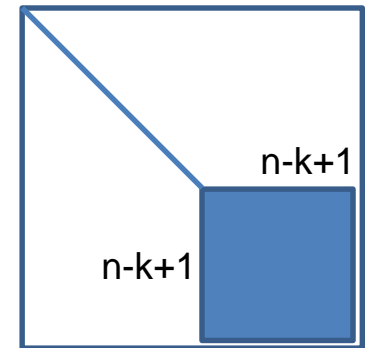


3.7.4. Kosten der Gauss-Elimination:

Im k -ten Teilschritt arbeitet man in einer $(n-k+1) \times (n-k+1)$ Untermatrix A_k

In dieser Matrix wird für $i=k+1, \dots, n$ neu berechnet :

$$a_{ij} = a_{ij} - l_{ik} a_{kj}$$



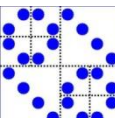
Das sind ca. $(n-k)^2$ Additionen und genauso viele Multiplikationen.

Insgesamt also

$$2 \sum_{k=1}^{n-1} (n-k)^2 = 2 \sum_{j=1}^{n-1} j^2 = \frac{2(n-1)(2n-1)n}{6} = \frac{2}{3} n^3 + O(n^2) \quad \text{flop}$$

Dazu kommen $O(n^2)$ flop für die Spaltenpivotsuche und $O(n^2)$ flop für das Auflösen des Dreiecksgleichungssystems.

Diese Kosten fallen aber praktisch nicht ins Gewicht gegenüber den obigen $\frac{2}{3}n^3$.

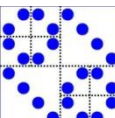


3.7.5 Beispiel zur Verdeutlichung der Kondition

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 1 \\ -1 & 1 & \ddots & \vdots & 1 \\ -1 & -1 & \ddots & 0 & 1 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ -1 & -1 & \dots & -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \downarrow \\ \\ \\ \vdots \\ \downarrow \end{matrix} \begin{matrix} + \\ \\ \\ \downarrow \end{matrix}$$

Eliminiere die erste Spalte durch Addieren der ersten Zeile:

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & 1 \\ 0 & 1 & & & 2 \\ 0 & -1 & 1 & & 2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & -1 & \dots & -1 & 2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \downarrow \\ \\ \\ \vdots \\ \downarrow \end{matrix} \begin{matrix} + \\ \\ \\ \downarrow \end{matrix}$$



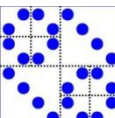
Im nächsten Schritt

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & 1 \\ 0 & 1 & & & 2 \\ 0 & 0 & 1 & & 4 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -1 & 4 \end{pmatrix}$$

und schließlich

$$U = \begin{pmatrix} 1 & & & & 1 \\ & 1 & & & 2 \\ & & 1 & & 4 \\ & & & \ddots & \vdots \\ & & & & 1 & 2^{n-2} \\ & & & & & 2^{n-1} \end{pmatrix}$$

In jedem Schritt verdoppelt sich der größte Eintrag in der Matrix!



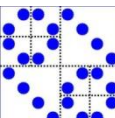
Kondition von A selbst ist $O(n)$, Kondition von U ist $O(2^{n-1})$!

Hilft Pivotsuche?

Im Verlauf der Gauss-Elimination *kann* die Kondition der Matrizen sehr stark anwachsen!

Aber: In der Praxis kommt das *so gut wie* nie vor!

Gauss-Elimination mit Pivotsuche *gilt als* numerisch stabil für gut konditionierte Systeme.



3.8 Methode der kleinsten Quadrate

(Least Squares, Normalgleichung)

Ausgangspunkt: Überbestimmtes System.

Mehr Gleichungen als Unbekannte

$$\boxed{\mathbf{A}} \mathbf{x} = \mathbf{b}$$

Sei A eine $m \times n$ – Matrix mit $m > n$ und maximal vollem Rang:

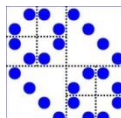
$\text{rang}(A) = n$, d.h. A bildet den \mathbf{R}^m in den ganzen \mathbf{R}^n ab.

Das System $Ax = b$ ist dann i.A. nicht lösbar!

Versuche, das Problem so gut wie möglich zu lösen!

Kompromiss!

Minimiere dazu die Abweichung $Ax - b$ in passender Norm!



Beispiele:

$$\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} x_1 = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \Rightarrow x_1 = 1$$

$$x_1 = 0$$

$$x_1 = 2$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \Rightarrow x_1 = 1, x_2 \text{ beliebig}$$

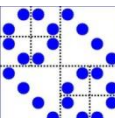
$$x_1 + 0 * x_2 = 0$$

$$x_1 + 0 * x_2 = 2$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (x_1 + x_2) = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} \Rightarrow x_1 + x_2 = 1$$

$$x_1 + x_2 = 0$$

$$x_1 + x_2 = 2$$



Minimiere die Abweichung $Ax - b$ in passender Norm!

