Veranstaltung Titel

Vortragender

Assistenten

Institut XXX

Wintersemester/Sommersemester xyz

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 4.1-4.3.2, 4.4.1

- Lineare Ausgleichsprobleme: Beispiele, Problemstellung
- Intermezzo: Orthogonale Projektion auf einen Teilraum
- Kondition
- Numerisches Verfahren: Lösung der Normalgleichungen

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 4.1-4.3.2, 4.4.1

- Lineare Ausgleichsprobleme: Beispiele, Problemstellung
- Intermezzo: Orthogonale Projektion auf einen Teilraum
- Kondition
- Numerisches Verfahren: Lösung der Normalgleichungen

Was Sie mitnehmen sollten:

- Wie sieht die Problemstellung aus?
- Wichtige Eigenschaften einer Best-Approximation-Aufgabe.
- Wie sehen die Normalgleichungen aus?
- Wodurch wird die Kondition bestimmt?
- Ein Lösungverfahren.

Problemstellung

Bisher: Lineare Gleichungssysteme

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$
- Annahme: $\mathbf{det}\boldsymbol{A} \neq \mathbf{0}$
  $\Rightarrow$ Spalten von $\boldsymbol{A}$ bilden eine Basis in $\mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$
  $\Rightarrow$ $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ eindeutig lösbar.

Problemstellung

Bisher: Lineare Gleichungssysteme

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$
- Annahme: $\det \boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{0}$
  $\Rightarrow$ Spalten von $\boldsymbol{A}$ bilden eine Basis in $\mathbb{R}^{n}$
  $\Rightarrow$ $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ eindeutig lösbar.

Jetzt: Lineare Ausgleichsrechnung

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$, $\boldsymbol{m} > \boldsymbol{n}$ (später auch $\boldsymbol{m} < \boldsymbol{n}$)
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$

Problemstellung

Bisher: Lineare Gleichungssysteme

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$
- Annahme: $\det \boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{0}$
  $\Rightarrow$ Spalten von $\boldsymbol{A}$ bilden eine Basis in $\mathbb{R}^{n}$
  $\Rightarrow$ $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$ eindeutig lösbar.

Jetzt: Lineare Ausgleichsrechnung

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$, $\boldsymbol{m} > \boldsymbol{n}$ (später auch $\boldsymbol{m} < \boldsymbol{n}$)
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}$
  $\Rightarrow$ im Allgemeinen nicht lösbar! , d.h. für jedes $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$:
  $\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \neq \boldsymbol{b}$

Problemstellung

Bisher: Lineare Gleichungssysteme

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$
- Annahme: $\det \boldsymbol{A} \neq \boldsymbol{0}$
  $\Rightarrow$ Spalten von $\boldsymbol{A}$ bilden eine Basis in $\mathbb{R}^{n}$
  $\Rightarrow$ $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ eindeutig lösbar.

Jetzt: Lineare Ausgleichsrechnung

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$, $\boldsymbol{m} > \boldsymbol{n}$ (später auch $\boldsymbol{m} < \boldsymbol{n}$)
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$
  $\Rightarrow$ im Allgemeinen nicht lösbar! , d.h. für jedes $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$:
  $\boldsymbol{Ax} \neq \boldsymbol{b}$
- Lösung: Bestimme $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{n}$, so dass

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

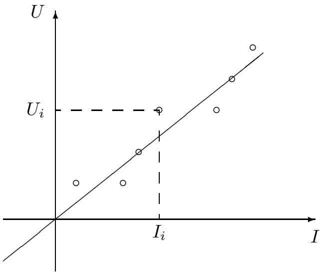
Bestimmung des elektrischen Widerstands (Beispiel 4.1)

- Ohmsches Gesetz: $\boldsymbol{U = I\,R}$
- Aufgabe: Bestimme Widerstand $\boldsymbol{R}$ im Stromkreis aus einer Reihe von Messungen:

$$\boldsymbol{(U_i, I_i)}\ \text{ (Spannung, Stromstärke)}, \ \boldsymbol{i = 1, \ldots, m}.$$

