Numerisches Rechnen

Lineare Ausgleichsrechnung

M. Grepl

J. Berger & R. O'Connor

Institut für Geometrie und Praktische Mathematik
RWTH Aachen

Wintersemester 2015/16

Vorlesungsinhalt

1. Fehleranalyse: Kondition, Rundungsfehler, Stabilität
   a) $\boldsymbol{y} = \boldsymbol{f}(\boldsymbol{x})$, Eingabefehler $\boldsymbol{\Delta x} \to$ Ausgabefehler $\boldsymbol{\Delta y}$
   b) Fehler aufgrund Gleitpunktdarstellung
   c) Fehler (durch Algorithmus) $\approx$ Fehler (durch Kondition)
2. Lineare Gleichungssysteme, direkte Lösungsverfahren
   geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n} \times \boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$;
   ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$
3. **Lineare Ausgleichsrechnung**
   geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{m} \times \boldsymbol{n}}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{m}}$, $\boldsymbol{m} > \boldsymbol{n}$;
   ges.: $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$, so dass $\boldsymbol{x}^* = \arg\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}} \|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2$

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 4.1-4.4, 4.7

- Das lineare Ausgleichsproblem
- Singulärwertzerlegung (SVD)

Was Sie mitnehmen sollten:

- Was ist ein lineares Ausgleichsproblem
- Wie ist das lineare Ausgleichsproblem konditioniert
- Welche Lösungsverfahren gibt es und wie stabil sind diese
- Definition, Eigenschaften und Anwendungen der SVD

Problemstellung

Bisher: Lineare Gleichungssysteme

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{n}$;
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$
- Annahme: $\det(\boldsymbol{A}) \neq 0$
  $\Rightarrow$ Spalten von $\boldsymbol{A}$ bilden eine Basis in $\mathbb{R}^{n}$
  $\Rightarrow$ $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$ eindeutig lösbar.

Jetzt: Lineare Ausgleichsrechnung

- geg.: $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$, $m > n$;
  ges.: $\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^{n}$, so dass $\boldsymbol{Ax} = \boldsymbol{b}$?
  $\Rightarrow$ im Allgemeinen nicht lösbar, d.h. $\boldsymbol{Ax} \neq \boldsymbol{b}$!
- Lösung: Bestimme $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{n}$, so dass

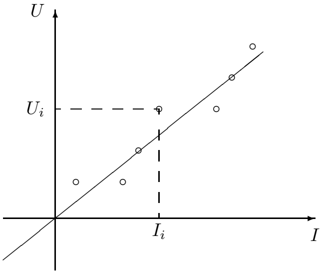
$$\boldsymbol{x}^* = \arg\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2^2$$

Beispiel 4.1

- Ohmsches Gesetz: $\boldsymbol{U = R\,I}$
- Aufgabe: Bestimme Widerstand $\boldsymbol{R}$ im Stromkreis aus einer Reihe von Messungen:

  $\boldsymbol{(U_i, I_i)}$ (Spannung, Stromstärke), $\boldsymbol{i = 1, \ldots, m}$.
- Problem: Messungen (Daten) sind mit Fehlern behaftet, d.h.

$$\boldsymbol{U_i \neq R\,I_i}\,, \quad \text{für fast alle } \boldsymbol{i = 1, \ldots, m}.$$



Beispiel 4.1

D:MV

Vorgehen:

- Fehler in Messung i (Residuum)

$$r_i = R\,I_i - U_i, \quad i = 1, \ldots, m$$

- Ein Maß für den Fehler: Summe der Fehlerquadrate

$$f(R) := \sum_{i=1}^{m} r_i^2 = \sum_{i=1}^{m} (R\,I_i - U_i)^2$$

- Bestimme Widerstand R^* so, dass Fehler minimal wird

$$R^* = \arg\min_{R} f(R)$$

- Extremum der quadratischen Funktion $f(R)$

$$f'(R^*) = 0 \quad \Rightarrow \quad R^* = \left(\sum_{i=1}^{m} U_i\,I_i \right) \Big/ \left(\sum_{i=1}^{m} I_i^2 \right)$$

Polynomial Data-Fitting

Anstelle Ursprungsgerade, betrachte allgemeineren Fall ...

Gegeben: D:ML

- m Messungen an den Punkten $y_1, y_2, \ldots, y_m$ mit zugehörigen Daten $z_1, z_2, \ldots, z_m$.
- Polynom $n-1$-ter Ordnung (wobei $n < m$)

$$f(y) = c_0 + c_1\, y + \ldots + c_{n-1}\, y^{n-1}$$

Summe der Fehlerquadrate

$$\sum_{i=1}^{m} (f(y_i) - z_i)^2$$

In Matrix-Vektor Notation

$$\|A\, x - b\|_2^2$$

mit ...

Polynomial Data-Fitting

mit ...

$$A = \begin{bmatrix} 1 & y_1 & \cdots & y_1^{n-1} \\ 1 & y_2 & \cdots & y_2^{n-1} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & y_m & \cdots & y_m^{n-1} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_{n-1} \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_m \end{bmatrix}$$

Aufgabe

Bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, so dass

$$x^* = \arg\min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

oder (gleichbedeutend)

$$\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A\,x - b\|_2$$

gilt.

Machine Vision – Optical Flow

- Definition: optical flow is the *apparent* motion of brightness patterns in the image.
- Eventuell nicht identisch mit dem (wahren) Geschwindigkeitsfeld im Bild
  - aperture problem
  - rotierende Kugel bei konstanter Beleuchtung vs. ruhende Kugel bei rotierender Beleuchtung
- Anwendungen
  - Optische Navigation von Robotern und Fahrzeugen
  - Optische Maus
  - Segmentierung (Erkennung von bewegten Objekten)
  - ...