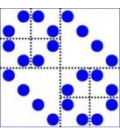
Am besten eignet sich dazu die euklid'sche Norm, da sie auf eine differenzierbare Funktion f führt:

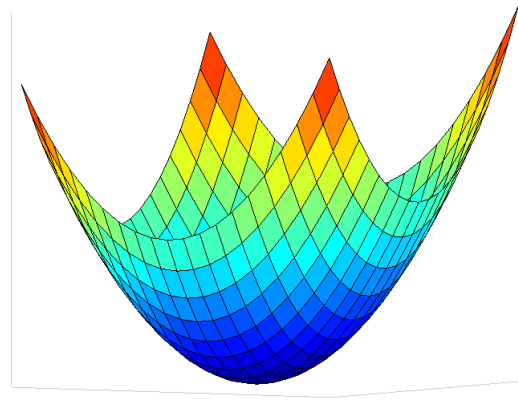
$$\mathbf{3.8.1. : \quad \min}_x \|Ax - b\|_2^2$$

$$f(x_1, \dots, x_n) := \|Ax - b\|_2^2 =$$

$$= (Ax - b)^T (Ax - b) = x^T A^T Ax - 2x^T A^T b + b^T b =$$

$$= \left\| \begin{pmatrix} \left(\sum_{j=1}^n a_{1,j} x_j \right) - b_1 \\ \vdots \\ \left(\sum_{j=1}^n a_{m,j} x_j \right) - b_m \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \sum_{k=1}^m \left(\left(\sum_{j=1}^n a_{k,j} x_j \right) - b_k \right)^2$$





Die Funktion f beschreibt einen Paraboloiden (n-dim. Parabel).

Das eindeutige Minimum dieser Funktion ist an der Stelle, an der die Ableitung gleich Null ist (waagrechte Tangente).

$$0 = \frac{df}{dx_i} = 2 \sum_{k=1}^m \left(\sum_{j=1}^n a_{k,j} x_j - b_k \right) a_{k,i} \quad \text{für } i=1, \dots, n$$

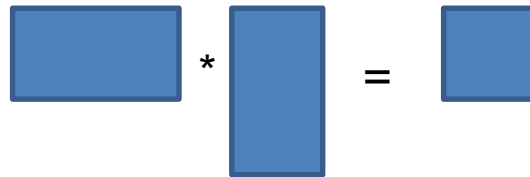
oder

$$\sum_{k=1}^m a_{k,i} \sum_{j=1}^n a_{k,j} x_j = \sum_{k=1}^m a_{k,i} b_k \quad \text{für } i=1, \dots, n$$

In Matrixschreibweise: $(A^T Ax)_i = (A^T b)_i, i=1, \dots, n$

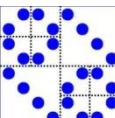
3.8.2. Normalgleichung zu $Ax=b$: $A^T Ax = A^T b$

$$A^T \cdot (Ax = b) \Rightarrow A^T Ax = A^T b$$



Die Matrix $A^T A$ ist eine $n \times n$ – Matrix von Rang n (wenn A Rang n hat) und beschreibt daher ein eindeutig lösbares, quadratisches lineares Gleichungssystem.

Allerdings ist die Kondition von $A^T A$ oft sehr viel schlechter als die von A , denn:



$$\begin{aligned}
 \text{cond}_2(A^T A) &= \|A^T A\|_2 \cdot \|(A^T A)^{-1}\|_2 = \\
 &= \sqrt{\lambda_{\max}(A^T A A^T A) * \lambda_{\max}((A^T A)^{-1} (A^T A)^{-1})} = \\
 &= \lambda_{\max}(A^T A) \cdot \lambda_{\max}(\text{inv}(A^T A)) = \\
 &= \lambda_{\max}(A^T A) / \lambda_{\min}(A^T A) = \sigma_{\max}^2(A) / \sigma_{\min}^2(A) = \\
 &= \|A\|_2^2 \cdot \|A^{-1}\|_2^2 = \text{cond}^2(A)
 \end{aligned}$$

Im folgenden Abschnitt werden wir daher ein besseres Verfahren zur Lösung dieses Problems kennen lernen.