- Problem: Messungen (Daten) sind mit Fehlern behaftet, d.h.

$$\boldsymbol{U_i \neq I_i R}, \ \text{ für fast alle } \boldsymbol{i = 1, \ldots, m}.$$



Beispiel 4.1

Vorgehen:

- Fehler in Messung i (Residuum)

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

Beispiel 4.1

Vorgehen:

- Fehler in Messung i (Residuum)

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

- Ein Maß für den Gesamtfehler: Summe der Fehlerquadrate

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

Beispiel 4.1

Vorgehen:

- Fehler in Messung i (Residuum)

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

- Ein Maß für den Gesamtfehler: Summe der Fehlerquadrate

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

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

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

Beispiel 4.1

Vorgehen:

- Fehler in Messung i (Residuum)
$$r_i = I_i R - U_i, \quad i = 1, \dots, m$$
- Ein Maß für den Gesamtfehler: Summe der Fehlerquadrate
$$f(R) := \sum_{i=1}^{m} r_i^2 = \sum_{i=1}^{m} (I_i R - U_i)^2$$
- Bestimme Widerstand R^* so, dass Gesamtfehler minimal wird
$$R^* = \arg\min_R f(R)$$
- Extremum der quadratischen Funktion $f(R)$
$$f'(R^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad R^* = \left(\sum_{i=1}^{m} U_i \, I_i \right) \Big/ \left(\sum_{i=1}^{m} I_i^2 \right)$$

Lineares Ausgleichsproblem

Allgemeine Problemstellung

Modellansatz: $y(t; x_1, \dots, x_n)$ mit Parametern $x_1, \dots, x_n$.
(Meß-)Daten: $b_i \approx y(t_i; x_1, \dots, x_n)$, $i = 1, \dots, m$.
Annahme: Modell ist linear in den Parametern:

$$y(t_i; x_1, \dots, x_n) = a_{i,1}x_1 + \dots + a_{i,n}x_n, \quad i = 1, \dots, m.$$

Gauß-Fehlerquadratkriterium: man bestimme Parameter $x_1, \dots, x_n$, die

$$\sum_{i=1}^{m} (y(t_i; x_1, \dots, x_n) - b_i)^2$$

minimieren.

Lineares Ausgleichsproblem: Matrixformulierung

Aufgabe:

$$\min_{\boldsymbol{x}} \sum_{i=1}^{m} (a_{i,1}x_1 + \ldots + a_{i,n}x_n - b_i)^2.$$

Setzt man

$$A = (a_{i,j})_{i,j=1}^{m,n} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m,$$

nimmt das Minimierungsproblem die äquivalente kompakte Form

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

Lineares Ausgleichsproblem: Matrixformulierung

Aufgabe:

$$\min_{x} \sum_{i=1}^{m} (a_{i,1}x_1 + \ldots + a_{i,n}x_n - b_i)^2.$$

Setzt man

$$A = (a_{i,j})_{i,j=1}^{m,n} \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m,$$

nimmt das Minimierungsproblem die äquivalente kompakte Form

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

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

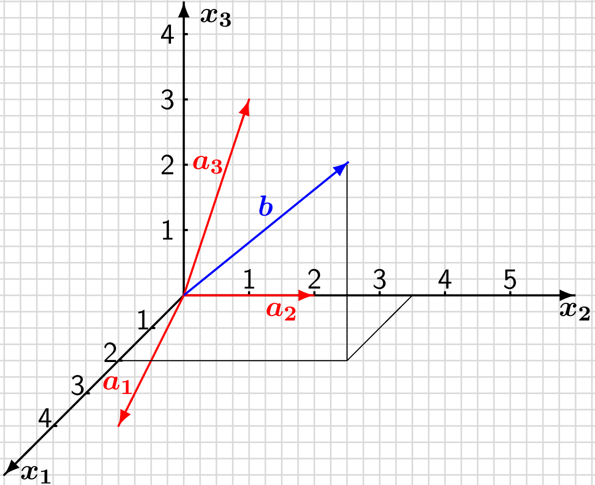
$$\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2.$$

