Kapitel 4

Buch Dahmen-Reusken

RWTH Aachen University

2022

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

Jetzt: Lineare Ausgleichsrechnung

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

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.

Jetzt: Lineare Ausgleichsrechnung

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

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

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

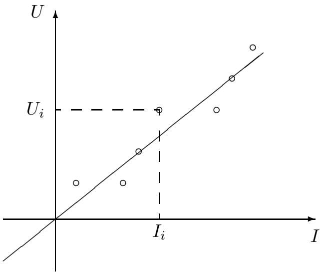
Bestimmung des elektrischen Widerstands (Beispiel 4.1)

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

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

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

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



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 $f(R)$

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

Allgemeiner: Polynomial Data-Fitting

Anstelle Ursprungsgerade, betrachte allgemeineren Fall ...

Gegeben:

- m Messungen an den Punkten $y_1, y_2, \ldots, y_m$ mit zugehörigen Daten $z_1, z_2, \ldots, z_m$
- Polynom $n-1$-ter Ordnung (wobei $n < m$)
$$f(y) = c_0 + c_1 y + \cdots + c_{n-1} y^{n-1}$$

Allgemeiner: Polynomial Data-Fitting

Anstelle Ursprungsgerade, betrachte allgemeineren Fall ...

Gegeben:

- m Messungen an den Punkten $y_1, y_2, \ldots, y_m$ mit zugehörigen Daten $z_1, z_2, \ldots, z_m$
- Polynom $n-1$-ter Ordnung (wobei $n < m$)
$$f(y) = c_0 + c_1 y + \cdots + c_{n-1} y^{n-1}$$

Summe der Fehlerquadrate

$$\sum_{i=1}^{m} (f(y_i) - z_i)^2$$

In Matrix-Vektor Notation

$$\|A\,x - b\|_2^2$$

mit ...

Polynomial Data-Fitting

mit

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 1 & y_1 & \cdots & y_1^{n-1} \\ 1 & y_2 & \cdots & y_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & y_m & \cdots & y_m^{n-1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{x} = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_m \end{pmatrix}$$

Polynomial Data-Fitting

mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & y_1 & \cdots & y_1^{n-1} \\ 1 & y_2 & \cdots & y_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & y_m & \cdots & y_m^{n-1} \end{pmatrix}, \quad x = \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_m \end{pmatrix}$$

Aufgabe

Bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass

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

oder (gleichbedeutend) gilt:

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

Lineares Ausgleichsproblem

Allgemeine Problemstellung

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

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

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

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

minimieren.

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: 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

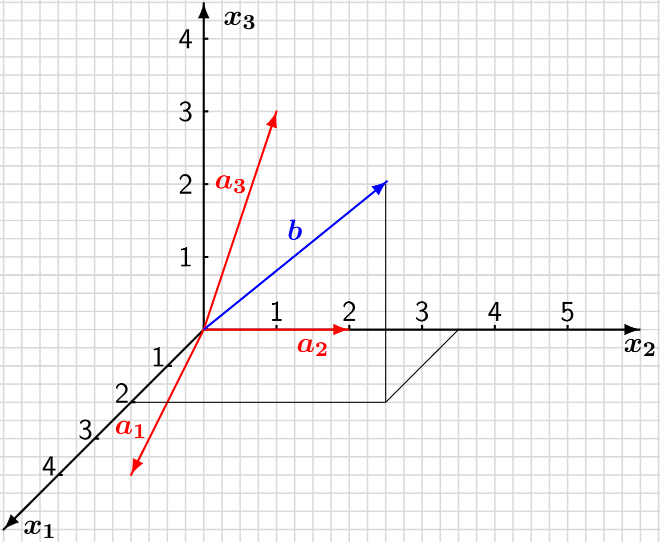
$$\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2.$$

Geometrische Interpretation $Ax = b$

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

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

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

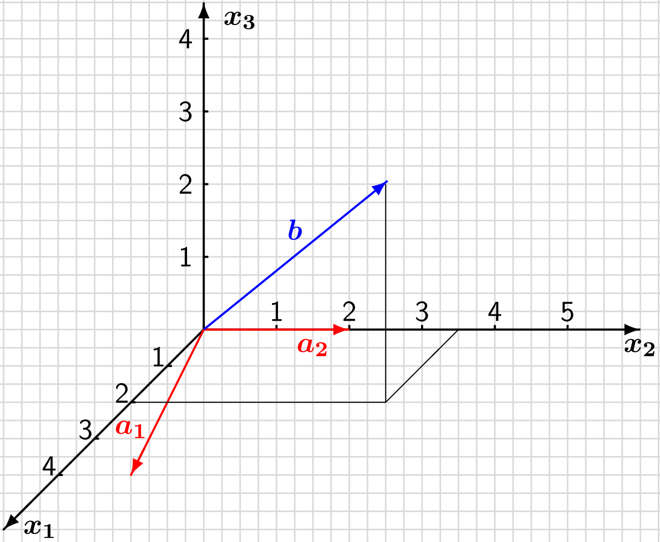


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax-b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$