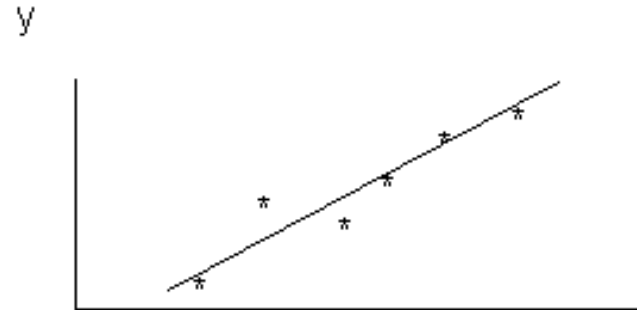
Dazu werden besser orthogonale Matrizen verwendet, um diese Konditionsverschlechterung zu vermeiden.

3.8.3. Lineares Ausgleichsproblem (Ausgleichsgerade)

Gegeben: Punktepaare in der Ebene , (x_i, y_i) , $i=1, \dots, n$;

Gesucht: beste Gerade, die möglichst nahe an den Punkten liegt.

$$y = g(x) = ax + b .$$



Es soll also gelten:

$$\begin{pmatrix} a + bx_1 \\ \vdots \\ a + bx_n \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$$

oder in Matrixschreibweise

$$A \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} \approx y \quad \text{mit} \quad A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{pmatrix}, \quad \text{und} \quad y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}.$$

Die Normalgleichung lautet also

$$A^T A \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n & \sum_{j=1}^n x_j \\ \sum_{j=1}^n x_j & \sum_{j=1}^n x_j^2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sum_{j=1}^n y_j \\ \sum_{j=1}^n x_j y_j \end{pmatrix}.$$

Die Lösung dieses 2 x 2 – Gleichungssystems liefert a und b, und damit die gesuchte Gerade $y = ax + b$.

Allgemeiner:

Ansatzfunktionen $g_1(x), \dots, g_m(x)$ z.B. $\cos(kx)$ und

Punkte $(x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$, $n > m$

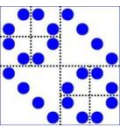
Gesucht : $f(x) = \sum_{k=1}^m a_k g_k(x)$ mit $f(x_j) \approx y_j, j = 1, \dots, n$

Mit $G = \begin{pmatrix} g_1(x_1) & \cdots & g_m(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ g_1(x_n) & \cdots & g_m(x_n) \end{pmatrix}$ ist dann $G^T G \begin{pmatrix} a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{pmatrix} = G^T \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}$

zu lösen.

Ergebnis ist die ‚näheste‘ Funktion an den vorgegebenen Punkten, die aus den g_1, \dots, g_m linear zusammengesetzt ist.

$f(x) = a \cdot 1 + b \cdot x^2 + c \cdot \sin(3x) + d \cdot e^{-x}$, optimale a, b, c, d



Beispiel: Schwingungsanteile

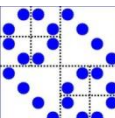
Gemessenes Audio-Signal $y = (y_1, \dots, y_n)$ an Stellen $x = (x_1, \dots, x_n)$

Gesucht: Frequenzen, Schwingungsanteile

Ansatzfunktionen: $g_k(x) = \cos(kx), k = 0, \dots, m$

$$f(x) = a_0 + a_1 \cos(x) + \dots + a_m \cos(mx) \quad \longrightarrow \quad f(x_j) = y_j, j = 1, \dots, n$$

$$\begin{pmatrix} 1 & \cos(x_1) & \cdots & \cos((m-1)x_1) & \cos(mx_1) \\ 1 & \cos(x_2) & \cdots & \cos((m-1)x_2) & \cos(mx_2) \\ \vdots & \vdots & & \vdots & \vdots \\ 1 & \cos(x_{n-1}) & \cdots & \cos((m-1)x_{n-1}) & \cos(mx_{n-1}) \\ 1 & \cos(x_n) & \cdots & \cos((m-1)x_n) & \cos(mx_n) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_{m-1} \\ a_m \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_{n-1} \\ y_n \end{pmatrix}$$



3.9. Die QR-Zerlegung einer Matrix

Schon vorher haben wir bemerkt:

- $\text{cond}(U)$ in der Gauß-Elimination ev. groß, auch bei kleinem $\text{cond}(A)$;
- falls A schlecht konditioniert: was ist der Rang von A ? Welche Pivotelemente werden wir als 0?
- überbestimmte Systeme: $\text{cond}(A^T A)$ oft sehr groß.

Andererseits: $\text{cond}(QA) = \text{cond}(A)$, falls Q orthogonal.

Also sind orthogonale Matrizen sehr gut für äquivalente Umformungen von A geeignet (vgl. LU-Zerlegung).

Außerdem gilt: $\mathbf{Q}^{-1} = \mathbf{Q}^T$.

Also sind Gleichungssysteme in \mathbf{Q} sehr leicht zu lösen.

