7. VL, 6.5.2009, Einf. in die Numm. Math., G. Bärwolff (1)

2.4 Anwendungen der QR-Zerlegung

Lösung eines linearen Gleichungssystems

$A\vec{x} = \vec{b}$, $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, regulär

$\rightarrow$ mit $A = QR$, $Q, R \in \mathbb{R}^{n\times n}$,

Q orthogonal, R obere Dreiecksmatrix

$A\vec{x} = \vec{b} \quad \longleftrightarrow \quad Q\vec{y} = \vec{b} \qquad \vec{y} = Q^T\vec{b}$

$R\vec{x} = \vec{y}$ Rückwärtseinsetzen

Ausgleichsprobleme

Gegeben: Wertepaare (y_k, x_k), $k = 1, \dots, n$

(z.B. Ergebnisse von Messungen)

Gesucht: funktionaler Zusammenhang

$$y_k = f(x_k) \quad , k = 1, \dots, n \quad , (2.27)$$

wobei man f nicht kennt.

Man macht einen Mehrparameteransatz

$$f = f(x; r_1, r_2, \dots, r_m) \quad , \text{i.d.R. } n \gg m,$$

und versucht (2.27) im quadr. Mittel zu lösen $\rightarrow$

$$\boxed{\text{minimiere } \sum_{k=1}^{n} (y_k - f(x_k; r_1, r_2, \dots, r_m))^2}$$

$\boxed{\text{über alle } \vec{r} = (r_1, r_2, \dots, r_m)^T \in \mathbb{R}^m}$

Methode der kleinsten Quadrate (Gauß)

Lineares Ausgleichsproblem als Spezialfall

$\rightarrow$ f lineare Funktion von $\vec{r}$.

Wir setzen

$$f_k(\vec{r}) := f(x_k, \vec{r}) \quad , \quad \vec{y} = (y_1, \dots, y_n)^T \in \mathbb{R}^n$$

und damit ergibt sich als Ansatz

$$\begin{bmatrix} f_1(r_1, r_2, \dots, r_m) \\ \vdots \\ f_n(r_1, r_2, \dots, r_m) \end{bmatrix} = M\vec{r} \quad , M \in \mathbb{R}^{n \times m} \text{ gegeben}$$

Beispiel (y_k, x_k), $k = 1, \dots, 4$

quadr. Ansatz

$$y = r_1 + r_2 x + r_3 x^2$$

$\rightsquigarrow$

$$\begin{aligned} f_1 &= r_1 + r_2 x_1 + r_3 x_1^2 \\ f_2 &= r_1 + r_2 x_2 + r_3 x_2^2 \\ f_3 &= r_1 + r_2 x_3 + r_3 x_3^2 \\ f_4 &= r_1 + r_2 x_4 + r_3 x_4^2 \end{aligned} \rightarrow M = \begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \\ 1 & x_4 & x_4^2 \end{bmatrix}$$

Lineares Ausgleichsproblem

$$\min_{\vec{r} \in \mathbb{R}^m} \| M\vec{r} - \vec{y} \|_2^2 \qquad (2.28)$$

③

$$F(\vec{r}) = \|M\vec{r} - \vec{y}\|_2^2 = (M\vec{r} - \vec{y}, M\vec{r} - \vec{y})$$ diff'bar, konvex

→ notwendige und hinreichende Bedingung für das gesuchte Minimum

$$\nabla F(\vec{r}) = 0$$

$$F'(\vec{r})\vec{h} = 2(M\vec{r} - \vec{y}, M\vec{h}) = 2(M^T(M\vec{r} - \vec{y}), \vec{h})$$

$$\to \quad \nabla F(\vec{r}) = 2M^T(M\vec{r} - \vec{y}) = \vec{0}$$

damit erhält man als Normalengleichungen das lineare System

$$M^T M \vec{r} = M^T \vec{y} \qquad (2.29)$$

Satz 2.13

Das lineare Ausgleichsproblem (2.28) hat mindestens eine Lösung $\vec{r}_0$. Für jede andere Lösung $\vec{r}$ gilt $M\vec{r} = M\vec{r}_0$. Das Residuum $\vec{d} = \vec{y} - M\vec{r}_0$ ist eindeutig bestimmt und erfüllt $M^T\vec{d} = 0$. Die Gleichung (2.29) ist notwendig und hinreichend dafür, dass $\vec{r}$ Lösung von (2.28) ist.

