3 Lineare Ausgleichsrechnung

(3.1) Lemma (Givensrotation)
Zu $x \in \mathbb{R}^N$ mit $x[k]^2 + x[n]^2 > 0$ für $k \neq n$, $k, n \in \{1, \ldots, N\}$, existiert eine Givensrotation

$$Q = c(e_k e_k^T + e_n e_n^T) + s(e_k e_n^T - e_n e_k^T) + \sum_{j \neq k,n} e_j e_j^T$$

mit $c^2 + s^2 = 1$ und $(Qx)[n] = 0$.
Es gilt $QQ^T = I_N$, also ist Q orthogonal.

Beweis. Aus $y = Qx$ folgt

$$y[i] = \begin{cases} x[i] & i \neq m, n \\ cx[m] + sx[n] & i = m \\ -sx[m] + cx[n] & i = n \end{cases}$$

Soll nun $y[n] = -sx[m] + cx[n] = 0$ gelten, dann folgt $sx[m] = cx[n]$. Zur stabilen Berechnung von c, s müssen wir Auslöschung vermeiden, also unterscheiden wir zwei Fälle:
Fall 1: Für $|x[n]| > |x[k]|$ setze $\tau = \dfrac{x[k]}{x[n]} = \dfrac{c}{s}$. Dann gilt

$$\tau^2 = \frac{c^2}{s^2} = \frac{c^2 + s^2 - s^2}{s^2} = \frac{1 - s^2}{s^2} = \frac{1}{s^2} - 1 \qquad \Longrightarrow \qquad s = \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}}, \qquad c = \tau s\,.$$

Fall 2: Für $|x[n]| \leq |x[k]|$ setze $\tau = \dfrac{x[n]}{x[k]} = \dfrac{s}{c}$. Dann gilt

$$\tau^2 = \frac{s^2}{c^2} = \frac{s^2 + c^2 - c^2}{c^2} = \frac{1 - c^2}{c^2} = \frac{1}{c^2} - 1 \qquad \Longrightarrow \qquad c = \frac{1}{\sqrt{1 + \tau^2}}, \qquad s = \tau c\,.$$

□

Eine Givensrotation beschreibt eine Drehung um den Winkel φ mit $(s, c) = (\sin\varphi, \cos\varphi)$ in der Ebene, die von e_m und e_n aufgespannt wird.

(3.2) Lemma (Householdertransformation)
Zu $x \in \mathbb{R}^N$, $x \neq 0$, existiert eine orthogonale Matrix $Q = I_N - \beta ww^T \in \mathbb{R}^{N \times N}$ mit $\beta = \frac{2}{w^T w}$, $w[1] = 1$ und $Qx = \sigma e_1\,, |\sigma| = |x|_2$.

Beweis. $Q = I_N - \beta ww^T$ ist orthogonal, es gilt also

$$\begin{aligned} I_N = Q^T Q = Q^2 &= (I_N - \beta ww^T)(I_N - \beta ww^T) \\ &= I_N - 2\beta ww^T + \beta^2 ww^T ww^T \\ &= I_N + \beta(-2 + \beta^2 ww^T) ww^T\,, \end{aligned}$$

d.h. es ist $\beta = 0$ oder $\beta = \frac{2}{w^T w}$. Es gilt $Qx = x - \beta^2 ww^T x = x - (\beta^2 w^T x)w$ und $|Qx|_2^2 = |x|_2^2$. Aus $Qx = \sigma e_1$ folgt $|\sigma| = |x|_2$. Weiterhin folgt aus $\sigma e_1 = x - (\beta^2 w^T x)w$

$$\sigma = \sigma e_1[1] = x[1] - \beta w^T x\,,$$

d.h. $\beta w^T x = \sigma - x[1]$ und $w = \frac{1}{x[1]-\sigma}(x - \sigma e_1)$.
Zur Vermeidung von Auslöschung betrachte zwei Fälle:
1. Fall: Für $x[1] > 0$ wähle $\sigma = -|x|_2$, d.h. $w = \frac{1}{x[1]+|x|_2}(x + |x|_2 e_1)$.
2. Fall: Für $x[1] \leq 0$ wähle $\sigma = |x|_2$, d.h. $w = \frac{1}{x[1]-|x|_2}(x - |x|_2 e_1)$.

