -0.1 \\ -0.75 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.35 \\ 1.55 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 2 & 0 & |0.35 \\ 0 & 2 & |1.55 \end{pmatrix} \underset{\text{Cholesky-Zerlegung}}{\Rightarrow} x^* = \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.175 \\ 0.775 \end{pmatrix}$$

Für die Klausur sollten α^*, β^* und x^* korrekt und vollständig angegeben werden.

$$\Rightarrow g(t) = 0.175cos(t) + 0.775sin(t)$$

4.1.1. Residuum:

$$\|Ax^* - b\|_2 = \| \begin{pmatrix} 1 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0.175 \\ 0.775 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0.25 \\ 0.8 \\ -0.1 \\ -0.75 \end{pmatrix} \|_2 = \| \begin{pmatrix} -0.075 \\ -0.025 \\ -0.075 \\ -0.025 \end{pmatrix} \|_2 = 0.118 \neq 0$$

5. Lösung des linearen Ausgleichsproblems durch QR-Zerlegung:

$$\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$
$$\|Ax - b\|_2^2 = \|QAx - Qb\|_2^2 = \|Rx - Qb\|_2^2 = \|\tilde{R}x - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2$$

$$\|Ax - b\|_2^2 \to min \Rightarrow \|\tilde{R}x - b_1\|_2^2 \to min \Rightarrow \tilde{R}x = b_1$$

5.1. Notation:

$$A|b \underset{\text{orth.Trafo}}{\rightsquigarrow} \begin{array}{c|c} \tilde{R} & b_1 \\ \hline 0 & b_2 \end{array}$$

$\|b_2\|_2$ ergibt das Residuum, d.h. $\|Ax^* - b\|_2 = \|b_2\|_2$

5.2. Kondition:

$$\kappa_2(QA) = \kappa_2(A),$$

besser als bei $A^T A$ (Normalgleichungen)

5.3. Rechenaufwand:

- QR-Zerlegung mittels Househoulder: mn^2 $(m >> n)$
- Qb Berechnung : $2mn$ Operationen
- Rückwärtseinsetzen: $\frac{1}{2}n^2$ Operationen

Daraus folgt der Aufwand ist etwa doppelt so hoch wie bei Normalgleichungen.

6. Fortsetzung Beispiel mittels QR-Zerlegung:

QR-Zerlegung von (A | b)

1.Schritt:

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & |0.25 \\ 0 & 1 & |0.8 \\ -1 & 0 & |-0.1 \\ 0 & -1 & |-0.75 \end{pmatrix}$$

$$a = 1, b = -1, r = \sqrt{a^2 + b^2} = 1.414$$
$$c = \frac{a}{r} = 0.7071, s = \frac{b}{r} = -0.7071$$

$$G_{1,3} = \begin{pmatrix} c & 0 & s & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

2.Schritt:

$$\begin{pmatrix} 1.414 & 0 & |0.2475 \\ 0 & 1 & |0.8 \\ 0 & 0 & |0.1061 \\ 0 & -1 & |-0.75 \end{pmatrix}$$

$$a = 1, b = -1, r = \sqrt{a^2 + b^2} = 1.414$$
$$c = \frac{a}{r} = 0.7071, s = \frac{b}{r} = -0.7071$$

$$G_{2,4} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & s \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -s & 0 & c \end{pmatrix}$$

Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} 1.414 & 0 & |0.2475 \\ 0 & 1.414 & |1.096 \\ 0 & 0 & |0.1061 \\ 0 & 0 & |0.03536 \end{pmatrix}$$

$$\alpha = 0.175, \beta = 0.775 \rightarrow x^* = \begin{pmatrix} \alpha^* \\ \beta^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.175 \\ 0.775 \end{pmatrix}$$

$\Rightarrow g(t) = 0.175 cos(t) + 0.775 sin(t)$

$\Rightarrow$Residuum: $\|Ax^* - b\|_2 = \sqrt{0.1061^2 + 0.03536^2} = 0.1118 \neq 0$

7. Kondition des linearen Ausgleichsproblems

Zur Kondition des linearen Ausgleichsproblems siehe Folien 4.11 und 4.9

Singulärwertzerlegung:

Lösung des linearen Ausgleichsproblems über Normalgleichungen:

$$A^T A x = A^T b \Leftrightarrow x = \underbrace{(A^T A)^{-1} A^T}_{A^+:\ Pseudoinverse}\ b$$

Problem: $(A^T A)^{-1}$ nicht invertierbar falls $Rang(A) < n$
Lösung: Erweiterung auf beliebige $m \times n$-Matrizen:

8. Eigenschaften der Singulärwertzerlegung:

8.0.1. Folie 4.30:

$$\begin{aligned} & U^T A V = \Sigma && U, V: \text{ orth. Matrizen} \\ \Leftrightarrow & U U^T A V V^T = U \Sigma V^T \\ \Leftrightarrow & A = U \Sigma V^T \end{aligned}$$

8.0.2. Folie 4.31:

$$\begin{aligned} & A^{-1} = (U\Sigma V^T)^{-1} = V^{-T}\Sigma^{-1}U^{-1} = V\Sigma^+ U^T && (A \in \mathbb{R}^{n\times n} \text{ reg.}) \\ & A^+ = V\Sigma^+ U^T && \text{sonst.} \end{aligned}$$

8.0.3. Folie 4.29:

1. Norm des Fehlers $\|Ax^* - b\|_2$ minimal
2. Norm der Lösung $\|x^*\|_2$ minimal

8.0.4. Folie 4.32:

1. $Rang(A) = r \Leftrightarrow \sigma_{r+1} = ... = \sigma_p = 0,\ p = min(m, n)$
2. σ_i berechnet sich aus den Eigenwerten von $A^T A$

9. Beispiel:

$$A = \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{4} \\ -\frac{3}{4} & \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{4} \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ -\frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} = U\Sigma V^T, \qquad b = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$x^* = A^+ b = V\Sigma^+ U^T b$$

$$x^* = \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}}_{V} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{1}{5} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}}_{\Sigma^+} \underbrace{\begin{pmatrix} \frac{\sqrt{3}}{4} & -\frac{3}{4} & \frac{1}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ -\frac{1}{4} & \frac{\sqrt{3}}{4} & \frac{\sqrt{3}}{2} \end{pmatrix}}_{U^T} \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix}$$

$$= -0.10143$$

$$L(b) = x^* + span\begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix} = \{x^* + t \cdot \begin{pmatrix} -\frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{2}{\sqrt{5}} \end{pmatrix}\},\ t \in \mathbb{R}$$