Optical Flow Estimation

Aufgabe

- Bestimme das Geschindigkeitsfeld $\boldsymbol{u(x,y)}$ und $\boldsymbol{v(x,y)}$ aus zwei aufeinanderfolgenden Bildern, $\boldsymbol{I(x,y)}$, eines Videos.

Annahmen

- **Brightness Constancy**
  Helligkeit des gleichen Objekts/Punkts bleibt konstant in jedem Bild
- **Temporal Persistence**
  Geringfügige Bewegungen von einem Bild zum nächsten Bild
- **Spatial Coherence**
  Benachbarte Pixel im Bild haben die gleiche Geschwindigkeit (gehören zum gleichen Objekt)

Optical Flow Estimation

Brightness Constancy Equation

$$I(x, y, t) = I(x + \delta x, y + \delta y, t + \delta t).$$

Aus Taylor-Entwicklung der rechten Seite ergibt sich

$$\boxed{I_x\, u + I_y\, v + I_t = 0}$$

mit optischem Fluss (u, v) und partiellen Ableitungen $I_x = \frac{\partial I}{\partial x}$, $I_y = \frac{\partial I}{\partial y}$ und $I_t = \frac{\partial I}{\partial t}$.

Problem: eine Gleichung, zwei Unbekannte
$\Rightarrow$ Lösung nicht eindeutig

Aperture Problem: Komponente des optischen Flusses rechtwinklig zum Gradienten ∇I is unbekannt (vgl. "Barberpole Illusion").

Optical Flow Estimation

Spatial Coherence Constraint†

- Benachbarte Pixel haben gleichen optischen Fluss (u, v)
- Betrachte Nachbarn in einem 5×5 Fenster um das Pixel herum, d.h. 25 Pixel $p_1, \ldots, p_{25}$
- Wir erhalten 25 Gleichungen pro Pixel

$$\begin{bmatrix} I_x(p_1) & I_y(p_1) \\ I_x(p_2) & I_y(p_2) \\ \vdots & \vdots \\ I_x(p_{25}) & I_y(p_{25}) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} I_t(p_1) \\ I_t(p_2) \\ \vdots \\ I_t(p_{25}) \end{bmatrix}$$

†B.D. Lucas and T. Kanade (1981), An iterative image registration technique with an application to stereo vision. Proceedings of Imaging Understanding Workshop, pages 121–130.

Optical Flow Estimation

- Lineares Ausgleichsproblem mit

$$A = \begin{bmatrix} I_x(p_1) & I_y(p_1) \\ I_x(p_2) & I_y(p_2) \\ \vdots & \vdots \\ I_x(p_{25}) & I_y(p_{25}) \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix}, \quad b = -\begin{bmatrix} I_t(p_1) \\ I_t(p_2) \\ \vdots \\ I_t(p_{25}) \end{bmatrix}$$

- Lösung

$$(A^T A)\, x = A^T b$$

oder

$$\begin{bmatrix} \sum I_x I_x & \sum I_x I_y \\ \sum I_x I_y & \sum I_y I_y \end{bmatrix} \begin{bmatrix} u \\ v \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} \sum I_x I_t \\ \sum I_y I_t \end{bmatrix}$$

(Summation über alle Pixel im 5×5 Fenster)

- Matlab Demo D:ML

Definition

Lineares Ausgleichsproblem

Zu gegebenem $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$, bestimme $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{n}$, für dass

$$\|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}^* - \boldsymbol{b}\|_2 = \min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2$$

gilt.

oder:

Lineares Ausgleichsproblem

Zu gegebenem $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $\boldsymbol{b} \in \mathbb{R}^{m}$, bestimme $\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{n}$, so dass

$$\boldsymbol{x}^* = \arg\min_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x} - \boldsymbol{b}\|_2^2.$$

Definition

Warum 2-Norm?

- $\|Ax-b\|_2^2$ ist differenzierbar und Ableitung ist linear
- Euklidische Norm bleibt bei orthogonalen Transformationen erhalten, d.h. für jede orthogonale Matrix $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ist

  $$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|_2$$

  äquivalent zu

  $$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Q(Ax-b)\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|QAx-Qb\|_2$$

Auch möglich:

$$\min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|_1 \text{ oder } \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax-b\|_\infty$$

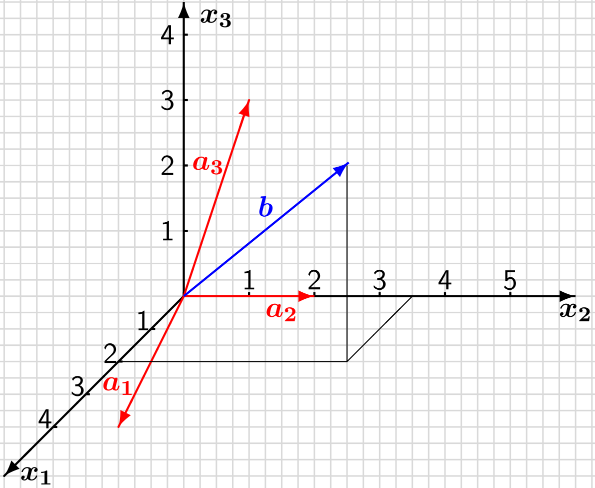
$\Rightarrow$ führt auf lineares Optimierungsproblem

Geometrische Interpretation $Ax = b$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 3 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$$

