Einführung in Numerical Computing
Linear Least Squares Probleme

Prof. Wilfried Gansterer

Universität Wien

Wintersemester 2024

Methode der kleinsten Quadrate
Inhalt

- Ausgleichsrechung, Data Fitting
- Existenz und Eindeutigkeit
- Sensitivität und Kondition
- Problemumformungen
- Orthogonalisierung
- Singulärwertzerlegung

Methode der kleinsten Quadrate

- Messfehler sind unvermeidlich
- Man kann oft Fehler duch Mittelung glätten, muss dann aber mehr Messungen vornehmen, um Parameter bestimmen zu können
- Die entstehenden Systeme sind überbestimmt, daher gibt es im allgemeinen keine eindeutige Lösung
- Es werden höher-dimensionale Daten auf einen niedriger-dimensionalen Raum projiziert, um irrelevante Details auszublenden
- Diese Projektion kann man gut mit der Methode der kleinsten Quadrate (Linear Least Squares) erreichen

Methode der kleinsten Quadrate

- Lineare Gleichungssysteme sind überbestimmt wenn gilt

$$Ax = b \quad \text{mit} \quad m \times n \text{ Matrix } A, m > n$$

- Wir schreiben oft $Ax \cong b$, weil Gleichheit im allg. nicht genau erfüllbar ist für $m > n$
- Die "kleinste Quadrate" Lösung minimiert das Quadrat der 2-Norm des Residuen-Vektors $r = b - Ax$:

$$\min_x \|r\|_2^2 = \min_x \|b - Ax\|_2^2$$

Methode der kleinsten Quadrate
Ausgleichsrechung (Data Fitting)

- Gegeben m Datenpunkte (t_i, y_i). Gesucht wird ein n-dimensionaler Parameter-Vektor x, der eine (vorgegebene) Modellfunktion $f(t, x)$ möglichst gut annähert:

$$\min_x \sum_{i=1}^{m} (y_i - f(t_i, x))^2$$

- Das Problem ist linear, wenn die Funktion f linear in den Komponenten von x ist:

$$f(t, x) = x_1\phi_1(t) + x_2\phi_2(t) + \cdots + x_n\phi_n(t)$$

  mit Funktionen ϕ_j, die nur von t abhängig sind
- Man kann das lineare Problem in Matrixform $Ax \cong b$ schreiben, mit $a_{ij} = \phi_j(t_i)$ und $b_i = y_i$

Methode der kleinsten Quadrate
Ausgleichsrechung (Data Fitting)

- Beispiel: Polynomial Fitting

$$f(t,x) = x_1 + x_2 t + x_3 t^2 \cdots + x_n t^{n-1}$$

- Beispiel: Exponential Fitting ist ein nichtlineares Problem

$$f(t,x) = x_1 e^{x_2 t} + \cdots + x_{n-1} e^{x_n t}$$

- Wir betrachten hier nur lineare Probleme

Methode der kleinsten Quadrate
Ausgleichsrechung (Data Fitting)

- Beispiel: Fitting eines Quadratischen Polynoms an 5 Datenpunkte ergibt folgendes Linear Least Squares Problem:

$$Ax = \begin{bmatrix} 1 & t_1 & t_1^2 \\ 1 & t_2 & t_2^2 \\ 1 & t_3 & t_3^2 \\ 1 & t_4 & t_4^2 \\ 1 & t_5 & t_5^2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ y_3 \\ y_4 \\ y_5 \end{bmatrix} = b$$

- Eine Matrix deren Spalten (oder Zeilen) fortlaufende Potenzen einer unabhängigen Variablen sind, heißt Vandermonde Matrix

Methode der kleinsten Quadrate
Ausgleichsrechung (Data Fitting)

- Konkrete Beispieldaten

$$\begin{array}{c|ccccc} t & -1.0 & -0.5 & 0.0 & 0.5 & 1.0 \\ y & 1.0 & 0.5 & 0.0 & 0.5 & 2.0 \end{array}$$

- ergeben das überbestimmte lineare 5×3 System

$$Ax = \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{bmatrix} \cong \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix} = b$$

