

Numerische Verfahren

Jens-Peter M. Zemke
zemke@tu-harburg.de

Institut für Numerische Simulation
Technische Universität Hamburg-Harburg

03.06.2008



Lineare Ausgleichsprobleme

Normalgleichungen

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Singulärwertzerlegung

Pseudoinverse

Störung von Ausgleichsproblemen

Regularisierung

Lineare Ausgleichsprobleme

Wir betrachten in diesem Abschnitt das **lineare Ausgleichsproblem**

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min \quad (5.1)$$

mit gegebenem $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $m \geq n$, und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$.

Lineare Ausgleichsprobleme

Wir betrachten in diesem Abschnitt das **lineare Ausgleichsproblem**

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min \quad (5.1)$$

mit gegebenem $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $m \geq n$, und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$.

Dieses lineare Ausgleichsproblem läßt sich elegant in ein äquivalentes lineares Gleichungssystem überführen, die sogenannten **Normalgleichungen**.

Normalgleichungen

Notwendig für eine Lösung des Ausgleichsproblems (5.1) ist, dass der Gradient des Funktionals

$$\phi(\mathbf{x}) = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$$

verschwindet,

Normalgleichungen

Notwendig für eine Lösung des Ausgleichsproblems (5.1) ist, dass der Gradient des Funktionals

$$\phi(\mathbf{x}) = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$$

verschwindet, d.h.

$$2\mathbf{A}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$$

Normalgleichungen

Notwendig für eine Lösung des Ausgleichsproblems (5.1) ist, dass der Gradient des Funktionals

$$\phi(\mathbf{x}) = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$$

verschwindet, d.h.

$$2\mathbf{A}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$$

oder

$$\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}. \quad (5.2)$$

Normalgleichungen

Notwendig für eine Lösung des Ausgleichsproblems (5.1) ist, dass der Gradient des Funktionals

$$\phi(\mathbf{x}) = (\mathbf{Ax} - \mathbf{b})^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})$$

verschwindet, d.h.

$$2\mathbf{A}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b}) = \mathbf{0}$$

oder

$$\mathbf{A}^T\mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T\mathbf{b}. \quad (5.2)$$

Die Gleichungen (5.2) heißen die **Normalgleichungen** des Ausgleichsproblems (5.1).

Normalgleichungen

Dass jede Lösung von (5.2) auch das Ausgleichsproblem (5.1) löst, sieht man folgendermaßen.

Normalgleichungen

Dass jede Lösung von (5.2) auch das Ausgleichsproblem (5.1) löst, sieht man folgendermaßen.

Es ist für alle $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned}\|\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - \mathbf{b}\|_2^2 &= (\mathbf{Ax} + \mathbf{Ah} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} + \mathbf{Ah} - \mathbf{b}) \\ &= \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\mathbf{Ah}\|_2^2 + 2\mathbf{h}^T (\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{A}^T \mathbf{b}) \\ &= \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\mathbf{Ah}\|_2^2 \geq \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2.\end{aligned}$$

Normalgleichungen

Dass jede Lösung von (5.2) auch das Ausgleichsproblem (5.1) löst, sieht man folgendermaßen.

Es ist für alle $\mathbf{h} \in \mathbb{R}^n$

$$\begin{aligned}\|\mathbf{A}(\mathbf{x} + \mathbf{h}) - \mathbf{b}\|_2^2 &= (\mathbf{Ax} + \mathbf{Ah} - \mathbf{b})^T (\mathbf{Ax} + \mathbf{Ah} - \mathbf{b}) \\ &= \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\mathbf{Ah}\|_2^2 + 2\mathbf{h}^T (\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} - \mathbf{A}^T \mathbf{b}) \\ &= \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \|\mathbf{Ah}\|_2^2 \geq \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2.\end{aligned}$$

Schließlich ist die Matrix $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ genau dann regulär, wenn die Matrix \mathbf{A} den Rang n besitzt. Damit ist das Ausgleichsproblem genau dann **eindeutig lösbar**, wenn $\text{Rang } \mathbf{A} = n$ gilt.

Normalgleichungen

Wir haben also:

Normalgleichungen

Wir haben also:

Satz 5.1

Die Lösungen des Ausgleichsproblems

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min$$

sind genau die Lösungen der Normalgleichungen

$$\mathbf{A}^T \mathbf{Ax} = \mathbf{A}^T \mathbf{b}.$$

Gleichung (5.1) ist genau dann eindeutig lösbar, wenn \mathbf{A} linear unabhängige Spalten besitzt.

Normalgleichungen

Besitzt A unabhängige Spalten, so ist die Koeffizientenmatrix $A^T A$ positiv definit und man kann daher die Normalgleichungen unter Benutzung der **Cholesky-Zerlegung** lösen.

Normalgleichungen

Besitzt A unabhängige Spalten, so ist die Koeffizientenmatrix $A^T A$ positiv definit und man kann daher die Normalgleichungen unter Benutzung der **Cholesky-Zerlegung** lösen.

Diese Methode erfordert zur Aufstellung der Normalgleichungen (unter Beachtung der Symmetrie von $A^T A$)

$$\frac{1}{2}n(n+1) + n$$

innere Produkte von Vektoren der Länge m , also $n^2 m + 3nm$ flops, und zur Lösung der Normalgleichungen

$$\frac{1}{3}n^3 + O(n^2) \text{ flops.}$$

Normalgleichungen

Besitzt A unabhängige Spalten, so ist die Koeffizientenmatrix $A^T A$ positiv definit und man kann daher die Normalgleichungen unter Benutzung der **Cholesky-Zerlegung** lösen.

Diese Methode erfordert zur Aufstellung der Normalgleichungen (unter Beachtung der Symmetrie von $A^T A$)

$$\frac{1}{2}n(n+1) + n$$

innere Produkte von Vektoren der Länge m , also $n^2 m + 3nm$ flops, und zur Lösung der Normalgleichungen

$$\frac{1}{3}n^3 + O(n^2) \text{ flops.}$$

Das Verfahren ist geeignet bei Problemen mit kleinem n . Bei größerem n können **Stabilitätsprobleme** auftreten und eines der folgenden Verfahren ist vorzuziehen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $m \geq n$, eine gegebene Matrix mit linear unabhängigen Spalten, so gibt es eine Matrix

$$Q \in \mathbb{R}^{(m,n)}$$

mit orthogonalen Spalten und eine obere Dreiecksmatrix

$$R \in \mathbb{R}^{(n,n)},$$

so dass gilt

$$A = QR. \tag{5.3}$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $m \geq n$, eine gegebene Matrix mit linear unabhängigen Spalten, so gibt es eine Matrix

$$Q \in \mathbb{R}^{(m,n)}$$

mit orthogonalen Spalten und eine obere Dreiecksmatrix

$$R \in \mathbb{R}^{(n,n)},$$

so dass gilt

$$A = QR. \quad (5.3)$$

Diese Zerlegung (5.3) heißt eine **QR-Zerlegung** der Matrix A .

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $m \geq n$, eine gegebene Matrix mit linear unabhängigen Spalten, so gibt es eine Matrix

$$Q \in \mathbb{R}^{(m,n)}$$

mit orthogonalen Spalten und eine obere Dreiecksmatrix

$$R \in \mathbb{R}^{(n,n)},$$

so dass gilt

$$A = QR. \quad (5.3)$$

Diese Zerlegung (5.3) heißt eine **QR-Zerlegung** der Matrix A .

Wir haben bereits in der Vorlesung „Lineare Algebra“ gesehen, dass man die QR-Zerlegung einer Matrix mit Hilfe der Orthogonalisierung nach Gram und Schmidt oder durch Multiplikation mit geeigneten Householder-Matrizen bestimmen kann.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Beim Gram-Schmidt-Verfahren werden im j ten Schritt, d.h., nachdem die ersten $j - 1$ Spalten $\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^{j-1}$ von \mathbf{Q} bereits bestimmt wurden, von der j ten Spalte \mathbf{a}^j von \mathbf{A} die Anteile in Richtung von \mathbf{q}^i , $i = 1, \dots, j - 1$, abgezogen und der so bestimmte, zu den \mathbf{q}^i orthogonale, Vektor normiert,

$$\mathbf{a}^j = \mathbf{q}^j r_{jj} + \sum_{i=1}^{j-1} \mathbf{q}^i r_{ij}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Beim Gram-Schmidt-Verfahren werden im j ten Schritt, d.h., nachdem die ersten $j - 1$ Spalten $\mathbf{q}^1, \dots, \mathbf{q}^{j-1}$ von \mathbf{Q} bereits bestimmt wurden, von der j ten Spalte \mathbf{a}^j von \mathbf{A} die Anteile in Richtung von \mathbf{q}^i , $i = 1, \dots, j - 1$, abgezogen und der so bestimmte, zu den \mathbf{q}^i orthogonale, Vektor normiert,

$$\mathbf{a}^j = \mathbf{q}^j r_{jj} + \sum_{i=1}^{j-1} \mathbf{q}^i r_{ij}.$$

Dabei werden zugleich die Elemente $r_{ij} := (\mathbf{q}^i)^T \mathbf{a}^j$ bestimmt.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Algorithmus 5.2: (Klassische Gram-Schmidt-Orthogonalisierung)

```
for i = 1:n
    q(:,i) = a(:,i);
    for j = 1:i-1
        r(j,i) = q(:,j)' * a(:,i) ;
        q(:,i) = q(:,i) - r(j,i)*q(:,j);
    end
    r(i,i) = ||q(:,i)||2;
    q(:,i) = q(:,i)/r(i,i);
end
```

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Wir haben vorausgesetzt, dass die Spalten von A **linear unabhängig** sind. Ist dies nicht der Fall, so wird Algorithmus 5.2 mit $r_{ii} = 0$ für ein i abbrechen. Diese Abfrage wird man natürlich noch in einen Algorithmus einbauen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Wir haben vorausgesetzt, dass die Spalten von A **linear unabhängig** sind. Ist dies nicht der Fall, so wird Algorithmus 5.2 mit $r_{ii} = 0$ für ein i abbrechen. Diese Abfrage wird man natürlich noch in einen Algorithmus einbauen.

Sind die Spalten von A nahezu linear abhängig, so ist das oben angegebene **klassische Gram-Schmidt-Verfahren** numerisch instabil. Die berechneten Vektoren q^j sind also **nicht orthogonal**.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Wir haben vorausgesetzt, dass die Spalten von A **linear unabhängig** sind. Ist dies nicht der Fall, so wird Algorithmus 5.2 mit $r_{ii} = 0$ für ein i abbrechen. Diese Abfrage wird man natürlich noch in einen Algorithmus einbauen.

Sind die Spalten von A nahezu linear abhängig, so ist das oben angegebene **klassische Gram-Schmidt-Verfahren** numerisch instabil. Die berechneten Vektoren q^j sind also **nicht orthogonal**.

Etwas besser wird die Stabilität, wenn man die Berechnung der r_{ij} ersetzt durch $r_{ij} = (q^j)^T q^i$. Diese dem klassischen Gram-Schmidt-Verfahren **äquivalente** Methode heißt **modifiziertes Gram-Schmidt-Verfahren**.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Algorithmus 5.2: (Klassische Gram-Schmidt-Orthogonalisierung)

```
for i = 1:n
    q(:,i) = a(:,i);
    for j = 1:i-1
        r(j,i) = q(:,j)' * a(:,i) ;
        q(:,i) = q(:,i) - r(j,i)*q(:,j);
    end
    r(i,i) = ||q(:,i)||2;
    q(:,i) = q(:,i)/r(i,i);
end
```

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Algorithmus 5.3: (Modifizierte Gram-Schmidt-Orthogonalisierung)

```
for i = 1:n
    q(:,i) = a(:,i);
    for j = 1:i-1
        r(j,i) = q(:,j)' * q(:,i) ;
        q(:,i) = q(:,i) - r(j,i)*q(:,j);
    end
    r(i,i) = ||q(:,i)||2;
    q(:,i) = q(:,i)/r(i,i);
end
```

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Beispiel 5.4: Das folgende Beispiel von Björck zeigt die Überlegenheit des modifizierten Gram-Schmidt-Verfahrens.

