## Kapitel 3: Ausgleichsrechnung

Hauptanwendung ist beim Anpassen eines Modells $y = f(x, c)$ an einen Datensatz $\{(x_j, y_j)\}_{j=1}^m$, d.h. bestimme $c$, so dass gilt

$$y_j \approx f(x_j, c), \quad j = 1, \ldots, m.$$

Hängt $f$ linear von $c = (c_1, \ldots, c_n)$ ab, d.h.

$$f(x, c) = c_1 f_1(x) + \ldots + c_n f_n$$

mit gegebenen Funktionen $f_1, \ldots, f_n$, führt die Forderung

$$\sum_{j=1}^m |y_j - f(x_j, c)|^2 \to \text{min!}$$

auf das lineare Ausgleichsproblem mit

$$A = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \ldots & f_n(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ f_1(x_m) & \ldots & f_n(x_m) \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad b = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_m \end{pmatrix}.$$

<u>Problem 3:</u> Das lineare Gleichungssystem

$$Ax = b, \quad A \in \mathbb{R}^{m \times n}, \quad b \in \mathbb{R}^m,$$

ist möglicherweise nicht lösbar, d.h. $b \notin \text{Bild}(A)$. Gesucht ist die Lösung $x^* \in \mathbb{R}^n$ des linearen Ausgleichsproblems

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

**3.1 Satz:** Seien $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ und $b \in \mathbb{R}^m$.

($i$) Problem 3 ist lösbar.

($ii$) $x^* \in \mathbb{R}^n$ löst Problem 3 genau dann wenn gilt

$$A^T A x^* = A^T b \qquad \text{(Normalengleichung)}.$$

($iii$) Die Lösungsmenge der Normalengleichung ist der affine Unterraum $\{x^* + y \ : \ y \in \text{Kern}(A)\}$.

Bemerkungen:

($i$) Für eine Matrix $A \in \mathbb{R}^{n\times m}$ ist die Matrix $A^T A$ positiv semi-definit.

($ii$) Im Fall Rang($A$) $= n$ ist $A^T A$ positiv definit. In diesem Fall ist Problem 3 eindeutig lösbar. Zur Lösung der Normalengleichung kann man die Cholesky-Zerlegung von $A^T A$ verwenden.

## 3.2 Konditionierung des Problems 3

Definition+Resultat: Für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, $m \geq n =$ Rang($A$), definiere

$$\|A\|_2 := \max_{\|x\|_2=1} \|Ax\|_2 = \sqrt{\|A^T A\|_2} = \sqrt{\lambda_{max}(A^T A)}$$

und

$$\mathrm{cond}_2(A) := \sqrt{\mathrm{cond}_2(A^T A)} = \sqrt{\frac{\lambda_{max}(A^T A)}{\lambda_{min}(A^T A)}}\ .$$

Seien
$$\cos\theta = \frac{\|Ax^*\|_2}{\|b\|_2} \quad \text{und} \quad \tan\theta = \frac{\|Ax^* - b\|_2}{\|Ax^*\|_2}.$$

Störungenssatz: Es gilt
$$\frac{\|x^* - \widetilde{x}\|_2}{\|x^*\|_2} \le \frac{\mathrm{cond}_2(A)}{\cos\theta} \cdot \frac{\|\Delta b\|_2}{\|b\|_2}$$
und
$$\frac{\|x^* - \widetilde{x}\|_2}{\|x^*\|_2} \le \left(\mathrm{cond}_2(A) + \mathrm{cond}_2^2(A)\tan\theta\right) \cdot \frac{\|\Delta A\|_2}{\|A\|_2}.$$

Bemerkung: Falls $\cos\theta << 1$ oder $\tan\theta >> 1$ gilt, ist das Problem 3 wesentlich anderes konditioniert als ein reguläres lineares Gleichungssystem.