- Die Lösung ist

$$x = (0.086, 0.4, 1.4)^T$$

(Berechnung siehe später!). Somit ergibt sich das Polynom

$$p(t) = 0.086 + 0.4t + 1.4t^2$$

Methode der kleinsten Quadrate
Ausgleichsrechung (Data Fitting)

Man erhält mit diesen Problemdaten folgende Kurve (auch die Originaldaten werden angezeigt):

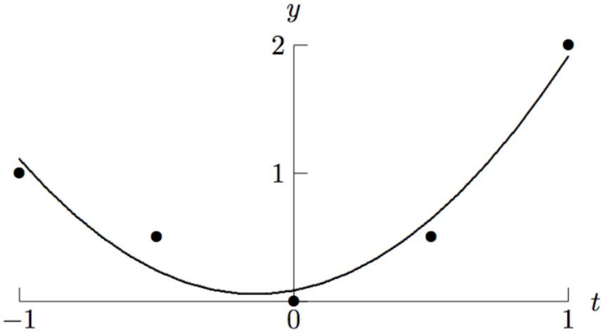

Abbildung: aus Heath, M., Scientific Computing - An Introductory Survey

Methode der kleinsten Quadrate
Existenz und Eindeutigkeit

- Das Problem $Ax \cong b$ mit einer $m \times n$-Matrix A hat immer eine Lösung
- Die Lösung ist genau dann eindeutig, wenn die Spalten von A linear unabhängig sind, d.h. wenn Rang(A)=n
- Wenn Rang$(A) < n$ (Rang-Defizienz), dann ist die Lösung nicht eindeutig
- Betrachte vorläufig den Fall Rang(A)=n (voller Spalten-Rang)

Normalgleichungen

Um die quadrierte Euklidische Norm des Residuen-Vektors

$$\begin{aligned} \|r\|_2^2 &= r^T r = (b - Ax)^T (b - Ax) \\ &= b^T b - 2x^T A^T b + x^T A^T A x \end{aligned}$$

zu minimieren, setzen wir die Ableitung nach x gleich 0:

$$2A^T A x - 2A^T b = 0$$

Daraus erhalten wir ein lineares $n \times n$ Gleichungssystem, die sogenannten Normalgleichungen

$$A^T A x = A^T b$$

Normalgleichungen

- Wenn $Ax = b$ nicht lösbar ist, dann liegt b nicht in dem von den Spalten der Matrix A aufgespannten Raum span(A)
- Ein Vektor $y = Ax$ in span(A) liegt bezüglich der Euklidischen Norm zum Vektor b am nächsten, wenn das Residuum $r = b - Ax$ orthogonal auf span(A) ist:

$$0 = A^T r = A^T (b - Ax)$$

- Das führt unmittelbar auch wieder zu den Normalgleichungen

$$A^T Ax = A^T b$$

Orthogonalität, Projektion

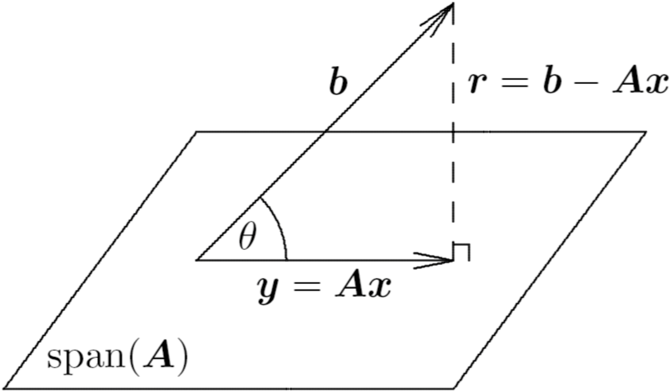

Abbildung: aus Heath, M., Scientific Computing - An Introductory Survey

Orthogonalität, Projektion

- Eine Matrix P ist ein Orthogonaler Projektor, wenn sie *idempotent* ($P^2 = P$) und *symmetrisch* ($P^T = P$) ist
- Orthogonale Projektion auf das orthogonale Komplement $\text{span}(P)^\perp$ ist gegeben durch $P_\perp = I - P$
- Für jeden Vektor v gilt

$$v = (P + (I - P))v = Pv + P_\perp v$$

- Wenn rank(A)=n, dann gilt für das Least Squares Problem $Ax \cong b$:

$$P = A(A^T A)^{-1} A^T$$

ist ein orthogonaler Projektor auf span(A) und

$$b = Pb + P_\perp b = Ax + (b - Ax) = y + r$$

Pseudoinverse

- $m \times n$- Matrizen (nicht-quadratisch) besitzen keine Inversen im üblichen Sinn
- Wenn rank(A)=n, definiert man die Pseudoinverse A^+ von A als

$$A^+ := (A^T A)^{-1} A^T$$

- Die Lösung des Least Squares Problems $Ax \cong b$ ist dann gegeben durch

$$x = A^+ b$$

- Die Konditionszahl kann verallgemeinert werden zu cond$(A) := \|A\|_2 \cdot \|A^+\|_2$
  - cond$(A) = \infty$, wenn rank$(A) < n$

Sensitivität, Kondition

- Die Sensitivität des Least Squares Problems $Ax \cong b$ hängt von A *und* von b ab !
- Sei der Winkel θ zwischen b und $y = Ax$ definiert

$$\cos(\theta) = \frac{\|y\|_2}{\|b\|_2} = \frac{\|Ax\|_2}{\|b\|_2}$$

- Eine Schranke für die Störung Δx der Lösung x wegen Störungen Δb von b ist gegeben durch

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \leq \text{cond}(A) \frac{1}{\cos(\theta)} \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$$

Sensitivität, Kondition

- Bei einer Störung E der Matrix A erhält man

$$\frac{\|\Delta x\|_2}{\|x\|_2} \lessapprox \left([\,\text{cond}(A)]^2 \tan\theta + \text{cond}(A) \right) \frac{\|\Delta E\|_2}{\|A\|_2}$$

- Die Konditionszahl für die Lösung des Least Squares Problems ist daher zumindest von der Grössenordnung cond(A), kann aber eventuell auch viel grösser werden !

Methode der Normalgleichungen

- Wenn die $m \times n$-Matrix A ($m > n$) Rang n hat, dann ist die symmetrische $n \times n$-Matrix $A^T A$ positiv definit
- Die Cholesky Faktorisierung LL^T kann genutzt werden, um die Lösung x des Gleichungssystems

  $$A^T Ax = A^T b$$

  zu bestimmen, welches die gleiche Lösung hat wie das Linear Least Squares Problem $Ax \cong b$
- Bei der Methode der Normalgleichungen transformiert man die Matrix also in folgenden Schritten

  rechteckig $\rightarrow$ quadratisch $\rightarrow$ dreieckig

Beispiel Methode der Normalgleichungen

Für das Beispiel von vorhin erhält man

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1.0 & -0.5 & 0.0 & 0.5 & 1.0 \\ 1.0 & 0.25 & 0.0 & 0.25 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} 5.0 & 0.0 & 2.5 \\ 0.0 & 2.5 & 0.0 \\ 2.5 & 0.0 & 2.125 \end{bmatrix},$$

$$A^T b = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ -1.0 & -0.5 & 0.0 & 0.5 & 1.0 \\ 1.0 & 0.25 & 0.0 & 0.25 & 1.0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 4.0 \\ 1.0 \\ 3.25 \end{bmatrix}$$

Beispiel Methode der Normalgleichungen

- Cholesky Faktorisierung der symmetrischen positiv definiten Matrix $A^T A$ ergibt

$$
\begin{aligned}
A^T A &= \begin{bmatrix} 5.0 & 0.0 & 2.5 \\ 0.0 & 2.5 & 0.0 \\ 2.5 & 0.0 & 2.125 \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} 2.236 & 0 & 0 \\ 0 & 1.581 & 0 \\ 1.118 & 0 & 0.935 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2.236 & 0 & 1.118 \\ 0 & 1.581 & 0 \\ 0 & 0 & 0.935 \end{bmatrix} \\
&= LL^T
\end{aligned}
$$

- Durch Lösung des unteren Dreieckssystems $Lz = A^T b$ erhält man $z = (1.789 \quad 0.632 \quad 1.336)^T$
- Durch Lösung des oberen Dreieckssystems $L^T x = z$ erhält man $x = (0.086 \quad 0.400 \quad 1.429)^T$

Nachteil der Normalgleichungen

- Potentieller Informationsverlust durch Bilden von $A^T A$ und $A^T b$
- Beispiel: Sei