Sei die Matrix A gegeben als

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

wobei ε so klein ist, dass

$$\text{fl}(1 + \varepsilon^2) = 1$$

gilt.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Dann erhält man mit dem klassischen und dem modifizierten Gram-Schmidt-Verfahren (bis auf Normierung der Spalten) die Matrizen

$$Q_{\text{kGS}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad Q_{\text{mGS}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & \varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Dann erhält man mit dem klassischen und dem modifizierten Gram-Schmidt-Verfahren (bis auf Normierung der Spalten) die Matrizen

$$Q_{\text{kGS}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad Q_{\text{mGS}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & \varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Für die minimalen Winkel φ_{kGS} und φ_{mGS} zwischen zwei Spalten gilt

$$\cos(\varphi_{\text{kGS}}) = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \cos(\varphi_{\text{mGS}}) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}.$$



Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Dann erhält man mit dem klassischen und dem modifizierten Gram-Schmidt-Verfahren (bis auf Normierung der Spalten) die Matrizen

$$Q_{\text{kGS}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon \\ 0 & \varepsilon & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad Q_{\text{mGS}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \varepsilon & -\varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & \varepsilon & -\varepsilon/2 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Für die minimalen Winkel φ_{kGS} und φ_{mGS} zwischen zwei Spalten gilt

$$\cos(\varphi_{\text{kGS}}) = \frac{1}{2} \quad \text{und} \quad \cos(\varphi_{\text{mGS}}) = -\frac{\varepsilon}{\sqrt{2}}. \quad \square$$

Der Winkel sollte bestenfalls $\pi/2$ betragen, der Kosinus also Null sein. Damit ist die modifizierte Variante eindeutig überlegen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Stabiler als das Gram-Schmidt-Verfahren sind Methoden zur Bestimmung der QR-Zerlegung einer Matrix, die auf der Multiplikation von A mit geeigneten orthogonalen Matrizen beruhen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Stabiler als das Gram-Schmidt-Verfahren sind Methoden zur Bestimmung der QR-Zerlegung einer Matrix, die auf der Multiplikation von A mit geeigneten orthogonalen Matrizen beruhen.

Wir betrachten zunächst die QR-Zerlegung von A mit Hilfe von Householder-Matrizen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Stabiler als das Gram-Schmidt-Verfahren sind Methoden zur Bestimmung der QR-Zerlegung einer Matrix, die auf der Multiplikation von A mit geeigneten orthogonalen Matrizen beruhen.

Wir betrachten zunächst die QR-Zerlegung von A mit Hilfe von Householder-Matrizen.

Definition 5.5: Es sei $w \in \mathbb{R}^n$ mit $\|w\|_2 = 1$. Dann heißt die Matrix

$$H := E - 2ww^T$$

eine [Householder-Matrix](#).

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Stabiler als das Gram-Schmidt-Verfahren sind Methoden zur Bestimmung der QR-Zerlegung einer Matrix, die auf der Multiplikation von A mit geeigneten orthogonalen Matrizen beruhen.

Wir betrachten zunächst die QR-Zerlegung von A mit Hilfe von Householder-Matrizen.

Definition 5.5: Es sei $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^n$ mit $\|\mathbf{w}\|_2 = 1$. Dann heißt die Matrix

$$\mathbf{H} := \mathbf{E} - 2\mathbf{w}\mathbf{w}^T$$

eine **Householder-Matrix**.

Die so definierte Householder-Matrix \mathbf{H} beschreibt eine Spiegelung an der Hyperebene \mathbf{w}^\perp . Der Vektor \mathbf{w} ist der Normalenvektor der Hyperebene.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Offensichtlich ist H ist eine **symmetrische** und **orthogonale** Matrix, d.h.,
 $H^T = H$ und $H^T H = H^2 = E$.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Offensichtlich ist \mathbf{H} ist eine **symmetrische** und **orthogonale** Matrix, d.h.,
 $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}$ und $\mathbf{H}^T \mathbf{H} = \mathbf{H}^2 = \mathbf{E}$.

Die **explizite** Matrixgestalt von \mathbf{H} wird außerordentlich selten benötigt. Die Matrix $\mathbf{H} = \mathbf{E} - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^T$ ist vollständig charakterisiert durch einen Normalenvektor \mathbf{u} der Spiegelungs-Hyperebene und den Skalierungsfaktor $\beta = 2 / \|\mathbf{u}\|_2^2$.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Offensichtlich ist \mathbf{H} ist eine **symmetrische** und **orthogonale** Matrix, d.h.,
 $\mathbf{H}^T = \mathbf{H}$ und $\mathbf{H}^T \mathbf{H} = \mathbf{H}^2 = \mathbf{E}$.

Die **explizite** Matrixgestalt von \mathbf{H} wird außerordentlich selten benötigt. Die Matrix $\mathbf{H} = \mathbf{E} - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^T$ ist vollständig charakterisiert durch einen Normalenvektor \mathbf{u} der Spiegelungs-Hyperebene und den Skalierungsfaktor $\beta = 2/\|\mathbf{u}\|_2^2$.

Sind diese beiden bekannt, so kann man eine Multiplikation eines Vektors \mathbf{x} mit \mathbf{H} ausführen gemäß

$$\mathbf{H}\mathbf{x} = \mathbf{x} - \beta(\mathbf{u}^T \mathbf{x})\mathbf{u}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Offensichtlich ist H ist eine **symmetrische** und **orthogonale** Matrix, d.h.,
 $H^T = H$ und $H^T H = H^2 = E$.

Die **explizite** Matrixgestalt von H wird außerordentlich selten benötigt. Die Matrix $H = E - \beta \mathbf{u} \mathbf{u}^T$ ist vollständig charakterisiert durch einen Normalenvektor \mathbf{u} der Spiegelungs-Hyperebene und den Skalierungsfaktor $\beta = 2/\|\mathbf{u}\|_2^2$.

Sind diese beiden bekannt, so kann man eine Multiplikation eines Vektors \mathbf{x} mit H ausführen gemäß

$$H\mathbf{x} = \mathbf{x} - \beta(\mathbf{u}^T \mathbf{x})\mathbf{u}.$$

Es sind also ein inneres Produkt und ein `_axpy`, d.h., $4n$ flops erforderlich. Wegen $H^{-1} = H^T = H$ gilt dasselbe für das Lösen eines Gleichungssystems mit der Koeffizientenmatrix H .

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Um die QR-Zerlegung einer Matrix mit Householder-Transformationen auszurechnen, benötigen wir zu gegebenem Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, eine Householder-Matrix \mathbf{H} mit

$$\mathbf{H}\mathbf{x} = \pm\|\mathbf{x}\|_2\mathbf{e}^1, \quad \mathbf{e}^1 = (1, 0, \dots, 0)^T.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Um die QR-Zerlegung einer Matrix mit Householder-Transformationen auszurechnen, benötigen wir zu gegebenem Vektor $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$, $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, eine Householder-Matrix \mathbf{H} mit

$$\mathbf{H}\mathbf{x} = \pm\|\mathbf{x}\|_2\mathbf{e}^1, \quad \mathbf{e}^1 = (1, 0, \dots, 0)^T.$$

In der Vorlesung „Lineare Algebra“ wurde gezeigt (und dies rechnet man auch leicht nach), dass für den Fall, dass \mathbf{x} kein Vielfaches von \mathbf{e}^1 ist, die Householder-Matrizen

$$\mathbf{H}_{\pm} = \mathbf{E} - \beta\mathbf{w}_{\pm}\mathbf{w}_{\pm}^T,$$

die durch die Normalenvektoren

$$\mathbf{w}_{\pm} = \mathbf{x} \mp \|\mathbf{x}\|_2\mathbf{e}^1,$$

bestimmt sind, das Gewünschte leisten.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist x ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors e^1 , so ist einer der beiden Vektoren der **Nullvektor**, und zwar gilt $w_- = o$ im Fall $x_1 > 0$ und $w_+ = o$ im Fall $x_1 < 0$.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist x ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors e^1 , so ist einer der beiden Vektoren der **Nullvektor**, und zwar gilt $w_- = o$ im Fall $x_1 > 0$ und $w_+ = o$ im Fall $x_1 < 0$.

Ist $x \approx ce^1$, so erhält man für w_- im Fall $c > 0$ und für w_+ im Fall $c < 0$ **Auslöschung**.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist x ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors e^1 , so ist einer der beiden Vektoren der **Nullvektor**, und zwar gilt $w_- = o$ im Fall $x_1 > 0$ und $w_+ = o$ im Fall $x_1 < 0$.

Ist $x \approx ce^1$, so erhält man für w_- im Fall $c > 0$ und für w_+ im Fall $c < 0$ **Auslöschung**.

Um diese zu **vermeiden**, wählen wir daher stets

$$H = E - \frac{2}{\|w\|_2^2} w w^T, \quad w = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e^1.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist x ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors e^1 , so ist einer der beiden Vektoren der **Nullvektor**, und zwar gilt $w_- = o$ im Fall $x_1 > 0$ und $w_+ = o$ im Fall $x_1 < 0$.

Ist $x \approx ce^1$, so erhält man für w_- im Fall $c > 0$ und für w_+ im Fall $c < 0$ **Auslöschung**.

Um diese zu **vermeiden**, wählen wir daher stets

$$H = E - \frac{2}{\|w\|_2^2} w w^T, \quad w = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e^1.$$

Damit erhalten wir den folgenden Algorithmus zur Berechnung der Matrix $H = E - \beta u u^T$, die x in $\text{span}(e^1)$ abbildet:

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Algorithmus 5.6: (Householder-Vektor)

```
function [u,  $\beta$ ] = householder(x)

 $\mu$  = x(2:n)' * x(2:n);
u = [1; x(2:n)];
if  $\mu$  == 0
     $\beta$  = 0;
else
    u(1) = x(1) + sign(x(1)) * sqrt(x(1)^2 +  $\mu$ );
     $\beta$  = 2 / (u(1)^2 +  $\mu$ );
end
```

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Wir verwenden nun Householder-Matrizen, um die Matrix A orthogonal auf obere Dreiecksgestalt zu transformieren. Sei dazu H_1 wie oben beschrieben gewählt, so dass

$$H_1 a^1 = \pm \|a^1\|_2 e^1 =: r_{11} e^1.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Wir verwenden nun Householder-Matrizen, um die Matrix A orthogonal auf obere Dreiecksgestalt zu transformieren. Sei dazu H_1 wie oben beschrieben gewählt, so dass

$$H_1 a^1 = \pm \|a^1\|_2 e^1 =: r_{11} e^1.$$

Dann gilt mit $P_1 = H_1$ und einer Matrix $A_1 \in \mathbb{R}^{(m-1, n-1)}$

$$P_1 A = \begin{pmatrix} r_{11} & r(1, 2 : n) \\ \mathbf{o} & A_1 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix A_1 kann jetzt weiter mit Householder-Matrizen behandelt werden, welche diese schrittweise auf obere Dreiecksgestalt bringen. Dabei müssen nur noch die immer kleineren Householder-Matrizen geeignet auf den Gesamttraum erweitert werden.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist nach j Schritten, $1 \leq j < n$, die Gestalt

$$\left(\begin{array}{cccc|cccc} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1j} & r_{1,j+1} & r_{1,j+2} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2j} & r_{2,j+1} & r_{2,j+2} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{jj} & r_{j,j+1} & r_{j,j+2} & \cdots & r_{j,n} \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & r_{j+1,j+1} & r_{j+1,j+2} & \cdots & r_{j+1,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & r_{m,j+1} & r_{m,j+2} & \cdots & r_{m,n} \end{array} \right)$$

erreicht, so wählen wir eine Householder-Matrix $\mathbf{H}_{j+1} \in \mathbb{R}^{(m-j, n-j)}$, so dass $\mathbf{H}_{j+1}r(j+1 : m, j+1)$ ein Vielfaches des ersten Einheitsvektors ist, und setzen hiermit

$$\mathbf{P}_{j+1} = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_j & \mathbf{O}_{j, n-j} \\ \mathbf{O}_{m-j, j} & \mathbf{H}_{j+1} \end{pmatrix}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Damit gilt

$$\mathbf{P}_{j+1} \mathbf{P}_j \cdots \mathbf{P}_1 \mathbf{A} = \left(\begin{array}{ccccc|ccc}
 r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1j} & r_{1,j+1} & r_{1,j+2} & \cdots & r_{1n} \\
 0 & r_{22} & \cdots & r_{2j} & r_{2,j+1} & r_{2,j+2} & \cdots & r_{2n} \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & r_{jj} & r_{j,j+1} & r_{j,j+2} & \cdots & r_{j,n} \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{r}_{j+1,j+1} & \tilde{r}_{j+1,j+2} & \cdots & \tilde{r}_{j+1,n} \\
 \hline
 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \tilde{r}_{j+2,j+2} & \cdots & \tilde{r}_{j+2,n} \\
 \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\
 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \tilde{r}_{m,j+2} & \cdots & \tilde{r}_{m,n}
 \end{array} \right) \cdot$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Damit gilt

$$P_{j+1}P_j \cdots P_1 A = \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \cdots & r_{1j} & r_{1,j+1} & r_{1,j+2} & \cdots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \cdots & r_{2j} & r_{2,j+1} & r_{2,j+2} & \cdots & r_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & r_{jj} & r_{j,j+1} & r_{j,j+2} & \cdots & r_{j,n} \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{r}_{j+1,j+1} & \tilde{r}_{j+1,j+2} & \cdots & \tilde{r}_{j+1,n} \\ \hline 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \tilde{r}_{j+2,j+2} & \cdots & \tilde{r}_{j+2,n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 & \tilde{r}_{m,j+2} & \cdots & \tilde{r}_{m,n} \end{pmatrix}.$$