Beweis

Sei $R(M)$ = Bild von M, es gilt

$$\mathbb{R}^n = R(M) \oplus R(M)^\perp,$$ also kann $\vec{y}$ eindeutig zerlegt werden als

$$\vec{y} = \vec{s} + \vec{d} \qquad \text{mit } \vec{s} \in R(M), \vec{d} \in R(M)^\perp$$

Nach Def. des Bildes von M gibt es zu $\vec{s}$ mindestens ein $\vec{r}_0$ mit

$$M\vec{r}_0 = \vec{s}$$

außerdem gilt $(\underbrace{M\vec{r}}_{\in R(M)}, \underbrace{\vec{d}}_{\in R(M)^\perp}) = 0$ f.a. $\vec{r} \in \mathbb{R}^m$,

und somit

$$(\vec{r}, M^T\vec{d}) = 0 \quad \text{und} \quad M^T\vec{d} = \theta.$$

Es folgt $M^T\vec{y} = M^T\vec{s} + \underbrace{M^T\vec{d}}_{=\theta} = M^T M\vec{r}_0$

$\rightsquigarrow$ $\vec{r}_0$ ist eine Lösung von (2.29)

Sei nun $\vec{r}$ eine weitere Lösung, d.h.

$$M^T M\vec{r} = M^T\vec{y}.$$

Dann ist $\vec{d} = \vec{y} - M\vec{r}$ orthogonal zu $R(M)$, denn

$$(M\vec{z}, \vec{d}) = (\vec{z}, M^T\vec{d}) = (\vec{z}, \underbrace{M^T\vec{y} - M^T M\vec{r}}_{=0}) = 0 \quad \text{f.a. } \vec{z}$$

$\vec{s} = M\vec{r}$ gehört zu $R(M)$ und

$$\vec{y} = M\vec{r} + (\vec{y} - M\vec{r}) = \vec{s} + \vec{d}$$

ist damit wieder eine Zerlegung von $\vec{y}$ in $\vec{s} \in R(M)$, $\vec{d} \in R(M)^\perp$ und aus der Eindeutigkeit der Zerlegung folgt

$$M\vec{r} = M\vec{r}_0$$

□

Bestimmung der Lösung des Minimumproblems

i) Lösung des Systems

$$M^T M \vec{r} = M^T \vec{y}$$

$M^T M$ ist symmetrisch und pos. semidefinit, da

$$(\vec{r}, M^T M \vec{r}) = (M\vec{r}, M\vec{r}) \geq 0$$

Die Gleichheit mit Null kann nur eintreten, wenn $M\vec{r} = 0$. Hat M den <u>vollen Rang</u>, d.h. bei $n \geq m$, also den Rang m, dann kann $\vec{r} = 0$ nur gelten bei $(\vec{r}, M^T M \vec{r}) = 0$. Also ist dann $M^T M$ <u>positiv definit</u>

$\rightarrow$ Cholesky-Zerlegung möglich,

- dazu notwendig: Berechnung von $M^T M$ ($\frac{1}{2} m^2 n$ Multiplikationen), bei $n \gg m$ ist der Aufbau von $M^T M$ teurer als das Cholesky-Verfahren ($\frac{m^3}{6}$ Multiplikationen)
- $M^T M$ oft schlecht konditioniert, Fehler in $\vec{y}$ werden durch die Kondition $\kappa(M^T M)$ verstärkt
- besser ist Methode, die nur M verwendet

ii) Bestimmung von $\vec{r}$ mittels QR-Zerlegung

Gute Eigenschaft von orthogonalen Transformationen

$$K_2(Q) = \|Q\|_2 \|Q^{-1}\|_2 = \|Q\|_2 \|Q^T\|_2 = 1,$$

d.h. sie verstärken nicht den Fehler der Größen, auf die sie angewendet werden

Satz 2.14

Sei $M \in \mathbb{R}^{n \times m}$, $n \geq m$, von vollem Rang und $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$, orthogonal, so dass

$$Q^T M = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix} \qquad Q^T \vec{y} = \begin{pmatrix} \vec{y}_1 \\ \vec{y}_2 \end{pmatrix}$$

mit $\vec{y}_1 \in \mathbb{R}^m$, $\vec{y}_2 \in \mathbb{R}^{n-m}$ und einer invertierbaren oberen Dreiecksmatrix $R \in \mathbb{R}^{m \times m}$ gilt.
Dann ist $\vec{r} = R^{-1}\vec{y}_1$ die Lösung des linearen Ausgleichsproblems $\min\limits_{\vec{r} \in \mathbb{R}^m} \|M\vec{r} - \vec{y}\|_2^2$