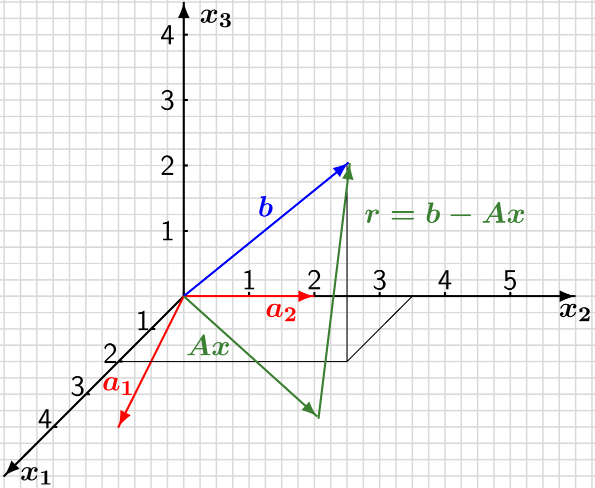


Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x^* = ?$$



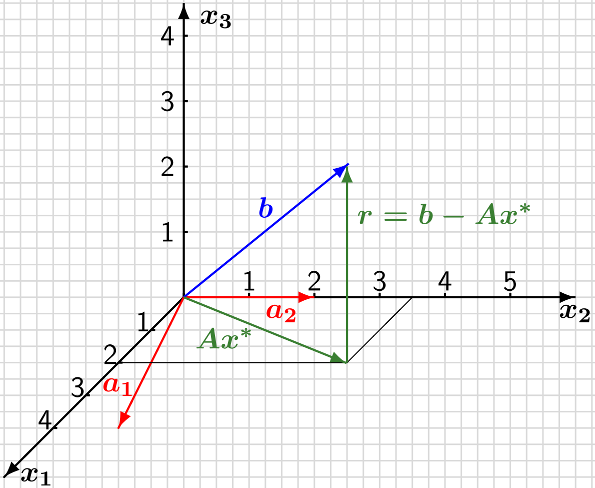
Geometrische Interpretation $\min_{x\in\mathbb{R}^2} \|Ax - b\|_2$

$$A = \begin{bmatrix} 4 & 0 \\ 1 & 2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$b = \begin{bmatrix} 2 \\ 3.5 \\ 3 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow x^* = \begin{bmatrix} 0.5 \\ 1.5 \end{bmatrix}$$

$$\Rightarrow \|r\|_2 = 3$$



Normalgleichungen

Die Lösung des linearen Ausgleichsproblems lässt sich auf die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{b}$$

reduzieren, das häufig als *Normalgleichungen* bezeichnet wird.

N4.1 & N4.2

Bemerkung

- Für $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist die Matrix $\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ stets quadratisch.
- Falls $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ vollen (Spalten-)Rang n hat, so ist die Matrix $\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch positiv definit.

Annahme:

- Wir beschrenken uns hier auf den Fall, dass $\boldsymbol{A}$ vollen Spaltenrang hat: Rang $(\boldsymbol{A}) = n$ (Fall Rang $(\boldsymbol{A}) < n$, siehe SVD).

Normalgleichungen

Die Lösung des linearen Ausgleichsproblems lässt sich auf die Lösung des linearen Gleichungssystems

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A}\, \boldsymbol{x} = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{b}$$

reduzieren, das häufig als *Normalgleichungen* bezeichnet wird.

N4.1 & N4.2

Satz 4.5

$\boldsymbol{x}^* \in \mathbb{R}^{\boldsymbol{n}}$ ist genau dann Lösung des linearen Ausgleichsproblems, wenn $\boldsymbol{x}^*$ Lösung der Normalgleichung

$$\boldsymbol{A}^T \boldsymbol{A} \boldsymbol{x}^* = \boldsymbol{A}^T \boldsymbol{b}$$

ist. Das System der Normalgleichung hat stets mindestens eine Lösung. Sie ist genau dann *eindeutig*, wenn Rang $(\boldsymbol{A}) = \boldsymbol{n}$ gilt.

Beispiel 4.3

Man vermutet, dass die Meßdaten

t	0	1	2	3
y	3	2.14	1.86	1.72

einer Gesetzmäßigkeit der Form

$$y = f(t) = \alpha \frac{1}{1+t} + \beta$$

mit noch zu bestimmenden Parametern $\alpha, \beta \in \mathbb{R}$ gehorchen. Wie lautet das zugehörige lineare Ausgleichsproblem?

Das Ausgleichsproblem lautet $\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^2} \|A\,x - b\|_2$,

wobei

$$x = \begin{pmatrix} \alpha \\ \beta \end{pmatrix}, \quad A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ \frac{1}{2} & 1 \\ \frac{1}{3} & 1 \\ \frac{1}{4} & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 2.14 \\ 1.86 \\ 1.72 \end{pmatrix}.$$

Kondition des linearen Ausgleichsproblems

Satz 4.7

Für die Kondition des linearen Ausgleichsproblems bezüglich Störungen in $\boldsymbol{b}$ gilt

$$\frac{\|\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2}{\|\boldsymbol{x}^*\|_2} \leq \frac{\kappa_2(\boldsymbol{A})}{\cos\Theta} \frac{\|\tilde{\boldsymbol{b}} - \boldsymbol{b}\|_2}{\|\boldsymbol{b}\|_2}.$$

Satz 4.9.