Nach n Schritten ist damit die obere Dreiecksgestalt erreicht.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Setzt man

$$Q^T := P_n P_{n-1} \cdots P_1,$$

so ist Q eine orthogonale Matrix und es gilt

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ O_{m-n,n} \end{pmatrix} = P_1 P_2 \cdots P_n \begin{pmatrix} R \\ O_{m-n,n} \end{pmatrix}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Setzt man

$$\mathbf{Q}^T := \mathbf{P}_n \mathbf{P}_{n-1} \cdots \mathbf{P}_1,$$

so ist \mathbf{Q} eine orthogonale Matrix und es gilt

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q} \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0}_{m-n,n} \end{pmatrix} = \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_n \begin{pmatrix} \mathbf{R} \\ \mathbf{0}_{m-n,n} \end{pmatrix}.$$

Die Householder-Matrizen \mathbf{H}_j (und damit die Faktoren \mathbf{P}_j in \mathbf{Q}) sind jeweils durch Vektoren \mathbf{u}^j und Skalare β_j vollständig bestimmt. Die \mathbf{u}^j können (bis auf die erste Komponente) im Verlauf eines Algorithmus unterhalb der Diagonalen von \mathbf{A} gespeichert werden. Tatsächlich müssen diese Elemente wegen der Gestalt der \mathbf{u}^j nicht einmal geändert werden. Die ersten Komponenten von \mathbf{u}^j und die β_j müssen in einem zusätzlichen Array gespeichert werden. Die Elemente von \mathbf{R} können das obere Dreieck von \mathbf{A} einschließlich der Diagonale überschreiben.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Algorithmus 5.7: (QR-Zerlegung mit Householder-Matrizen)

```
for i = 1:min(m-1,n)
    [u,β] = householder(a(i:m,i));
    a(i:m,i+1:n) = a(i:m,i+1:n) - βu*(u'*a(i:m,i+1:n));
    a(i,i) = a(i,i) - βu(1)u'*a(i:m,i);
    uu(i) = u(1);
    be(i) = β;
end
```

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Algorithmus 5.7: (QR-Zerlegung mit Householder-Matrizen)

```
for i = 1:min(m-1,n)
    [u,β] = householder(a(i:m,i));
    a(i:m,i+1:n) = a(i:m,i+1:n) - βu*(u'*a(i:m,i+1:n));
    a(i,i) = a(i,i) - βu(1)u'*a(i:m,i);
    uu(i) = u(1);
    be(i) = β;
end
```

Man zählt leicht ab, dass dieser Algorithmus für die QR-Zerlegung von A im Wesentlichen $2n^2m - \frac{2}{3}n^3$ flops benötigt.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der QR-Zerlegung bieten die **Givens-Rotationen**. Es ist bekannt, dass eine Rotation im \mathbb{R}^2 um den Winkel θ gegeben ist durch

$$\mathbf{x} \mapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \mathbf{x}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Eine weitere Möglichkeit zur Bestimmung der QR-Zerlegung bieten die **Givens-Rotationen**. Es ist bekannt, dass eine Rotation im \mathbb{R}^2 um den Winkel θ gegeben ist durch

$$\mathbf{x} \mapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \mathbf{x}.$$

Entsprechend kann man eine Multiplikation eines Vektors $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ mit der Matrix

$$\mathbf{R}(i, j, \theta) = \begin{pmatrix} \mathbf{E}_{i-1} & \mathbf{o} & \mathbf{O} & \mathbf{o} & \mathbf{O} \\ \mathbf{o}^T & \cos \theta & \mathbf{o}^T & -\sin \theta & \mathbf{o}^T \\ \mathbf{O} & \mathbf{o} & \mathbf{E}_{j-i-1} & \mathbf{o} & \mathbf{O} \\ \mathbf{o}^T & \sin \theta & \mathbf{o}^T & \cos \theta & \mathbf{o}^T \\ \mathbf{O} & \mathbf{o} & \mathbf{O} & \mathbf{o} & \mathbf{E}_{n-j} \end{pmatrix}$$

als Rotation in der von \mathbf{e}^i und \mathbf{e}^j aufgespannten Ebene auffassen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Die Matrix $\mathbf{R}(i, j, \theta)$ heißt eine **Givens-Rotation** oder seltener auch eine **Jacobi-Rotation**.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Die Matrix $\mathbf{R}(i, j, \theta)$ heißt eine **Givens-Rotation** oder seltener auch eine **Jacobi-Rotation**.

Diese Abbildungen wurden 1958 von Givens benutzt, um eine Matrix orthogonal auf obere Dreiecksgestalt zu transformieren. Jacobi verwandte diese Abbildung schon 1846 zur Lösung des vollständigen symmetrischen Eigenwertproblems.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Die Matrix $\mathbf{R}(i, j, \theta)$ heißt eine **Givens-Rotation** oder seltener auch eine **Jacobi-Rotation**.

Diese Abbildungen wurden 1958 von Givens benutzt, um eine Matrix orthogonal auf obere Dreiecksgestalt zu transformieren. Jacobi verwandte diese Abbildung schon 1846 zur Lösung des vollständigen symmetrischen Eigenwertproblems.

Es sei nun für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ die j -te Komponente x_j von Null verschieden. Wir wählen θ so, dass

$$\cos \theta = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} \quad \text{und} \quad \sin \theta = \frac{-x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Die Matrix $\mathbf{R}(i, j, \theta)$ heißt eine **Givens-Rotation** oder seltener auch eine **Jacobi-Rotation**.

Diese Abbildungen wurden 1958 von Givens benutzt, um eine Matrix orthogonal auf obere Dreiecksgestalt zu transformieren. Jacobi verwandte diese Abbildung schon 1846 zur Lösung des vollständigen symmetrischen Eigenwertproblems.

Es sei nun für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ die j -te Komponente x_j von Null verschieden. Wir wählen θ so, dass

$$\cos \theta = \frac{x_i}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}} \quad \text{und} \quad \sin \theta = \frac{-x_j}{\sqrt{x_i^2 + x_j^2}}.$$

Dann gilt

$$\begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_i \\ x_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sqrt{x_i^2 + x_j^2} \\ 0 \end{pmatrix},$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

und daher wird in $\mathbf{R}(i, j, \theta)\mathbf{x}$ die j -te Komponente annulliert.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

und daher wird in $\mathbf{R}(i, j, \theta)\mathbf{x}$ die j -te Komponente annulliert.

Damit ist klar, wie man mit einer Folge von Multiplikationen mit Givens-Rotationen eine QR-Zerlegung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ bestimmen kann.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

und daher wird in $\mathbf{R}(i, j, \theta)x$ die j -te Komponente annulliert.

Damit ist klar, wie man mit einer Folge von Multiplikationen mit Givens-Rotationen eine QR-Zerlegung einer Matrix $A \in \mathbb{R}^{(m, n)}$ bestimmen kann.

Man annulliert nacheinander die Elemente der ersten Spalte unterhalb der Diagonale mit geeigneten Rotationen

$$\mathbf{R}(1, 2, \theta_{12}), \quad \mathbf{R}(1, 3, \theta_{13}), \quad \dots, \quad \mathbf{R}(1, m, \theta_{1m})$$

und dann mit Rotationen

$$\mathbf{R}(i, j, \theta_{ij}), \quad i = 2, \dots, n, \quad j = i + 1, \dots, m$$

die Elemente der weiteren Spalten von links nach rechts und von oben nach unten.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Genauso kann man mit Rotationen

$$\mathbf{R}(m-1, m, \theta_{m-1, m}), \quad \dots, \quad \mathbf{R}(1, 2, \theta_{12})$$

die Elemente der ersten Spalte unterhalb der Diagonale von unten nach oben annullieren und dann die weiteren Spalten von links nach rechts auf gleiche Weise behandeln.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Genauso kann man mit Rotationen

$$\mathbf{R}(m-1, m, \theta_{m-1, m}), \quad \dots, \quad \mathbf{R}(1, 2, \theta_{12})$$

die Elemente der ersten Spalte unterhalb der Diagonale von unten nach oben annullieren und dann die weiteren Spalten von links nach rechts auf gleiche Weise behandeln.

Analog kann man auch die sog. **Givens-Reflexionen** verwenden, die ausgehend von der Spiegelung

$$\mathbf{x} \mapsto \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ \sin \theta & -\cos \theta \end{pmatrix} \mathbf{x}$$

im \mathbb{R}^2 analog definiert werden.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ein Vorteil der Verwendung von Givens-Rotationen oder -Reflexionen gegenüber den Householder Transformationen zur QR-Zerlegung einer Matrix A besteht darin, dass man auf übersichtliche Weise gewisse Nullen in A berücksichtigen und damit die Arbeit vermindern kann.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ein Vorteil der Verwendung von Givens-Rotationen oder -Reflexionen gegenüber den Householder Transformationen zur QR-Zerlegung einer Matrix A besteht darin, dass man auf übersichtliche Weise gewisse Nullen in A berücksichtigen und damit die Arbeit vermindern kann.

Ein Nachteil ist, dass die direkte Implementierung des beschriebenen Verfahrens doppelt so teuer ist wie die QR-Zerlegung mit Householder-Matrizen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ein Vorteil der Verwendung von Givens-Rotationen oder -Reflexionen gegenüber den Householder Transformationen zur QR-Zerlegung einer Matrix A besteht darin, dass man auf übersichtliche Weise gewisse Nullen in A berücksichtigen und damit die Arbeit vermindern kann.

Ein Nachteil ist, dass die direkte Implementierung des beschriebenen Verfahrens doppelt so teuer ist wie die QR-Zerlegung mit Householder-Matrizen.

Man beachte aber, dass Gentleman (1973) und Hammarling (1974) eine Methode, die **schnelle Givens-Transformation**, angegeben haben, mit der der Aufwand genauso hoch ist wie mit Householder-Matrizen. Diese wurde in der BLAS1 verwendet.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist eine QR-Zerlegung

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ O_{m-n,n} \end{pmatrix}$$

der Matrix $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ bekannt, so ist es leicht, das lineare Ausgleichsproblem

$$\|Ax - b\|_2 = \min$$

zu lösen.

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Ist eine QR-Zerlegung

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ O_{m-n,n} \end{pmatrix}$$

der Matrix $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ bekannt, so ist es leicht, das lineare Ausgleichsproblem

$$\|Ax - b\|_2 = \min$$

zu lösen.

Da die Multiplikation eines Vektors mit einer orthogonalen Matrix seine Euklidische Länge nicht verändert, gilt

$$\|Ax - b\|_2 = \|Q^T(Ax - b)\|_2 = \left\| \begin{pmatrix} R \\ O_{m-n,n} \end{pmatrix} x - Q^T b \right\|_2$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Mit

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{b} =: \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{b}_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Mit

$$\mathbf{Q}^T \mathbf{b} =: \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{b}_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$$

folgt

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 = \|\mathbf{Rx} - \mathbf{b}_1\|_2^2 + \|\mathbf{b}_2\|_2^2.$$

Orthogonale Zerlegung von Matrizen

Mit

$$Q^T \mathbf{b} =: \begin{pmatrix} \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{b}_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b}_1 \in \mathbb{R}^n, \quad \mathbf{b}_2 \in \mathbb{R}^{m-n}$$

folgt

$$\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2^2 = \|R\mathbf{x} - \mathbf{b}_1\|_2^2 + \|\mathbf{b}_2\|_2^2.$$

Den zweiten Summanden kann man durch die Wahl von \mathbf{x} nicht beeinflussen. Daher ist die **Lösung des Ausgleichsproblems** gegeben durch

$$\mathbf{x} = R^{-1}\mathbf{b}_1$$

und der **Defekt** ist $\|\mathbf{b}_2\|_2$.

Singularwertzerlegung

Definition 5.8: Sei $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$. Gilt für zwei orthogonale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{(m,m)}$ und $V \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ und eine Diagonalmatrix

$$\Sigma = (\sigma_i \delta_{ij})_{i,j} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \sigma_n & \\ & \mathbf{0}_{m-n,n} & & \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m,n)},$$

wobei hier der Einfachheit halber $n \leq m$ gelte, die Gleichung (Matrixzerlegung)

$$A = U \Sigma V^T, \quad (5.4)$$

so heißt (5.4) eine **Singularwertzerlegung (SVD)** von A .