Geometrische Interpretation $\boldsymbol{Ax = b}$

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

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

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

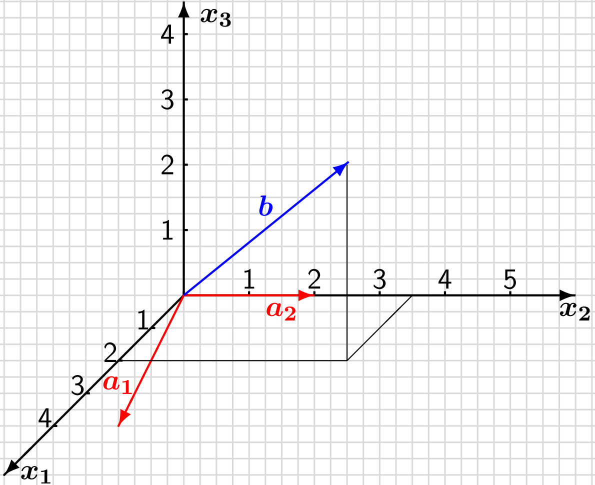


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$

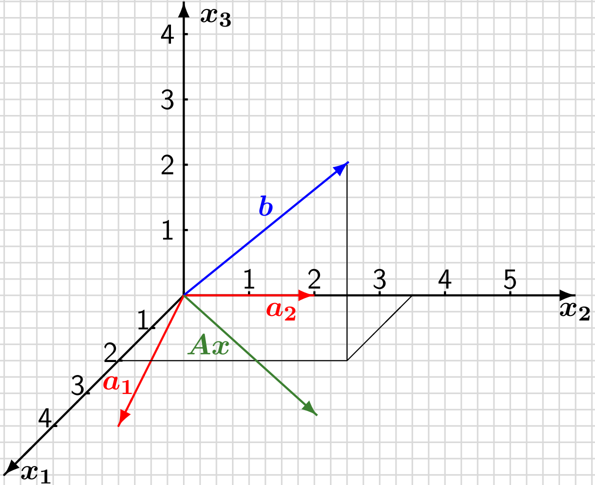


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$

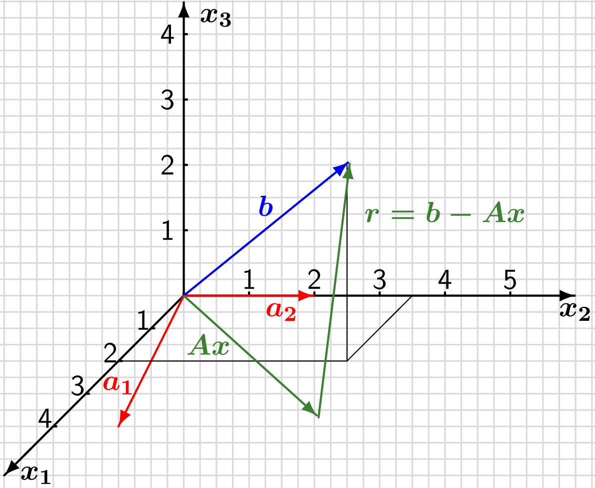


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$



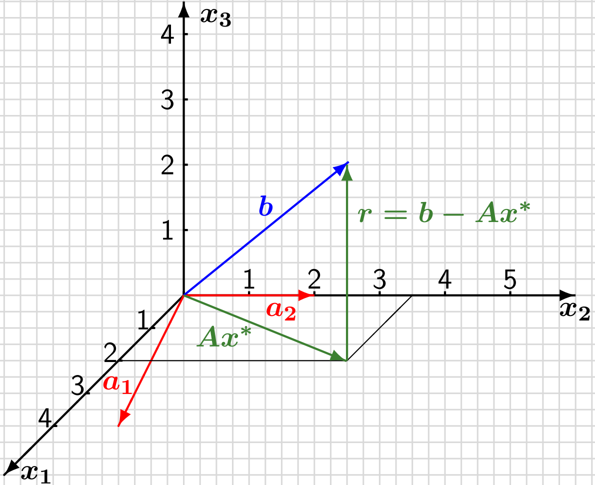
Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax-b\|_2$

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

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

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

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



Lineares Ausgleichsproblem: Fallunterscheidung

Falls $\mathbf{Rang}(A) \neq n$: keine eindeutige Lösung. Deshalb Fallunterscheidung.

