Institut für Informationsverarbeitung
Leibniz Universität Hannover
http://www.tnt.uni-hannover.de

# Scientific Computing I - Übung 5

## 1 Theorie

a) Bestimmen Sie die Lösung des Quadratmittelproblems $Ax = b$ mit

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 3 & 7 \\ 2 & 1 & 1 \\ 6 & 0 & 5 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

und

$$b = \begin{bmatrix} 17 \\ 5 \\ 11 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Nutzen Sie dafür die Normalgleichung.

b) Bestimmen Sie die Projektion $y = Ax$ von $b$ auf span$(A)$ und den Restvektor $r = b - Ax$ des Quadratmittelproblems $Ax = b$ mit Hilfe des Orthogonalprojektors, der sich aus $A$ bestimmen lässt.

c) Bestimmen Sie die Lösung des Quadratmittelproblems $Ax = y$ mit Hilfe der Pseudoinversen.

*Hinweis:* Diese Theorieaufgaben sind ganz schön rechenintensiv. Vielleicht können Ihnen ja ihre MATLAB-Lösungen von den letzten Übungsblättern helfen, falls ihr Taschenrechner nicht die nötigen Funktionen bietet.

# 2 Einstiegsaufgabe

Die Datei *Messdaten.mat* enthält zwei Vektoren mit zugehörigen Wertepaaren (t, v) für Zeit und Geschwindigkeit eines Experiments. Da die Daten verrauscht sind, ist ein exakter Fit an die Daten nicht möglich. Auf Grund der Form der Datenkurve erscheint eine Modellierung mittels eines Polynoms sinnvoll. Schreiben Sie eine Funktion *mypolyval*, welches ein Polynom beliebiger Ordnung zu den Zeitpunkten t auswertet. MATLAB bietet dafür übrigens die Funktion *polyval* an, deren Funktionalität wir nachbauen wollen.

Ihre Funktion soll den Parameter der Zeitpunkte (allgemeiner: Auswertungspunkte) und den Parameter der Polynomkoeffizienten als Eingabe übernehmen und die dazugehörigen Funktionswerte des Polynoms ausgeben. Versuchen Sie passende Koeffizienten händisch zu finden, um die Datenpunkte optimal anzufitten. Für die Profis: Schreiben Sie die Funktion ohne Verwendung von Schleifen.

Wie man geschickter optimale Polynomkoeffizienten bestimmt, lernt man in der nächsten Aufgabe!

# 3 Haushalten will gelernt sein

Zum Lösen von Quadratmittelproblemen (QMP) kann die sogenannte Householder-Transformation (HHT) verwendet werden. Bei (linearen) QMP liegt typischerweise ein überbestimmtes LGS der Form

$$\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b} \tag{1}$$

vor. Dieses kann i.A. nicht exakt gelöst werden. Statt einer exakten Lösung sucht man bei QMP eine Näherungslösung, welche den Restfehler $\boldsymbol{r} := \boldsymbol{b} - \boldsymbol{A}\boldsymbol{x}$ bezüglich der euklidischen Norm minimiert. In der Vorlesung werden Sie lernen, dass zur Lösung dieses Problems die HHT angewendet werden kann. Diese zerlegt die Matrix $\boldsymbol{A}$ in eine obere Dreiecksmatrix $\boldsymbol{R}$ und eine orthogonale Matrix $\boldsymbol{Q}$. Dies ist die sogenannte QR-Zerlegung:

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{Q}[\boldsymbol{R}, \boldsymbol{0}]^T. \tag{2}$$

$\boldsymbol{0}$ bezeichnet die Nullmatrix.
Anschließend kann das Quadratmittelproblem durch Lösung des resultierenden oberen Dreiecksystems

$$\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{A}\boldsymbol{x} = [\boldsymbol{R}, \boldsymbol{0}]^T\boldsymbol{x} = \boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{b} \tag{3}$$

gelöst werden. Dieses Vorgehen wollen wir nun nachbauen!

a) Schreiben Sie eine Funktion, welche für einen vorgegebenen Spaltenvektor $\boldsymbol{v}$ die Householdermatrix $\boldsymbol{H}$ konstruiert und diese zurück gibt. Die Householdermatrix für einen Vektor $\boldsymbol{v}$ ist definiert als

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{I} - 2\frac{\boldsymbol{v}\boldsymbol{v}^T}{\boldsymbol{v}^T\boldsymbol{v}} \tag{4}$$

Überzeugen Sie sich davon, dass die so definierte Householdermatrix orthogonal ist.

b) Der Vektor $\boldsymbol{v}$ aus 1) soll nun aus einem weiteren Vektor $\boldsymbol{a}$ konstruiert werden. Die Konstruktionsgleichung lautet hierbei

$$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{a} - \alpha \boldsymbol{e}_n \tag{5}$$

mit $\alpha = \pm||\boldsymbol{a}||_2$ und einem (Standard-) Einheitsvektor $\boldsymbol{e}_n$. Welcher Einheitsvektor verwendet wird, soll über einen Inputparameter einstellbar sein. Das Vorzeichen von $\alpha$ sollte so gewählt werden, dass keine Auslöschung auftritt. Siehe auch Vorlesung 3, Folie 30.