Singularwertzerlegung

Definition 5.8: Sei $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$. Gilt für zwei orthogonale Matrizen $U \in \mathbb{R}^{(m,m)}$ und $V \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ und eine Diagonalmatrix

$$\Sigma = (\sigma_i \delta_{ij})_{i,j} = \begin{pmatrix} \sigma_1 & & & \\ & \ddots & & \\ & & \mathbf{0}_{m-n,n} & \\ & & & \sigma_n \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{(m,n)},$$

wobei hier der Einfachheit halber $n \leq m$ gelte, die Gleichung (Matrixzerlegung)

$$A = U \Sigma V^T, \quad (5.4)$$

so heißt (5.4) eine **Singularwertzerlegung (SVD)** von A .

Wir werden im Folgenden die Diagonalelemente σ_i von Σ **nichtnegativ** und **fallend sortiert** wählen und zeigen, dass **jede** Matrix eine SVD besitzt.

Singulärwertzerlegung

Kennen wir eventuell bereits Singulärwertzerlegungen?

Singulärwertzerlegung

Kennen wir eventuell bereits Singulärwertzerlegungen? **Ja.**

Singularwertzerlegung

Kennen wir eventuell bereits Singularwertzerlegungen? Ja:

Beispiel 5.9: Ist $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ symmetrisch mit den Eigenwerten μ_1, \dots, μ_n und ist $\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n$ ein zugehöriges System von orthonormalen Eigenvektoren, so gilt mit der Diagonalmatrix

$$\Sigma := \text{diag}\{\mu_1, \dots, \mu_n\}$$

und mit

$$U := V := (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n)$$

die Gleichung

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

und dies ist eine Singularwertzerlegung von A . □

Singularwertzerlegung

Setzt man $U = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^m)$ und $V = (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n)$, so ist (5.4) äquivalent zu

$$A\mathbf{v}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{u}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, m. \end{cases} \quad (5.5)$$

Singularwertzerlegung

Setzt man $U = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^m)$ und $V = (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n)$, so ist (5.4) äquivalent zu

$$A\mathbf{v}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{u}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, m. \end{cases} \quad (5.5)$$

Ohne Einschränkung können die σ_i nichtnegativ gewählt werden. Ist etwa $\sigma_j < 0$, so ersetze man die j -te Spalte \mathbf{v}^j von V durch $-\mathbf{v}^j$.

Singularwertzerlegung

Setzt man $U = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^m)$ und $V = (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n)$, so ist (5.4) äquivalent zu

$$A\mathbf{v}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{u}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, m. \end{cases} \quad (5.5)$$

Ohne Einschränkung können die σ_i nichtnegativ gewählt werden. Ist etwa $\sigma_j < 0$, so ersetze man die j -te Spalte \mathbf{v}^j von V durch $-\mathbf{v}^j$.

Ferner können wir durch Umordnung von Zeilen von V^T bzw. Spalten von U erreichen, dass $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$ gilt.

Singularwertzerlegung

Setzt man $U = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^m)$ und $V = (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n)$, so ist (5.4) äquivalent zu

$$A\mathbf{v}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{u}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, m. \end{cases} \quad (5.5)$$

Ohne Einschränkung können die σ_i nichtnegativ gewählt werden. Ist etwa $\sigma_j < 0$, so ersetze man die j -te Spalte \mathbf{v}^j von V durch $-\mathbf{v}^j$.

Ferner können wir durch Umordnung von Zeilen von V^T bzw. Spalten von U erreichen, dass $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$ gilt.

Wir werden nun nur noch Singularwertzerlegungen betrachten, in denen die Diagonalelemente $\sigma_1, \dots, \sigma_m$ nichtnegativ und der Größe nach geordnet sind.

Singularwertzerlegung

Setzt man $U = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^m)$ und $V = (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n)$, so ist (5.4) äquivalent zu

$$A\mathbf{v}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{u}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, m. \end{cases} \quad (5.5)$$

Ohne Einschränkung können die σ_i nichtnegativ gewählt werden. Ist etwa $\sigma_j < 0$, so ersetze man die j -te Spalte \mathbf{v}^j von V durch $-\mathbf{v}^j$.

Ferner können wir durch Umordnung von Zeilen von V^T bzw. Spalten von U erreichen, dass $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots$ gilt.

Wir werden nun nur noch Singularwertzerlegungen betrachten, in denen die Diagonalelemente $\sigma_1, \dots, \sigma_m$ nichtnegativ und der Größe nach geordnet sind.

Definition 5.10: Es seien in einer Singularwertzerlegung (5.4) von $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ die Diagonalelemente $\sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_m$ von Σ nicht negativ. Diese σ_i heißen die **Singularwerte** oder die **singulären Werte** von A .

Singulärwertzerlegung

Beispiel 5.11: (Fortsetzung von Beispiel 5.9)

Es sei $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ symmetrisch und μ_i und v^i wie in Beispiel 5.9, wobei die Reihenfolge so gewählt ist, dass

$$|\mu_1| \geq |\mu_2| \geq \cdots \geq |\mu_r| > \mu_{r+1} = \cdots = \mu_n = 0$$

gilt.

Singulärwertzerlegung

Beispiel 5.11: (Fortsetzung von Beispiel 5.9)

Es sei $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ symmetrisch und μ_i und v^i wie in Beispiel 5.9, wobei die Reihenfolge so gewählt ist, dass

$$|\mu_1| \geq |\mu_2| \geq \dots \geq |\mu_r| > \mu_{r+1} = \dots = \mu_n = 0$$

gilt.

Es sei $u^i := v^i$, falls $\mu_i \geq 0$, und $u^i := -v^i$, falls $\mu_i < 0$, und hiermit

$$U := (u^1, \dots, u^n).$$

Singulärwertzerlegung

Beispiel 5.11: (Fortsetzung von Beispiel 5.9)

Es sei $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ symmetrisch und μ_i und v^i wie in Beispiel 5.9, wobei die Reihenfolge so gewählt ist, dass

$$|\mu_1| \geq |\mu_2| \geq \dots \geq |\mu_r| > \mu_{r+1} = \dots = \mu_n = 0$$

gilt.

Es sei $u^i := v^i$, falls $\mu_i \geq 0$, und $u^i := -v^i$, falls $\mu_i < 0$, und hiermit

$$U := (u^1, \dots, u^n).$$

Dann gilt

$$A = U \Sigma V^T, \quad \text{wobei} \quad \Sigma = (|\mu_i| \delta_{ij}),$$

und $\sigma_1 = |\mu_1|, \dots, \sigma_r = |\mu_r|$ und 0 (mit entsprechender Multiplizität) sind die singulären Werte von A . □

Singularwertzerlegung

Aus (5.4) folgt

$$\mathbf{A}^T = \mathbf{V}\mathbf{\Sigma}^T\mathbf{U}^T; \quad (5.6)$$

Singulärwertzerlegung

Aus (5.4) folgt

$$A^T = V\Sigma^T U^T; \quad (5.6)$$

besitzt also A eine Singulärwertzerlegung, so auch A^T und die singulären Werte stimmen überein.

Singularwertzerlegung

Aus (5.4) folgt

$$\mathbf{A}^T = \mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}^T\mathbf{U}^T; \quad (5.6)$$

besitzt also \mathbf{A} eine Singularwertzerlegung, so auch \mathbf{A}^T und die singulären Werte stimmen überein.

Die Gleichung (5.6) kann man (entsprechend Gleichung (5.5), auch im Fall $n \leq m$) schreiben als

$$\mathbf{A}^T \mathbf{u}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{v}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, n. \end{cases}$$

Singularwertzerlegung

Aus (5.4) folgt

$$\mathbf{A}^T = \mathbf{V}\boldsymbol{\Sigma}^T\mathbf{U}^T; \quad (5.6)$$

besitzt also \mathbf{A} eine Singularwertzerlegung, so auch \mathbf{A}^T und die singulären Werte stimmen überein.

Die Gleichung (5.6) kann man (entsprechend Gleichung (5.5), auch im Fall $n \leq m$) schreiben als

$$\mathbf{A}^T \mathbf{u}^i = \begin{cases} \sigma_i \mathbf{v}^i, & i = 1, \dots, \min(m, n), \\ \mathbf{o}, & i = \min(m, n) + 1, \dots, n. \end{cases}$$

Ist $m \geq n$, so erhalten wir in der Gleichung oben nur den oberen Fall.

Singularwertzerlegung

Aus (5.4) und (5.6) folgt

$$\begin{aligned} \mathbf{A}^T \mathbf{A} &= \mathbf{V} \boldsymbol{\Sigma}^T \boldsymbol{\Sigma} \mathbf{V}^T, \\ \mathbf{A} \mathbf{A}^T &= \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} \boldsymbol{\Sigma}^T \mathbf{U}^T, \end{aligned} \tag{5.7}$$

d.h., die Quadrate der singulären Werte von \mathbf{A} (und \mathbf{A}^T) sind Eigenwerte von $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ und $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$ und $\{\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^n\}$ bzw. $\{\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^m\}$ ist ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren von $\mathbf{A}^T \mathbf{A}$ bzw. $\mathbf{A} \mathbf{A}^T$.

Singulärwertzerlegung

Aus (5.4) und (5.6) folgt

$$\begin{aligned}A^T A &= V \Sigma^T \Sigma V^T, \\ AA^T &= U \Sigma \Sigma^T U^T,\end{aligned}\tag{5.7}$$

d.h., die Quadrate der singulären Werte von A (und A^T) sind Eigenwerte von $A^T A$ und AA^T und $\{v^1, \dots, v^n\}$ bzw. $\{u^1, \dots, u^m\}$ ist ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren von $A^T A$ bzw. AA^T .

Dies zeigt, dass die singulären Werte σ_i eindeutig bestimmt sind, nicht aber die Matrizen U und V , da mehrfache Eigenwerte von AA^T und $A^T A$ auftreten können.

Singularwertzerlegung

Aus (5.4) und (5.6) folgt

$$\begin{aligned}A^T A &= V \Sigma^T \Sigma V^T, \\ AA^T &= U \Sigma \Sigma^T U^T,\end{aligned}\tag{5.7}$$

d.h., die Quadrate der singulären Werte von A (und A^T) sind Eigenwerte von $A^T A$ und AA^T und $\{v^1, \dots, v^n\}$ bzw. $\{u^1, \dots, u^m\}$ ist ein Orthonormalsystem von Eigenvektoren von $A^T A$ bzw. AA^T .

Dies zeigt, dass die singulären Werte σ_i eindeutig bestimmt sind, nicht aber die Matrizen U und V , da mehrfache Eigenwerte von AA^T und $A^T A$ auftreten können.

Satz 5.12

Jedes $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ besitzt eine Singularwertzerlegung.

Singularwertzerlegung

Satz 5.13

Ist die Singularwertzerlegung von A durch Gleichung (5.4) gegeben und gilt

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \dots = \sigma_m = 0,$$

so ist

- ▶ r der Rang von A ,
- ▶ $\text{Kern}(A) := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n : A\mathbf{x} = \mathbf{o}\} = \text{span}\{\mathbf{v}^{r+1}, \dots, \mathbf{v}^n\}$,
- ▶ $\text{Bild}(A) := \{A\mathbf{x} : \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n\} = \text{span}\{\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^r\}$,
- ▶ $A = \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}^i (\mathbf{v}^i)^T = \mathbf{U}_r \mathbf{\Sigma}_r \mathbf{V}_r^T$ mit $\mathbf{U}_r = (\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^r)$, $\mathbf{V}_r = (\mathbf{v}^1, \dots, \mathbf{v}^r)$, $\mathbf{\Sigma}_r = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r)$,
- ▶ $\|A\|_S^2 = \sum_{i=1}^m \sum_{j=1}^n a_{ij}^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2$,
- ▶ $\|A\|_2 = \sigma_1$.

Singulärwertzerlegung

Beweis.

(i): Da die Multiplikation mit den regulären Matrizen U^T und V den Rang nicht verändert, gilt $\text{Rang } A = \text{Rang } \Sigma = r$.

Singulärwertzerlegung

Beweis.

(i): Da die Multiplikation mit den regulären Matrizen U^T und V den Rang nicht verändert, gilt $\text{Rang } A = \text{Rang } \Sigma = r$.

(ii): Es ist $V^T v^i = e^i$. Somit ist

$$A v^i = U \Sigma V^T v^i = U \Sigma e^i = \mathbf{o} \quad \text{für } i = r + 1, \dots, n.$$

Also gilt

$$v^{r+1}, \dots, v^n \in \text{Kern}(A).$$

Da $\dim \text{Kern}(A) = n - r$, bilden diese Vektoren eine Basis von $\text{Kern}(A)$.

