Übungsstunde 9

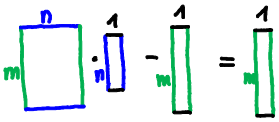
Methode der kleinsten Quadrate

gegeben: überbestimmtes LGS $\rightarrow$ #Glg > # Unbek.

Idee: Gleichungen lösen $Ax = c$

↳ gesucht: Lösung mit minimalen Fehlerquadraten (m Glg, n Unbek)

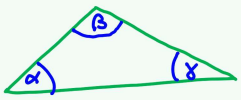
Fehlergleichung: $\underbrace{A}_{m \times n} \cdot \underbrace{x}_{n \times 1} - \underbrace{c}_{m \times 1} = \underbrace{r}_{m \times 1}$



Ziel: $x \in \mathbb{R}^n$ finden, sodass $\|r\|_2 = \|Ax - c\|_2$ minimal wird.

$\|r\|_2 = \sqrt{r_1^2 + \ldots + r_m^2}$

Beispiel



Bestimme alle Winkel:

- 2 Winkelmessungen: $\alpha = 42°$ und $\beta = 110°$
- Innenwinkelsumme ist 180°: $\gamma = 28°$
- Messung γ: $\gamma = 31°$

$\Rightarrow$ Fehler! Was ist der kleinste Fehler?

z.B.: $r_\alpha = 0°,\ r_\beta = 1°,\ r_\gamma = 2° \Rightarrow \|r\|_2 = \sqrt{5}$

$r_\alpha = 0°,\ r_\beta = 0°,\ r_\gamma = 3° \Rightarrow \|r\|_2 = \sqrt{9}$

$r_\alpha = 1°,\ r_\beta = 1°,\ r_\gamma = 1° \Rightarrow \|r\|_2 = \sqrt{3} \longleftarrow r_{min}$

10.1 Kleinste Quadrate

Mit dem Prinzip der „kleinsten Quadrate" kann man zwar überbestimmte Gleichungssysteme nicht lösen, man kann jedoch eine möglichst „gute" Lösung finden, indem man den quadratischen Fehler minimiert.

Bsp:
$$\begin{array}{rcrcl} 2x_1 & + & 3x_2 & = & 6 \\ 3x_1 & + & 4x_2 & = & 8 \\ 2x_1 & + & 1x_2 & = & 3 \end{array} \Rightarrow \text{überbestimmt}$$

Wir bilden die Differenz (= Fehler) aus der rechten und der linken Seite und nennen sie Residuenvektor r:

$$\begin{array}{rcrcrcl} 2x_1 & + & 3x_2 & - & 6 & = & r_1 \\ 3x_1 & + & 4x_2 & - & 8 & = & r_2 \\ 2x_1 & + & 1x_2 & - & 3 & = & r_3 \end{array}$$

Wir suchen $(x_1\ x_2)^T$, sodass $||r||$ minimal.
$\Rightarrow$ quadratischer Fehler minimal

Vorgehen:
Meist ist das Gleichungssystem in Aufgabe bereits in Form $A \cdot x - c = r$ gegeben (siehe oben).

1. Man bestimme A und c

   Bsp: $A = \begin{pmatrix} 2 & 3 \\ 3 & 4 \\ 2 & 1 \end{pmatrix},\ c = \begin{pmatrix} 6 \\ 8 \\ 3 \end{pmatrix}$

2. Man berechne $A^T A$ und $A^T c$

   Bsp: $A^T A = \begin{pmatrix} 17 & 20 \\ 20 & 2 \end{pmatrix},\ A^T c = \begin{pmatrix} 42 \\ 53 \end{pmatrix}$

3. Man löse das Gleichungssystem $A^T A \cdot x = A^T c$

   Bsp: $\begin{pmatrix} 17 & 20 \\ 20 & 2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 42 \\ 53 \end{pmatrix} \Rightarrow x = \begin{pmatrix} 2.67 \\ -0.17 \end{pmatrix}$

QR-Zerlegung

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, dann existiert $Q \in \mathbb{R}^{m \times m}$ orthogonal ($Q^{-1} = Q^T$), sodass $A = QR$, wobei $R = (R_0, 0)$ ist und $R_0 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ (obere Dreiecksmatrix)

$\Rightarrow$ Rang$(A) = n \Leftrightarrow R_0$ regulär und Lsg eindeutig

10.2 QR-Zerlegung

Mit der QR-Zerlegung kann eine beliebige Matrix $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ in das Produkt einer orthogonalen Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$ 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: $w = \sqrt{1^2 + 1^2} = \sqrt{2}$

Q: besteht oft aus einer Reihe von Givens-Rotationsmatrizen

↳ Jeder Multiplikationsterm gibt ein neues Nullelement!