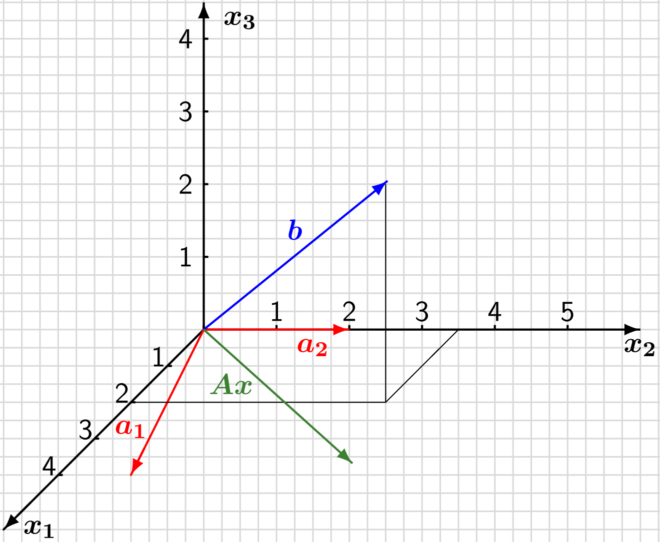


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$

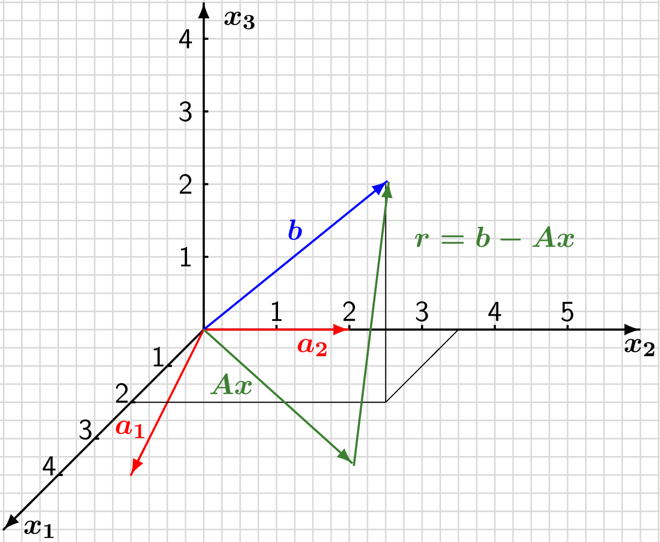


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

$$\Rightarrow x^* = ?$$



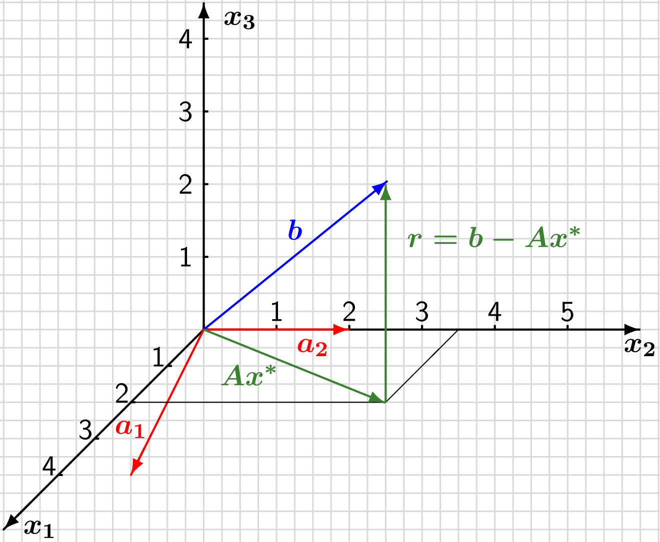
Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

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

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

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

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



Lineares Ausgleichsproblem: Fallunterscheidung

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

Gewöhnliches lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.3)

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

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

Lineares Ausgleichsproblem: Fallunterscheidung

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

Gewöhnliches lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.3)

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

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

Allgemeines lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.4)

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

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

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 $\boldsymbol{U} = \mathrm{Bild}(\boldsymbol{A}) = \{\boldsymbol{Ax} \mid \boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}\} \subset \mathbb{R}^{\boldsymbol{m}}$, so dass

$$\|\boldsymbol{y}^* - \boldsymbol{b}\|_{\boldsymbol{2}} = \min_{\boldsymbol{y} \in \boldsymbol{U}} \|\boldsymbol{y} - \boldsymbol{b}\|_{\boldsymbol{2}}\,.$$

Best-Approximation-Aufgabe

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

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

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

Best-Approximation-Aufgabe 4.8

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

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

Best-Approximation-Aufgabe

Satz 4.11

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

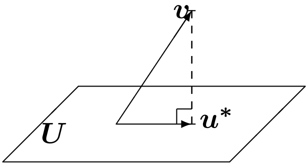
$$\|\boldsymbol{u}^* - \boldsymbol{v}\| = \min_{\boldsymbol{u} \in \boldsymbol{U}} \|\boldsymbol{u} - \boldsymbol{v}\| \qquad (1)$$

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

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

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

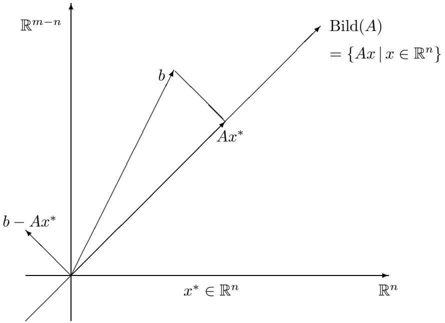
$$\|g_N - f\|_{L^2}^2 = \int_0^{2\pi} (g_N(t) - f(t))^2\ dt = \min_{g \in U} \|g - f\|_{L^2}^2.$$

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

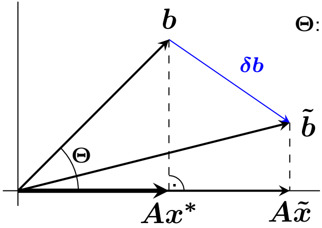
Die Abbildung $\boldsymbol{b} \mapsto \boldsymbol{x}^*$, $\boldsymbol{x}^* = (\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{b}$, ist linear. Da im Falle $\boldsymbol{m} = \boldsymbol{n}$ gerade $(\boldsymbol{A}^T\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^T = \boldsymbol{A}^{-1}$ gilt, kann 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

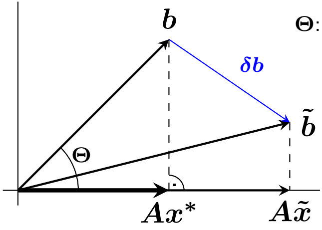
Für $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ sei $\boldsymbol{\kappa_2(A) := \max_{x \neq 0} \frac{\|A\,x\|_2}{\|x\|_2} \Big/ \min_{x \neq 0} \frac{\|A\,x\|_2}{\|x\|_2}}$.



$\boldsymbol{\Theta}$: Winkel zwischen $\boldsymbol{b}$ und $\boldsymbol{Ax^*}$

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^*

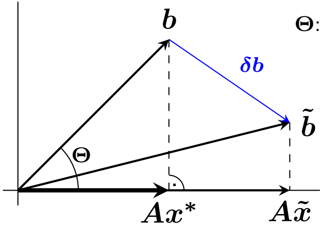
Satz 4.18

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



Θ: Winkel zwischen b und Ax^*

Satz 4.20

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

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

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

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.

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 4.19

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.

Lineare Regression: Statistischer Hintergrund

Es seien $(t_1, y_1), \ldots, (t_m, y_m)$ Daten, mit t_i feste (deterministische) Messpunkte und die y_i Realisierungen von Zufallsvariablen Y_i.
Die Lineare Regression basiert auf einem Ansatz der Form

$$Y_i = \sum_{k=1}^{n} a_k(t_i) x_k + F_i, \quad i = 1, \ldots, m,$$

wobei die $a_k(t)$ geeignete Ansatzfunktionen sind.
Modell- oder Messfehler werden durch die Zufallsvariablen F_i dargestellt.

Lineare Regression: Statistischer Hintergrund

Es seien $(t_1, y_1), \ldots, (t_m, y_m)$ Daten, mit t_i feste (deterministische) Messpunkte und die y_i Realisierungen von Zufallsvariablen Y_i.
Die Lineare Regression basiert auf einem Ansatz der Form

$$Y_i = \sum_{k=1}^{n} a_k(t_i)x_k + F_i, \quad i = 1, \ldots, m,$$

wobei die $a_k(t)$ geeignete Ansatzfunktionen sind.
Modell- oder Messfehler werden durch die Zufallsvariablen F_i dargestellt.