Singularwertzerlegung

Beweis.

(iii): Wegen $A = U\Sigma V^T$ ist

$$\begin{aligned}\text{Bild}(A) &= U \cdot \text{Bild}(\Sigma) = U \cdot \text{span}(\mathbf{e}^1, \dots, \mathbf{e}^r) \\ &= \text{span}(\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^r).\end{aligned}$$

Singulärwertzerlegung

Beweis.

(iii): Wegen $A = U\Sigma V^T$ ist

$$\begin{aligned}\text{Bild}(A) &= U \cdot \text{Bild}(\Sigma) = U \cdot \text{span}(\mathbf{e}^1, \dots, \mathbf{e}^r) \\ &= \text{span}(\mathbf{u}^1, \dots, \mathbf{u}^r).\end{aligned}$$

Punkt (iv): Durch Block-Matrix-Multiplikation erhält man

$$\begin{aligned}A &= U\Sigma V^T \\ &= (\mathbf{u}^1 \quad \dots \quad \mathbf{u}^m) \Sigma \begin{pmatrix} (\mathbf{v}^1)^T \\ \vdots \\ (\mathbf{v}^n)^T \end{pmatrix} = \sum_{i=1}^r \sigma_i \mathbf{u}^i (\mathbf{v}^i)^T.\end{aligned}$$

Singulärwertzerlegung

Beweis.

(v): Es sei $\mathbf{A} = (\mathbf{a}^1, \dots, \mathbf{a}^n)$. Da die orthogonale Matrix \mathbf{U}^T die Euklidische Länge nicht verändert, gilt

$$\|\mathbf{A}\|_S^2 = \sum_{i=1}^n \|\mathbf{a}^i\|_2^2 = \sum_{i=1}^n \|\mathbf{U}^T \mathbf{a}^i\|_2^2 = \|\mathbf{U}^T \mathbf{A}\|_S^2.$$

Durch entsprechende Argumentation mit den Zeilen von $\mathbf{U}^T \mathbf{A}$ erhält man

$$\|\mathbf{A}\|_S^2 = \|\mathbf{U}^T \mathbf{A} \mathbf{V}\|_S^2 = \|\boldsymbol{\Sigma}\|_S^2 = \sum_{i=1}^r \sigma_i^2.$$

Singularwertzerlegung

Beweis.

(vi): Nach Definition und aufgrund von

$$\mathbf{V}^T \mathbf{V} = \mathbf{V} \mathbf{V}^T = \mathbf{E}$$

gilt

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A}\|_2 &= \max\{\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|_2 : \|\mathbf{x}\|_2 = 1\} \\ &= \max\{\|\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{x}\|_2 : \|\mathbf{x}\|_2 = 1\} \\ &= \max\{\|\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{V}\mathbf{V}^T\mathbf{x}\|_2 : \|\mathbf{V}\mathbf{V}^T\mathbf{x}\|_2 = 1\} \\ &= \max\{\|\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{V}\mathbf{y}\|_2 : \|\mathbf{V}\mathbf{y}\|_2 = 1\} \\ &= \max\{\|\mathbf{U}^T\mathbf{U}\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{V}\mathbf{y}\|_2 : \|\mathbf{V}^T\mathbf{V}\mathbf{y}\|_2 = 1\} \\ &= \max\{\|\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{y}\|_2 : \|\mathbf{y}\|_2 = 1\} = \sigma_1 \end{aligned}$$



Singularwertzerlegung

Bemerkung 5.14: Besitzt die **reguläre** Matrix A die Singularwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$, so gilt $\|A\|_2 = \sigma_1$, und wegen

$$A^{-1} = (U\Sigma V^T)^{-1} = V\Sigma^{-1}U^T$$

ist

$$\|A^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sigma_n}.$$

Singularwertzerlegung

Bemerkung 5.14: Besitzt die **reguläre** Matrix A die Singularwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$, so gilt $\|A\|_2 = \sigma_1$, und wegen

$$A^{-1} = (U\Sigma V^T)^{-1} = V\Sigma^{-1}U^T$$

ist

$$\|A^{-1}\|_2 = \frac{1}{\sigma_n}.$$

Daher ist die Kondition von A bzgl. der Euklidischen Norm gegeben durch

$$\kappa_2(A) := \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 = \frac{\sigma_1}{\sigma_n}.$$

□

Singulärwertzerlegung

Bemerkung 5.15: Im Prinzip kann man mit Hilfe der Gleichungen (5.7) die Singulärwertzerlegung von A berechnen (wenn man Eigenwertaufgaben numerisch lösen kann).

Singularwertzerlegung

Bemerkung 5.15: Im Prinzip kann man mit Hilfe der Gleichungen (5.7) die Singularwertzerlegung von A berechnen (wenn man Eigenwertaufgaben numerisch lösen kann).

Dazu hat man $A^T A$ und AA^T zu berechnen. Dies ist zum einen sehr aufwendig, zum anderen kann — wie wir später sehen werden — die **Kondition drastisch verschlechtert** werden und damit die **numerische Behandlung erheblich erschwert** werden.

Singularwertzerlegung

Bemerkung 5.15: Im Prinzip kann man mit Hilfe der Gleichungen (5.7) die Singularwertzerlegung von A berechnen (wenn man Eigenwertaufgaben numerisch lösen kann).

Dazu hat man $A^T A$ und AA^T zu berechnen. Dies ist zum einen sehr aufwendig, zum anderen kann — wie wir später sehen werden — die **Kondition drastisch verschlechtert** werden und damit die **numerische Behandlung erheblich erschwert** werden.

In der Praxis verwendet man einen **Algorithmus von Golub und Reinsch** (1971), der auf dem sogenannten QR-Algorithmus zur Bestimmung der Eigenwerte von $A^T A$ beruht, aber die Berechnung von $A^T A$ bzw. AA^T vermeidet. □

Pseudoinverse

Wir betrachten erneut das lineare Ausgleichsproblem

Es seien $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ gegeben mit $m \geq n$. Man bestimme $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ mit

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min \quad (5.8)$$

und untersuchen dieses nun mit Hilfe der Singulärwertzerlegung.

Pseudoinverse

Wir betrachten erneut das lineare Ausgleichsproblem

Es seien $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ gegeben mit $m \geq n$. Man bestimme $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ mit

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min \quad (5.8)$$

und untersuchen dieses nun mit Hilfe der Singulärwertzerlegung.

Wir bezeichnen in diesem ganzen Abschnitt mit

$$\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > \sigma_{r+1} = \dots = \sigma_n = 0$$

die singulären Werte von \mathbf{A} , mit $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$ eine Singulärwertzerlegung von \mathbf{A} und mit \mathbf{u}^j bzw. \mathbf{v}^k die Spalten von \mathbf{U} bzw. \mathbf{V} .

Pseudoinverse

Satz 5.16

Es sei $\mathbf{c} := \mathbf{U}^T \mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$. Dann ist die Lösungsmenge des linearen Ausgleichsproblems (5.8) gegeben durch

$$L = \bar{\mathbf{x}} + \text{Kern}(\mathbf{A}), \quad (5.9)$$

wobei $\bar{\mathbf{x}}$ die folgende spezielle Lösung von (5.8) bezeichnet:

$$\bar{\mathbf{x}} := \sum_{i=1}^r \frac{c_i}{\sigma_i} \mathbf{v}^i = \mathbf{V}_r \boldsymbol{\Sigma}_r^{-1} \mathbf{U}_r^T \mathbf{b}. \quad (5.10)$$

Pseudoinverse

Beweis.

Da die Multiplikation mit einer orthogonalen Matrix die Euklidische Länge nicht ändert, gilt mit $z := V^T x$

$$\begin{aligned}\|Ax - b\|_2^2 &= \|U^T(Ax - b)\|_2^2 = \|\Sigma V^T x - U^T b\|_2^2 = \|\Sigma z - c\|_2^2 \\ &= \|(\sigma_1 z_1 - c_1, \dots, \sigma_r z_r - c_r, -c_{r+1}, \dots, -c_m)^T\|_2^2.\end{aligned}$$



Pseudoinverse

Beweis.

Da die Multiplikation mit einer orthogonalen Matrix die Euklidische Länge nicht ändert, gilt mit $\mathbf{z} := \mathbf{V}^T \mathbf{x}$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 &= \|\mathbf{U}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})\|_2^2 = \|\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{x} - \mathbf{U}^T\mathbf{b}\|_2^2 = \|\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{z} - \mathbf{c}\|_2^2 \\ &= \|(\sigma_1 z_1 - c_1, \dots, \sigma_r z_r - c_r, -c_{r+1}, \dots, -c_m)^T\|_2^2. \end{aligned}$$

Wie im Abschnitt über die Normalgleichungen liest man hieraus die Lösung von (5.8) sofort ab: $z_i := c_i/\sigma_i$, $i = 1, \dots, r$, und $z_i \in \mathbb{R}$ beliebig für $i = r + 1, \dots, n$, d.h.,

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^r \frac{c_i}{\sigma_i} \mathbf{v}^i + \sum_{i=r+1}^n z_i \mathbf{v}^i, \quad z_i \in \mathbb{R}, \quad i = r + 1, \dots, n. \quad (5.11)$$



Pseudoinverse

Beweis.

Da die Multiplikation mit einer orthogonalen Matrix die Euklidische Länge nicht ändert, gilt mit $\mathbf{z} := \mathbf{V}^T \mathbf{x}$

$$\begin{aligned} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 &= \|\mathbf{U}^T(\mathbf{Ax} - \mathbf{b})\|_2^2 = \|\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{V}^T\mathbf{x} - \mathbf{U}^T\mathbf{b}\|_2^2 = \|\boldsymbol{\Sigma}\mathbf{z} - \mathbf{c}\|_2^2 \\ &= \|(\sigma_1 z_1 - c_1, \dots, \sigma_r z_r - c_r, -c_{r+1}, \dots, -c_m)^T\|_2^2. \end{aligned}$$

Wie im Abschnitt über die Normalgleichungen liest man hieraus die Lösung von (5.8) sofort ab: $z_i := c_i/\sigma_i$, $i = 1, \dots, r$, und $z_i \in \mathbb{R}$ beliebig für $i = r+1, \dots, n$, d.h.,

$$\mathbf{x} = \sum_{i=1}^r \frac{c_i}{\sigma_i} \mathbf{v}^i + \sum_{i=r+1}^n z_i \mathbf{v}^i, \quad z_i \in \mathbb{R}, \quad i = r+1, \dots, n. \quad (5.11)$$

Die letzten $n - r$ Spalten von \mathbf{V} spannen nach Satz 5.13 den Kern von \mathbf{A} auf, daher ist die Lösungsmenge L von (5.8) gegeben durch (5.9), (5.10). \square

Pseudoinverse

In Satz 5.1 wurde gezeigt (und das liest man auch aus Satz 5.16 ab), dass die Lösung des Ausgleichsproblems (5.8) genau dann eindeutig ist, wenn $r = \text{Rang } A = n$ gilt.

Pseudoinverse

In Satz 5.1 wurde gezeigt (und das liest man auch aus Satz 5.16 ab), dass die Lösung des Ausgleichsproblems (5.8) genau dann eindeutig ist, wenn $r = \text{Rang } A = n$ gilt.

Wir erzwingen nun auch im Fall $r < n$ die Eindeutigkeit, indem wir zusätzlich fordern, dass die Euklidische Norm der Lösung möglichst klein werden soll.

Pseudoinverse

In Satz 5.1 wurde gezeigt (und das liest man auch aus Satz 5.16 ab), dass die Lösung des Ausgleichsproblems (5.8) genau dann eindeutig ist, wenn $r = \text{Rang } A = n$ gilt.

Wir erzwingen nun auch im Fall $r < n$ die Eindeutigkeit, indem wir zusätzlich fordern, dass die Euklidische Norm der Lösung möglichst klein werden soll.

Definition 5.17: Es sei L die Lösungsmenge des Ausgleichsproblems (5.8). Der Vektor $\tilde{x} \in L$ heißt **Pseudonormallösung** von (5.8), falls

$$\|\tilde{x}\|_2 \leq \|x\|_2 \quad \text{für alle } x \in L.$$

Pseudoinverse

In Satz 5.1 wurde gezeigt (und das liest man auch aus Satz 5.16 ab), dass die Lösung des Ausgleichsproblems (5.8) genau dann eindeutig ist, wenn $r = \text{Rang } A = n$ gilt.