## 3.3 Numerische Algorithmen (Rang$(A) = n \leq m$)

| Methode | Lösung | Kondition | Aufwand |
|---|---|---|---|
| Normalengleichung | $A^TAx = A^Tb$ | cond$(A)^2$ | $\frac{mn^2}{2} + \frac{n^3}{6}$ |
| $QR$-Zerlegung<br>$A = Q\begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$<br>$Q^TQ = I,\ R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ | $Rx = (q_{ij})^T_{i,j=1,\ldots,n}b$ | cond$(A)$ | $mn^2 - \frac{n^3}{3}$ |
| Singulärwertzerlegung<br>$A = U\Sigma V^T$<br>$UU^T = I,\ V^TV = I$<br>$\Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}$ | $\Sigma V^Tx = U^Tb$ | cond$(A)$ | $2mn^2 + 4n^3$ |

Normalengleichung: Die Berechnung von $A^T A$ ist aufwändig und birgt die Gefahr von Genauigkeitsverlust durch Rundungsfehler.

$QR$-Zerlegung kann z.B. mit Hilfe von Householder-Transformationen

$$Q_v = I - 2\frac{vv^T}{\|v\|_2^2}, \quad v \in \mathbb{R}^n, \quad v \neq 0,$$

berechnet werden. Wesentlich ist, dass für $y = (y_1, \ldots, y_n) \in \mathbb{R}^n$, $y \neq 0$, gilt

$$Q_v y = -\alpha e_1, \quad v = y + \alpha e_1, \quad \alpha = \mathrm{sgn}(y_1)\|y\|_2.$$

Diese Wahl von $\alpha$ hilft die Auslöschung bei der numerischen Berechnung von $v = (y_1 + \alpha, y_2, \ldots, y_n)$ zu vermeiden. Falls $y_1 = 0$ ist, setze $\alpha = \|y\|_2$ oder $\alpha = -\|y\|_2$. Die $QR$-Zerlegung ist stabiler als die $LR$-Zerlegung und wird auch zum Lösen von regulären Gleichungssystemen benutzt. Der Nachteil ist der doppelt so hohe Rechenaufwand.

## Algorithmus (Householder-Verfahren):

Eingabe: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n = \text{Rang}(A)$.

Initialisierung: $A^{(0)} = (a_{ij}^{(0)}) = \left(\bar{a}_1^{(0)}, \ldots, \bar{a}_n^{(0)}\right) = A$

Für $j = 1, \ldots, n$ berechne

(1) $v^{(j)} = \bar{a}_1^{(j-1)} + \text{sign}(a_{jj}^{(j-1)}) \cdot \|\bar{a}_1^{(j-1)}\|_2 \, e_j$

(2) $$A^{(j)} = Q_{v^{(j)}} \cdot A^{(j-1)} = \begin{pmatrix} * & \cdots & * & \\ & \ddots & \vdots & *_{j,n-j} \\ & & * & \\ & & & \\ & 0_{m-j,j} & & \bar{a}_1^{(j)}, \ldots, \bar{a}_{m-j}^{(j)} \end{pmatrix}.$$

Ergebnis:

$$A = \underbrace{Q_{v^{(1)}} \cdots Q_{v^{(n)}}}_{= Q \in \mathbb{R}^{m \times m}} \cdot A^{(n)} \quad \text{mit} \quad A^{(n)} = \begin{pmatrix} R \\ 0_{m-n,n} \end{pmatrix}.$$

Singulärwertzerlegung ist rechenaufwendiger als die $QR$-Zerlegung, ist aber stabiler, falls der numerische Rang$(A) < n$ ist.

Satz: Es sei $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$, Rang$(A) = r \leq \min(m,n)$. Dann existieren orthogonale Matrizen $V \in \mathbb{R}^{n\times n}$ und $U \in \mathbb{R}^{m\times m}$, so dass

$$U^T\, A\, V = \underbrace{\begin{pmatrix} \sigma_1 & & & 0 & \dots & 0 \\ & \ddots & & \vdots & & \vdots \\ & & \sigma_r & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}}_{=\Sigma}, \quad \Sigma \in \mathbb{R}^{m\times n}.$$

Definition: Es sei $A = U\,\Sigma\,V^T$. Die Matrix

$$A^+ = V\,\Sigma^+\,U^T, \quad \Sigma^+ = \begin{pmatrix} \mathrm{diag}(\sigma_1^{-1},\dots,\sigma_r^{-1}) & 0_{r,m-r} \\ 0_{n-r,r} & 0_{n-r,m-r} \end{pmatrix},$$

heißt die Moore-Pseudo-Inverse von $A$.