Gewöhnliches lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.3)

Zu gegebenem $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, mit $\mathbf{Rang}(A) = n$, und $b \in \mathbb{R}^n$ bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass

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

Lineares Ausgleichsproblem: Fallunterscheidung

Falls $\mathbf{Rang}(A) \neq n$: keine eindeutige Lösung. Deshalb Fallunterscheidung.

Gewöhnliches lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.3)

Zu gegebenem $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, mit $\mathbf{Rang}(A) = n$, und $b \in \mathbb{R}^n$ bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass

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

Allgemeines lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.4)

Zu gegebenem $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^n$ bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$ mit minimaler Euklidischer Norm, so dass

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

Beispiel 4.5

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.

Beispiel 4.5

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 4.5

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 $\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \|A\,x - b\|_2$,

wobei

x

Beispiel 4.5

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 $\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \|A\,x - b\|_2$, wobei

$$x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad A$$

Beispiel 4.5

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 $\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^2} \|A\,x - b\|_2$,

wobei

$$x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} \frac{1}{1+0} & 1 \\ \frac{1}{1+1} & 1 \\ \frac{1}{1+2} & 1 \\ \frac{1}{1+3} & 1 \end{pmatrix}$$

Beispiel 4.5

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 $\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \|A\,x - b\|_2$,

wobei

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

Beispiel 4.5

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 $\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \|A\,x - b\|_2$,

wobei

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

Best-Approximation-Aufgabe

Lineares Ausgleichsproblem:
Bestimme dasjenige $\boldsymbol{y}^*$ in
$\boldsymbol{U} = \mathrm{Bild}(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} \mid \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m$, so dass

$$\|\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{b}\|_2 = \min_{\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{U}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|_2 .$$

Best-Approximation-Aufgabe

Lineares Ausgleichsproblem:
Bestimme dasjenige y^* in
$U = \text{Bild}(A) = \{Ax \mid x \in \mathbb{R}^n\} \subset \mathbb{R}^m$, so dass

$$\|y^* - b\|_2 = \min_{y \in U} \|y - b\|_2 \,.$$

Beispiel einer Best-Approximation-Aufgabe.
Sei V ein Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$,
Norm $\|v\| := \langle v, v \rangle^{\frac{1}{2}}$.

Best-Approximation-Aufgabe 4.8

Es sei $U \subset V$ ein n-dimensionaler Teilraum von V. Zu $v \in V$ bestimme $u^* \in U$, so dass

$$\|u^* - v\| = \min_{u \in U} \|u - v\| \,.$$

Best-Approximation-Aufgabe

Satz 4.11

Es existiert ein eindeutiges $\boldsymbol{u}^* \in \boldsymbol{U}$, das

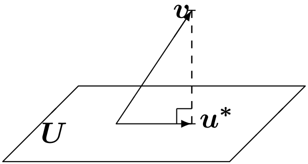
$$\|\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{v}\| = \min_{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U}} \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\| \qquad (1)$$

erfüllt. Ferner gilt (1) genau dann, wenn

$$\langle \boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{v}, \boldsymbol{u} \rangle = \boldsymbol{0} \quad \forall \boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U},$$

d.h., $\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{v}$ senkrecht (bzgl. $\langle \cdot, \cdot \rangle$) zu $\boldsymbol{U}$ ist. Das Element $\boldsymbol{u}^*$ ist somit die orthogonale Projektion (bzgl. $\langle \cdot, \cdot \rangle$) von $\boldsymbol{v}$ auf $\boldsymbol{U}$.