Die gegebenen Messdaten $y = (y_1, \ldots, y_m)^T$ sind Realisierungen von $Y = (Y_1, \ldots, Y_m)^T$.

Wir definieren die Zufallsvariable

$$\hat{x} = (A^T A)^{-1} A^T y.$$

$\hat{x}$ ist ein Schätzer für den unbekannten Parametersatz.

Lineare Regression: Statistischer Hintergrund

$\hat{\boldsymbol{x}}$ ist ein Schätzer für den unbekannten Parametersatz $\boldsymbol{x}$.
Annahme: $\boldsymbol{F_i}$ sind unabhängig, identisch verteilt mit Erwartungswert $\mathbb{E}(\boldsymbol{F_i}) = \mathbf{0}$ und Varianz-Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\sigma^2 I}$.

Lineare Regression: Statistischer Hintergrund

$\hat{\boldsymbol{x}}$ ist ein Schätzer für den unbekannten Parametersatz $\boldsymbol{x}$.
Annahme: $\boldsymbol{F_i}$ sind unabhängig, identisch verteilt mit Erwartungswert $\mathbb{E}(\boldsymbol{F_i}) = \boldsymbol{0}$ und Varianz-Kovarianzmatrix $\boldsymbol{\sigma^2 I}$.

- $\hat{\boldsymbol{x}}$ ist der "Best Linear Unbiased Estimator" (BLUE). Es gilt:
  - $\hat{\boldsymbol{x}}$ ist linear in $\boldsymbol{y}$.
  - $\hat{\boldsymbol{x}}$ ist erwartungstreu: $\mathbb{E}(\hat{\boldsymbol{x}}) = \boldsymbol{x}$.
  - $\hat{\boldsymbol{x}}$ hat minimale Varianz.

Lineare Regression: Statistischer Hintergrund

$\hat{x}$ ist ein Schätzer für den unbekannten Parametersatz x.
Annahme: F_i sind unabhängig, identisch verteilt mit Erwartungswert $\mathbb{E}(F_i) = 0$ und Varianz-Kovarianzmatrix $\sigma^2 I$.

- $\hat{x}$ ist der "Best Linear Unbiased Estimator" (BLUE). Es gilt:
  - $\hat{x}$ ist linear in y.
  - $\hat{x}$ ist erwartungstreu: $\mathbb{E}(\hat{x}) = x$.
  - $\hat{x}$ hat minimale Varianz.
- $\hat{x}$ ist der "Maximum-Likelihood-Schätzer" (MLS).
  Weitere Annahme: F_i sind normalverteilt.
  Für die Messreihe $y_1, \ldots, y_m$ ist die Likelihood-Funktion:

$$L(x; y_1, \ldots, y_m) := \left(\frac{1}{2\pi\sigma^2}\right)^{\frac{m}{2}} e^{-\frac{1}{2\sigma^2}\|y - Ax\|_2^2}.$$

  Das Maximum dieser Funktion wird an der Stelle $\hat{x}$ angenommen.

Lösung über Normalgleichungen

Da die Matrix $\boldsymbol{A^T A}$ symmetrisch positiv definit ist, ergibt sich folgende Methode:

Lösung über Normalgleichungen

- Berechne $\boldsymbol{A^T A}$, $\boldsymbol{A^T b}$.
- Berechne die Cholesky-Zerlegung von $\boldsymbol{A^T A}$

$$\boldsymbol{LDL^T = A^T A}$$

- Löse

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

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

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

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

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 $\boldsymbol{x}^* = (1, 1)^T$ (für alle $\boldsymbol{\delta} > 0$).

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

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

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.
- 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 $\tilde{\boldsymbol{x}}$ liefern, mit

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

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

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

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

Das Lösungsverfahren ist (in diesem Beispiel) nicht stabil.

Lösung über QR-Zerlegung

Zur Erinnerung:

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

$$\boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{R}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \}\ \ n \\ \}\ \ m-n \end{array},$$

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

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

$$Q\,A = R = \begin{pmatrix} \widetilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \} \;\; n \\ \} \;\; m-n \end{array},$$

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

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

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

Lösung über QR-Zerlegung

Zur Erinnerung:

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

$$\boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R} = \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{R}} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \} \;\; n \\ \} \;\; m-n \end{array},$$

  wobei die obere Dreiecksmatrix $\widetilde{\boldsymbol{R}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär ist.
- Multiplikation mit (einer orthogonalen Matrix) $\boldsymbol{Q}$ verändert nicht die euklidische Länge eines Vektors, d.h.

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

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

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

Lösung über QR-Zerlegung

Daraus folgt:

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

Lösung über QR-Zerlegung

Daraus folgt:

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

Lösung über QR-Zerlegung

Daraus folgt:

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

Lösung über QR-Zerlegung

Daraus folgt:

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

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

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

$$\|A\,x^* - b\|_2^2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} \widetilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2$$

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

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

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

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

Lösung über QR-Zerlegung

Satz 4.25

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

Sei $\boldsymbol{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$ eine orthogonale Matrix und $\widetilde{\boldsymbol{R}} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix, so dass

$$\boldsymbol{Q}\,\boldsymbol{A} = \boldsymbol{R} := \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{R}} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \begin{array}{l} \}\boldsymbol{n} \\ \}\boldsymbol{m}-\boldsymbol{n} \end{array}.$$

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

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

dann ist $\boldsymbol{x}^* = \widetilde{\boldsymbol{R}}^{-1}\,\boldsymbol{b_1}$ die Lösung des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems. Es gilt $\|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}\|_2 = \|\boldsymbol{b_2}\|_2$.

Lösung über QR-Zerlegung

Aus Satz 4.25 ergibt sich nun folgende Methode:

- Bestimme die $\boldsymbol{QR}$-Zerlegung von $\boldsymbol{A}$

$$\boldsymbol{QA} = \begin{pmatrix} \widetilde{\boldsymbol{R}} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \qquad (\widetilde{\boldsymbol{R}} \in \mathbb{R}^{n \times n}),$$

  z.B. mittels Givens- oder Householder-Transformationen und berechne

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

- Löse $\widetilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b_1}$ mittels Rückwärtseinsetzen.

Lösung über QR-Zerlegung

Aus Satz 4.25 ergibt sich nun folgende Methode:

- Bestimme die QR-Zerlegung von A

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

  z.B. mittels Givens- oder Householder-Transformationen und berechne

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

- Löse $\widetilde{R}x = b_1$ mittels Rückwärtseinsetzen.

Rechenaufwand (für Householder und $m \gg n$): etwa $2mn^2$ Flop.