Versuche daher, analog zur LU-Zerlegung $\mathbf{A}=\mathbf{LR}$,
eine Zerlegung der Form

$$\mathbf{A} = \mathbf{QR}$$

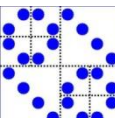
zu bestimmen mit

\mathbf{Q} orthogonal

\mathbf{R} obere Dreiecksmatrix

Vorteile:

- numerisch stabiler als LU
- „ähnliche“ Kosten, zumindest in $O()$ bis auf Faktor
- Systeme in \mathbf{Q} und \mathbf{R} leicht zu lösen
- auch für überbestimmte Systeme.

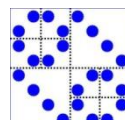


Orthogonale 2 x 2 – Matrix :

Frage: orthogonale 1 x 1 – Matrix?

$$G = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & -\cos(\varphi) \end{pmatrix}$$
 heißt **Givensreflexion**. Denn

$$\begin{aligned}
 G^T G &= G G = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & -\cos(\varphi) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & -\cos(\varphi) \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} \cos^2(\varphi) + \sin^2(\varphi) & \cos(\varphi)\sin(\varphi) - \sin(\varphi)\cos(\varphi) \\ \sin(\varphi)\cos(\varphi) - \cos(\varphi)\sin(\varphi) & \sin^2(\varphi) + \cos^2(\varphi) \end{pmatrix} = \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix};
 \end{aligned}$$



Wilkinson, Givens, Forsythe, Householder, Henrici, F.L.Bauer



$$\left\{ \text{Alternativ **Givensrotation:** } \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ -\sin(\varphi) & \cos(\varphi) \end{pmatrix} \right\}$$

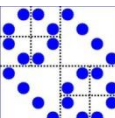
G ist eindeutig bestimmt durch den 'Winkel' φ .

Bestimme nun φ so, dass

$$\tilde{A} = GA = \begin{pmatrix} \tilde{a}_{11} & \tilde{a}_{12} \\ \tilde{a}_{21} & \tilde{a}_{22} \end{pmatrix} \quad \text{obere Dreiecksmatrix wird.}$$

Dazu muss gelten:

$$\tilde{a}_{21} = (\sin(\varphi) \quad -\cos(\varphi)) \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \end{pmatrix} = \sin(\varphi)a_{11} - \cos(\varphi)a_{21} \stackrel{!}{=} 0$$



Lösung:

$$\cot(\varphi) = \frac{a_{11}}{a_{21}}; \quad \varphi = \operatorname{arcctg}\left(\frac{a_{11}}{a_{21}}\right) \quad \text{oder} \quad \varphi = \operatorname{arctg}\left(\frac{a_{21}}{a_{11}}\right)$$

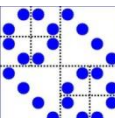
Ist $a_{21} = 0$, so ist keine weitere Transformation nötig!

Numerisch stabilere Art der Berechnung :

(a_{21} oder a_{11} könnten fast 0 sein):

$$\rho = \operatorname{sign}(a_{11})\sqrt{a_{11}^2 + a_{21}^2}; \quad \cos(\varphi) = \frac{a_{11}}{\rho}; \quad \sin(\varphi) = \frac{a_{21}}{\rho};$$

$$\sin(\varphi)a_{11} - \cos(\varphi)a_{21} = \frac{a_{21}}{\rho}a_{11} - \frac{a_{11}}{\rho}a_{21} = 0; \quad \left(\frac{a_{21}}{\rho}\right)^2 + \left(\frac{a_{11}}{\rho}\right)^2 = 1;$$

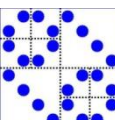


3.9.3. Givens-Reflexion für den allgemeinen $n \times n$ – Fall:

n -dimensionale Givens-Reflexion ist im Wesentlichen wie die Einheitsmatrix, bis auf den gerade zu betrachtenden 2×2 – Unterblock.

Dieser Block wird wieder - wie oben definiert - abhängig von φ bestimmt.

Man eliminiert wieder in der ersten Spalte $a_{2,1}, \dots, a_{m,1}$, und dann entsprechend in der zweiten Spalte die Unterdiagonalelemente, usw. wie bei Gauss.



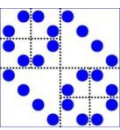
Zur Elimination eines Elementes a_{ij} der Matrix A multiplizieren wir $G_{ij} \cdot A$.