Orthogonale Projektion



Definition 4.12

Es seien V ein Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle\cdot,\cdot\rangle$ und dadurch induzierter Norm $\|\cdot\| = \langle\cdot,\cdot\rangle^{1/2}$ und U ein endlichdimensionaler Unterraum von V. Zu $v \in V$ existiert ein eindeutiges $P_U(v) \in U$, so dass $v - P_U(v) \perp U$, d.h.,

$$\langle v - P_U(v), u\rangle = 0 \quad \forall \ u \in U.$$

Die Abbildung $P_U : V \to U$ ist die orthogonale Projektion (auf U).

Orthogonale Projektion

Eigenschaften der orthogonalen Projektion

- Die Abbildung $P_U : V \to U$ ist linear.
- P_U ist ein Projektor, d.h. $P_U(u) = u$ für alle $u \in U$ ($P_U^2 = P_U$).
- Die Abbildung P_U ist symmetrisch, d.h.,

$$\langle P_U(v), w\rangle = \langle v, P_U(w)\rangle, \quad \forall \ v, w \in V.$$

- P_U ist beschränkt und zwar gilt

$$\|P_U\| = \sup_{\|v\|=1} \|P_U(v)\| = 1.$$

Bestimmung von $P_U(v)$

Es seien $\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$ eine Basis für U und $P_U(v) = \sum_{j=1}^{n} c_j \phi_j$.

Wir definieren

$$c = (c_1, \ldots, c_n)^T, \quad \hat{v} = (\langle v, \phi_1 \rangle, \ldots, \langle v, \phi_n \rangle)^T,$$
$$G := \big(\langle \phi_k, \phi_j \rangle\big)_{j,k=1}^{n} \quad \text{(Gram-Matrix).}$$

Die Matrix G ist symmetrisch positiv definit.

Bestimmung von $P_U(v)$

Es seien $\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$ eine Basis für U und $P_U(v) = \sum_{j=1}^n c_j \phi_j$.

Wir definieren

$$c = (c_1, \ldots, c_n)^T, \quad \hat{v} = (\langle v, \phi_1 \rangle, \ldots, \langle v, \phi_n \rangle)^T,$$
$$G := \big(\langle \phi_k, \phi_j \rangle\big)_{j,k=1}^n \quad \text{(Gram-Matrix).}$$

Die Matrix G ist symmetrisch positiv definit.

Es gilt: $Gc = \hat{v}$.

Die Berechnung einer orthogonalen Projektion läuft also im Allgemeinen auf die Lösung eines Gleichungssystems mit einer symmetrisch positiv definiten Matrix hinaus.

Bestimmung von $P_U(v)$

Wichtiger Spezialfall:
$\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$ eine Orthonormalbasis für U:

$$\langle \phi_i, \phi_j \rangle = \delta_{ij}, \quad i, j = 1, \ldots, n.$$

Es gilt $G = I$.

Folgerung 4.13

Für jedes $v \in V$ löst

$$P_U(v) := \sum_{j=1}^{n} \langle v, \phi_j \rangle \phi_j$$

die Best-Approximation-Aufgabe 4.8.

Beispiel 4.14: Fourier-Best-Approximation

$V := C([0, 2\pi])$ und $\langle f, g \rangle := \int_0^{2\pi} f(t)g(t)\, dt$.

Die trigonometrischen Funktionen

$\cos(kt),\ k = 0, \ldots, N,\ \sin(\ell t),\ \ell = 1, \ldots, N,$

bilden ein Orthogonalsystem bezüglich dieses Skalarprodukts.

U: der von diesen $2N + 1$ Funktionen aufgespannte Raum.

Beispiel 4.14: Fourier-Best-Approximation

$V := C([0, 2\pi])$ und $\langle f, g\rangle := \int_0^{2\pi} f(t)g(t)\,dt$.

Die trigonometrischen Funktionen

$\cos(kt),\ k = 0, \ldots, N,\ \ \sin(\ell t),\ \ell = 1, \ldots, N,$

bilden ein Orthogonalsystem bezüglich dieses Skalarprodukts.