Für die Kondition des linearen Ausgleichsproblems bezüglich Störungen in $\boldsymbol{A}$ gilt

$$\frac{\|\tilde{\boldsymbol{x}} - \boldsymbol{x}^*\|_2}{\|\boldsymbol{x}^*\|_2} \leq \left(\kappa_2(\boldsymbol{A}) + \kappa_2(\boldsymbol{A})^2 \tan\Theta\right) \frac{\|\tilde{\boldsymbol{A}} - \boldsymbol{A}\|_2}{\|\boldsymbol{A}\|_2}$$

Wobei hier $\kappa_2(\boldsymbol{A}) := \max\limits_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}\|_2 \Big/ \min\limits_{\|\boldsymbol{x}\|=1} \|\boldsymbol{A}\,\boldsymbol{x}\|_2.$

N4.3

Beispiel 4.8.

Gegeben seien

$$\boldsymbol{A} := \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \text{ und } \boldsymbol{b} := \begin{pmatrix} \mathbf{0.01} \\ \mathbf{1} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

sowie eine gestörte rechte Seite $\tilde{\boldsymbol{b}} = (\mathbf{0.01}, \mathbf{1}, \mathbf{0.01})^{\boldsymbol{T}}$. Bestimmen Sie $\boldsymbol{x}^*$ und $\tilde{\boldsymbol{x}}$, und diskutieren Sie die Kondition des linearen Ausgleichsproblems.

Die Lösung der Normalgleichung liefert

$$\boldsymbol{x}^* = (\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} \mathbf{0.01} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix},$$

sowie für die gestörte rechte Seite

$$\tilde{\boldsymbol{x}} = (\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\boldsymbol{A})^{-1}\boldsymbol{A}^{\boldsymbol{T}}\tilde{\boldsymbol{b}} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \mathbf{0.01} \end{pmatrix}.$$

Beispiel 4.8.

Daraus folgt

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 100 \frac{\|\tilde{b} - b\|_2}{\|b\|_2},$$

also eine schlechte Kondition des linearen Ausgleichsproblems.

Mit Hilfe von Satz 4.7 erhält man aus

$$\kappa_2(A) \approx 2.62$$

und

$$\cos\Theta = \frac{\|A\,x^*\|_2}{\|b\|_2} = 0.01$$

für die Kondition bezüglich Störungen in b

$$\frac{\kappa_2(A)}{\cos\Theta} = 262,$$

d.h. eine schlechte Kondition obwohl $\kappa_2(A)$ klein ist.

Lösung über Normalgleichungen

Da die Matrix $A^T A$ symmetrisch positiv definit ist, ergibt sich folgende Methode:

Lösung über Normalgleichungen

- Berechne $A^T A$, $A^T b$.
- Berechne die Cholesky-Zerlegung
$$LDL^T = A^T A$$
von $A^T A$
- Löse
$$L\,y = A^T\,b, \quad L^T\,x = D^{-1}\,y$$
durch Vorwärts- bzw. Rückwärtseinsetzen.

Lösung über Normalgleichungen — Nachteile

- Die Berechnung von $A^T A$ ist für große m aufwendig und birgt die Gefahr von Genauigkeitsverlust durch Auslöschungseffekte. Die Einträge von $A^T A$ sind also mit (möglicherweise erheblichen relativen) Fehlern behaftet.

- Bei der Lösung des Systems $A^T A\, x = A^T b$ über das Cholesky-Verfahren werden die Rundungsfehler in $A^T A$ und $A^T b$ mit

$$\kappa_2(A^T A)$$

verstärkt. Es gilt

$$\kappa_2(A^T A) = \kappa_2(A)^2.$$

Folglich wird die Rundungsfehlerverstärkung durch $\kappa_2(A)^2$ beschrieben.

N4.4

Beispiel 4.12.

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}, \; b = \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ \delta \\ \delta \end{pmatrix}, \; 0 < \delta \ll 1.$$

Bestimmen Sie die Lösung des linearen Ausgleichsproblems über die Normalgleichungen und diskutieren Sie das Ergebnis.

- Das lineare Ausgleichsproblem hat die Lösung $x^* = (1, 1)^T$ (für alle $\delta > 0$).
- Es gilt $\Theta = 0$ und damit $\cos\Theta = 1$, d.h. die Kondition des Problems wird ausschließlich durch $\kappa_2(A)$ beschrieben.
- Man rechnet einfach nach, dass

$$\kappa_2(A) \approx \frac{\sqrt{6}}{\delta}.$$

Beispiel 4.12.

- Ein stabiles Verfahren sollte ein Resultat $\tilde{x}$ liefern, mit

$$\frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \lessapprox \kappa_2(A)\,\mathrm{eps}.$$

- Die Lösung dieses Problems über die Normalgleichung und das Cholesky-Verfahren auf einer Maschine mit $\mathrm{eps} \approx 10^{-16}$ ergibt jedoch:

$$\delta = 10^{-4}: \quad \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2 * 10^{-8} \approx \frac{1}{3}\kappa_2(A)^2\mathrm{eps}$$

$$\delta = 10^{-6}: \quad \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2 * 10^{-4} \approx \frac{1}{3}\kappa_2(A)^2\mathrm{eps}$$

Lösung über QR-Zerlegung

Zur Erinnerung:

- Für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m > n$, mit $\text{Rang}(A) = n$, folgt aus der QR-Zerlegung von A, dass

$$Q\,A = R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{array}{l} \}\ \ n \\ \}\ \ m-n \end{array},$$

  wobei die obere Dreiecksmatrix $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ regulär ist.