Dieses Produkt verändert nur die i -te und die j -te Zeile von A . Es genügt, vom Gesamt-System nur diesen 2×2 – Teil zu betrachten. Also muss wieder

$$\varphi = \operatorname{arccotg} \left(\frac{a_{jj}}{a_{ij}} \right) \text{ gesetzt sein wie oben. } (1 \rightarrow j \text{ und } 2 \rightarrow i)$$

Mit einer solchen Matrix G_{21} wird dann im ersten Schritt a_{21} zu Null gemacht.

$$G_{21} = \begin{pmatrix} G & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}, \quad G = \begin{pmatrix} \cos(\varphi) & \sin(\varphi) \\ \sin(\varphi) & -\cos(\varphi) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c & s \\ -s & c \end{pmatrix}$$





Genauere Analyse eines allgemeinen Eliminationsschritts:



$$\begin{pmatrix} \ddots & & & & & & \\ & & & & & & \\ \boxed{j} & \boxed{c} & & \boxed{s} & & & \\ & & \ddots & & & & \\ & & & & & & \\ \boxed{i} & \boxed{s} & & \boxed{-c} & & & \\ & & & & \ddots & & \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \ddots & & & & & & \\ & 0 & \boxed{a_{jj}} & & \boxed{a_{ji}} & & \\ & 0 & 0 & \ddots & & & \\ & 0 & \boxed{a_{ij}} & & \boxed{a_{ii}} & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \uparrow & \vdots & \ddots & \end{pmatrix} = G_{i,j} \cdot A$$

k

verändert nur j-te und i-te Zeile;

i-te Zeile: $a_{ik} \rightarrow sa_{jk} - ca_{ik}$ für $k=j, \dots, n$

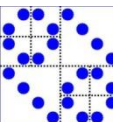
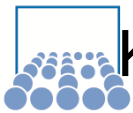
speziell: $a_{ij} \rightarrow sa_{jj} - ca_{ij} = 0$! soll Null werden

Legt daher φ fest.

j-te Zeile: $a_{jk} \rightarrow ca_{jk} + sa_{ik}$ für $k=j, \dots, n$

mit c und s zu obigen φ

Keine extra Pivotszeile sondern Kombination zweier Zeilen!



Verwende der Reihe nach $G_{21}, G_{31}, \dots, G_{n1}$

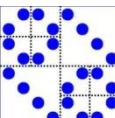
zur Bearbeitung der ersten Spalte,

also um $a_{21}, a_{31}, \dots, a_{n1}$ zu Null zu machen,

und danach $G_{32}, G_{42}, \dots, G_{n2}$, \dots , G_{n-1n-2}, G_{nn-2} , und G_{nn-1}

um $a_{32}, a_{42}, \dots, a_{n2}$, \dots , a_{n-1n-2}, a_{nn-2} , und a_{nn-1}

zu Null zu machen.



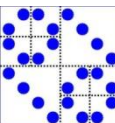
Die Reihenfolge, in der die $a_{j,i}$ zu Null gemacht werden, ist gegeben durch:

$$\begin{array}{ccccccc}
 & \boxed{\cdot} & & & & & \cdot \\
 1 & & \boxed{\cdot} & & & & \\
 2 & & n & & \boxed{\cdot} & & \\
 \vdots & & \vdots & & & \boxed{\cdot} & \\
 n-1 & 2n-3 & \dots & n(n-1)/2 & & \boxed{\cdot} &
 \end{array}$$

Jeweils nötig ist eine Multiplikation mit Givens-Reflexion

$$\mathbf{G}_{i,j}, \quad i=1, \dots, n-1 \quad \text{und} \quad j=i+1, \dots, n.$$

Also benötigt man insgesamt $n(n-1)/2$ Givensreflexionen um eine quadratische $n \times n$ –Matrix auf Dreiecksgestalt zu transformieren.



Man benutze also immer das Diagonalelement a_{jj} und eine Kombination von i -ter/ j -ter Zeile, um a_{ij} zu Null zu machen.

$$Q^T := G_{n,n-1} G_{n,n-2} \cdots G_{n-1,n-2} \cdots G_{n1} \cdots G_{21}$$

$$Q^T A = G_{n,n-1} G_{n,n-2} \cdots G_{n-1,n-2} \cdots G_{n1} \cdots G_{21} A = R$$

mit einer oberen Dreiecksmatrix R .

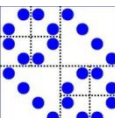
Daher ist

$$Q = G_{21} \cdots G_{n1} \cdots G_{n,n-1}, \text{ da } G_{ij}^T = G_{ij} \text{ und } A=Q^*R.$$

Q ist gegeben durch die einzelnen G_{ij} ;

jedes G_{ij} ist eindeutig gegeben durch das φ_{ij} , das nötig war, um genau ein a_{ij} zu eliminieren.

Q wird meist nicht explizit berechnet. Speichere nur die G_s .





Genauso kann man für eine $m \times n$ Matrix A ($m > n$) mit $\text{rank}(A)=n$ eine QR-Zerlegung berechnen

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

Wie bei der Gauss-Elimination eliminiert man also mit den Diagonalelementen der Reihe nach sämtliche Unterdiagonalelemente.