U: der von diesen $2N + 1$ Funktionen aufgespannte Raum.

Die Funktion $g_N(t) := \frac{1}{2}a_0 + \sum_{k=1}^{N} a_k \cos(kt) + b_k \sin(kt),$

$$a_k := \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(t)\cos(kt)\,dt, \quad b_k := \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} f(t)\sin(kt)\,dt,$$

löst die Aufgabe

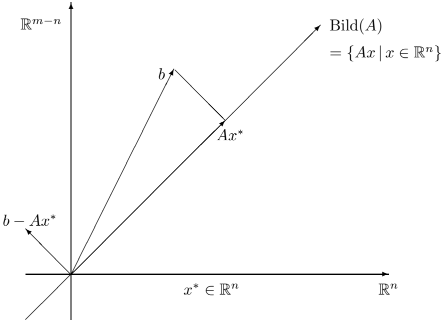
$$\|g_N - f\|_{L^2}^2 = \int_0^{2\pi} (g_N(t) - f(t))^2\ dt = \min_{g\in U} \|g - f\|_{L^2}^2.$$

Normalgleichungen

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

$$\boldsymbol{A^T A\, x = A^T\, b}$$

reduzieren, das häufig als Normalgleichungen bezeichnet wird.



Normalgleichungen

Annnahme: die Matrix $\boldsymbol{A}$ hat vollen Spaltenrang.

Satz 4.15

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

$$\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{b}$$

ist. Die Systemmatrix $\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{A}$ ist symmetrisch positiv definit.

Normalgleichungen

Annnahme: die Matrix $\boldsymbol{A}$ hat vollen Spaltenrang.

Satz 4.15

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

$$\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$$

ist. Die Systemmatrix $\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A}$ ist symmetrisch positiv definit.

Bemerkung 4.17

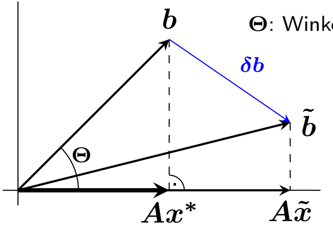
Die Abbildung $\boldsymbol{b} \mapsto \boldsymbol{x}^*$, $\boldsymbol{x}^* = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$, ist linear. Da im Falle $\boldsymbol{m} = \boldsymbol{n}$ gerade $(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}^{-1}$ gilt, kann man die Matrix $(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T$ als eine Verallgemeinerung der Inversen betrachten.

Kondition des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems

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

Kondition des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems

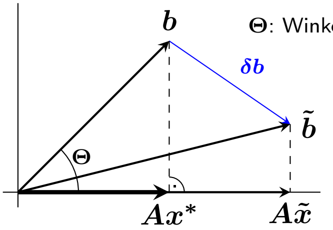
Für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ sei $\kappa_2(A) := \max_{x\neq 0} \frac{\|A\,x\|_2}{\|x\|_2} \Big/ \min_{x\neq 0} \frac{\|A\,x\|_2}{\|x\|_2}$.



Θ: Winkel zwischen b und Ax^*

Kondition des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems

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



Θ: Winkel zwischen b und Ax^*

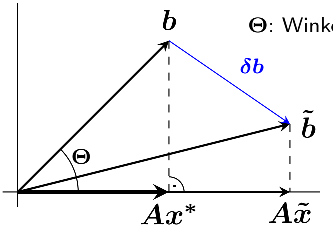
Satz 4.18

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 gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems

Für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ sei $\kappa_2(A) := \max\limits_{x\neq 0} \frac{\|A\,x\|_2}{\|x\|_2} \Big/ \min\limits_{x\neq 0} \frac{\|A\,x\|_2}{\|x\|_2}$.



Θ: Winkel zwischen b und Ax^*

Satz 4.20

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 4.19

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.