$\square$

(3.3) Satz (QR-Zerlegung)
Sei $A \in \mathbb{R}^{K\times N}$. Dann existiert eine orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{K\times K}$ und eine obere Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{K\times N}$ mit $A = QR$.

Beweis. Wir führen eine Induktion über N durch. Für $N = 1$ folgt sofort $Q = 1,\ R = A$.
$N > 1$: Setze $x = A[1:K,1] \in \mathbb{R}^K$. Wir unterscheiden zwei Fälle:
1. Fall: $x[2:K] = 0_{K-1}$
Setze $Q_1 = I_N$ und $\sigma = A[1,1]$.
2. Fall: $x[2:K] \neq 0_{K-1}$. Setze

$$\sigma = \begin{cases} -|x|_2 & x[1] > 0, \\ |x|_2 & x[1] \leq 0, \end{cases} \qquad w \in \mathbb{R}^N \text{ mit } w[1] = 1,\, w = \frac{1}{x[1]-\sigma} x[2:K],$$

$$Q_1 = I_N - \frac{2}{w^T w} w w^T .$$

Damit gilt

$$Q_1 A = \begin{pmatrix} \sigma & R_1[1,2:N] \\ 0_{M-1} & A_2 \end{pmatrix},$$

mit

$$R_1[1,2:N] = Q_1[1,1:K]A[1:K,2:N] \in \mathbb{R}^{1\times N-1}$$

und

$$A_2 = Q_1[2:K,1:K]A[1:K,2:K] \in \mathbb{R}^{K-1\times N-1}.$$

Nun sei $A_2 = Q_2 R_2 \in \mathbb{R}^{K-1,N-1}$ eine QR-Zerlegung der Restmatrix. Also

$$\begin{aligned} A &= Q_1 \begin{pmatrix} \sigma & R_1[1,2:N] \\ 0_{K-1} & Q_2 R_2 \end{pmatrix} \\ &= \underbrace{Q_1 \begin{pmatrix} 1 & 0_{K-1}^T \\ 0_{K-1} & Q_2 \end{pmatrix}}_{=:Q} \underbrace{\begin{pmatrix} \sigma & R_1[1,2:N] \\ 0_{K-1} & R_2 \end{pmatrix}}_{=:R} \end{aligned}$$

$\square$

Bemerkung (Aufwand)
Zählt man alle Operationen zur Lösung des LGS $Ax = b$ zusammen, so erhält man den Aufwand der Verfahren (nur die Terme mit höchstem Exponenten):

$$\begin{aligned} &QR-Zerlegung: && \frac{4}{3}N^3\ Operationen, \\ &LR-Zerlegung: && \frac{2}{3}N^3\ Operationen, \\ &LL^T-Zerlegung: && \frac{1}{3}N^3\ Operationen. \end{aligned}$$

Wir betrachten die folgenden Spezialfälle:

1. $K = N$, A regulär:
   Es gilt $0 \neq \det A = \det Q \det R$, also ist $0 \neq \det R = \prod_{n=1}^{N} R[n,n]$, woraus $R[n,n] \neq 0$, $n = 1,\dots,N$, folgt.
   Eine Lösung von $Ax = b$ berechnet sich wie folgt: Aus $Q^T Ax = Q^T QRx = Q^T b$ folgt $Rx = Q^T b$; $x = R^{-1}(Q^T b)$ ist mit Rückwärtssubstitution in $O(N^2)$ Operationen lösbar.