Beispiel 4.26

Gegeben seien

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

d.h. $\boldsymbol{m = 3, n = 2.}$

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

Beispiel 4.26

Gegeben seien

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

d.h. $\boldsymbol{m = 3, n = 2.}$

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

Annullierung von $\boldsymbol{a_{3,1}}$:

$$\boldsymbol{A}^{(\mathbf{2})}$$

Beispiel 4.26

Gegeben seien

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

d.h. $\boldsymbol{m = 3, n = 2.}$

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

Annullierung von $\boldsymbol{a_{3,1}}$:

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

Beispiel 4.26

Gegeben seien

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

d.h. $\boldsymbol{m = 3, n = 2}$.
Man bestimme die Lösung $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{\mathbf{2}}$ des zugehörigen linearen Ausgleichsproblem über QR-Zerlegung mittels Givens-Rotation.

Annullierung von $\boldsymbol{a_{3,1}}$:

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

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

Beispiel 4.26

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

$$\boldsymbol{A^{(3)}}$$

Beispiel 4.26

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

$$A^{(3)} = G_{2,3} A^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 13 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \widetilde{R} \\ 0 \end{pmatrix}, \; b^{(3)}$$

Beispiel 4.26

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

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

Beispiel 4.26

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

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

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

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

Beispiel 4.26

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

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

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:

Beispiel 4.26

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

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

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 3.57 gilt

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

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

Lösung über QR-Zerlegung — Stabilität

Beachte

- Wegen Satz 3.57 gilt
$$\boldsymbol{\kappa_2(A) = \kappa_2(\widetilde{R})},$$
d.h. das Quadrieren der Kondition, das bei den Normalgleichungen auftritt, wird vermieden.
- Die Berechnung der $\boldsymbol{QR}$-Zerlegung über Givens- oder Householder-Transformationen ist ein sehr stabiles Verfahren, wobei die Fehlerverstärkung durch $\boldsymbol{\kappa_2(A)}$ (und nicht $\boldsymbol{\kappa_2(A)^2}$) beschrieben wird.

Beispiel 4.28

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 $\boldsymbol{QR}$-Zerlegung und diskutieren Sie das Ergebnis.

Beispiel 4.28

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 QR-Zerlegung und diskutieren Sie das Ergebnis.

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

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

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

Beispiel 4.28

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 QR-Zerlegung und diskutieren Sie das Ergebnis.

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

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

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

Das Lösungsverfahren ist sehr stabil (vgl. Beispiel 4.24).

Zusammenfassung

	Normalgleichungen	QR-Zerlegung
Rechenaufwand $(m \gg n)$		
Stabilität		

Zusammenfassung

	Normalgleichungen	QR-Zerlegung
Rechenaufwand $(m \gg n)$	ca. mn^2	
Stabilität		

Zusammenfassung

	Normalgleichungen	QR-Zerlegung
Rechenaufwand ($m \gg n$)	ca. mn^2	ca. $2mn^2$ (Householder)
Stabilität		

Zusammenfassung

	Normalgleichungen	QR-Zerlegung
Rechenaufwand ($m \gg n$)	ca. mn^2	ca. $2mn^2$ (Householder)
Stabilität	instabil, wenn	

Zusammenfassung

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

Zusammenfassung

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

Zusammenfassung

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

Zusammenfassung

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

Singulärwertzerlegung

Satz 4.29

Zu jeder Matrix $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{n}}$ existieren orthogonale Matrizen $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{m}\times\boldsymbol{m}}$, $\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}\times\boldsymbol{n}}$ und eine Diagonalmatrix

$$\boldsymbol{\Sigma := \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad p = \min(m, n),}$$

mit

$$\boldsymbol{\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_p \geq 0,}$$

so dass

$$\boldsymbol{U^T A V = \Sigma.}$$

Singulärwertzerlegung

Satz 4.29

Zu jeder Matrix $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ existieren orthogonale Matrizen $\boldsymbol{U} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\boldsymbol{V} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine Diagonalmatrix

$$\boldsymbol{\Sigma} := \mathbf{diag}(\boldsymbol{\sigma}_1, \ldots, \boldsymbol{\sigma}_p) \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad \boldsymbol{p} = \mathbf{min}(\boldsymbol{m}, \boldsymbol{n}),$$

mit

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \geq \boldsymbol{\sigma}_2 \geq \cdots \geq \boldsymbol{\sigma}_p \geq \mathbf{0},$$

so dass

$$\boldsymbol{U}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{V} = \boldsymbol{\Sigma}.$$

- Singulärwerte von $\boldsymbol{A}$: $\boldsymbol{\sigma}_i, \ \boldsymbol{i} = \mathbf{1}, \ldots, \boldsymbol{p}$
- Linkssingulärvektoren : Spalten von $\boldsymbol{U} = [\boldsymbol{u}_1 \, \boldsymbol{u}_2 \cdots \boldsymbol{u}_m]$
- Rechtssingulärvektoren: Spalten von $\boldsymbol{V} = [\boldsymbol{v}_1 \, \boldsymbol{v}_2 \cdots \boldsymbol{v}_n]$

Pseudoinverse

Wir definieren $A^\dagger \in \mathbb{R}^{n\times m}$ durch

$$A^\dagger := V\Sigma^\dagger U^T \quad \text{mit} \quad \Sigma^\dagger = \mathrm{diag}(\sigma_1^{-1},\ldots,\sigma_r^{-1},0,\ldots,0) \in \mathbb{R}^{n\times m}$$

Diese Pseudoinverse ist eindeutig definiert.

Pseudoinverse

Wir definieren $A^\dagger \in \mathbb{R}^{n\times m}$ durch

$$A^\dagger := V\Sigma^\dagger U^T \quad \text{mit} \quad \Sigma^\dagger = \mathrm{diag}(\sigma_1^{-1}, \ldots, \sigma_r^{-1}, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{n\times m}$$

Diese Pseudoinverse ist eindeutig definiert.

Verallgemeinerung der Konditionszahl:

$$\kappa_2^*(A) := \|A\|_2 \|A^\dagger\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_r}$$

Eigenschaften: Lemma 4.30

Es sei $U^T A V = \Sigma$ eine Singulärwertzerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_p = 0$, $p = \min\{m, n\}$. Dann gilt:

(i) $A v_i = \sigma_i u_i, \quad A^T u_i = \sigma_i v_i, \quad i = 1, \ldots, p$.

(ii) $\mathrm{Rang}(A) = r$.

Eigenschaften: Lemma 4.30

Es sei $U^T AV = \Sigma$ eine Singulärwertzerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_p = 0$, $p = \min\{m, n\}$. Dann gilt:

(i) $Av_i = \sigma_i u_i, \quad A^T u_i = \sigma_i v_i, \quad i = 1, \ldots, p$.

(ii) $\text{Rang}(A) = r$.

(iii) $\text{Bild}(A) = \text{Span}\{u_1, \ldots, u_r\}, \quad \text{Kern}(A) = \text{Span}\{v_{r+1}, \ldots, v_n\}$.

(iv) $\|A\|_2 = \sigma_1$.