Wir erzwingen nun auch im Fall $r < n$ die Eindeutigkeit, indem wir zusätzlich fordern, dass die Euklidische Norm der Lösung möglichst klein werden soll.

Definition 5.17: Es sei L die Lösungsmenge des Ausgleichsproblems (5.8). Der Vektor $\tilde{x} \in L$ heißt **Pseudonormallösung** von (5.8), falls

$$\|\tilde{x}\|_2 \leq \|x\|_2 \quad \text{für alle } x \in L.$$

Die Pseudonormallösung, also die „kürzeste“ Normallösung, ist meist die einzige „physikalisch“ sinnvolle „Lösung“.

Pseudoinverse

Aus der Darstellung (5.11) der allgemeinen Lösung von (5.8) liest man ab, dass $\bar{\mathbf{x}}$ aus (5.10) Pseudonormallösung von (5.8) ist, denn

$$\left\| \bar{\mathbf{x}} + \sum_{i=r+1}^n z_i \mathbf{v}^i \right\|_2^2 = \|\bar{\mathbf{x}}\|_2^2 + \sum_{i=r+1}^n |z_i|^2 \cdot \|\mathbf{v}^i\|_2^2 \geq \|\bar{\mathbf{x}}\|_2^2.$$

Pseudoinverse

Aus der Darstellung (5.11) der allgemeinen Lösung von (5.8) liest man ab, dass \bar{x} aus (5.10) Pseudonormallösung von (5.8) ist, denn

$$\left\| \bar{x} + \sum_{i=r+1}^n z_i \mathbf{v}^i \right\|_2^2 = \|\bar{x}\|_2^2 + \sum_{i=r+1}^n |z_i|^2 \cdot \|\mathbf{v}^i\|_2^2 \geq \|\bar{x}\|_2^2.$$

Ferner ist die Pseudonormallösung eindeutig bestimmt, und \bar{x} ist offensichtlich die **einzige** Lösung von (5.8) mit $\mathbf{x} \in \text{Kern}(\mathbf{A})^\perp \cap L$.

Pseudoinverse

Aus der Darstellung (5.11) der allgemeinen Lösung von (5.8) liest man ab, dass \bar{x} aus (5.10) Pseudonormallösung von (5.8) ist, denn

$$\|\bar{x} + \sum_{i=r+1}^n z_i \mathbf{v}^i\|_2^2 = \|\bar{x}\|_2^2 + \sum_{i=r+1}^n |z_i|^2 \cdot \|\mathbf{v}^i\|_2^2 \geq \|\bar{x}\|_2^2.$$

Ferner ist die Pseudonormallösung eindeutig bestimmt, und \bar{x} ist offensichtlich die **einzige** Lösung von (5.8) mit $\mathbf{x} \in \text{Kern}(\mathbf{A})^\perp \cap L$. Daher gilt

Satz 5.18

Es gibt genau eine Pseudonormallösung \bar{x} von (5.8). Diese ist charakterisiert durch $\bar{x} \in \text{Kern}(\mathbf{A})^\perp \cap L$.

Pseudoinverse

Für jedes $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ ist durch

$$\mathbb{R}^m \ni \mathbf{b} \mapsto \bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n : \|\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|_2 \leq \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \|\bar{\mathbf{x}}\|_2 \text{ minimal}$$

eine **Abbildung** erklärt.

Pseudoinverse

Für jedes $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ ist durch

$$\mathbb{R}^m \ni \mathbf{b} \mapsto \bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n : \|\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|_2 \leq \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \|\bar{\mathbf{x}}\|_2 \text{ minimal}$$

eine **Abbildung** erklärt.

Diese ist offensichtlich **linear** (vgl. die Darstellung von $\bar{\mathbf{x}}$ in (5.10)), kann also durch eine Matrix $\mathbf{A}^\dagger \in \mathbb{R}^{(n,m)}$ dargestellt werden.

Pseudoinverse

Für jedes $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ ist durch

$$\mathbb{R}^m \ni \mathbf{b} \mapsto \bar{\mathbf{x}} \in \mathbb{R}^n : \|\mathbf{A}\bar{\mathbf{x}} - \mathbf{b}\|_2 \leq \|\mathbf{A}\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 \quad \forall \mathbf{x} \in \mathbb{R}^n, \quad \|\bar{\mathbf{x}}\|_2 \text{ minimal}$$

eine **Abbildung** erklärt.

Diese ist offensichtlich **linear** (vgl. die Darstellung von $\bar{\mathbf{x}}$ in (5.10)), kann also durch eine Matrix $A^\dagger \in \mathbb{R}^{(n,m)}$ dargestellt werden.

Definition 5.19: Es sei $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$. Dann heißt die Matrix $A^\dagger \in \mathbb{R}^{(n,m)}$, für die durch

$$\bar{\mathbf{x}} := A^\dagger \mathbf{b}$$

für alle $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^m$ die Pseudonormallösung des Ausgleichsproblems (5.8) gegeben ist, die **Pseudoinverse** (oder **Moore-Penrose-Inverse**) von A .

Pseudoinverse

Bemerkung 5.20: Ist $\text{Rang } A = n$, so ist das Ausgleichsproblem (5.8) eindeutig lösbar, und aus den Normalgleichungen folgt, dass die Lösung $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$ ist.

Pseudoinverse

Bemerkung 5.20: Ist $\text{Rang } A = n$, so ist das Ausgleichsproblem (5.8) eindeutig lösbar, und aus den Normalgleichungen folgt, dass die Lösung $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$ ist.

In diesem Fall ist also $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$.

Pseudoinverse

Bemerkung 5.20: Ist $\text{Rang } A = n$, so ist das Ausgleichsproblem (5.8) eindeutig lösbar, und aus den Normalgleichungen folgt, dass die Lösung $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$ ist.

In diesem Fall ist also $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$.

Ist noch spezieller $n = m$ und A regulär, so ist $A^\dagger = A^{-1}$.

Pseudoinverse

Bemerkung 5.20: Ist $\text{Rang } A = n$, so ist das Ausgleichsproblem (5.8) eindeutig lösbar, und aus den Normalgleichungen folgt, dass die Lösung $\bar{x} = (A^T A)^{-1} A^T b$ ist.

In diesem Fall ist also $A^\dagger = (A^T A)^{-1} A^T$.

Ist noch spezieller $n = m$ und A regulär, so ist $A^\dagger = A^{-1}$.

Die Pseudoinverse wird also zur „normalen Inversen“, wenn diese existiert, und ist somit eine konsistente Erweiterung dieses Begriffes. □

Pseudoinverse

Aus unserer Konstruktion ergibt sich sofort im allgemeinen Fall

Satz 5.21

Sei $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ mit der Singulärwertzerlegung

$$A = U\Sigma V^T, \quad \Sigma = (\sigma_i \delta_{ij})_{i,j}.$$

Dann gilt

- ▶ $\Sigma^\dagger = (\tau_i \delta_{ij})_{j,i}, \quad \tau_i = \begin{cases} \sigma_i^{-1}, & \text{falls } \sigma_i \neq 0 \\ 0, & \text{falls } \sigma_i = 0 \end{cases},$
- ▶ $A^\dagger = V\Sigma^\dagger U^T.$

Pseudoinverse

Bemerkung 5.22: Die explizite Matrix-Darstellung der Pseudoinverse braucht man genauso häufig wie die der inversen Matrix, nämlich fast nie. □

Pseudoinverse

Bemerkung 5.22: Die explizite Matrix-Darstellung der Pseudoinverse braucht man genauso häufig wie die der inversen Matrix, nämlich fast nie. \square

Aus der Darstellung der Pseudoinversen in Satz 5.21 folgt unmittelbar

Pseudoinverse

Bemerkung 5.22: Die explizite Matrix-Darstellung der Pseudoinverse braucht man genauso häufig wie die der inversen Matrix, nämlich fast nie. \square

Aus der Darstellung der Pseudoinversen in Satz 5.21 folgt unmittelbar

Korollar 5.23

Für jede Matrix $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ gilt

$$A^{\dagger\dagger} = A \quad \text{und} \quad (A^{\dagger})^T = (A^T)^{\dagger}.$$

Pseudoinverse

Bemerkung 5.22: Die explizite Matrix-Darstellung der Pseudoinverse braucht man genauso häufig wie die der inversen Matrix, nämlich fast nie. \square

Aus der Darstellung der Pseudoinversen in Satz 5.21 folgt unmittelbar

Korollar 5.23

Für jede Matrix $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ gilt

$$A^{\dagger\dagger} = A \quad \text{und} \quad (A^{\dagger})^T = (A^T)^{\dagger}.$$

Die Pseudoinverse A^{\dagger} besitzt also die üblichen Eigenschaften der Inversen A^{-1} für reguläres A . Es gilt jedoch i. A.

$$(AB)^{\dagger} \neq B^{\dagger}A^{\dagger}.$$

Pseudoinverse

Beispiel 5.24: Es gilt

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{E} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

Pseudoinverse

Beispiel 5.24: Es gilt

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{E} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

und daher besitzt \mathbf{A} die Pseudoinverse

$$\mathbf{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{E} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pseudoinverse

Beispiel 5.24: Es gilt

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{E} \begin{pmatrix} \sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix},$$

und daher besitzt \mathbf{A} die Pseudoinverse

$$\mathbf{A}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1/\sqrt{2} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \mathbf{E} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Es ist $\mathbf{A}^2 = \mathbf{A}$ und $(\mathbf{A}^\dagger)^2 = \frac{1}{2}\mathbf{A}^\dagger$, d.h. $(\mathbf{A}^2)^\dagger \neq (\mathbf{A}^\dagger)^2$. □

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir übertragen nun den Begriff der Kondition einer Matrix auf singuläre und, allgemeiner, auf nicht quadratische Matrizen.

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir übertragen nun den Begriff der Kondition einer Matrix auf singuläre und, allgemeiner, auf nicht quadratische Matrizen.

Es ist klar, dass für den quadratischen, nicht regulären Fall dieser verallgemeinerte Konditionsbegriff nicht mehr als **Verstärkungsfaktor** für die Störung linearer Systeme gedeutet werden kann. Er spielt aber eine ähnliche Rolle für lineare Ausgleichsprobleme.

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir übertragen nun den Begriff der Kondition einer Matrix auf singuläre und, allgemeiner, auf nicht quadratische Matrizen.

Es ist klar, dass für den quadratischen, nicht regulären Fall dieser verallgemeinerte Konditionsbegriff nicht mehr als **Verstärkungsfaktor** für die Störung linearer Systeme gedeutet werden kann. Er spielt aber eine ähnliche Rolle für lineare Ausgleichsprobleme.

Wir beschränken uns auf die Euklidische Norm und betrachten nur die beiden Spezialfälle, dass entweder A vollen Rang hat **oder** nur die rechte Seite b gestört wird.

Störung von Ausgleichsproblemen

Zur Motivation betrachten wir das lineare Ausgleichsproblem

$$\|A\mathbf{x} - \mathbf{b}\|_2 = \min \quad (5.12)$$

mit $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $\text{Rang}(A) = r$, und eine Störung hiervon

$$\|A(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) - (\mathbf{b} + \Delta\mathbf{b})\|_2 = \min, \quad (5.13)$$

wobei wir **nur** Störungen von \mathbf{b} , nicht aber der Koeffizientenmatrix A zulassen.

Störung von Ausgleichsproblemen

Zur Motivation betrachten wir das lineare Ausgleichsproblem

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min \quad (5.12)$$

mit $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $\text{Rang}(\mathbf{A}) = r$, und eine Störung hiervon

$$\|\mathbf{A}(\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x}) - (\mathbf{b} + \Delta\mathbf{b})\|_2 = \min, \quad (5.13)$$

wobei wir **nur** Störungen von \mathbf{b} , nicht aber der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} zulassen.

