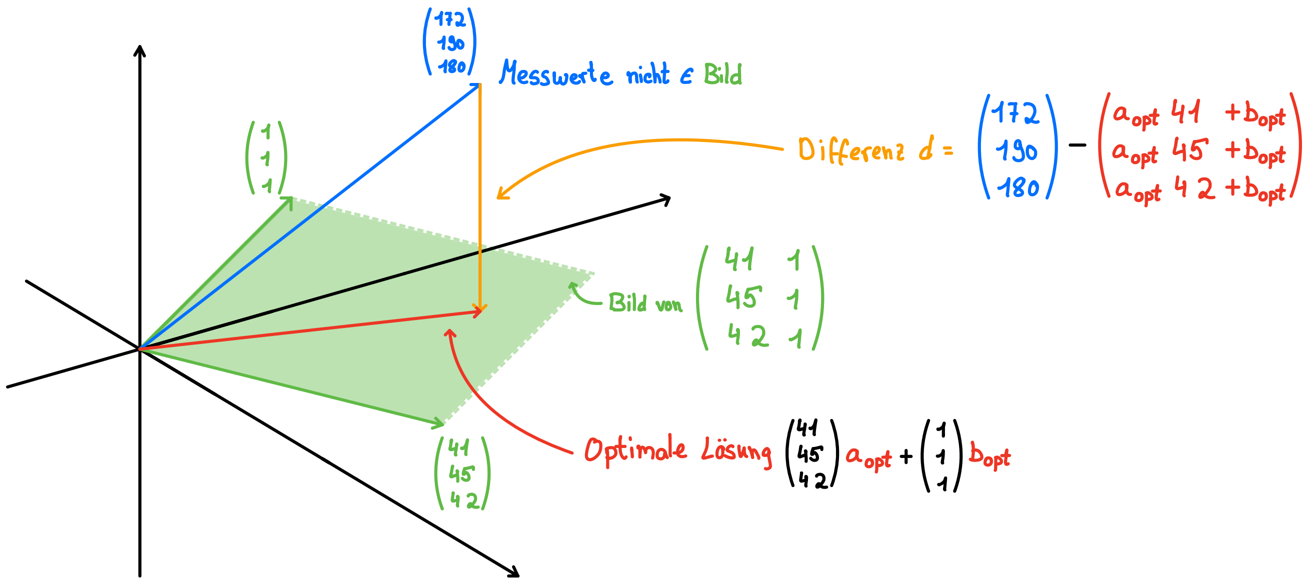
Wie können wir eine möglichst gute Lösung für ein überbestimmtes LGS $Ax = c$ finden?

Nehmen wir als Bsp ein System mit 3 Gleichungen und 2 Unbekannten.

$$\begin{aligned} 172 &= a\,41 + b \\ 190 &= a\,45 + b \\ 180 &= a\,42 + b \end{aligned} \quad\longrightarrow\quad \begin{pmatrix}172\\190\\180\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}41 & 1\\45 & 1\\42 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}a\\b\end{pmatrix}$$

Graphisch können wir uns das wie folgt vorstellen:



nicht Massstäblich

Wir wollen nun die Länge des Differenzvektors minimieren:

$$\|d\| = \sqrt{(172-(a\,41+b))^2 + (190-(a\,45+b))^2 + (180-(a\,42+b))^2}$$

Wie finde ich nun a und b, so dass die Differenz $d = c - A\cdot\begin{pmatrix}a_{opt}\\b_{opt}\end{pmatrix}$ minimal ist?

a_{opt} und b_{opt} finden wir durch:

$$A\cdot y \perp d \qquad \text{(Bild von } A \text{ orthogonal zu } d\text{)}$$

$$\langle A\cdot y, d\rangle = 0$$

$$(A\cdot y)^T\cdot d = 0 \qquad \text{(Skalarprodukt ausgeschrieben)}$$

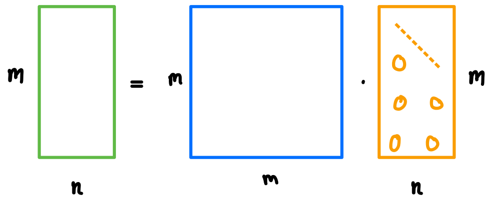
$$y^T A^T\left(c - A\cdot\begin{pmatrix}a_{opt}\\b_{opt}\end{pmatrix}\right) = 0 \qquad (d \text{ eingesetzt})$$

$$y^T A^T c - y^T A^T A\cdot\begin{pmatrix}a_{opt}\\b_{opt}\end{pmatrix} = 0$$

$$A^T c = A^T A\cdot\begin{pmatrix}a_{opt}\\b_{opt}\end{pmatrix} \qquad \boxed{(A^T A)^{-1} A^T\cdot c = \begin{pmatrix}a_{opt}\\b_{opt}\end{pmatrix}}$$

QR-Zerlegung:

Idee: Eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in das Produkt einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und einer Rechtsdreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times n}$



Anwendung: Die QR-Zerlegung wird für ein alternatives Lösungsverfahren der kleinsten Quadrate gebraucht welches numerisch bessere Resultate liefert.