Beispiel 4.19

Gegeben seien

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

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

Die Lösung der Normalgleichungen liefert

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

sowie für die gestörte rechte Seite

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

Beispiel 4.19

Daraus folgt

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 100 \frac{\|\tilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2},$$

also eine schlechte Kondition des linearen Ausgleichsproblems.

Beispiel 4.19

Daraus folgt

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 100 \frac{\|\tilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2},$$

also eine schlechte Kondition des linearen Ausgleichsproblems.

Mit Hilfe von Satz 4.18 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

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.

Rechenaufwand: etwa $mn^2 + \frac{1}{3}n^3$ Flop.

Lösung über Normalgleichungen — Nachteile

- Die Berechnung von $A^T A$ ist für große m aufwendig (mn^2 Flop).

Lösung über Normalgleichungen — Nachteile

- Die Berechnung von $A^T A$ ist für große m aufwendig (mn^2 Flop).
- Rundungsfehler bei der Berechnung von $A^T A$ und $A^T b$ (im ersten Schritt des Verfahrens) können mit einem Faktor $\kappa_2(A^T A)$ verstärkt werden.

Lösung über Normalgleichungen — Nachteile

- Die Berechnung von $A^T A$ ist für große m aufwendig (mn^2 Flop).
- Rundungsfehler bei der Berechnung von $A^T A$ und $A^T b$ (im ersten Schritt des Verfahrens) können mit einem Faktor $\kappa_2(A^T A)$ verstärkt werden.
- Bei der Lösung des Systems $A^T A\,x = A^T\,b$ über das Cholesky-Verfahren werden die in der Durchführung entstehenden Rundungsfehler mit (höchstens)

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

verstärkt. Es gilt $\kappa_2(A^T A) = \kappa_2(A)^2$.

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

Beispiel 4.24

Gegeben seien

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

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

Beispiel 4.24

Gegeben seien

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

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 $\delta > 0$).

Beispiel 4.24

Gegeben seien

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

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.

Beispiel 4.24

Gegeben seien

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

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

$$\kappa_2(A) \approx \frac{\sqrt{6}}{\delta}.$$

Beispiel 4.24

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

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \lessapprox \kappa_2(A)\,\mathrm{eps}$$

Beispiel 4.24

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

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \lessapprox \kappa_2(A)\,\mathrm{eps}$$

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

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

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

Beispiel 4.24

- Ein stabiles Verfahren sollte ein Resultat $\tilde{x}$ liefern, mit
$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \lessapprox \kappa_2(A)\,\mathbf{eps}$$
- Die Lösung dieses Problems über die Normalgleichungen und das Cholesky-Verfahren auf einer Maschine mit $\mathbf{eps} \approx 10^{-16}$ ergibt jedoch:
$$\delta = 10^{-4}: \quad \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2 \cdot 10^{-8} \approx \frac{1}{3}\kappa_2(A)^2\,\mathbf{eps}$$
$$\delta = 10^{-6}: \quad \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2 \cdot 10^{-4} \approx \frac{1}{3}\kappa_2(A)^2\,\mathbf{eps}$$

Das Lösungsverfahren ist (in diesem Beispiel) nicht stabil.

Zusammenfassung

- Bei der Problemstellung macht man eine Fallunterscheidung: $\mathbf{Rang}(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{n}$ oder $\mathbf{Rang}(\boldsymbol{A}) \neq \boldsymbol{n}$.
- Beim Lösen einer Best-Approximation-Aufgabe ergibt sich ein lineares Gleichungssystem mit einer Gram-Matrix. Diese Matrix ist symmetrisch positiv definit. Im Falle einer orthogonalen Basis ist sie diagonal.
- Kondition: neben $\boldsymbol{\kappa_2(A)}$ spielt auch der Winkel zwischen $\boldsymbol{b}$ und Bild$(\boldsymbol{A})$ eine Rolle.
- Die Lösung eines linearen Ausgleichsproblems ist auch Lösung der Normalgleichungen $\boldsymbol{A^T A x = A^T b}$.
- Ein Lösungsverfahren: Löse die Normalgleichungen mit dem Cholesky-Verfahren