Es sei $\mathbf{x} = \mathbf{A}^\dagger \mathbf{b}$ bzw. $\mathbf{x} + \Delta\mathbf{x} = \mathbf{A}^\dagger (\mathbf{b} + \Delta\mathbf{b})$ die Pseudonormallösung von (5.12) bzw. (5.13). Dann gilt $\Delta\mathbf{x} = \mathbf{A}^\dagger \Delta\mathbf{b}$, und aus $\|\mathbf{A}^\dagger\|_2 = 1/\sigma_r$ folgt

$$\|\Delta\mathbf{x}\|_2 \leq \|\mathbf{A}^\dagger\|_2 \cdot \|\Delta\mathbf{b}\|_2 = \frac{1}{\sigma_r} \|\Delta\mathbf{b}\|_2.$$

Störung von Ausgleichsproblemen

Ferner gilt (vgl. (5.11)):

$$\|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^r \frac{c_i^2}{\sigma_i^2} \geq \frac{1}{\sigma_1^2} \sum_{i=1}^r c_i^2 = \frac{1}{\sigma_1^2} \left\| \sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i \right\|_2^2.$$

Störung von Ausgleichsproblemen

Ferner gilt (vgl. (5.11)):

$$\|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^r \frac{c_i^2}{\sigma_i^2} \geq \frac{1}{\sigma_1^2} \sum_{i=1}^r c_i^2 = \frac{1}{\sigma_1^2} \left\| \sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i \right\|_2^2.$$

Da offenbar

$$\sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i$$

die **Projektion** von \mathbf{b} auf den **Bildbereich** $\text{Bild}(A)$ von A ist,

Störung von Ausgleichsproblemen

Ferner gilt (vgl. (5.11)):

$$\|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^r \frac{c_i^2}{\sigma_i^2} \geq \frac{1}{\sigma_1^2} \sum_{i=1}^r c_i^2 = \frac{1}{\sigma_1^2} \left\| \sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i \right\|_2^2.$$

Da offenbar

$$\sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i$$

die **Projektion** von \mathbf{b} auf den **Bildbereich** $\text{Bild}(A)$ von A ist, folgt also für den relativen Fehler

$$\frac{\|\Delta \mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} \leq \frac{\sigma_1}{\sigma_r} \cdot \frac{\|\Delta \mathbf{b}\|_2}{\|\mathbf{P}_{\text{Bild}(A)} \mathbf{b}\|_2}. \quad (5.14)$$

Störung von Ausgleichsproblemen

Ferner gilt (vgl. (5.11)):

$$\|\mathbf{x}\|_2^2 = \sum_{i=1}^r \frac{c_i^2}{\sigma_i^2} \geq \frac{1}{\sigma_1^2} \sum_{i=1}^r c_i^2 = \frac{1}{\sigma_1^2} \left\| \sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i \right\|_2^2.$$

Da offenbar

$$\sum_{i=1}^r (\mathbf{u}^i)^T \mathbf{b} \mathbf{u}^i$$

die **Projektion** von \mathbf{b} auf den **Bildbereich** $\text{Bild}(A)$ von A ist, folgt also für den relativen Fehler

$$\frac{\|\Delta \mathbf{x}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} \leq \frac{\sigma_1}{\sigma_r} \cdot \frac{\|\Delta \mathbf{b}\|_2}{\|\mathbf{P}_{\text{Bild}(A)} \mathbf{b}\|_2}. \quad (5.14)$$

Diese Ungleichung beschreibt wieder, wie sich der **relative Fehler** der rechten Seite eines Ausgleichsproblems auf die Lösung auswirken kann.

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir definieren daher

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir definieren daher

Definition 5.25: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ besitze die Singulärwertzerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$. Dann nennen wir $\kappa_2(\mathbf{A}) := \sigma_1/\sigma_r$ die **Kondition** des Ausgleichsproblems $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min$ bzgl. Störungen der rechten Seite.

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir definieren daher

Definition 5.25: $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ besitze die Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$. Dann nennen wir $\kappa_2(A) := \sigma_1/\sigma_r$ die **Kondition** des Ausgleichsproblems $\|Ax - b\|_2 = \min$ bzgl. Störungen der rechten Seite.

Bemerkung 5.26: Ist $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ regulär, so stimmt diese Definition der Kondition mit der vorher gegebenen (für die Euklidische Norm) überein. □

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir definieren daher

Definition 5.25: $A \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ besitze die Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$. Dann nennen wir $\kappa_2(A) := \sigma_1/\sigma_r$ die **Kondition** des Ausgleichsproblems $\|Ax - b\|_2 = \min$ bzgl. Störungen der rechten Seite.

Bemerkung 5.26: Ist $A \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ regulär, so stimmt diese Definition der Kondition mit der vorher gegebenen (für die Euklidische Norm) überein.

Bemerkung 5.27: Wegen $\kappa_2(A^T A) = \kappa_2(A)^2$ und $\kappa_2(A) \geq 1$ sind die Normalgleichungen eines linearen Ausgleichsproblems i. A. schlechter konditioniert als die Koeffizientenmatrix des Ausgleichsproblems.

Störung von Ausgleichsproblemen

Wir definieren daher

Definition 5.25: $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$ besitze die Singulärwertzerlegung $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{\Sigma}\mathbf{V}^T$. Dann nennen wir $\kappa_2(\mathbf{A}) := \sigma_1/\sigma_r$ die **Kondition** des Ausgleichsproblems $\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min$ bzgl. Störungen der rechten Seite.

Bemerkung 5.26: Ist $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(n,n)}$ regulär, so stimmt diese Definition der Kondition mit der vorher gegebenen (für die Euklidische Norm) überein.

Bemerkung 5.27: Wegen $\kappa_2(\mathbf{A}^T\mathbf{A}) = \kappa_2(\mathbf{A})^2$ und $\kappa_2(\mathbf{A}) \geq 1$ sind die Normalgleichungen eines linearen Ausgleichsproblems i. A. schlechter konditioniert als die Koeffizientenmatrix des Ausgleichsproblems.

Lässt man Störungen der Koeffizientenmatrix \mathbf{A} **unter der Annahme, dass diese vollen Rang hat**, zu, so gilt:

Störung von Ausgleichsproblemen

Satz 5.28

Die Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, $m \geq n$, besitze den vollen Rang n . Es sei \mathbf{x} die Lösung des Ausgleichsproblems (5.12) und $\tilde{\mathbf{x}}$ die Lösung des gestörten Problems

$$\|(\mathbf{A} + \Delta\mathbf{A})\tilde{\mathbf{x}} - (\mathbf{b} + \Delta\mathbf{b})\|_2 = \min, \quad (5.15)$$

wobei

$$\varepsilon := \max \left(\frac{\|\Delta\mathbf{A}\|_2}{\|\mathbf{A}\|_2}, \frac{\|\Delta\mathbf{b}\|_2}{\|\mathbf{b}\|_2} \right) < \frac{1}{\kappa_2(\mathbf{A})} = \frac{\sigma_n(\mathbf{A})}{\sigma_1(\mathbf{A})}. \quad (5.16)$$

Dann gilt

$$\frac{\|\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{x}}\|_2}{\|\mathbf{x}\|_2} \leq \varepsilon \left(\frac{2\kappa_2(\mathbf{A})}{\cos \theta} + \tan \theta \cdot \kappa_2^2(\mathbf{A}) \right) + O(\varepsilon^2), \quad (5.17)$$

wobei θ den Winkel zwischen \mathbf{b} und seiner Projektion auf den Raum $\text{Bild}(\mathbf{A})$ bezeichnet.

Regularisierung schlecht konditionierter Probleme

Einige Probleme der Anwendungen (z. B. in der Tomographie oder bei der Ausbreitung von Rissen in den Materialwissenschaften) führen auf lineare Gleichungssysteme oder Ausgleichsprobleme mit **schlecht konditionierten Koeffizientenmatrizen**.

Regularisierung schlecht konditionierter Probleme

Einige Probleme der Anwendungen (z. B. in der Tomographie oder bei der Ausbreitung von Rissen in den Materialwissenschaften) führen auf lineare Gleichungssysteme oder Ausgleichsprobleme mit **schlecht konditionierten Koeffizientenmatrizen**.

In diesen Fällen führen die bisher betrachteten Verfahren zu **schlechten** oder gar **unbrauchbaren** Ergebnissen.

Regularisierung schlecht konditionierter Probleme

Einige Probleme der Anwendungen (z. B. in der Tomographie oder bei der Ausbreitung von Rissen in den Materialwissenschaften) führen auf lineare Gleichungssysteme oder Ausgleichsprobleme mit **schlecht konditionierten Koeffizientenmatrizen**.

In diesen Fällen führen die bisher betrachteten Verfahren zu **schlechten** oder gar **unbrauchbaren** Ergebnissen.

Wie soll der Ingenieur nun vorgehen: Aufgeben? Zum nächsten Mathematiker rennen und sich über die Ungerechtigkeit in der Welt beschweren?

Regularisierung schlecht konditionierter Probleme

Einige Probleme der Anwendungen (z. B. in der Tomographie oder bei der Ausbreitung von Rissen in den Materialwissenschaften) führen auf lineare Gleichungssysteme oder Ausgleichsprobleme mit **schlecht konditionierten Koeffizientenmatrizen**.

In diesen Fällen führen die bisher betrachteten Verfahren zu **schlechten** oder gar **unbrauchbaren** Ergebnissen.

Wie soll der Ingenieur nun vorgehen: Aufgeben? Zum nächsten Mathematiker rennen und sich über die Ungerechtigkeit in der Welt beschweren?

Meist stecken hinter diesen Problemen Fragestellungen, denen eine ingenieurwissenschaftlich oder physikalisch sinnvolle Antwort innewohnt. Die implizite Annahme der Existenz einer „physikalisch sinnvollen Lösung“ nutzt man zum „Erzwingen“ einer geeigneten „mathematischen Lösung“.

Regularisierung

Beispiel 5.29: Das Problem, die orthogonale Projektion einer gegebenen Funktion $f : [0, 1] \rightarrow \mathbb{R}$ auf den Raum Π_{n-1} der Polynome vom Höchstgrad $n - 1$ bzgl. des inneren Produkts

$$\langle f, g \rangle := \int_0^1 f(x)g(x) dx$$

zu berechnen, führt bei der Wahl der Basis $\{1, x, \dots, x^{n-1}\}$ auf das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{A}\mathbf{y} = \mathbf{b} \tag{5.18}$$

mit der Matrix

$$\mathbf{A} = (a_{ij})_{i,j=1}^n, \quad \text{wobei} \quad a_{ij} := \frac{1}{i+j-1}, \tag{5.19}$$

einer sogenannten **Hilbert-Matrix**, und $\mathbf{b} \in \mathbb{R}^n$, $b_i := \langle f, x^{i-1} \rangle$.

Regularisierung

Wir wählen für die Dimensionen $n = 10$, $n = 20$ und $n = 40$ die rechte Seite von (5.18) so, dass $y = (1, \dots, 1)^T$ die eindeutige Lösung ist, und behandeln (5.18) mit den bekannten numerischen Verfahren.

Regularisierung

Wir wählen für die Dimensionen $n = 10$, $n = 20$ und $n = 40$ die rechte Seite von (5.18) so, dass $\mathbf{y} = (1, \dots, 1)^T$ die eindeutige Lösung ist, und behandeln (5.18) mit den bekannten numerischen Verfahren.

Unter MATLAB erhält man mit der LR-Zerlegung mit Spaltenpivotsuche (in MATLAB $\mathbf{A} \setminus \mathbf{b}$), mit dem Cholesky-Verfahren, der QR-Zerlegung der Matrix \mathbf{A} und der Singulärwertzerlegung von \mathbf{A} die folgenden Fehler in der Euklidischen Norm:

Regularisierung

Wir wählen für die Dimensionen $n = 10$, $n = 20$ und $n = 40$ die rechte Seite von (5.18) so, dass $y = (1, \dots, 1)^T$ die eindeutige Lösung ist, und behandeln (5.18) mit den bekannten numerischen Verfahren.

Unter MATLAB erhält man mit der LR-Zerlegung mit Spaltenpivotsuche (in MATLAB $A \setminus b$), mit dem Cholesky-Verfahren, der QR-Zerlegung der Matrix A und der Singulärwertzerlegung von A die folgenden Fehler in der Euklidischen Norm:

	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$
LR-Zerlegung	$5.24 \cdot 10^{-4}$	$8.25 \cdot 10^{+1}$	$3.78 \cdot 10^{+2}$
Cholesky	$7.15 \cdot 10^{-4}$	numer. nicht pos. def.	
QR-Zerlegung	$1.41 \cdot 10^{-3}$	$1.67 \cdot 10^{+2}$	$1.46 \cdot 10^{+3}$
SVD	$8.24 \cdot 10^{-4}$	$3.26 \cdot 10^{+2}$	$8.35 \cdot 10^{+2}$

Regularisierung

Die Ergebnisse sind also (wenigstens für die Dimensionen $n = 20$ oder $n = 40$) unbrauchbar.

Regularisierung

Die Ergebnisse sind also (wenigstens für die Dimensionen $n = 20$ oder $n = 40$) unbrauchbar.

Ein ähnliches Verhalten zeigt sich bei dem Ausgleichsproblem.

Regularisierung

Die Ergebnisse sind also (wenigstens für die Dimensionen $n = 20$ oder $n = 40$) unbrauchbar.

Ein ähnliches Verhalten zeigt sich bei dem Ausgleichsproblem.