Schreiben Sie dazu eine Funktion, welche den Vektor $\boldsymbol{v}$ berechnet (und ausgibt) bei vorgegebenem Vektor $\boldsymbol{a}$. Achten Sie auf passende Vorzeichenwahl! Testen Sie ihre Funktion anhand des Vektors $\boldsymbol{a} = [2, 1, 2]^T$ (vgl. Vorlesung 3, Folie 31). Prüfen Sie, dass dann $\boldsymbol{Ha} = \alpha \boldsymbol{e}_n$ gilt.

c) Lösen Sie nun das QMP durch iterative Anwendung der Householder-Transformation. Schreiben Sie dazu eine Funktion, welche eine M x N Matrix $\boldsymbol{A}$ und einen M x 1 Vektor $\boldsymbol{b}$ als Input erwartet und den Lösungsvektor $\boldsymbol{x}$ des QMP ausgibt. Wenden Sie zur Lösung die HHT iterativ auf die Matrix $\boldsymbol{A}$ bzw. ihrer HHT an. Beachten Sie, dass Sie im Schritt $n$ den Vektor $\boldsymbol{v}_n$ nach (5) ausgehend von dem n-ten Spaltenvektor $\boldsymbol{a}_n$ der Matrix $\boldsymbol{H}_{n-1}\boldsymbol{H}_{n-2}\ldots\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A}$ bestimmen. Entsprechend ist jeweils der n-te Einheitsvektor $\boldsymbol{e}_n$ in (5) zu verwenden! $\boldsymbol{Q}$ ist dann gegeben durch die Verkettung der Householdermatrizen $\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{H}_2\ldots\boldsymbol{H}_N$. Folglich gilt

$$\boldsymbol{Q}^T\boldsymbol{A} = \boldsymbol{H}_N\boldsymbol{H}_{N-1}\ldots\boldsymbol{H}_1\boldsymbol{A} = [\boldsymbol{R}, \boldsymbol{0}]^T. \tag{6}$$

Wenden Sie die selbe Folge von HHT auf den Vektor $\boldsymbol{b}$ an. Nutzen Sie (6) um die Matrix $\boldsymbol{A}$ auf eine obere Dreiecksform zu bringen und lösen Sie das resultierende Dreickeckssystem, um den Lösungsvektor $\boldsymbol{x}$ zu bestimmen. Prüfen Sie ihre Lösung anhand des Beispiels aus der Vorlesung, bei welchem gilt

$$\boldsymbol{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}, \boldsymbol{b} = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix}. \tag{7}$$

Sie sollten als Lösungsvektor $\boldsymbol{x} = [0.086, 0.400, 1.429]^T$ erhalten.

# 4 Polynome an Daten fitten

Testen Sie nun Ihren MATLAB-Code an den Beispieldaten aus der *Messdaten.mat*. Bei der Suche nach den optimalen Polynomkoeffizienten stoßen wir auf ein QMP.

Wollen wir für ein Polynom

$$p(t) = \sum_{n=0}^{N} a_n t^{N-n} \tag{8}$$

die für die gegeben Daten optimalen Koeffizienten $a_0, a_1, \ldots, a_N$ bestimmen und stellen wir die nach (8) für die Zeitpunkte $t_1, t_2, \ldots, t_N$ berechneten Werte $p(t_i)$ den gemessenen $v(t_i)$ gegenüber, so erhalten wir ein überbestimmtes Gleichungssystem:

$$\begin{bmatrix} t_1^N & t_1^{N-1} & \ldots & t_1^2 & t_1 & 1 \\ t_2^N & t_2^{N-1} & \ldots & t_2^2 & t_2 & 1 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ t_M^N & t_M^{N-1} & \ldots & t_M^2 & t_M & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \\ v_M \end{bmatrix}. \tag{9}$$

Für M > N ist dieses System überbestimmt und i.A. nicht exakt lösbar. Um eine Näherungslösung zu bestimmen können wir aber die HHT verwenden!
Vergleichen Sie die Lösungskoeffizienten, die ihre QMP-Funktion ausgibt mit den Polynomkoeffizienten, welche die MATLAB-Funktion *polyfit* generiert. Was für ein Verhalten beobachten Sie, wenn Sie den Polynomgrad erhöhen (z.b. von 4 auf 20 auf 50)? Wie verändert sich die Modellgüte? Plotten Sie die erhaltenen Lösungskurven zusammen mit den Messdaten. Ergänzen Sie die Grafik um eine Legende und passende Achsenbeschriftungen.

Hinweis: Legenden können in MATLAB mittels des *legend*-Befehls definiert werden.