Technische Universität Berlin
Fachgebiet Computer Graphics

Prof. Marc Alexa, Ugo Finnendahl,
Dimitrios Bogiokas, Gabriel Dogadov

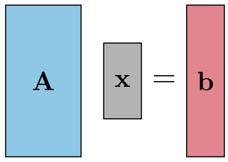
Wissenschaftliches Rechnen - Übung 2.2

Lineare Ausgleichsrechnung

20.11.2023 bis 24.11.2023

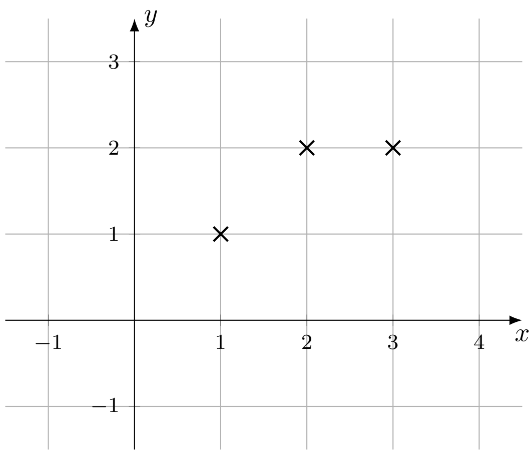
Aufgabe 1: Ausgleichsrechnung und lineare Regression

Ein überbestimmtes lineares Gleichungssystem $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ mit $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$ sieht wie folgt aus:



Dabei hat die Matrix $\mathbf{A}$ vollen Rang und es gibt mehr Gleichungen als Unbekannte. Zwar können überbestimmte lineare Gleichungssysteme genau eine oder keine Lösung haben, jedoch haben diese in der Praxis fast ausschließlich keine Lösung.

1. Warum haben überbestimmte Gleichungssysteme $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$ in der Praxis meist keine Lösung?
2. Wie kann man eine approximative Lösung des überbestimmten Gleichungssystems berechnen? Welche geometrische Interpretation hat die Lösung?
3. Gegeben seien drei Datenpunkte $(x_i, y_i) \in \mathbb{R}^2$ mit den Werten $(1, 1), (2, 2)$ und $(3, 2)$. Diese sind nochmal in der Abbildung dargestellt.



Im Folgenden möchten wir die Punkte mithilfe einer Geraden $f(x) = ax + b$ approximieren.

a) Modellieren Sie das Regressionsproblem mithilfe eines überbestimmten LGS $\mathbf{Ax} = \mathbf{b}$.
b) Warum können Sie sich sicher sein, dass das LGS keine Lösung hat, auch wenn Sie es nicht explizit lösen?
c) Lösen Sie das überbestimmte Gleichungssystem approximativ und zeichnen Sie die resultierende Funktion in die Abbildung oben ein.
d) Zeichnen Sie die Fehler ein, die durch das Ausgleichsproblem $\min \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|^2$ minimiert werden.
e) Nun möchten wir statt einer Geraden ein quadratisches Polynom $g(x) = ax^2 + bx + c$ verwenden. Wie sieht das lineare Gleichungssystem dazu aus?
f) Das Gleichungssystem aus der vorherigen Aufgabe ist jedoch eindeutig lösbar. Wie verhält sich das berechnete quadratische Polynom zu den Datenpunkten im Vergleich zur Geraden?

$*$ Ist es auch möglich $\{\exp(x), \exp(2x)\}$ als Basisfunktionen für das Regressionsproblem zu verwenden? Falls ja, geben Sie das zugehörige Gleichungssystem an.

Aufgabe 2: Cholesky-Zerlegung

Die Cholesky-Zerlegung einer Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist eine Faktorisierung von $\mathbf{A}$ in eine untere Dreiecksmatrix $\mathbf{L} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und ihre Transponierte:

$$\begin{bmatrix} a_{1,1} & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{2,1} & a_{2,2} & \cdot & \cdot \\ \vdots & \vdots & \ddots & \cdot \\ a_{n,1} & a_{n,2} & \dots & a_{n,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \ell_{1,1} & 0 & \dots & 0 \\ \ell_{2,1} & \ell_{2,2} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \ell_{n,1} & \ell_{n,2} & \dots & \ell_{n,n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \ell_{1,1} & \ell_{2,1} & \dots & \ell_{n,1} \\ 0 & \ell_{2,2} & \dots & \ell_{n,2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \ell_{n,n} \end{bmatrix}$$

Eine solche Matrix $\mathbf{A}$ muss **symmetrisch** und (mindestens) **positiv (semi)definit** sein. Positiv (semi)definit bedeutet, dass $\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} > 0$ ($\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} \geq 0$) für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$. Dabei ist $\mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x}$ die quadratische Form von $\mathbf{A}$, ein Polynom zweiten Grades in n Variablen, das nur quadratische Terme enthält.

1. Zeigen Sie, dass $\mathbf{A}$ symmetrisch und positiv semidefinit sein muss, um eine Cholesky-Zerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{L}^\mathsf{T}$ zu besitzen.

2. Gegeben ist folgende symmetrische Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{3 \times 3}$:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} 1 & -1 & 3 \\ -1 & 5 & -7 \\ 3 & -7 & 14 \end{bmatrix}$$

   Wie kann man überprüfen, ob $\mathbf{A}$ positiv definit ist?

3. Berechnen Sie die Cholesky-Zerlegung der Matrix aus der vorherigen Teilaufgabe. In welchen Schritten kann die Berechnung schiefgehen, falls $\mathbf{A}$ nicht positiv definit ist?

4. Wie kann man die Cholesky-Zerlegung dazu nutzen, um lineare Gleichungssysteme $\mathbf{A}\mathbf{x} = \mathbf{b}$ zu lösen, falls $\mathbf{A}$ symmetrisch und positiv definit ist? Welche Vorteile hat dies gegenüber der Gauß-Elimination?

5. Neben den Eigenschaften positiv (semi)definit gibt es weitere, analog definierte Eigenschaften: Eine quadratische Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ist

$$\left.\begin{array}{ll} \text{negativ definit,} & \text{falls } \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} < 0 \\ \text{negativ semidefinit,} & \text{falls } \mathbf{x}^\mathsf{T}\mathbf{A}\mathbf{x} \leq 0 \\ \text{indefinit,} & \text{sonst} \end{array}\right\} \text{ für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}.$$

   Wie kann man für eine symmetrische Matrix überprüfen, welche von diesen Eigenschaften sie hat?