2. $K > N$, $\operatorname{rang}(A) = N$
   Es existiert eine QR-Zerlegung $A = QR$ mit

   $$R = \begin{pmatrix} R[1:N,1:N] \\ 0 \end{pmatrix}$$

   Dann gilt:

   $$\begin{aligned} Ax = b \text{ ist lösbar } &\iff Rx = Q^T b = y \text{ ist lösbar} \\ &\iff y[N+1:K] = 0_{K-N} \end{aligned}$$

3. $K < N$, $\operatorname{rang}(A) = K$:
   Es existiert eine Permutationsmatrix P mit $AP = QR$ mit $R = \begin{pmatrix} R[1:K,1:K] & R[1:K,K+1:N] \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R_1 & R_2 \end{pmatrix}$. Dann gilt:

   $$Ax = b \iff AP\underbrace{P^T x}_{=:z} = b \iff QRz = b \iff Rz = Q^T b =: y$$

   Die spezielle Lösung ist $z[1:K] = R_1^{-1} y[1:K]$. Für die allgemeine Lösung wähle $z[K+1:N] \in \mathbb{R}^{N-K}$, dann folgt $z[1:K] = R_1^{-1}(b - R_2 z[K+1:N])$

Im Allgemeinen ist das lineare Gleichungssystem $Ax = b$ für $b \in \mathbb{R}^K$ und $A \in \mathbb{R}^{K \times N}$ nicht oder nicht eindeutig lösbar. Stattdessen untersuchen wir nun das Minimierungsproblem:

$$\text{Bestimme } x \in \mathbb{R}^N \text{ mit } |Ax - b|_2 = \text{Min!}$$

(3.4) Satz
Sei $A \in \mathbb{R}^{K \times N}$, $b \in \mathbb{R}^K$. Dann ist äquivalent:

(a) $|Ax - b|_2 \leq |Ay - b|_2 \quad \forall y \in \mathbb{R}^N$

(b) $x \in \mathbb{R}^N$ *löst die* Normalengleichung $A^T Ax = A^T b$.

Beweis. Betrachte

$$\begin{aligned} F(x) &= \frac{1}{2}|Ax - b|_2^2 \\ &= \frac{1}{2}(Ax - b)^T (Ax - b) \\ &= \frac{1}{2}x^T A^T Ax - \frac{1}{2}b^T Ax - \frac{1}{2}(Ax)^T b + \frac{1}{2}b^T b \end{aligned}$$

Algorithmus 4 Berechnung einer QR-Zerlegung und Lösung eines Gleichungssystems.

```
function x = qr_solve(A,b)
  [M,N] = size(A);
  for m = 1:min(N,M-1)
    [v,beta] = householder(A(m:M,m));
    if beta ~= 0
      w = beta * v' * A(m:M,m:N);
      A(m:M,m:N) = A(m:M,m:N) - v * w;
      A(m+1:M,m) = v(2:M-m+1);
    end
  end
  for m = 1:min(N,M-1)
    v = [1;A(m+1:M,m)];
    beta = 2 / (v' * v);
    if beta ~= 2
      b(m:M) = b(m:M) - beta*(v' * b(m:M)) * v;
    end
  end
  x = zeros(N,1);
  for n=min(N,M):-1:1
    x(n) = (b(n) - A(n,n+1:N) * x(n+1:N)) / A(n,n);
  end
return
```

„(a) $\implies$ (b)“
Es gilt $F(x) \leq F(y)$ für alle $y \in \mathbb{R}^N$, d.h. es gilt

$$\begin{aligned}\partial_n F(x) &= \frac{1}{2}e_n^T A^T A x + \frac{1}{2}x^T A^T A e_n - \frac{1}{2}b^T A e_n - \frac{1}{2}(Ae_n)^T b \\ &= e_n^T(A^T A x - A^T b) \\ &= 0\end{aligned}$$

Damit folgt $A^T A x = A^T b$.
„(b) $\implies$ (a)“
Mittels Taylorentwicklung folgt

$$\begin{aligned}F(y) &= F(x) + \nabla F(x)(y-x) + \frac{1}{2}(y-x)^T H_k(x)(y-x) \\ &= F(x) + \frac{1}{2}|A(y-x)|_2^2 \\ &\geq F(x)\end{aligned}$$

$\square$

Bemerkung
Die Normalengleichung ist lösbar. Sei dazu $y \in \mathrm{Kern}(A^T A)$. *Dann gilt* $A^T A y = 0$, *also* $y^T A^T A y = |Ay|_2^2 = 0$. *Somit ist* $y \in \mathrm{Kern}(A)$, $b^T(Ay) = (A^T b)^T y = 0$, *also* $A^T A x = A^T b$ *lösbar.*

Anwendungen

1. $N \ll K$, $\mathrm{rang} A = N$
   $A^T A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ *ist symmetrisch und positiv definit. Berechne eine Cholesky-Zerlegung* $LL^T = A^T A$ *und löse* $LL^T x = A^T b$.