(v) Falls $\text{Rang}(A) = n \leq m$, so gilt

$$\kappa_2^*(A) = \kappa_2(A) = \frac{\max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2}{\min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2}$$

Eigenschaften: Lemma 4.30

Es sei $U^T AV = \Sigma$ eine Singulärwertzerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_p = 0$, $p = \min\{m, n\}$. Dann gilt:

(i) $Av_i = \sigma_i u_i, \quad A^T u_i = \sigma_i v_i, \quad i = 1, \ldots, p$.

(ii) $\mathrm{Rang}(A) = r$.

(iii) $\mathrm{Bild}(A) = \mathrm{Span}\{u_1, \ldots, u_r\}, \quad \mathrm{Kern}(A) = \mathrm{Span}\{v_{r+1}, \ldots, v_n\}$.

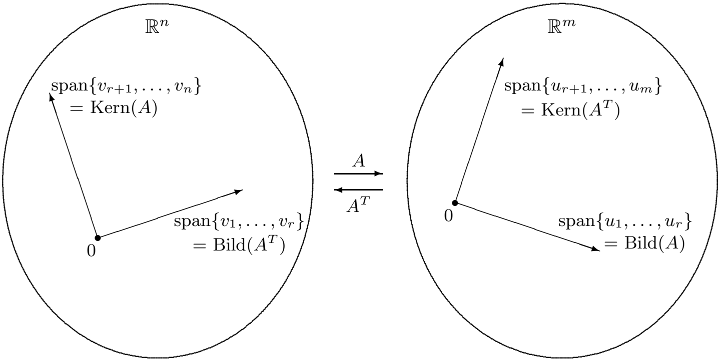
(iv) $\|A\|_2 = \sigma_1$.

(v) Falls $\mathrm{Rang}(A) = n \leq m$, so gilt

$$\kappa_2^*(A) = \kappa_2(A) = \frac{\max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2}{\min_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2}$$

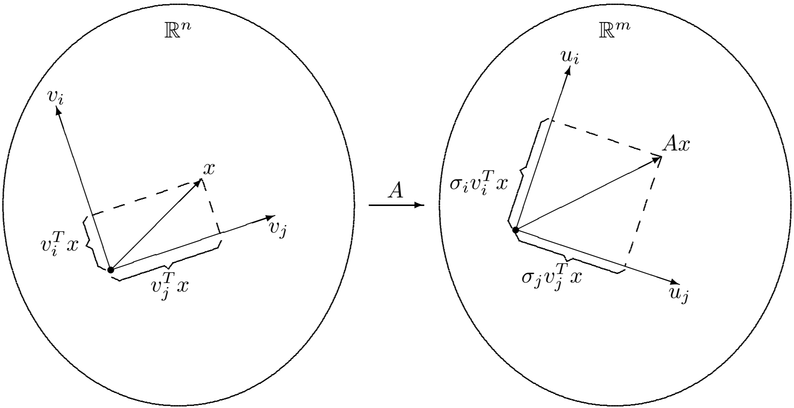
(vi) Die strikt positiven Singulärwerte sind gerade die Wurzeln der strikt positiven Eigenwerte von $A^T A$:

Singulärwertzerlegung – Geometrische Interpretation



Orthogonale Basis in $\mathbb{R}^n$ und in $\mathbb{R}^m$.

Singulärwertzerlegung – Geometrische Interpretation



Berechnung von Singulärwerten

Lemma 4.32

Es sei $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Es seien $\boldsymbol{Q_1} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\boldsymbol{Q_2} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonale Matrizen. Dann haben $\boldsymbol{A}$ und $\boldsymbol{Q_1 A Q_2}$ die gleichen Singulärwerte.

Berechnung von Singulärwerten

Lemma 4.32

Es sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Es seien $Q_1 \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $Q_2 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ orthogonale Matrizen. Dann haben A und $Q_1 A Q_2$ die gleichen Singulärwerte.

Transformation auf Bidiagonalgestalt. Beispiel einer 5×4-Matrix. Wir verwenden Householdertransformationen.

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} * & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & v_1^T \\ \emptyset & * \end{pmatrix}$$

Transformation auf Bidiagonalgestalt

Es sei $\tilde{Q}_1 \in \mathbb{R}^{3\times 3}$ eine Householder-Transformation, so dass

$$\tilde{Q}_1 v_1 = \begin{pmatrix} * \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \text{also} \quad v_1^T \tilde{Q}_1^T = v_1^T \tilde{Q}_1 = (\, * \;\; 0 \;\; 0).$$

Mit der orthogonalen Matrix $\hat{Q}_1 := \begin{pmatrix} 1 & \emptyset \\ \emptyset & \tilde{Q}_1 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{4\times 4}$ erhält man

$$Q_1 A \hat{Q}_1 = \begin{pmatrix} * & v_1^T \\ \emptyset & * \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & \emptyset \\ \emptyset & \tilde{Q}_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \\ 0 & * & * & * \end{pmatrix}.$$

Transformation auf Bidiagonalgestalt

Mit geeigneten Householder-Transformationen können auf ähnliche Weise Nulleinträge in der 2. Spalte, 2. Zeile, 3. Spalte und 4. Spalte erzeugt werden:

$$Q_2Q_1A\hat{Q}_1 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix} \rightsquigarrow Q_2Q_1A\hat{Q}_1\hat{Q}_2 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & * & * \end{pmatrix}$$

$$\rightsquigarrow Q_3Q_2Q_1A\hat{Q}_1\hat{Q}_2 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & * \end{pmatrix}$$

$$\rightsquigarrow Q_4Q_3Q_2Q_1A\hat{Q}_1\hat{Q}_2 = \begin{pmatrix} * & * & 0 & 0 \\ 0 & * & * & 0 \\ 0 & 0 & * & * \\ 0 & 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Transformation auf Bidiagonalgestalt

Mit dieser Technik kann man eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ auf Bidiagonalgestalt transformieren. Für $m \geq n$ ergibt sich

$$Q_{m-1} \dots Q_1 A \hat{Q}_1 \dots \hat{Q}_{n-2} = B = \begin{pmatrix} * & * & & \emptyset & \\ & * & * & & \\ & & * & \ddots & \\ & & & \ddots & * \\ & \emptyset & & & * \\ & & & & \emptyset \end{pmatrix}$$

Die Matrix B hat obere Bidiagonalgestalt.

Transformation auf Bidiagonalgestalt

Mit dieser Technik kann man eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ auf Bidiagonalgestalt transformieren. Für $m \geq n$ ergibt sich

$$Q_{m-1} \ldots Q_1 A \hat{Q}_1 \ldots \hat{Q}_{n-2} = B = \begin{pmatrix} * & * & & \emptyset & \\ & * & * & & \\ & & * & \ddots & \\ & & & \ddots & * \\ & \emptyset & & & * \\ & & & & \emptyset \end{pmatrix}$$

Die Matrix B hat obere Bidiagonalgestalt.