- Multiplikation mit (einer orthogonalen Matrix) Q verändert nicht die euklidische Länge eins Vektors, d.h.

$$\|x\|_2 = \|Qx\|_2 \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

- Das lineare Ausgleichsproblem ist gegeben durch: Zu gegebenem $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$, bestimme $x^* \in \mathbb{R}^n$, für dass

$$\|A\,x^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|A\,x - b\|_2$$

  gilt.

Lösung über QR-Zerlegung

Daraus folgt:

$$\begin{aligned}\|A\,x^* - b\|_2 &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|A\,x - b\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Q(Ax - b)\|_2 \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Q\,A\,x - Q\,b\|_2 \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|R\,x - Q\,b\|_2\end{aligned}$$

und mit

$$R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}, \quad Q\,b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix},$$

erhält man

$$\begin{aligned}\|A\,x^* - b\|_2^2 &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \left\| \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} x - \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\ &= \min_{x\in\mathbb{R}^n} \left(\|\tilde{R}\,x - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2 \right) \\ &= \|b_2\|_2^2 \quad \text{für} \quad \tilde{R}\,x = b_1\end{aligned}$$

Lösung über QR-Zerlegung

Satz 4.13.

Sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit $\text{Rang}(A) = n$ und $b \in \mathbb{R}^m$. Sei $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ eine orthogonale Matrix und $\tilde{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ eine obere Dreiecksmatrix, so dass

$$Q\,A = R := \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix}.$$

Dann ist die Matrix $\tilde{R}$ regulär. Schreibt man

$$Q\,b = \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix} \begin{matrix} \}n \\ \}m-n \end{matrix},$$

dann ist $x^* = \tilde{R}^{-1}\,b_1$ die Lösung des linearen Ausgleichsproblems. Die Norm $\|A\,x^* - b\|_2$ ist gerade durch $\|b_2\|_2$ gegeben.

Lösung über QR-Zerlegung

Aus Satz 4.13 ergibt sich nun folgende Methode:

- Bestimme die $\boldsymbol{QR}$-Zerlegung von $\boldsymbol{A}$
$$\boldsymbol{QA} = \begin{pmatrix} \tilde{\boldsymbol{R}} \\ \boldsymbol{0} \end{pmatrix} \qquad (\tilde{\boldsymbol{R}} \in \mathbb{R}^{n \times n}),$$
z.B. mittels Givens-Rotationen oder Householder-Spiegelungen und berechne
$$\boldsymbol{Qb} = \begin{pmatrix} \boldsymbol{b}_1 \\ \boldsymbol{b}_2 \end{pmatrix}.$$
- Löse
$$\tilde{\boldsymbol{R}}\boldsymbol{x} = \boldsymbol{b}_1$$
mittels Rückwärtseinsetzen.
- Die Norm des Residuums $\min\limits_{\boldsymbol{x} \in \mathbb{R}^n} \|\boldsymbol{Ax} - \boldsymbol{b}\|_2 = \|\boldsymbol{Ax}^* - \boldsymbol{b}\|_2$ ist gerade durch $\|\boldsymbol{b}_2\|_2$ gegeben.

Beispiel 4.15.

Gegeben seien

$$\boldsymbol{A} = \begin{pmatrix} 3 & 7 \\ 0 & 12 \\ 4 & 1 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{b} = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ 5 \end{pmatrix},$$

d.h. $m = 3, n = 2$. Man bestimme die Lösung $x^* \in \mathbb{R}^2$ des zugehörigen linearen Ausgleichsproblem über QR-Zerlegung mittels Givens-Rotation.

- Annullierung von $a_{3,1}$:

$$A^{(2)} = G_{1,3}A = \begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 12 \\ 0 & -5 \end{pmatrix}, \quad b^{(2)} = G_{1,3}b = \begin{pmatrix} 10 \\ 1 \\ -5 \end{pmatrix}.$$

Zur Erinnerung: die Transformationen $G_{1,3}A$ und $G_{1,3}b$ werden in der Praxis ausgeführt, *ohne* dass $G_{1,3}$ explizit berechnet wird.

Beispiel 4.15.

- Annullierung von $a_{3,2}^{(2)}$:

$$A^{(3)} = G_{2,3}A^{(2)} = \begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 13 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix}, \quad b^{(3)} = G_{2,3}\, b^{(2)} = \begin{pmatrix} 10 \\ \frac{37}{13} \\ -\frac{55}{13} \end{pmatrix}$$

Lösung von

$$\begin{pmatrix} 5 & 5 \\ 0 & 13 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 10 \\ \frac{37}{13} \end{pmatrix}$$

durch Rückwärtseinsetzen liefert

$$x^* = \left(\frac{301}{169}, \frac{37}{169} \right)^T .$$

Als Norm des Residiums ergibt sich:

$$\|b_2\|_2 = \frac{55}{13}.$$

Lösung über QR-Zerlegung — Kondition

Beachte

- Wegen Satz 3.14 gilt N4.4

$$\kappa_2(A) = \kappa_2(\tilde{R}),$$

d.h. das Quadrieren der Kondition, das bei den Normalgleichungen auftritt, wird vermieden.

- Die Berechnung der QR-Zerlegung über Givens- oder Householder-Transformationen ist ein sehr stabiles Verfahren, wobei die Fehlerverstärkung durch $\kappa_2(A)$ (und nicht $\kappa_2(A)^2$) beschrieben wird.