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

mit $\epsilon < \sqrt{\epsilon_{mach}}$ (z.B. $\epsilon = 10^{-9}$ in double precision)
- In Gleitpunktarithmetik erhält man dann

$$A^T A = \begin{bmatrix} 1+\epsilon^2 & 1 \\ 1 & 1+\epsilon^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix},$$

also ein *singuläres* Gleichungssystem !
- Allgemein: Die Sensitivität der Lösung verschlechtert sich, weil

$$\text{cond}(A^T A) = [\text{cond}(A)]^2$$

Augmentiertes System

- Eine andere Möglichkeit, auf ein quadratisches Gleichungssystem zu kommen: Definition des Residuums und Orthogonalitätsbedingung ergeben das folgende "augmentierte" $(m+n) \times (m+n)$ System:

$$\begin{bmatrix} I & A \\ A^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Diese "augmentierte" System ist nicht positiv-definit, ist grösser als das Originalsystem und braucht zwei Kopien von A
- Mit Pivotisierung ist aber LDL^T oder LU Faktorisierung möglich

Augmentiertes System

- Führe einen Skalierungsparameter α für das Residuum ein:

$$\begin{bmatrix} \alpha I & A \\ A^T & O \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r/\alpha \\ x \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b \\ 0 \end{bmatrix}$$

  α gibt uns die Möglichkeit, die beiden Subsysteme für die Wahl des Pivots relativ zu gewichten (potentielle Vorteile bei der Pivotisierung)
- Daumenregel für die Wahl des Skalierungsparameters

$$\alpha = \max_{i,j} |a_{ij}|/1000$$

- Augmentierte Systeme können manchmal nützlich sein, brauchen aber auf jeden Fall mehr Speicherplatz

Orthogonale Transformationen

- Alternative Methode gesucht, die numerische Schwierigkeiten bei Normalgleichungen vermeidet
- Brauchen numerisch stabile Transformationen, die ein einfacher zu lösendes Problem ergeben, die Lösung des Originalproblems aber nicht verändern
- Frage: Welche Transformationen lassen "Least Squares" Lösungen unverändert?
- Multiplikation mit einer orthogonalen Matrix erhält die Euklidische Norm
$$\|Qv\|_2^2 = (Qv)^T Qv = v^T Q^T Qv = v^T v = \|v\|_2^2$$
- Also verändert die Multiplikation mit einer orthogonalen Matrix die Lösung des Least Squares Problems nicht.

Orthogonale Transformationen

- Wünschenswert bei Linearen Gleichungssystemen war eine Dreiecksform
- Für "Linear Least Squares" wird folgende Form interessant sein

$$\begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} x \cong \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix}$$

  wobei R eine obere $n \times n$ Dreiecksmatrix ist und b auch entsprechend partitioniert ist.
- Residuum

$$\|r\|_2^2 = \|b_1 - Rx\|_2^2 + \|b_2\|_2^2$$

Orthogonale Transformationen

- Über den zweiten Term $\|b_2\|_2^2$ haben wir keine Kontrolle, aber der erste Term wird Null, wenn x das $n \times n$ Dreieckssystem

$$Rx = b_1$$

erfüllt. welches durch Rückwärtssubstitution bestimmt werden kann
- Man erhält mit x eine Lösung des Linear Least Squares Problems, mit folgender minimaler Quadratsumme

$$\|r\|_2^2 = \|b_2\|_2^2$$

- Strategie ist daher, das allgemeine Linear Least Squares Problem mit Hilfe orthogonaler Transformationen in so eine Dreiecksform zu transformieren, die die Lösung erhält

QR Faktorisierung

- Sei eine $m \times n$ Matrix A mit $m > n$ gegeben. Wir suchen eine orthogonale $m \times m$ Matrix Q mit

$$A = Q \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix}$$

mit R einer oberen $n \times n$ Dreiecksmatrix

- Das Linear Least Squares Problem $Ax \cong b$ wird dann transformiert in

$$Q^T A x = \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} x \cong \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} = Q^T b$$

- Dieses System hat die selbe Lösung, da

$$\|r\|_2^2 = \|b - Ax\|_2^2 = \|b - Q \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} x\|_2^2 = \|Q^T b - \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} x\|_2^2$$