Beweis

Q ist isometrisch $\rightarrow \|\vec{y} - M\vec{r}\|_2 = \|Q^T(\vec{y} - M\vec{r})\|_2$,
daraus folgt

$$\|\vec{y} - M\vec{r}\|_2^2 = \|Q^T(\vec{y} - M\vec{r})\|^2 = \left\| \begin{pmatrix} \vec{y}_1 - R\vec{r} \\ \vec{y}_2 \end{pmatrix} \right\|^2$$

$$= \|\vec{y}_1 - R\vec{r}\|^2 + \|\vec{y}_2\|^2 \geq \|\vec{y}_2\|^2 \qquad \text{f.a. } \vec{r} \in \mathbb{R}^m$$

Wählt man $\vec{r} = R^{-1}\vec{y}_1$, so hat man die Lösung □

Bemerkung

Residuum $\vec{d}$ erfüllt $\|\vec{d}\|_2 = \|\vec{y}_2\|_2$.

Beispiel

Geg.

y_k	x_k
4	1
6	2
10	3
15	4
16	5
20	6

Gerade

$$y = f(x) = r_1 + r_2 x$$

mit

$$\sum_{k=1}^{6} \left[y_k - (r_1 + r_2 x_k) \right]^2 \to \min$$

$$\Longleftrightarrow \min_{\vec{r} \in \mathbb{R}^2} \| \vec{y} - M\vec{r} \|_2^2$$

$$M = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \\ 1 & 5 \\ 1 & 6 \end{pmatrix}, \quad \vec{y} = \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 10 \\ 15 \\ 16 \\ 20 \end{pmatrix}, \quad \vec{r} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix}$$

$$M^T \vec{y} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 \\ 6 \\ 10 \\ 15 \\ 16 \\ 20 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 71 \\ 306 \end{pmatrix}$$

$$M^T M = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 1 & 4 \\ 1 & 5 \\ 1 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 6 & 21 \\ 21 & 91 \end{pmatrix}$$

$$M^T M \vec{r} = M^T \vec{y} \longleftrightarrow \begin{pmatrix} 6 & 21 \\ 21 & 91 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 71 \\ 306 \end{pmatrix}$$

$$r_1 = \frac{5}{15} = \frac{1}{3}$$

$$r_2 = \frac{115}{35} = \frac{23}{7} = 3{,}28571$$

$\mathrm{Cond}(M^T M) = \approx 87{,}598$

QR-Zerlegung von M

$$H_1 = E - 2\vec{w}_1\vec{w}_1^T \quad , \vec{w}_1 = \begin{pmatrix} 1+\sqrt{6} \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \Big/ \left\| \begin{pmatrix} 1+\sqrt{6} \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\|_2$$

$$\rightsquigarrow H_1 M = \begin{pmatrix} -2{,}4499 & -8{,}5732 \\ 0 & -7{,}7526e-01 \\ 0 & 2{,}2474e-01 \\ 0 & 1{,}2247 \\ 0 & 2{,}2247 \\ 0 & 3{,}2247 \end{pmatrix} , \hat{H}_1 = H_1$$

$$\vec{m} \in \mathbb{R}^5 , \quad \vec{w}_2 = \frac{\vec{m} - \|\vec{m}\|_2 \vec{e}_1}{\|\vec{m} - \|\vec{m}\|_2 \vec{e}_1\|_2}$$
$$\vec{e}_1 \in \mathbb{R}^5$$

$$H_2 = E - 2\vec{w}_2\vec{w}_2'$$

$$= \begin{pmatrix} -0{,}769845 \\ 0{,}034893 \\ 0{,}190149 \\ 0{,}345405 \\ 0{,}500660 \end{pmatrix}$$

$$\hat{H}_2 = \left(\begin{array}{c|ccccc} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \hline 0 & & & & & \\ 0 & & & & & \\ 0 & & & H_2 & & \\ 0 & & & & & \\ 0 & & & & & \end{array}\right)$$

$$\hat{H}_2 \hat{H}_1 M = \begin{pmatrix} -2{,}44949 & -8{,}57321 \\ 0 & 4{,}18330 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$Q = \hat{H}_1 \hat{H}_2$$