Beispiel: Matlab Demo lineare Ausgleichsrechnung

N4.5 & D:ML

Beispiel 4.16

Gegeben seien

$$A = \begin{pmatrix} \sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \delta & 0 \\ 0 & \delta \end{pmatrix}, \; b = \begin{pmatrix} 2\sqrt{3} \\ \delta \\ \delta \end{pmatrix}, \; 0 < \delta \ll 1.$$

Bestimmen Sie die Lösung des linearen Ausgleichsproblems über die QR-Zerlegung und diskutieren Sie das Ergebnis.

Auf einer Maschine mit $\mathbf{eps} \approx 10^{-16}$ erhält man

$$\delta = 10^{-4}: \quad \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 2.2 * 10^{-16},$$

$$\delta = 10^{-6}: \quad \frac{\|\tilde{x} - x^*\|_2}{\|x^*\|_2} \approx 1.6 * 10^{-16}.$$

Wegen der sehr guten Stabilität dieser Methode sind die Resultate viel besser als in Beispiel 4.12.

Zusammenfassung

	Normalgleichungen	QR-Zerlegung
Rechenaufwand ($m \gg n$)	ca. $\frac{1}{2}mn^2$	ca. mn^2
Stabilität	instabil, wenn $\kappa_2(A) \gg 1$ und $\theta \approx 0$ stabil, wenn $\kappa_2(A) \approx 1$ oder $\theta \approx \frac{\pi}{4}$	stabil

Übersicht

Themen: Dahmen & Reusken Kap. 4.1-4.4, **4.7**

- Das lineare Ausgleichsproblem
- **Singulärwertzerlegung (SVD)**

Was Sie mitnehmen sollten:

- Was ist ein lineares Ausgleichsproblem
- Wie ist das lineare Ausgleichsproblem konditioniert
- Welche Lösungsverfahren gibt es und wie stabil sind diese
- **Definition, Eigenschaften und Anwendungen der SVD**

Motivation

Lösung des linearen Ausgleichsproblems (für $\mathbf{Rang}(A) = n$):

$$x^* = (A^T A)^{-1} A^T b.$$

Problem: – $(A^T A)^{-1}$ existiert nicht für $\mathbf{Rang}(A) < n$
– Lösung lineares Ausgleichsproblem nicht eindeutig
$\Rightarrow$ zusätzliche Auswahlbedingung

Allgemeines Lineares Ausgleichsproblem

Sei $b \in \mathbb{R}^m$ und $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Die Aufgabe: bestimme x^* mit minimaler Euklidischer Norm, für das

$$\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2$$

gilt, hat eine eindeutige Lösung.

- QR-Zerlegung mit Pivotisierung
- Singulärwertzerlegung (SVD = Singular Value Decomposition)

Singulärwertzerlegung

Satz

Zu jeder Matrix $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ existieren orthogonale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und eine Diagonalmatrix

$$\Sigma := \operatorname{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_p) \in \mathbb{R}^{m\times n}, \quad p = \min(m,n),$$

mit

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_p \geq 0,$$

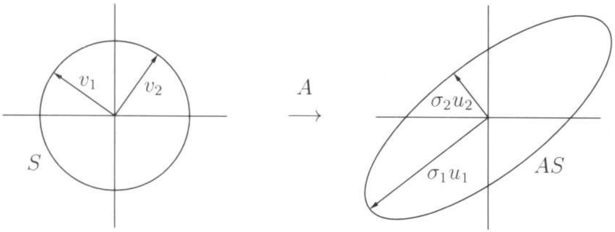
so dass

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

Hierbei sind:

- Singulärwerte von A : $\sigma_i,\ i = 1, \dots, p$
- Linkssingulärvektoren : Spalten von $U = [u_1\, u_2 \dots u_m]$
- Rechtssingulärvektoren : Spalten von $V = [v_1\, v_2 \dots v_n]$

Singulärwertzerlegung – Geometrische Interpretation

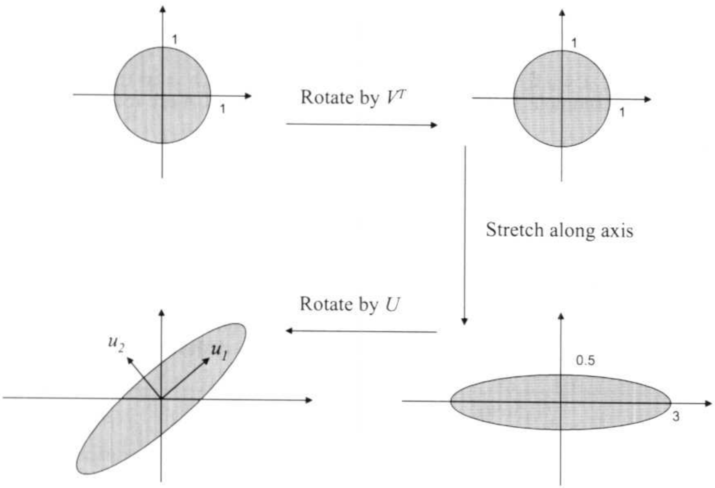


Quelle: Trefethen & Bau

Abbildung der Einheitskugel $S = \{x : \|x\|_2 = 1\}$ durch A

- Singulärwerte: Längen σ_1, σ_2 der Halbachsen von AS.
- Linkssingulärvektoren: Einheitsvektoren $\{u_1, u_2\}$ in Richtung der Halbachsen von AS
- Rechtssingulärvektoren: Einheitsvektoren $\{v_1, v_2\} \in S$, Urbild der Halbachsen von AS, so dass $Av_j = \sigma_j u_j$.