QR Faktorisierung

- Wenn wir die orthogonale Matrix so partitionieren, dass $Q = [Q_1 \, Q_2]$, mit Q_1 $m \times n$ Matrix, dann wird

$$A = Q \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} = [Q_1 \, Q_2] \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} = Q_1 R$$

  als "reduzierte QR Faktorisierung" von A bezeichnet
- Die Spalten von Q_1 bilden eine Orthonormalbasis für $\text{span}(A)$ und die Spalten von Q_2 bilden eine Orthonormalbasis für $\text{span}(A)^\perp$
- $Q_1 Q_1^T$ bilden eine Orthogonalprojektion auf $\text{span}(A)$
- Die Lösung des Least Squares Problems $Ax \cong b$ ist gegeben durch die Lösung des Systems

$$Q_1^T A x = R x = c_1 = Q_1^T b$$

QR Faktorisierung

- Um die QR Faktorisierung der $m \times n$ Matrix A mit $m > n$ zu bestimmen, werden wir sukzessive die subdiagonalen Einträge zu Null transformieren, um eine obere Dreiecksform zu erreichen
- Wir gehen vor wie bei der LU Faktorisierung bei Gauss'scher Eliminiation, nur verwenden wir statt der Elementarmatrizen jetzt orthogonale Transformationen
- Mögliche Methoden dazu sind etwa
  - Householder Transformation
  - Givens Rotation
  - Gram-Schmidt Orthogonalisierung

Householder Transformation

- Die Householder Transformation hat die Form

$$H = I - 2\frac{vv^T}{v^Tv}$$

  für Vektoren $v \neq 0$
- H ist orthogonal und symmetrisch: $H = H^T = H^{-1}$
- Sei ein Vektor a gegeben. Wir wählen v so, dass

$$Ha = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \alpha e_1$$

- Wir setzen in der obigen Formel für H

$$v = a - \alpha e_1$$

  und $\alpha = \pm\|a\|_2$ (Vorzeichen kann gewählt werden)

Householder Beispiel

- Sei $a = [2\,1\,2]^T$, dann wählen wir

$$v = a - \alpha e_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} - \alpha \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

  mit $\alpha = \pm\|a\|_2 = \pm 3$
- Wählen

$$v = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$$

  (da a_1 positiv ist, wählen wir für α das negative Vorzeichen, um Auslöschungen zu vermeiden)
- Sehen uns jetzt die Transformation an:

$$Ha = a - 2\frac{v^T a}{v^T v} v = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} - 2\frac{15}{30} \begin{bmatrix} 5 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Householder QR Faktorisierung

- Bestimmen QR Faktorisierung von A mit Hilfe von Housholder Transformationen, wobei wir subdiagonale Matrixeinträge eine Spalte nach der anderen auf Null transformieren
- Jede Householder Transformation wird auf die gesamte Matrix angewendet. Sie beeinflusst aber schon bearbeitete Spalten nicht, die bisher erhaltenen Nulleinträge bleiben erhalten
- Anwendung einer Housholder Transformation auf einen beliebigen Vektor u ergibt

$$Hu = (I - 2\frac{vv^T}{v^Tv})u = u - (2\frac{v^Tu}{v^Tv})v$$

(benötigt dafür nur den Vektor v und nicht die volle Matrix H)

Householder QR Faktorisierung

- Auf die eben beschriebene Art erhalten wir die Faktorisierung

$$H_n \cdots H_1 A = \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix}$$

wobei R eine $n \times n$ obere Dreiecksmatrix ist

- Setzen wir $Q = H_1 \cdots H_n$, dann ist $A = Q \begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix}$
- Um die Lösung des Linear Least Squares Problems zu erhalten, muss natürlich auch die ”rechte Seite” b entsprechend transformiert werden.
- Dann löst man das Least Squares Problem in Dreiecksform

$$\begin{bmatrix} R \\ O \end{bmatrix} x \cong Q^T b$$

Householder QR Faktorisierung

Beispiel: Polynomales Fitting Beispiel von vorher

- $$A = \begin{bmatrix} 1 & -1.0 & 1.0 \\ 1 & -0.5 & 0.25 \\ 1 & 0.0 & 0.0 \\ 1 & 0.5 & 0.25 \\ 1 & 1.0 & 1.0 \end{bmatrix}, b = \begin{bmatrix} 1.0 \\ 0.5 \\ 0.0 \\ 0.5 \\ 2.0 \end{bmatrix}$$
- Der Householder Vektor v_1 für die Transformation der subdiagonalen Einträge der ersten Spalte ist

$$v_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -2.236 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.236 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