Der Vorteil der QR-Zerlegung:

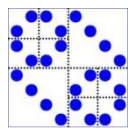
$$\text{cond}(A) = \text{cond}(QR) = \text{cond}(R)$$

Gut für schlecht konditionierte Systeme

Anwendbar auf rechteckige Systeme

Andere Orthogonalisierungsverfahren:

- Gram-Schmidt (orthonormalisiere Vektoren), geo. Proj.
- Householder (erzeuge in einem Schritt eine ganze Nullspalte). $H = I - 2 u u^T$, $\|u\|_2 = 1$.

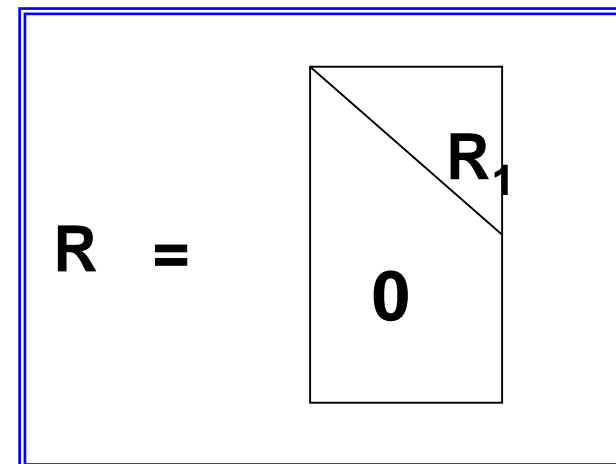


3.9.4. Anwendung bei Linearer Ausgleichsrechnung:

$$\begin{aligned} \min_x \|Ax - b\|_2 &= \min_x \|QRx - b\|_2 = \\ &= \min_x \|Q^T(QRx - b)\|_2 = \min_x \|Rx - Q^T b\|_2 \end{aligned}$$

da Q orthogonal und euklid'sche Norm.

R ist obere Dreiecksmatrix der Dimension $m \times n$ und vollen Ranges n .



Das obige Minimum erhält man wegen

$$\min_x \left\| \begin{pmatrix} R_1 \\ 0 \end{pmatrix} x - Q^T b \right\|_2^2 = \min_x \left\| \begin{pmatrix} R_1 x \\ 0 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \tilde{b}_1 \\ \tilde{b}_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 = \min_x \left\| R_1 x - \tilde{b}_1 \right\|_2^2 + \left\| \tilde{b}_2 \right\|_2^2$$

aus der Lösung des Dreieckssystems

$$R_1 x = \tilde{b}_1$$

Der Wert des Minimums ist gegeben durch $\left\| \tilde{b}_2 \right\|_2^2$

$$\min_x \left\| \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \mathbf{1} & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|_2 = \min_x \|Ax - b\|_2$$

Erster Schritt: $\mathbf{a}_{21} \rightarrow 0$:

$$\begin{pmatrix} c & s & 0 \\ s & -c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \mathbf{1} & 1 \\ \mathbf{1} & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} c+s & c+s \\ s-c & s-c \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} \end{pmatrix}$$

mit

$$c = s = 1/\sqrt{2}, \quad \varphi = \pi/4$$

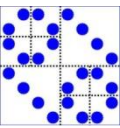


$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & c & s \\ 0 & s & -c \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & s \\ 0 & -c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

mit $c = 0, s = 1, \varphi = \pi/2$

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

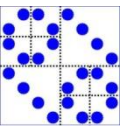
$Q^T \cdot A = R$



Also $Q = \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 & 1/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} & 0 & -1/\sqrt{2} \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$

Anwendung auf Minimierungsproblem :

$$\begin{aligned} \min_x \left\| Ax - \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|_2 &= \min_x \left\| \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1/\sqrt{2} & -1/\sqrt{2} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|_2 = \\ &= \min_x \left\| \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot x - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|_2 = \min_x \left\| \begin{pmatrix} \sqrt{2} & \sqrt{2} \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot x - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|_2 \end{aligned}$$



Lösung x als Lösung des Dreiecksgleichungssystems:

$$x = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \end{pmatrix}$$

In diesem Fall liefert x sogar eine genaue Lösung von $Ax=b$, da der Fehlerterm $\|b_2\|$ gleich Null ist.

QR-Zerlegung ist in dieser Form anwendbar für beliebige rechteckige Matrix A , so lange A vollen Rang besitzt.