Berechnung:

11.2 QR-Zerlegung

Mit der QR-Zerlegung kann eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ in das Produkt einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und einer oberen Rechtsdreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ verwandelt werden:

$$\boxed{A = Q \cdot R}$$

Vorgehen:
Wir wollen nacheinander alle Elemente unterhalb der Hauptdiagonalen von A eliminieren.

1. Man wähle zu eliminierendes Element und benenne es a_{ij}.

   Bsp: $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \Longrightarrow a_{31}$ soll eliminiert werden

2. Lese i, j ab und notiere a_{jj}, a_{ij}

   Bsp: $i = 3, j = 1 \Longrightarrow a_{jj} = 1, a_{ij} = 1$

3. Berechne $w = \sqrt{a_{jj}^2 + a_{ij}^2}$

   Bsp: $w = \sqrt{1^2 + 1^2} = \sqrt{2}$

4. Man finde die richtige Rotationsmatrix Q'^T. Man nehme zuerst die Identitätsmatrix $I \in \mathbb{R}^{m\times m}$ und setze $i_{ii} = \cos(\alpha)$, $i_{ij} = -\sin(\alpha)$, $i_{ji} = \sin(\alpha)$, $i_{jj} = \cos(\alpha)$.

   Bsp: $I = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow Q'^T = \begin{pmatrix} \cos(\alpha) & 0 & \sin(\alpha) \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin(\alpha) & 0 & \cos(\alpha) \end{pmatrix}$

5. Setze in Rotationsmatrix $\sin(\alpha) = \frac{a_{ij}}{w}$ und $\cos(\alpha) = \frac{a_{jj}}{w}$

   Bsp: $Q'^T = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

6. Berechne $Q'^T \cdot A = A'$

   Bsp: $\begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \\ -1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 \\ 0 & 1/\sqrt{2} \end{pmatrix}$

7. Falls A' keine obere Dreiecksmatrix, wiederhole (finde Q''^T etc.) bis alle nötigen Elemente eliminiert.

   Bsp: $Q''^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{2}/\sqrt{3} & 1/\sqrt{3} \\ 0 & -1/\sqrt{3} & \sqrt{2}/\sqrt{3} \end{pmatrix}, A'' = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3}/\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

8. Wenn $A'' = R$ gefunden, berechne $Q = (Q''^T \cdot Q'^T)^T$

   $\Longrightarrow A = Q \cdot R$

Anwendung für kleinste Quadrate:

Kleinste Quadrate mit QR-Zerlegung

Löst man ein Optimierungsproblem mit dem Computer, liefert das in 10.1 beschriebene Verfahren ungenaue Lösungen (da numerisch instabil). Das Lösungsverfahren mittels QR-Zerlegung ist besser. **In Aufgabe nur machen, wenn explizit verlangt!**

Vorgehen:

1. Man bestimme A und c wie bei 10.1.

   Bsp: $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}$

2. Man führe die QR-Zerlegung durch $A = QR$

   Bsp: $Q = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \\ 0 & \sqrt{2}/\sqrt{3} & -1/\sqrt{3} \\ -1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{6} & 1/\sqrt{3} \end{pmatrix}, R = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3}/\sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$

3. Man berechne $d = Q^T \cdot c$

   Bsp: $d = Q^T \cdot c = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/\sqrt{3} \\ 2/\sqrt{3} \end{pmatrix}$

4. Man berechne löse das Gleichungssystem $R_0 \cdot \boxed{x} = d_0$, wobei R_0 die extrahierte Dreiecksmatrix aus R ist und d_0 die dazugehörigen oberen Einträge von d

   optimale Lösung

   Bsp: $R_0 = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 1/\sqrt{2} \\ 0 & \sqrt{3}/\sqrt{2} \end{pmatrix}, \quad d_0 = \begin{pmatrix} 0 \\ \sqrt{2}/\sqrt{3} \end{pmatrix}$