Householder QR Faktorisierung

- Wendet man die entsprechende Householder Transformation H_1 jetzt auf A und b an, erhält man

$$H_1 A = \begin{bmatrix} -2.238 & 0 & -1.118 \\ 0 & -0.191 & -0.405 \\ 0 & 0.309 & -0.655 \\ 0 & 0.809 & -0.405 \\ 0 & 1.309 & 0.345 \end{bmatrix}, H_1 b = \begin{bmatrix} -1.789 \\ -0.362 \\ -0.862 \\ -0.362 \\ 1.138 \end{bmatrix}$$

- Der Householder Vektor v_2 für die Transformation der subdiagonalen Einträge der zweiten Spalte ist

$$v_2 = \begin{bmatrix} 0 \\ -0.191 \\ 0.309 \\ 0.809 \\ 1.309 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 1.581 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -1.772 \\ 0.309 \\ 0.809 \\ 1.309 \end{bmatrix}$$

Householder QR Faktorisierung

- Wendet man die entsprechende Householder Transformation H_2 jetzt auf H_1A und H_1b an, erhält man

$$H_2H_1A = \begin{bmatrix} -2.238 & 0 & -1.118 \\ 0 & 1.581 & 0 \\ 0 & 0 & -0.725 \\ 0 & 0 & -0.589 \\ 0 & 0 & 0.047 \end{bmatrix}, H_2H_1b = \begin{bmatrix} -1.789 \\ 0.632 \\ -1.035 \\ -0.816 \\ 0.404 \end{bmatrix}$$

- Der Householder Vektor v_3 für die Transformation der subdiagonalen Einträge der dritten Spalte ist

$$v_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -0.725 \\ -0.589 \\ 0.047 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0.935 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1.660 \\ -0.589 \\ 0.047 \end{bmatrix}$$

Householder QR Faktorisierung

- Wendet man die entsprechende Householder Transformation H_3 jetzt an, erhält man

$$H_3 H_2 H_1 A = \begin{bmatrix} -2.238 & 0 & -1.118 \\ 0 & 1.581 & 0 \\ 0 & 0 & 0.935 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, H_3 H_2 H_1 b = \begin{bmatrix} -1.789 \\ 0.632 \\ 1.336 \\ 0.026 \\ 0.337 \end{bmatrix}$$

- Löst man jetzt das obere Dreieckssystem $Rx = c_1$ durch Rückwärtssubstitution, so erhält man $x = [0.086\, 0.400\, 1.429]^T$

Givens Rotation

- Mit Givens Rotation kann man einzelne Nullstellen in Matrizen erzeugen
- Gegeben sei ein Vektor $[a_1\ a_2]^T$, wähle c und s so, dass

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix}$$

  mit $c^2 + s^2 = 1$ (oder äquivalent $\alpha = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}$)
- Kann obiges System umschreiben zu

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ a_2 & -a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ 0 \end{bmatrix}$$

- Durch Gauss Elimination, erhält man

$$\begin{bmatrix} a_1 & a_2 \\ 0 & -a_1 - a_2^2/a_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} c \\ s \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \alpha \\ -\alpha a_2/a_1 \end{bmatrix}$$

Givens Rotation

- Rückwärtssubstitution ergibt

$$s = \frac{\alpha a_2}{a_1^2 + a_2^2} \quad \text{und} \quad c = \frac{\alpha a_1}{a_1^2 + a_2^2}$$

- Da aber $c^2 + s^2 = 1$ bzw. $\alpha = \sqrt{a_1^2 + a_2^2}$, gilt

$$c = \frac{a_1}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}} \quad \text{und} \quad s = \frac{a_2}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}}$$

Givens Rotation

Beispiel:

- Sei $a = [4\,3]^T$
- Um den zweiten Eintrag auf Null zu transformieren, berechnen wir

$$c = \frac{a_1}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}} = \frac{4}{5} = 0.8 \quad \text{und} \quad s = \frac{a_2}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2}} = \frac{3}{5} = 0.6$$