Singulärwertzerlegung – Geometrische Interpretation



Singulärwertzerlegung

Fall: $\boldsymbol{m} = \mathbf{4},\ \boldsymbol{n} = \mathbf{2}$, $\mathbf{rank}(\boldsymbol{A}) = \mathbf{2}$

- Full SVD

$$\underset{\boldsymbol{A}}{\begin{bmatrix} \times & \times \\ \times & \times \\ \times & \times \\ \times & \times \end{bmatrix}} = \underset{\boldsymbol{U}}{\begin{bmatrix} \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \\ \times & \times & \times & \times \end{bmatrix}} \underset{\boldsymbol{\Sigma}}{\begin{bmatrix} \times & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \times \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{bmatrix}} \underset{\boldsymbol{V}^{\boldsymbol{T}}}{\begin{bmatrix} \times & \times \\ \times & \times \end{bmatrix}}$$

- Reduced SVD

$$\underset{\boldsymbol{A}}{\begin{bmatrix} \times & \times \\ \times & \times \\ \times & \times \\ \times & \times \end{bmatrix}} = \underset{\hat{\boldsymbol{U}}}{\begin{bmatrix} \times & \times \\ \times & \times \\ \times & \times \\ \times & \times \end{bmatrix}} \underset{\hat{\boldsymbol{\Sigma}}}{\begin{bmatrix} \times & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \times \end{bmatrix}} \underset{\boldsymbol{V}^{\boldsymbol{T}}}{\begin{bmatrix} \times & \times \\ \times & \times \end{bmatrix}}$$

Singulärwertzerlegung

- Annahme: $m \geq n$
  - Fall $m < n$: betrachte SVD von A^T

$$A^T = U\,\Sigma\,V^T \quad \Rightarrow \quad A = V\,\Sigma\,U^T$$

- Singulärwerte sind reell und nichtnegativ

- Konvention
  - $\sigma_{\max} = \sigma_1$ größter Singulärwert
  - $\sigma_{\min} = \sigma_n$ kleinster Singulärwert
  - der Größe nach geordnet

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \ldots \geq \sigma_n \geq 0$$

- SVD ist numerisch rückwärtsstabil berechenbar

$$A + \Delta A = \tilde{U}\,\tilde{\Sigma}\,\tilde{V}^T \text{ mit } \|\Delta A\|_2 = \mathcal{O}(\text{eps})$$

Eigenschaften

Sei $A = U\,\Sigma\,V^T$ eine Singulärwertzerlegung von $A \in R^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_n = 0$. Dann gilt:

- $Av_i = \sigma_i u_i$, $A^T u_i = \sigma_i v_i$, $i = 1, \ldots, n$.
- $\mathrm{Rang}(A) = r =$ Anzahl der von Null verschiedenen Singulärwerte.
- $\|A\|_2 = \sigma_1 = \sigma_{\max}$
- $\|A^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sigma_n}$, falls A eine reguläre $n \times n$ Matrix ist
- $\kappa_2(A) = \|A\|_2\|A^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}$, falls A eine reguläre $n \times n$ Matrix ist
- $\kappa_2(A) = \|A\|_2\|A^{+}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} = \frac{\sigma_{\max}}{\sigma_{\min}}$, falls $\mathrm{Rang}(A) = n$.

Eigenschaften

Sei $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{U}\,\boldsymbol{\Sigma}\,\boldsymbol{V}^T$ eine Singulärwertzerlegung von $\boldsymbol{A} \in \boldsymbol{R}^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\boldsymbol{\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_n = 0}$. Dann gilt:

- Die strikt positiven Singulärwerte sind die Wurzeln der strikt positiven Eigenwerte von $\boldsymbol{A}^T\,\boldsymbol{A}$:
$$\{\boldsymbol{\sigma}_i \,|\, i = 1, \ldots, r\} = \{\sqrt{\boldsymbol{\lambda}_i(\boldsymbol{A}^T\,\boldsymbol{A})} \,|\, i = 1, \ldots, r\}$$
- Die Singulärwerte sind gleich dem Absolutbetrag der Eigenwerte von $\boldsymbol{A}$ falls $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}^T$.
- Für $\boldsymbol{A} \in \mathbb{R}^{n\times n}$ gilt $|\mathbf{det}(\boldsymbol{A})| = \prod_{i=1}^{m} \boldsymbol{\sigma}_i$
- Die Pseudoinverse $\boldsymbol{A}^+ \in \mathbb{R}^{n\times m}$ ist definiert durch
$$\boldsymbol{A}^+ = \boldsymbol{V}\,\boldsymbol{\Sigma}^+\,\boldsymbol{U}^T$$
mit $\boldsymbol{\Sigma}^+ = \mathbf{diag}(\boldsymbol{\sigma}_1^{-1}, \ldots, \boldsymbol{\sigma}_r^{-1}, \mathbf{0}, \ldots, \mathbf{0}) \in \mathbb{R}^{n\times m}$.

Eigenschaften – Low-Rank Approximation

Sei $A = U\,\Sigma\,V^T$ eine Singulärwertzerlegung von $A \in R^{m\times n}$ mit Singulärwerten $\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_n = 0$. Für $k \leq r = \mathrm{Rang}(A)$ definiere

$$A_k = U\,\Sigma_k\,V^T$$

mit $\Sigma_k = \mathrm{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_k, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{m\times n}$. Dann gilt:

- $\mathrm{Rang}(A_k) = k$.
- Die Distanz zwischen A_k und A ist
$$\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}.$$
- A_k ist die beste Approximation an A vom Rang $\leq k$
$$\|A - A_k\|_2 = \min_{\mathrm{Rang}(B)\leq k} \|A - B\|_2.$$

Lineares Ausgleichsproblem

Bestimme x^*, so dass

$$\|Ax^* - b\|_2 = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2.$$

Lösung mit SVD: $A = U\,\Sigma\,V^T$

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2 &= \|U^T A V V^T x - U^T b\|_2 \\ &= \|\Sigma(V^T x) - (U^T b)\|_2 \\ &= \|\Sigma y - (U^T b)\|_2 \end{aligned}$$

Dann $y = \Sigma^{-1}(U^T b)$ und $x^* = V y$.