2. $K < N$, $\mathrm{rang} A = K$
   $A^T A \in \mathbb{R}^{N\times N}$ *ist singulär. Berechne eine QR-Zerlegung* $A = QR$. *Damit gilt* $A^T A x = R^T Q^T Q R x = R^T R x = R^T Q b$.
   Ist $R[1:K, 1:K] = R_1$ *regulär, so löst* $x[1:K] = R_1^{-1} Q^T b, x[K+1:N] = 0_{N-K}$ *die Normalengleichung.*

3. *A hat nicht vollen Rang*
   Das Ausgleichsproblem ist nicht sachgemäß gestellt; es muss regularisiert werden.

Die Singulärwertzerlegung

(3.5) Satz
Sei $A \in \mathbb{R}^{K \times N}$ *mit* $R = \operatorname{rang} A$. *Dann existieren* Singulärwerte $\sigma_1, \ldots, \sigma_R > 0$ *und orthogonale Matrizen* $V \in \mathbb{R}^{K \times R}$, $U \in \mathbb{R}^{N \times R}$ *und eine Zerlegung*

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

mit $\Sigma \in \mathbb{R}^{R \times R}$, $\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_R)$.

Beweis. Die Matrix $A^T A \in \mathbb{R}^{N \times N}$ ist symmetrisch und positiv semidefinit mit rang $A = R$. Also existieren eine Orthonormalbasis $u_1, \ldots, u_n \in \mathbb{R}^N$ und Eigenwerte

$$\lambda_1 \geq \ldots \geq \lambda_R > \lambda_{R+1} = \ldots = \lambda_N = 0$$

mit $A^T A u_k = \lambda_k u_k$.
Dann gilt $A^T A U = U \Sigma^2$, mit $U[1:N,k] = u_k$, $\Sigma = \operatorname{diag}(\sqrt{\lambda_1}, \ldots, \sqrt{\lambda_R})$. Weiter gilt $U^T U = I_R$, also $U^T A^T A U = \Sigma^2$.
Definiere $V = AU\Sigma^{-1} \in \mathbb{R}^{K \times N}$, d.h. es ist $A = V \Sigma U^T$.
V ist orthogonal: $V^T V = \Sigma^{-1} U^T A^T A U \Sigma^{-1} = \Sigma^{-1} \Sigma^2 \Sigma^{-1} = I_R$.

□

Bemerkung
Es gilt

$$\begin{aligned} \operatorname{kern} A &= \operatorname{span}\{u_k \mid k = R+1, \ldots, N\}, \\ \operatorname{bild} A &= \operatorname{span}\{v_k \mid k = 1, \ldots, R\}, \quad v_k = V[1:K,k]. \end{aligned}$$

Damit ergibt sich die Darstellung

$$A = V \Sigma U^T = \sum_{k=1}^{R} \sigma_k v_k u_k^T, \quad Ax = \sum_{r=1}^{R} \sigma_k (u_k^T x_k) v_k$$

(3.6) Definition
Wir definieren die Pseudo-Inverse *durch* $A^+ = U \Sigma^{-1} V^T$. *Es gilt* $A^+ = \sum_{r=1}^{R} \frac{1}{\sigma_r} u_r v_r^T$ *und* $A^+ y = \sum_{r=1}^{R} \frac{1}{\sigma_r} (v_r^T y) u_r$.