- A und B haben die gleichen Singulärwerte.
- Die Singulärwerte von B sind die Wurzeln der Eigenwerte der symmetrischen Tridiagonalmatrix $B^T B$.
- Eigenwerte einer symmetrischen Tridiagonalmatrix können sehr effizient berechnet werden.

Matrixzerlegungen

Zerlegungen einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$

Zerlegung	Annahmen	Methoden	Aufwand (Flop)
LR	$m = n$,(regulär)	Gauss-Elim.	$\frac{2}{3}n^3$
Cholesky	$m = n$, s.p.d.	Cholesky	$\frac{1}{3}n^3$
Eigenvektor	$m = n$, symm.	QR-Alg.	$\mathcal{O}(n^3)$ (iterativ)
Schur	$m = n$	QR-Alg.	$\mathcal{O}(n^3)$ (iterativ)
QR	–	HH, Givens	$2mn^2$, $3mn^2$ $(m \gg n)$
SVD	–	QR-Alg.	$\mathcal{O}(n^3)$ (iterativ)

Eigenvektorzerlegung, Schur-Zerlegung: Kapitel 7.

Allgemeines lineares Ausgleichsproblem

Allgemeines lineares Ausgleichsproblem (Aufgabe 4.4)

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

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

Allgemeines lineares Ausgleichsproblem

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

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

Sei $U := \text{Bild}(A)$. Betrachte die Aufgabe

Gesucht $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $Ax^* = P_U(b)$ und $x^* \perp \text{Kern}(A)$ (1)

Allgemeines lineares Ausgleichsproblem

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

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

Sei $U := \text{Bild}(A)$. Betrachte die Aufgabe

Gesucht $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass $Ax^* = P_U(b)$ und $x^* \perp \text{Kern}(A)$ (1)

Satz 4.35

Aufgabe 4.4 ist äquivalent zur Aufgabe (1). Die eindeutige Lösung ist

$$x^* = \sum_{j=1}^{r} \sigma_j^{-1}(u_j^T b)v_j = A^\dagger b$$

Regularisierung

Wir betrachten das allgemeine lineare Ausgleichsproblem mit $\kappa_2^*(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r} \gg 1$.

Regularisierungsmethoden:
das ursprüngliche (sehr schlecht konditionierte) Problem durch ein approximatives, aber besser konditioniertes Problem ersetzt.

Regularisierung

Wir betrachten das allgemeine lineare Ausgleichsproblem mit $\kappa_2^*(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_r} \gg 1$.

Regularisierungsmethoden:
das ursprüngliche (sehr schlecht konditionierte) Problem durch ein approximatives, aber besser konditioniertes Problem ersetzt.

Filterfunktion:

$$g_\alpha(z) := \begin{cases} 0 & \text{for } \; z \in [0, \alpha] \\ 1 & \text{for } \; z \in (\alpha, \infty). \end{cases}$$

Hierbei ist $\alpha > 0$ ein noch zu wählender Regularisierungsparameter.

Abgebrochenene Singulärwertzerlegung (TSVD)

$$\tilde{x}_\alpha = R_\alpha \tilde{b} := \sum_{j=1}^{r} g_\alpha(\sigma_j)\sigma_j^{-1}(u_j^T \tilde{b})v_j$$

Beispiel 4.43: ein Entfaltungsproblem

Vereinfachtes eindimensionales Problem: gesucht $g : [0,1] \to \mathbb{R}$, so dass

$$\int_0^1 e^{-(t-z)^2} g(z)\, dz = b(t) \quad \text{für alle} \quad t \in [0,1].$$

Beispiel 4.43: ein Entfaltungsproblem

Vereinfachtes eindimensionales Problem: gesucht $g : [0,1] \to \mathbb{R}$, so dass

$$\int_0^1 e^{-(t-z)^2} g(z)\,dz = b(t) \quad \text{für alle} \quad t \in [0,1].$$

Diskretisierung des Integrals: $z_j = \left(j - \frac{1}{2}\right)h,\ j = 1, \ldots, n,\ h = \frac{1}{n}$,

$$h \sum_{j=1}^{n} e^{-(t-z_j)^2} g_j = b(t) \quad t \in [0,1],$$

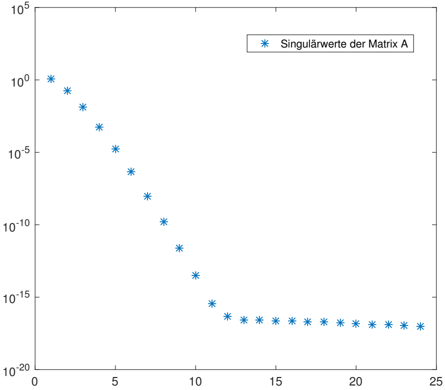
mit $g_j \approx g(z_j) =: x_j, j = 1, \ldots n$.
Gitter $t_i = (i-1)\tilde{h}$, $i = 1, \ldots, m$, $\tilde{h} = \frac{1}{m-1}$, mit $m > n$.

Lineares Ausgleichsproblem

$$\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2, \quad \text{mit } a_{i,j} := h\, e^{-(t_i - z_j)^2},\ 1 \le i \le m,\ 1 \le j \le n$$

Diskretisiertes Entfaltungsproblem

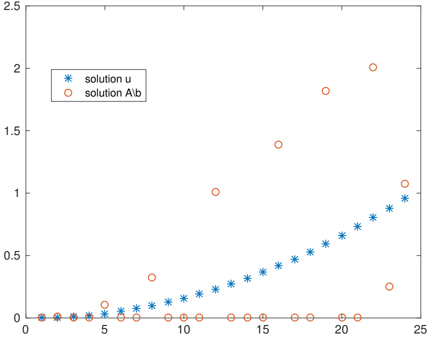
Das diskrete Problem mit $n = 24$, $m = 50$.



Das lineare Ausgleichsproblem ist extrem schlecht konditioniert.

Diskretisiertes Entfaltungsproblem

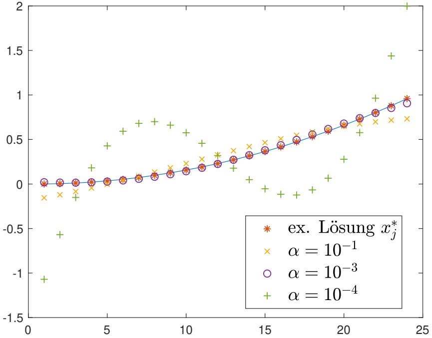
Wir wählen $g(t) = t^2$ und entsprechend $x_j^* = z_j^2$ $(n = 24,\ m = 50)$.
Das Ausgleichsproblem mit $b := Ax^*$, gelöst in Matlab:



Berechnete Lösung (nur Rundungsfehler!) weit von der Exakten entfernt.

Diskretisiertes Entfaltungsproblem mit TSVD

Wir verwenden TSVD mit unterschiedlichen Parameterwerten α.