- Rotation ist gegeben durch

$$G = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.6 \\ -0.6 & 0.8 \end{bmatrix}$$

- Wirkung der Rotation auf $a = [4\,3]^T$

$$Ga = \begin{bmatrix} 0.8 & 0.6 \\ -0.6 & 0.8 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 4 \\ 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 5 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Givens Rotation

Beispiel:

- Allgemein: um eine bestimmte Komponente auf Null zu transformieren, "rotiert" man sie mit einer anderen Komponente

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & c & 0 & s & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -s & 0 & c & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ a_2 \\ a_3 \\ a_4 \\ a_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_1 \\ \alpha \\ a_3 \\ 0 \\ a_5 \end{bmatrix}$$

- Mit Givens Rotationen können wir durch gezielte Transformation von Stellen auf Null eine obere Dreiecksform erreichen
- Jede Rotation ist orthogonal, ihre Produkte sind orthogonal. So können wir eine QR Zerlegung erreichen

Gram-Schmidt Orthogonalisierung

- Wenn die Vektoren a_1 und a_2 vorgegeben sind, werden zwei orthonormale Vektoren q_1 und q_2 gesucht, die den selben Raum aufspannen
- Dies kann man erreichen, indem man vom zweiten Vektor seine Projektion auf den ersten Vektor abzieht und beide Vektoren normalisiert

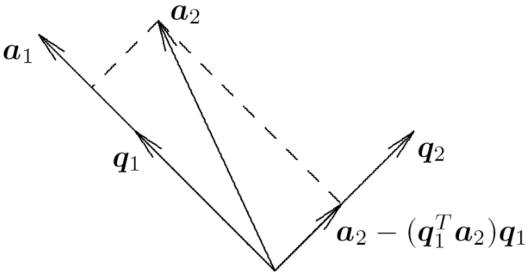

Abbildung: aus Heath, M., Scientific Computing - An Introductory Survey

Gram-Schmidt Orthogonalisierung

- Man kann diesen Prozess auf beliebig viele Vektoren ausdehnen und orthogonalisiert sukzessive die Vektoren gegenüber allen vorhergehenden: **Klassisches Gram-Schmidt Verfahren**
- **for** $k = 1$ to n **do**
  $q_k = a_k$
  for $j = 1$ to $k - 1$ **do**
  $r_{jk} = q_j^T a_k$
  $q_k = q_k - r_{jk} q_j$
  end for
  $r_{kk} = \|q_k\|_2$
  $q_k = q_k / r_{kk}$
  end for
- Mit den dabei entstehenden q_k und r_{jk} lässt sich eine QR Zerlegung von A erreichen

Gram-Schmidt Orthogonalisierung

- Bei endlicher Genauigkeit, kann genau Orthogonalität nicht bis zum Schluss gewähleistet werden
- Brauchen getrennten Speicherplatz für A, Q, R
- Kann das mit dem **Modifizierten Gram-Schmdt Verfahren** überkommen

Gram-Schmidt Orthogonalisierung

Modifiziertes Gram-Schmdt Verfahren

- **for** $k = 1$ to n **do**
  - $r_{kk} = \|a_k\|_2$
  - $q_k = a_k / r_{kk}$
  - **for** $j = k + 1$ to n **do**
    - $r_{kj} = q_k^T a_j$
    - $a_j = a_j - r_{kj} q_k$
  - **end for**
- **end for**

Rang Defizit

- Wenn Rang$(A) < n$, dann existiert QR Zerlegung, aber die obere Dreiecksmatrix R ist singulär und die Lösung ist nicht eindeutig
- Oft wählt man ein Minimum mit kleinstem Residuum aus
- Lösung kann mit QR Faktorisierung (mit Spalten-Pivotierung) oder durch Singulärwert-Zerlegung (SVD) bestimmt werden
- Der Rang einer Matrix ist in der Praxis oft auch nicht ganz klar definiert, verwendet Toleranzwerte, um den Rang zu bestimmen.