(3.7) Lemma
Die Normalengleichung $A^T A x = A^T b$ *wird durch* $x = A^+ b$ *gelöst.*

Beweis. Sei dazu $x = A^+ b = U \Sigma^{-1} V^T b$. Dann gilt $\Sigma U^T x = V^T b$; durch Erweitern erhalten wir $U \Sigma V^T V \Sigma U^T x = U \Sigma V^T b$, also $A^T A x = A^T b$.

□

Die Tikhonov-Regularisierung

Zwei Probleme bleiben bei den bisherigen Verfahren bestehen:

Problem 1: Wenn eine Aufgabe schlecht konditioniert ist dann werden Datenfehler extrem verstärkt. Dies ist zum Beispiel der Fall bei $Ax = b$ mit $\kappa(A) \gg 1$.

Problem 2: Wenn eine Aufgabe nicht sachgemäß gestellt ist, ist sie entweder nicht eindeutig lösbar oder die Lösung ist nicht stetig von den Daten abhängig. Eine solche Situation tritt beispielsweise bei $|Ax - b|_2 = \min!$ für Kern $A \neq \{0\}$ auf.

Zu $F(x) = \min!$ betrachte $F_\alpha(x) = F(x) + \frac{\alpha}{2}|x|_2^2$, $\alpha > 0$, die Regularisierung von F. $F_\alpha(x) = \min!$ ist für $\alpha > 0$ sachgemäß gestellt. Die Aufgabe ist, einen Kompromiss zwischen großem Regularisierungsfehler bei großem α und schlechter Kondition bei kleinem α zu finden.

(3.8) Satz
Zu $A \in \mathbb{R}^{K \times N}$, $b \in \mathbb{R}^K$, $\alpha > 0$ existiert genau ein $x^\alpha \in \mathbb{R}^N$, welches die Tikhonov-Regularisierung

$$F_\alpha(x) := \frac{1}{2}|Ax - b|_2^2 + \frac{\alpha}{2}|x|_2^2$$

minimiert. Es gilt

$$x^\alpha = (A^T A + \alpha I_N)^{-1} A^T b.$$

Beweis. Es gilt

$$F_\alpha(x) = \frac{1}{2}|Ax - b|_2^2 + \frac{\alpha}{2}|x|_2^2 = \frac{1}{2}(x^T A^T A x - 2x^T A b + b^T b + \alpha x^T x),$$

sodass

$$\begin{aligned} \nabla F_\alpha(x) &= A^T A x - A^T b + \alpha x, \\ \nabla^2 F_\alpha(x) &= A^T A + \alpha I_N. \end{aligned}$$

Damit ist x^α Extremwert von $F_\alpha(x)$, wenn $\nabla F_\alpha(x) = 0_N$, also $A^T A x + \alpha x = A^T b$. Folglich ist x^α einziger kritischer Punkt und da $\nabla^2 F_\alpha(x^\alpha)$ positiv definit ist, ist x^α ein lokales Minimum. Weiterhin gilt $F_\alpha(x) \longrightarrow \infty$ für $|x|_2 \to \infty$, also ist x^α globales Minimum.

□

(3.9) Satz
Es gilt:

$$\lim_{\alpha \to 0} x^\alpha = \lim_{\alpha \to 0} (A^T A + \alpha I_N)^{-1} A^T b = A^+ b.$$

Beweis. Sei $A = V \Sigma U^T$ Singulärwertzerlegung mit $U = (u_1 | \dots | u_R)$, $V = (v_1 | \dots | v_R)$, $\Sigma = \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_R)$, σ_r^2 positive Eigenwerte von $A^T A$, $U^T U = V^T V = I_R$ und $R = \text{rang } A$. Dann gilt

$$A^T A = U \Sigma V^T V \Sigma U^T = U \Sigma^2 U^T$$

$$A^T b = U \Sigma V^T b = \sum_{r=1}^{R} u_r \sigma_r (v_r^T b)$$

Somit folgt

$$(A^TA+\alpha I_N)u_k \quad = \textstyle\sum_{r=1}^{R} u_r\sigma_r^2(u_r^Tu_k+\alpha u_k = (\sigma_k^2+\alpha)u_k$$

also

$$\begin{aligned} x^\alpha &= (A^TA+\alpha I_N)^{-1}\sum_{r=1}^{R} u_r\sigma_r(v_r^Tb) \\ &= \sum_{r=1}^{R}\frac{\sigma_r}{\sigma_r^2+\alpha}(v_r^Tb)u_r, \end{aligned}$$

und damit

$$\lim_{\alpha\to 0} x^\alpha = \sum_{r=1}^{R}\frac{1}{\sigma_r}(v_r^Tb)u^r = U\Sigma^{-1}V^Tb = A^+b.$$