Eine gute Genauigkeit für geeignet gewähltes α.

Analyse TSVD-Regularisierung

Sei

$$A^{\dagger\dagger}b := \sum_{j=1}^{r} \sigma_j^{-2}(u_j^T b)v_j$$

(In Anwendungen hängt diese Größe oft mit der Glattheit der exakten Daten b zusammen).

Satz 4.45

Für die TSVD-Annäherung $\tilde{x}_\alpha$ gilt:

$$\|\tilde{x}_\alpha - x^*\|_2 \leq \min\left\{\frac{1}{\sigma_r}, \frac{1}{\alpha}\right\}\|\Delta b\|_2 + \alpha\|A^{\dagger\dagger}b\|_2.$$

Analyse TSVD-Regularisierung

Sei

$$A^{\dagger\dagger}b := \sum_{j=1}^{r} \sigma_j^{-2}(u_j^T b)v_j$$

(In Anwendungen hängt diese Größe oft mit der Glattheit der exakten Daten b zusammen).

Satz 4.45

Für die TSVD-Annäherung $\tilde{x}_\alpha$ gilt:

$$\|\tilde{x}_\alpha - x^*\|_2 \leq \min\left\{\frac{1}{\sigma_r}, \frac{1}{\alpha}\right\}\|\Delta b\|_2 + \alpha\|A^{\dagger\dagger}b\|_2.$$

Man soll α so wählen dass ein guter Kompromiss zwischen Datenfehler und Regularisierungsfehler erreicht wird.
Dazu sind Parameterwahlverfahren entwickelt worden.

Tikhonov Regularisierung

Man verwendet die Filterfunktion

$$\hat{g}_\alpha(z) := \frac{z^2}{z^2 + \alpha^2}, \quad \alpha > 0.$$

Tikhonov-Regularisierung:

$$\tilde{x}_\alpha = R_\alpha \tilde{b} := \sum_{j=1}^{r} \hat{g}_\alpha(\sigma_j)\sigma_j^{-1}(u_j^T \tilde{b})v_j$$

Sehr leistungsfähige Methode, insbesondere weil die Bestimmung der SVD vermieden werden kann.

Tikhonov Regularisierung

Man verwendet die Filterfunktion

$$\hat{g}_\alpha(z) := \frac{z^2}{z^2 + \alpha^2}, \quad \alpha > 0.$$

Tikhonov-Regularisierung:

$$\tilde{x}_\alpha = R_\alpha \tilde{b} := \sum_{j=1}^{r} \hat{g}_\alpha(\sigma_j)\sigma_j^{-1}(u_j^T \tilde{b})v_j$$

Sehr leistungsfähige Methode, insbesondere weil die Bestimmung der SVD vermieden werden kann.

Die Tikhonov-Regularisierung $\tilde{x}_\alpha$ ist die Lösung des gewöhnlichen linearen Ausgleichsproblems

$$\min_x \left\| \begin{pmatrix} A \\ \alpha I \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} \tilde{b} \\ \emptyset \end{pmatrix} \right\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} A \\ \alpha I \end{pmatrix} \tilde{x}_\alpha - \begin{pmatrix} \tilde{b} \\ \emptyset \end{pmatrix} \right\|_2.$$

Niedrigrangapproximation

Für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit $r = \mathbf{Rang}(A) \ll \mathbf{min}\{m, n\}$ ist eine erhebliche Komplexitätsreduktion möglich.
Notationen: U_r, V_r, Matrizen mit nur den ersten r Spalten von U, V, und $\Sigma_r = \mathbf{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r\times r}$.

Speicherbedarf nur $mr + nr + r \approx r(m + n)$, und

$$A = U\Sigma V^T = U_r\Sigma_r V_r^T.$$

Niedrigrangapproximation

Für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $r = \mathbf{Rang}(A) \ll \mathbf{min}\{m, n\}$ ist eine erhebliche Komplexitätsreduktion möglich.
Notationen: U_r, V_r, Matrizen mit nur den ersten r Spalten von U, V, und $\Sigma_r = \mathbf{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_r) \in \mathbb{R}^{r \times r}$.

Speicherbedarf nur $mr + nr + r \approx r(m+n)$, und

$$A = U \Sigma V^T = U_r \Sigma_r V_r^T.$$

Matrix-Vektor Produkt

$$Ax = U_r \Sigma_r V_r^T x = \sum_{i=1}^{r} \sigma_i (v_i^T x) u_i,$$

mit Aufwand nur $2r(m+n)$ Flop.

Niedrigrangapproximation

Wie gut ist eine Matrix $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit einer Matrix niedrigen Ranges approximierbar?

Sei

$$\mathcal{R}_k := \{\, B \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \mathrm{Rang}(B) \le k \,\}, \quad 0 \le k \le p = \min\{m, n\}.$$

Es gilt $\{0\} =: \mathcal{R}_0 \subsetneqq \mathcal{R}_1 \subsetneqq \ldots \subsetneqq \mathcal{R}_p = \mathbb{R}^{m\times n}$.

Niedrigrangapproximation

Wie gut ist eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit einer Matrix niedrigen Ranges approximierbar?

Sei

$$\mathcal{R}_k := \{\, B \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \mathrm{Rang}(B) \leq k \,\}, \quad 0 \leq k \leq p = \min\{m, n\}.$$

Es gilt $\{0\} =: \mathcal{R}_0 \subsetneqq \mathcal{R}_1 \subsetneqq \ldots \subsetneqq \mathcal{R}_p = \mathbb{R}^{m\times n}$.

Satz 4.47

Es sei $U^T A V = \Sigma$ eine Singulärwertzerlegung von $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_p = 0$, $p = \min\{m, n\}$. Für $0 \leq k \leq p-1$ gilt:

$$\min\{\, \|A - B\|_2 \mid B \in \mathcal{R}_k\} = \|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1},$$

mit $A_0 := 0$, $A_k = U_k \Sigma_k V_k$ für $k \geq 1$.

Niedrigrangapproximation

Sei
$$\boldsymbol{K_\gamma(A) := \{\, B \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid \|A - B\|_2 \le \gamma \,\}}.$$

Frage: Was ist der minimale Rang der Matrizen in $\boldsymbol{K_\gamma(A)}$?

Niedrigrangapproximation

Sei
$$K_\gamma(A) := \{\, B \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \|A - B\|_2 \le \gamma \,\}.$$

Frage: Was ist der minimale Rang der Matrizen in $K_\gamma(A)$?

Lemma 4.50

Es sei $\sigma_{p+1} := 0$. Dann gilt:

$$\min\{\, \mathrm{Rang}(B) \mid B \in K_\gamma(A) \,\} = \min\{\, 0 \le k \le p \mid \sigma_{k+1} \le \gamma \,\}.$$

Niedrigrangapproximation

Sei
$$K_\gamma(A) := \{\, B \in \mathbb{R}^{m\times n} \mid \|A-B\|_2 \le \gamma \,\}.$$

Frage: Was ist der minimale Rang der Matrizen in $K_\gamma(A)$?