↳ Winkel sollte bei jedem Schritt verschieden sein.

→ Vorgehen:

1. Wähle zu eliminierendes Element und nenne es a_{ij}
2. Notiere a_{ij} und a_{jj}
3. Berechne $w = \sqrt{a_{ij}^2 + a_{jj}^2}$
4. Finde Rotationsmatrix Q'^T
5. „Normiere" mit w → $\sin\alpha$ ⇒ $\frac{1}{w}\sin\alpha$
6. Berechne $Q'^T \cdot A = A'$
7. Falls A' keine obere Dreiecksmatrix → wiederhole 1 bis 7
8. Falls A'' obere Dreiecksmatrix → $A'' = R$; $Q = (Q''^T \cdot Q'^T)^T$ → $A = Q \cdot R$

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 $Q = (Q''^T \cdot Q'^T)^T$
$\Longrightarrow A = Q \cdot R$

Kochrezept Ausgleichsrechnung mit QR-Zerlegung

1. $R = Q^T \cdot A$ (QR-Zerlegung)
2. $d = Q^T \cdot c$
3. $R_0 \cdot x = d_0$
4. Residuen berechnen $\|r\|_2 = \|d_1\|_2$ → minimal

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

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 $R_0 \cdot x = d_0$, wobei R_0 die extrahierte Dreiecksmatrix aus R ist und d_0 die dazugehörigen oberen Einträge von d

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

Beispiel (Serie 9, Aufgabe 5)

$$\begin{aligned} x_1 + x_2 - 1 &= r_1 \\ x_2 - 3 &= r_2 \\ x_2 - 4 &= r_3 \end{aligned}$$

→ Löse dieses Ausgleichsproblem anhand der QR-Zerlegung

Fehlergleichung: $A \cdot x - c = r$

$$\Rightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ r_3 \end{pmatrix}$$

① $R = Q^T A$ → Ziel: A soll obere Dreiecksmatrix sein!

↳ a_{32} eliminieren → $Q' = \underbrace{\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & -\sin\alpha \\ 0 & \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}}_{\text{Rotationsmatrix}}$ → $Q'^T = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & \sin\alpha \\ 0 & -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix}$

↳ $A' = Q'^T \cdot A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\alpha & \sin\alpha \\ 0 & -\sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \cos\alpha + \sin\alpha \\ 0 & \cos\alpha - \sin\alpha \end{pmatrix} \overset{!}{=} \begin{pmatrix} * & * \\ * & * \\ * & 0 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow \cos\alpha = \sin\alpha \Rightarrow \alpha = \frac{\pi}{4} \Rightarrow \cos\alpha = \sin\alpha = \frac{\sqrt{2}}{2} = \frac{1}{\sqrt{2}}$

$\hookrightarrow A' = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_0 \\ 0 \end{pmatrix}$, wobei R_0 eine obere Dreiecksmatrix ist

$\rightarrow Q = (Q'')^T = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$, $R = A' = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \rightarrow R_0 = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix}$

② $d = Q^T c = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \sqrt{2} \\ 7 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 7/\sqrt{2} \\ 1/\sqrt{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} d_0 \\ d_1 \end{pmatrix}$

$\Rightarrow d_0 = \begin{pmatrix} 1 \\ 7/\sqrt{2} \end{pmatrix}$ und $d_1 = \frac{1}{\sqrt{2}}$

③ $R_0 \cdot x = d_0$

$\hookrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 7/\sqrt{2} \end{pmatrix} \Rightarrow \left| \begin{array}{r} x_1 + x_2 = 1 \\ 2x_2 = 7 \end{array} \right| \Rightarrow x = \begin{pmatrix} -5/2 \\ 7/2 \end{pmatrix}$

④ $A \cdot x - c = r$

$\hookrightarrow \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} -5/2 \\ 7/2 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -5/2 + 7/2 - 1 \\ 7/2 - 3 \\ 7/2 - 4 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{pmatrix} = r$

$\hookrightarrow$ Kontrolle: $\|r\|_2 = \sqrt{0^2 + \left(\frac{1}{2}\right)^2 + \left(-\frac{1}{2}\right)^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} = \|d_1\|_2 \rightarrow$ <u>minimal!</u>