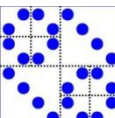
Kosten des QR-Verfahrens mit Givens für $n \times n$ – Matrix:
 $2n^3 + O(n^2)$ (also teurer als Gauss-Elimination mit $2n^3/3$)

Ein Eliminationsschritt bei Spalte k :

$$(2 \text{ mult} + 1 \text{ add})2k = 6k \text{ flop}$$

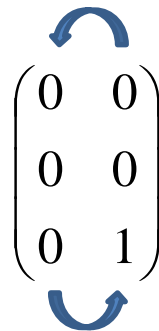
Insgesamt:
$$\sum_{k=n-1}^2 (k-1) \cdot 6k = 2n^3 + O(n^2)$$

Bei $m \times n$ – Matrix mit $m > n$ und $\text{Rang}(A)=n$: $n^2 (3m-n)$



- schlecht konditioniertem Gleichungssystem
- überbestimmtem Gleichungssystem mit vollem Rang (an Stelle der Normalgleichung), wie oben beschrieben
- allgemeinem nichtquadratischen System in der Form $QAP = R$ mit Permutation P zum Vertauschen von Spalten. (P ist nötig, um einen Block vollen Ranges nach vorne/oben zu transportieren)

Beispiel:

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$


- Entdeckung fast linear abhängiger (eigentlich überflüssiger) Gleichungen oder Unbekannter (numerische Bestimmung des Rangs von A)
- Reduktion der Matrix auf den wesentlichen Teil (Noise-reduction)

$$A = (Q_1 \quad Q_2) \cdot \begin{pmatrix} R & S \\ 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \approx Q_1 \cdot (R \quad S) = (Q_1 R \quad Q_1 S)$$

3.10 Regularisierung

In vielen praktischen Anwendungen hat man zwar ein überbestimmtes lineares Gleichungssystem vorliegen, aber so, dass die Normalmatrix $A^T A$ auch noch (fast) singulär ist!

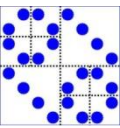
Dadurch erhält man bei der Lösung dieses Problems einen Vektor x , der extrem groß ist:

Ist in $Ax=b$ die Matrix A (fast) singulär \rightarrow

\rightarrow $\| \text{inv}(A) \|$ sehr groß \rightarrow

\rightarrow $\| x \| = \| \text{inv}(A) * b \|$ kann sehr groß sein.

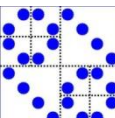
$\text{inv}(A)$ gefährlich, da schlecht konditioniert, und daher kleinste Rundungsfehler in b große Fehler in x erzeugen!

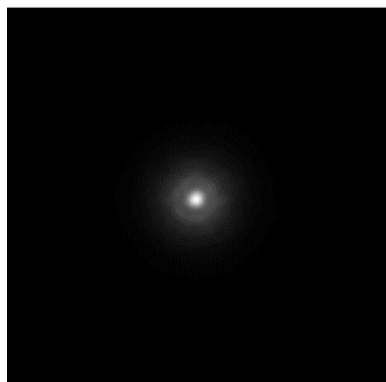


Durch Mess/Rundungsfehler enthält aber die rechte Seite b viele kleine Störungen (noise, Rauschen), die in der berechneten Näherungslösung x dann sehr groß werden, so dass - selbst bei exakter Rechnung - x unbrauchbar ist.

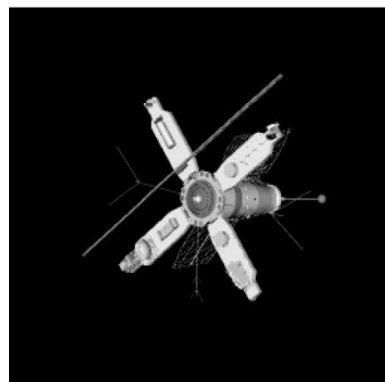
$$\tilde{x} = A^{-1}(b + \Delta b) = A^{-1}b + A^{-1}\Delta b = x + \underbrace{A^{-1}\Delta b}$$

Störanteil
Viel größer als x

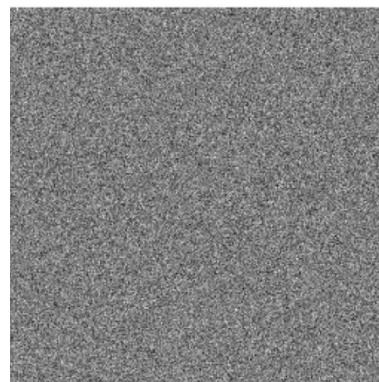




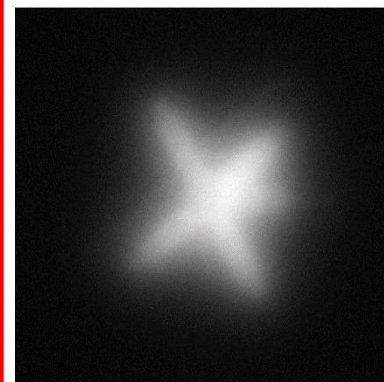
*



+



=



$$A * x + n = b$$

Ausweg:

Suche ‚vernünftige‘ Least Squares Lösung durch Minimierung mit Nebenbedingung:
 ‚ x soll nicht zu groß werden‘.

$$\min_x \left(\|Ax - b\|_2^2 + \gamma^2 \|x\|_2^2 \right)$$

Minimierung \leftrightarrow Nullstelle der Ableitung führt auf das sog. regularisierte Gleichungssystem

$$\left(A^T A + \gamma^2 I \right) x = A^T b$$

Idee: Verschiebe $A^T A$ durch Aufaddieren von $\gamma^2 I$, so dass die neue Matrix besser konditioniert und spd ist.