Falls $\mathbf{Rang}(A) = r < n$, definiere Pseudo-Inverse $A^+ \in \mathbb{R}^{n\times m}$ durch

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

mit $\Sigma^+ = \mathrm{diag}(\sigma_1^{-1}, \ldots, \sigma_r^{-1}, 0, \ldots, 0) \in \mathbb{R}^{n\times m}$.

Lösung des allgemeinen linearen Ausgleichsproblems: $x^* = A^+\,b$.

Numerischer Rang

Rang einer Matrix wird in der Praxis fast immer über die Singulärwerte bestimmt. Falls

$$\sigma_1 \geq \ldots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \ldots = \sigma_n = 0$$

so gilt $\mathbf{Rang}(A) = r$.

Problem: Rundungsfehler aufgrund Maschinengenauigkeit

$$A \to \tilde{A}, \quad \sigma_i \to \tilde{\sigma}_i, \; i = 1, \ldots, n.$$

$\Rightarrow \mathbf{Rang}(\tilde{A})$ häufig $> r$, Abfrage "$\sigma_k = 0$" nicht sinnvoll.

Numerischer Rang

Der numerische Rang der Matrix $\tilde{A} \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist definiert als

$$\mathbf{Rang}_{\mathbf{num}}(\tilde{A}) = \min\{1 \leq k \leq n \,|\, \tilde{\sigma}_{k+1} \leq \tilde{\sigma}_1 \sqrt{mn}\,\mathbf{eps}\}.$$

Image Compression

Singulärwertzerlegung von A

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

kann geschrieben werden als

$$A = \sum_{i=1}^{p} \sigma_i\, u_i\, v_i^T = \sigma_1\, u_1\, v_1^T + \sigma_2\, u_2\, v_2^T + \ldots + \sigma_p\, u_p\, v_p^T$$

mit $p = \min(m, n)$.

Approximation der Matrix A vom Rang k, $k \leq p$, ist

$$A_k = \sum_{i=1}^{k} \sigma_i\, u_i\, v_i^T$$

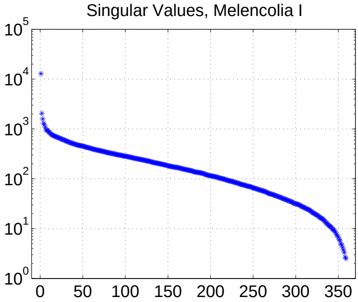
und $\|A - A_k\|_2 = \sigma_{k+1}$.

Datenkompression:

$\Rightarrow$ Speicherbedarf für A_k ist $k(m+n)$ vs. mn für A.

Image Compression

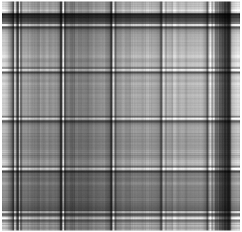
Betrachte Schwarz Weiß-Bild $I(x, y)$ als Matrix A: Einträge in Matrix entsprechen Graustufen des jeweiligen Pixels.



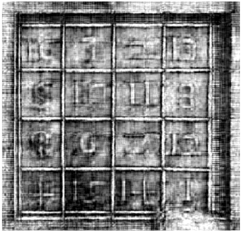
Je nach Anwendung: Principal Component Analysis (PCA), Proper Orthogonal Decomposition (POD), Karhunen-Loéve Decomposition.

Image Compression

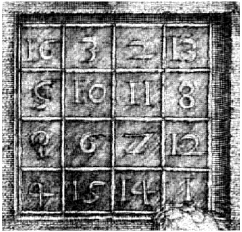
k = 1, compression = 0.00548



k = 20, compression = 0.11



k = 40, compression = 0.219



Original: A. Duerer, Melencolia I

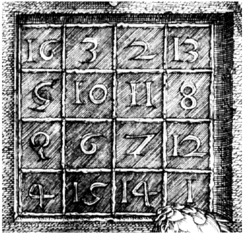


Image Compression

Gatlinburg-Tagung: J.H. Wilkinson, W. Givens, G. Forsythe, A. Householder, G. Henrici, F.L. Bauer (von links nach rechts)

Berechnung der Singulärwerte

Verfahren:

- Wurzeln der Eigenwerte von $A^T A$

  Problem: – Aufwand relativ hoch
  – nicht stabil

  - Fehlerverstärkung mit $\kappa(A)^2$ anstelle von $\kappa(A)$ (vgl. Normalgleichung)
  - Problematisch bei Berechnung der Singulärwerte mit $\sigma_k \ll \|A\|_2$.
- Golub-Kahan-Reinsch Algorithmus
  - Schritt 1: Bidiagonalisierung mit Householder-Transformation
  - Schritt 2: Reduktion auf Diagonalgestalt

...oder in MATLAB:

```
>> [U,S,V] = svd(A)
```

Zusammenfassung

Singulärwertzerlegung wird eingesetzt für

- Bestimmung des (numerischen) Rangs einer Matrix
- Berechnung von Norm und Konditionszahl
- ...

Viele Praktische Anwendungen:

- signal processing, image processing, statistics, reduced-order modelling, inverse problems (regularization), ...