Rang Defizit

Beispiel

- Betrachte folgende 3×2 Matrix

$$A = \begin{bmatrix} 0.641 & 0.242 \\ 0.321 & 0.121 \\ 0.962 & 0.363 \end{bmatrix}$$

- Man bestimmt die QR Faktorisierung und erhält

$$R = \begin{bmatrix} 1.1997 & 0.4527 \\ 0 & 0.0002 \end{bmatrix}$$

- R ist "fast"singulär
- Verwendet man R zur Lösung des Linear Least Squares Problems, erhält man Lösungen, die sehr sensitiv auf Störungen reagieren
- In der Praxis wird man hier also wohl eher von Rang(A)=1, als von Rang(A)=2 ausgehen

Rang Defizit

- Für Rang(A)=$k < n$ erhält man nach k Schritten (evtl. mit Spalten-Umordnung) eine orthogonale Faktorisierung der Form

$$Q^T AP = \begin{bmatrix} R & S \\ O & O \end{bmatrix}$$

wobei R eine $k \times k$ obere Dreiecksmatrix ist, nichtsingulär, P eine Permutationsmatrix

Singular Value Decomposition

- Die Singulärwertzerlegung (Singular Value Decomposition SVD) einer $m \times n$ Matrix A hat die Form

$$A = U \Sigma V^T$$

wobei U eine orthogonale $m \times m$ Matrix, V eine orthogonale $n \times n$ Matrix ist und Σ ist eine $m \times n$ Diagonalmatrix mit

$$\sigma_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } i \neq j \\ \sigma_i \geq 0 & \text{für } i = j \end{cases}$$

- Diagonal-Elemente σ_j werden Singulärwerte von A genannt und sind üblicherweise angeordnet

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_n$$

- Die Spalten u_i von U und v_i von V heissen linke bzw. rechte Singulärvektoren

Singular Value Decomposition

Beispiel

- SVD von $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \\ 10 & 11 & 12 \end{bmatrix}$ ist gegeben durch $U\Sigma V^T$=

$$\begin{bmatrix} .141 & .825 & -.420 & -.351 \\ .344 & .426 & .298 & .782 \\ .547 & .0278 & .664 & -.509 \\ .750 & -.371 & -.542 & .0790 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 25.5 & 0 & 0 \\ 0 & 1.29 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} .504 & .574 & .644 \\ -.761 & -.057 & .646 \\ .408 & -.816 & .408 \end{bmatrix}$$

Anwendungen SVD

- Die Minimum-Norm Lösung von $Ax \cong b$ ist gegeben durch

$$x = \sum_{\sigma_i \neq 0} \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

  Für schlecht konditionierte oder Probleme mit Rang-Defizit können Summanden mit ”kleinen” Singulärwerten weggelassen werden.
- Euklidische Matrixnorm: $\|A\|_2 = \sigma_{max}$
- Euklidische Konditionszahl einer Matrix: cond$(A) = \frac{\sigma_{max}}{\sigma_{min}}$
- Rang einer Matrix: Anzahl der Singulärwerte ungleich Null

Pseudoinverse

- Die Pseudoinverse einer allgemeinen $m \times n$ Matrix A ist gegeben durch

$$A^+ = V\Sigma^+U^T$$

  wobei für Σ^+ die Matrix Σ transponiert wird und jeder Wert σ_i durch $\frac{1}{\sigma_i}$ ersetzt wird (für $\sigma_i \neq 0$)
- Die Pseudoinverse existiert immer, auch für nicht quadratische Matrizen oder wenn der Rang nicht voll ist
- Für eine quadratische, nichtsinguläre Matrix gilt $A^+ = A^{-1}$
- Die Minimum Norm Lösung von $Ax \cong b$ ist gegeben durch $x = A^+b$

Orthogonale Basen

- Die SVD einer Matrix $A = U\Sigma V^T$ ergibt orthogonale Basen für relevante Subräume
- Die Spalten von U, die Singulärwerten ungleich Null entsprechen, bilden eine Orthonormalbasis für span(A)
- Die restlichen Spalten von U bilden eine Orthonormalbasis für das orthogonale Komplement span$(A)^\perp$
- Die Spalten von V, die Singulärwerten gleich Null entsprechen, bilden eine Orthonormalbasis für den Nullraum von A
- Die restlichen Spalten von V bilden eine Orthonormalbasis für das orthogonale Komplement des Nullraums von A