Lemma 4.50

Es sei $\sigma_{p+1} := 0$. Dann gilt:

$$\min\{\,\mathrm{Rang}(B) \mid B \in K_\gamma(A)\,\} = \min\{\, 0 \le k \le p \mid \sigma_{k+1} \le \gamma \,\}.$$

Kondition der Singulärwertbestimmung (Folgerung 4.51)

Für A und $\tilde{A} = A + \Delta A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \ge \ldots \ge \sigma_p$ bzw. $\tilde{\sigma}_1 \ge \ldots \ge \tilde{\sigma}_p$, $p = \min\{m,n\}$, gilt

$$\frac{|\sigma_k - \tilde{\sigma}_k|}{|\sigma_1|} \le \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2}, \quad \text{für} \quad k = 1,\ldots,p.$$

Numerischer Rang

Problem: Rundungsfehler aufgrund Maschinengenauigkeit

$$\boldsymbol{A \to \tilde{A}, \quad \sigma_i \to \tilde{\sigma}_i,}$$

$\Rightarrow \mathbf{Rang}(\tilde{A})$ häufig $> r$, Abfrage "$\sigma_k = 0$" nicht sinnvoll.

Numerischer Rang

Problem: Rundungsfehler aufgrund Maschinengenauigkeit

$$A \to \tilde{A}, \quad \sigma_i \to \tilde{\sigma}_i,$$

$\Rightarrow \mathbf{Rang}(\tilde{A})$ häufig $> r$, Abfrage "$\sigma_k = 0$" nicht sinnvoll.

Für $\tilde{A} = (\tilde{a}_{i,j}) = \mathrm{fl}(A) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gilt

$$\|\tilde{A} - A\|_2 \leq \tilde{\sigma}_1 \sqrt{mn}\,\mathrm{eps} =: \delta_{\mathrm{eps}}.$$

Numerischer Rang

Problem: Rundungsfehler aufgrund Maschinengenauigkeit

$$A \to \tilde{A}, \quad \sigma_i \to \tilde{\sigma}_i,$$

$\Rightarrow \mathbf{Rang}(\tilde{A})$ häufig $> r$, Abfrage "$\sigma_k = 0$" nicht sinnvoll.

Für $\tilde{A} = (\tilde{a}_{i,j}) = \mathrm{fl}(A) \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gilt

$$\|\tilde{A} - A\|_2 \leq \tilde{\sigma}_1 \sqrt{mn}\,\mathrm{eps} =: \delta_{\mathrm{eps}}.$$

Matrizen, die im Hinblick auf Rundungsfehler nicht von $\tilde{A}$ unterscheidbar sind:

$$K_{\delta_{\mathrm{eps}}}(\tilde{A}) := \{\, B \in \mathbb{R}^{m \times n} \mid \|\tilde{A} - B\|_2 \leq \delta_{\mathrm{eps}} \,\}.$$

Numerischer Rang

Definition: Numerischer Rang

Der numerische Rang der Matrix $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist definiert als

$$\mathbf{Rang}_{\mathbf{num}}(\tilde{A}) := \mathbf{min}\{\, \mathbf{Rang}(B) \mid B \in K_{\delta_{\mathrm{eps}}}(\tilde{A}) \,\}.$$

Numerischer Rang

Definition: Numerischer Rang

Der numerische Rang der Matrix $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist definiert als

$$\mathrm{Rang}_{\mathrm{num}}(\tilde{A}) := \min\{\, \mathrm{Rang}(B) \mid B \in K_{\delta_{\mathrm{eps}}}(\tilde{A}) \,\}.$$

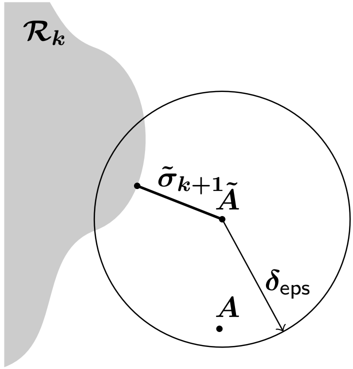
Diesen Rang kann man bestimmen:

Folgerung 4.52

Es sei $\tilde{\sigma}_{p+1} := 0$. Es gilt:

$$\mathrm{Rang}_{\mathrm{num}}(\tilde{A}) = \min\{\, 0 \leq k \leq p \mid \tilde{\sigma}_{k+1} \leq \tilde{\sigma}_1 \sqrt{mn}\, \mathrm{eps} \,\}$$

Numericher Rang



Numerischer Rang: minimales k so dass $\tilde{\sigma}_{k+1} \leq \delta_{\mathrm{eps}}$

Beispiel 4.54

$$\boldsymbol{A_1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{10} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{10} & \frac{2}{3} & 3 \\ \frac{3}{10} & \frac{3}{3} & 0 \\ \frac{4}{10} & \frac{4}{3} & 7 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{A_2} = \boldsymbol{A_1} + 10\,\mathrm{eps} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

mit $\mathbf{Rang}(\boldsymbol{A_1}) = 2$, $\mathbf{Rang}(\boldsymbol{A_2}) = 3$. Auf einem Rechner ($\mathrm{eps} \approx 2 \cdot 10^{-16}$): $\tilde{\boldsymbol{A}}_1 = \mathrm{fl}(\boldsymbol{A_1})$, bzw. $\tilde{\boldsymbol{A}}_2 = \mathrm{fl}(\boldsymbol{A_2})$.

Beispiel 4.54

$$A_1 = \begin{pmatrix} \frac{1}{10} & \frac{1}{3} & 0 \\ \frac{2}{10} & \frac{2}{3} & 3 \\ \frac{3}{10} & \frac{3}{3} & 0 \\ \frac{4}{10} & \frac{4}{3} & 7 \end{pmatrix}, \quad A_2 = A_1 + 10\,\mathrm{eps} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

mit $\mathrm{Rang}(A_1) = 2$, $\mathrm{Rang}(A_2) = 3$. Auf einem Rechner ($\mathrm{eps} \approx 2 \cdot 10^{-16}$): $\tilde{A}_1 = \mathrm{fl}(A_1)$, bzw. $\tilde{A}_2 = \mathrm{fl}(A_2)$.

Die (in Matlab) berechneten Singulärwerte dieser Matrizen sind

$$\tilde{A}_1 : 7.776,\ 1.082,\ 1.731 \cdot 10^{-16},\ \tilde{A}_2 : 7.776,\ 1.082,\ 2.001 \cdot 10^{-15}$$

In beiden Fällen sind alle berechnete Singulärwerte strikt positiv, jedoch gilt

$$\mathrm{Rang}_{\mathrm{num}}(\tilde{A}_1) = \mathrm{Rang}_{\mathrm{num}}(\tilde{A}_2) = 2.$$