□

(3.10) Folgerung

1. *$A^+ = \lim_{\alpha\to 0}(A^TA+\alpha I_N)^{-1}A^T$ ist eindeutig bestimmt.*
2. *Für* rang$A = N$ *gilt* $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$.

Bemerkung

A^+ ist eindeutig durch die Penrose-Axiome

$$(A^+A)^T = A^+A, \quad (AA^+)^T = AA^+, \quad A^+AA^+ = A^+, \quad AA^+A = A$$

bestimmt. Allgemein ist $(AB)^+ \neq B^+A^+$.

Bemerkung

Für die Kondition der Tikhonov-Regularisierung gilt

$$\begin{aligned} \kappa_2(A^TA+\alpha I_N) &= \|A^TA+\alpha I_N\|_2\|(A^TA+\alpha I_N)^{-1}\|_2 \\ &= \frac{\max\sigma_n^2+\alpha}{\min\sigma_n^2+\alpha} \le \frac{\rho^2(A)+\alpha}{\alpha}. \end{aligned}$$

Das Diskrepanz-Prinzip

Wir betrachten nun den Fall, dass die rechte Seite b nur ungefähr gegeben ist (z.B. wegen Messungenauigkeiten). Dazu definieren wir einen sogenannten *Noiselevel* $\delta > 0$ und zeigen: wenn δ kleiner wird, dann wird das optimale α kleiner. Genauer:

Sei $x = A^+b \in \mathrm{Bild}(A)$, also $Ax = b$, und es gelte $|b^\delta - b|_2 < \delta < |b|_2$.

Dann existiert zu δ ein $\alpha = \alpha(\delta)$ mit $x^\alpha = (A^TA+\alpha I_N)^{-1}A^Tb^\delta$ und $|Ax^\alpha - b^\delta|_2 = \delta$, und für $\delta \to 0$ gilt $x^\alpha \longrightarrow x$.

Beweis. Es gilt für

$$F^\delta(\alpha) = |Ax^\alpha - b^\delta|^2 - \delta^2 = \sum_{k=1}^{K}\frac{\alpha^2}{(\alpha+\sigma_k^2)^2}v_k^Tb^\delta - \delta^2$$

$F^{\delta}(0) = -\delta^2 < 0$, und $F^{\delta}(\alpha)$ ist für wachsendes α streng monoton wachsend.
Also existiert $\alpha = \alpha(\delta)$ mit $F^{\delta}(\alpha) = 0$ und $|b^{\delta}|_2 - \delta = |b^{\delta}|_2 - |Ax^{\alpha} - b^{\delta}|_2 \leq |Ax^{\alpha}|_2$.
Aus $(A^T A + \alpha I_N)x^{\alpha} = A^T b^{\delta}$ folgt $\alpha x^{\alpha} = A^T b^{\delta} - A^T A x^{\alpha}$ und

$$\alpha |Ax^{\alpha}|_2 = |A(A^T b^{\delta} - A^T A x^{\alpha})|_2 \leq |AA^T(Ax^{\alpha} - b^{\delta})|_2 \leq \|AA^T\|_2 \delta\,.$$

Also gilt

$$\alpha \leq \delta \frac{\|AA^T\|_2}{|Ax^{\alpha}|_2} \leq \delta \frac{\|AA^T\|_2}{|b^{\delta}| - \delta} \leq \|AA^T\|_2 \delta \longrightarrow 0 \text{ für } \delta \to 0$$

$\square$