Dann ist $\|inv(A^T A + \gamma^2 I)\|_2 \ll \|inv(A^T A)\|_2$

Daher führen in dem neuen Gleichungssystem die Rauschkomponenten in b nicht mehr zu einem extremen Anwachsen der Lösung x .

Man weiß, dass die gesuchte Lösung x nicht zu groß sein kann, und dies wird durch die Regularisierung gewährleistet.

γ heißt Regularisierungsparameter und die hier beschriebene Methode heißt
Tikhonov-Regularisierung.

Regularisierung muss häufig angewendet werden bei Problemen der Bildverarbeitung

(z.B. bei verrauschten, unscharfen Bildern)

Regularisierende Zusatzbedingungen:

- Beschränktheit der Lösung $\|x\|$
- Ev. Dünnbesetztheit der Lösung $(x_1, 0, \dots, 0, x_k, 0, \dots, 0)$
- Ev. Glattheit der Lösung $\Delta x_i \approx 0$
- Nähe zu schon bekannter Näherungslösung $\|x - x_{\text{approx}}\|$

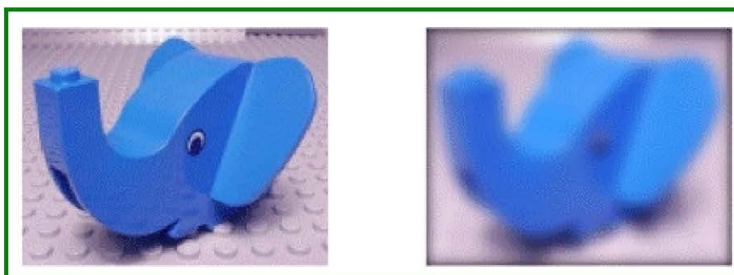


The Difficult Task of Image Deblurring

The underlying linear model:

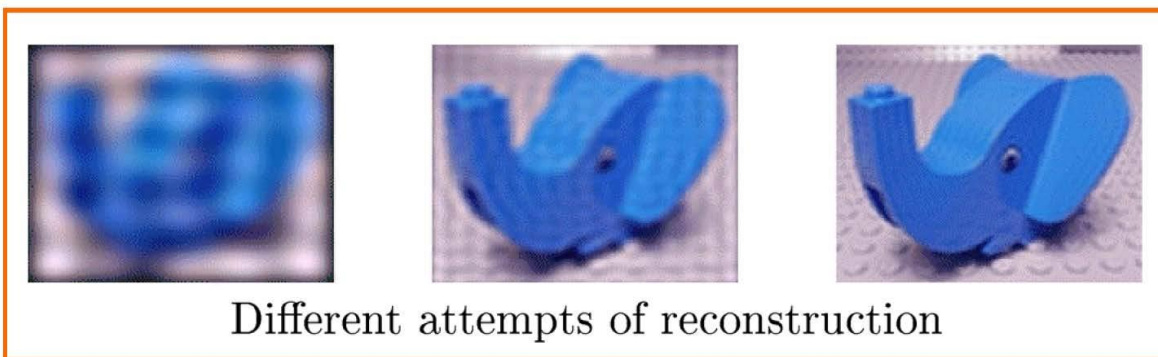
$$Ax = b \quad \rightarrow$$

$$\text{cond}(A) = \infty$$

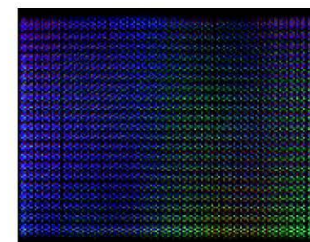


The “naive” reconstruction:

$$x_{\text{naive}} = A^{-1}b$$



Different attempts of reconstruction



Überblick über Lösungsmethoden in Abhängigkeit vom Charakter des Problems:

- Gauss-Elimination, LR, ($n \times n$, gut konditioniert)
- QR-Zerlegung, ($m \times n$, voller Rang)
- Regularisierung (extrem schlecht, singulär)

sind die wichtigsten Werkzeuge zur direkten Lösung von
 $Ax = b$.