Wir betrachten für $n = 10$, $n = 20$ und $n = 40$ und $m = n + 10$ die Ausgleichsprobleme

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2 = \min$$

mit der Hilbert-Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{(m,n)}$, wobei \mathbf{b} so gewählt ist, dass $\mathbf{x} = (1, \dots, 1)^T$ die Lösung ist mit dem Residuum $\mathbf{Ax} - \mathbf{b} = \mathbf{o}$.

Regularisierung

Die folgende Tabelle enthält wieder die Fehler in der Euklidischen Norm für die Lösung der Normalgleichungen mit der LR-Zerlegung (das Cholesky Verfahren führte schon bei $n = 10$ zu der Meldung, dass die Koeffizientenmatrix nicht positiv definit ist), mit der QR-Zerlegung und der Singulärwertzerlegung.

Regularisierung

Die folgende Tabelle enthält wieder die Fehler in der Euklidischen Norm für die Lösung der Normalgleichungen mit der LR-Zerlegung (das Cholesky Verfahren führte schon bei $n = 10$ zu der Meldung, dass die Koeffizientenmatrix nicht positiv definit ist), mit der QR-Zerlegung und der Singulärwertzerlegung.

	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$
Normalgleichungen	$2.91 \cdot 10^{+2}$	$2.40 \cdot 10^{+2}$	$8.21 \cdot 10^{+2}$
QR-Zerlegung	$1.93 \cdot 10^{-5}$	$5.04 \cdot 10^{+0}$	$1.08 \cdot 10^{+1}$
SVD	$4.67 \cdot 10^{-5}$	$6.41 \cdot 10^{+1}$	$3.72 \cdot 10^{+2}$

Regularisierung

Die folgende Tabelle enthält wieder die Fehler in der Euklidischen Norm für die Lösung der Normalgleichungen mit der LR-Zerlegung (das Cholesky Verfahren führte schon bei $n = 10$ zu der Meldung, dass die Koeffizientenmatrix nicht positiv definit ist), mit der QR-Zerlegung und der Singulärwertzerlegung.

	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$
Normalgleichungen	$2.91 \cdot 10^{+2}$	$2.40 \cdot 10^{+2}$	$8.21 \cdot 10^{+2}$
QR-Zerlegung	$1.93 \cdot 10^{-5}$	$5.04 \cdot 10^{+0}$	$1.08 \cdot 10^{+1}$
SVD	$4.67 \cdot 10^{-5}$	$6.41 \cdot 10^{+1}$	$3.72 \cdot 10^{+2}$

Die Lösungen sind ebenfalls unbrauchbar. □

Regularisierung

Bei schlecht konditionierten Ausgleichsproblemen oder Gleichungssystemen ($n = m$) ist das folgende Vorgehen zu empfehlen:

Regularisierung

Bei schlecht konditionierten Ausgleichsproblemen oder Gleichungssystemen ($n = m$) ist das folgende Vorgehen zu empfehlen:

Bestimme die Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$ von A ; setze

$$\Sigma_{\tau}^{\dagger} = \text{diag}(\eta_i \delta_{ji}), \quad \eta_i := \begin{cases} \sigma_i^{-1} & \text{falls } \sigma_i \geq \tau, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei $\tau > 0$ eine gegebene Zahl ist,

$$A_{\tau}^{\dagger} := V \Sigma_{\tau}^{\dagger} U^T, \quad x := A_{\tau}^{\dagger} b.$$

Regularisierung

Bei schlecht konditionierten Ausgleichsproblemen oder Gleichungssystemen ($n = m$) ist das folgende Vorgehen zu empfehlen:

Bestimme die Singulärwertzerlegung $A = U\Sigma V^T$ von A ; setze

$$\Sigma_{\tau}^{\dagger} = \text{diag}(\eta_i \delta_{ji}), \quad \eta_i := \begin{cases} \sigma_i^{-1} & \text{falls } \sigma_i \geq \tau, \\ 0 & \text{sonst,} \end{cases}$$

wobei $\tau > 0$ eine gegebene Zahl ist,

$$A_{\tau}^{\dagger} := V \Sigma_{\tau}^{\dagger} U^T, \quad x := A_{\tau}^{\dagger} b.$$

Die Matrix A_{τ}^{\dagger} heißt eine **effektive Pseudoinverse** von A .

Regularisierung

Dieses Vorgehen nennt man eine **Regularisierung**. Zu kleine singuläre Werte werden unschädlich gemacht, um die Kondition zu verbessern.

Regularisierung

Dieses Vorgehen nennt man eine **Regularisierung**. Zu kleine singuläre Werte werden unschädlich gemacht, um die Kondition zu verbessern.

Dafür nimmt man einen **Verfahrensfehler** in Kauf.

Regularisierung

Dieses Vorgehen nennt man eine **Regularisierung**. Zu kleine singuläre Werte werden unschädlich gemacht, um die Kondition zu verbessern.

Dafür nimmt man einen **Verfahrensfehler** in Kauf.

Man löst an Stelle des Gleichungssystems $Ax = b$ das System $Ax = Pb$, wobei P die orthogonale Projektion auf den Teilraum $\text{span}\{u^i : \sigma_i \geq \tau\}$ bezeichnet.

Regularisierung

Die bekannteste Regularisierung wurde unabhängig von Philips und Tichonov eingeführt und wird als **Tichonov-Regularisierung** bezeichnet.

Regularisierung

Die bekannteste Regularisierung wurde unabhängig von Philips und Tichonov eingeführt und wird als **Tichonov-Regularisierung** bezeichnet.

Sie entspricht einer **Dämpfung** des Einflusses kleiner singulärer Werte bei der Lösung.

Regularisierung

Die bekannteste Regularisierung wurde unabhängig von Philips und Tichonov eingeführt und wird als **Tichonov-Regularisierung** bezeichnet.

Sie entspricht einer **Dämpfung** des Einflusses kleiner singulärer Werte bei der Lösung.

Man löst an Stelle des Systems $Ax = b$ das Gleichungssystem

$$(A^T A + \alpha E_n)x = A^T b \quad (5.20)$$

mit einem Regularisierungsparameter $\alpha > 0$.

Regularisierung

Offenbar ist (5.20) äquivalent zu

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{x}\|_2^2 = \min \quad (5.21)$$

(dies ist die übliche Formulierung der Tichonov-Regularisierung)

Regularisierung

Offenbar ist (5.20) äquivalent zu

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{x}\|_2^2 = \min \quad (5.21)$$

(dies ist die übliche Formulierung der Tichonov-Regularisierung)

oder zu

$$\|\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{b}}\|_2^2 = \min, \quad \tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha}\mathbf{E}_n \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{o} \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

Regularisierung

Offenbar ist (5.20) äquivalent zu

$$\|\mathbf{Ax} - \mathbf{b}\|_2^2 + \alpha \|\mathbf{x}\|_2^2 = \min \quad (5.21)$$

(dies ist die übliche Formulierung der Tichonov-Regularisierung)

oder zu

$$\|\tilde{\mathbf{A}}\mathbf{x} - \tilde{\mathbf{b}}\|_2^2 = \min, \quad \tilde{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\alpha}\mathbf{E}_n \end{pmatrix}, \quad \tilde{\mathbf{b}} = \begin{pmatrix} \mathbf{b} \\ \mathbf{o} \end{pmatrix}. \quad (5.22)$$

Diese letzte Formulierung wurde zusammen mit der QR-Zerlegung der Matrix $\tilde{\mathbf{A}}$ von Golub erstmals verwendet, **um die Regularisierung stabil auszuführen.**

Regularisierung

Wegen $\tilde{\mathbf{A}}^T \tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{E}_n$ besitzt $\tilde{\mathbf{A}}$ die singulären Werte $\sqrt{\sigma_i^2 + \alpha}$, wenn die σ_i die singulären Werte von \mathbf{A} sind, und die Kondition von (5.22) wird verkleinert zu

$$\sqrt{\frac{\sigma_1^2 + \alpha}{\sigma_n^2 + \alpha}}.$$

Regularisierung

Wegen $\tilde{\mathbf{A}}^T \tilde{\mathbf{A}} = \mathbf{A}^T \mathbf{A} + \alpha \mathbf{E}_n$ besitzt $\tilde{\mathbf{A}}$ die singulären Werte $\sqrt{\sigma_i^2 + \alpha}$, wenn die σ_i die singulären Werte von \mathbf{A} sind, und die Kondition von (5.22) wird verkleinert zu

$$\sqrt{\frac{\sigma_1^2 + \alpha}{\sigma_n^2 + \alpha}}.$$

Ist $\boldsymbol{\beta} := \mathbf{U}^T \mathbf{b}$, so ist (5.22) wegen (5.20) äquivalent zu

$$\mathbf{V}(\boldsymbol{\Sigma}^T \mathbf{U}^T \mathbf{U} \boldsymbol{\Sigma} + \alpha \mathbf{E}_n) \mathbf{V}^T \mathbf{x} = \mathbf{V} \boldsymbol{\Sigma}^T \mathbf{U}^T \mathbf{b} = \mathbf{V} \boldsymbol{\Sigma}^T \boldsymbol{\beta},$$

d.h.,

$$\mathbf{x} = \mathbf{V}(\boldsymbol{\Sigma}^T \boldsymbol{\Sigma} + \alpha \mathbf{E}_n)^{-1} \boldsymbol{\Sigma}^T \boldsymbol{\beta} = \sum_{i=1}^n \frac{\beta_i \sigma_i}{\sigma_i^2 + \alpha} \mathbf{v}^i.$$

Regularisierung

Man benötigt also nur die **Singulärwertzerlegung** von A , um das regularisierte Problem für **verschiedene** Regularisierungsparameter α zu lösen.

Regularisierung

Man benötigt also nur die **Singulärwertzerlegung** von A , um das regularisierte Problem für **verschiedene** Regularisierungsparameter α zu lösen.

Wir wenden auf das Gleichungssystem (5.18) die Regularisierungen durch Abschneiden der kleinen singulären Werte an und die verschiedenen Formen der Tichonov-Regularisierungen. Dabei wird der **Regularisierungsparameter** α jeweils **so gewählt**, dass der **Fehler minimal** wird.

Regularisierung

Man benötigt also nur die **Singulärwertzerlegung** von A , um das regularisierte Problem für **verschiedene** Regularisierungsparameter α zu lösen.

Wir wenden auf das Gleichungssystem (5.18) die Regularisierungen durch Abschneiden der kleinen singulären Werte an und die verschiedenen Formen der Tichonov-Regularisierungen. Dabei wird der **Regularisierungsparameter** α jeweils **so gewählt**, dass der **Fehler minimal** wird.

Dies ist bei praktischen Problemen natürlich nicht möglich (die Lösung des Problems wird ja erst noch gesucht). Strategien zur Wahl des Parameters findet man in Engl (1997) oder Louis (1989).

Regularisierung

Als grobe Richtlinie kann man sagen, dass man eine numerische Lösung, die bedingt durch die schlechte Kondition eines Problems verfälscht ist, häufig daran erkennt, dass sie **stark oszilliert**. Man variiert dann interaktiv den Parameter solange, bis man die Lösung glaubt (d.h. bis die gefundene Lösung die **physikalischen Eigenschaften** des modellierten Problems richtig wiedergibt).

Regularisierung

Als grobe Richtlinie kann man sagen, dass man eine numerische Lösung, die bedingt durch die schlechte Kondition eines Problems verfälscht ist, häufig daran erkennt, dass sie **stark oszilliert**. Man variiert dann interaktiv den Parameter solange, bis man die Lösung glaubt (d.h. bis die gefundene Lösung die **physikalischen Eigenschaften** des modellierten Problems richtig wiedergibt).

Für das lineare Gleichungssystem (5.18), (5.19) erhält man die Fehler der folgenden Tabelle. Dabei wurden die Normalgleichungen der Tichonov-Regularisierung (5.20) mit der Cholesky Zerlegung gelöst (die LR-Zerlegung mit dem MATLAB-Befehl `\` lieferte ähnliche Ergebnisse) und das regularisierte Ausgleichsproblem (5.22) wurde mit der QR-Zerlegung von \tilde{A} und der Singulärwertzerlegung von A gelöst.

Regularisierung

Für das lineare Gleichungssystem erhält man

	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$
Tichonov-Cholesky	$1.41 \cdot 10^{-3}$	$2.03 \cdot 10^{-3}$	$3.51 \cdot 10^{-3}$
Tichonov-QR	$3.50 \cdot 10^{-6}$	$5.99 \cdot 10^{-6}$	$7.54 \cdot 10^{-6}$
Tichonov-SVD	$3.43 \cdot 10^{-6}$	$6.33 \cdot 10^{-6}$	$9.66 \cdot 10^{-6}$
Abgeschnittene SVD	$2.77 \cdot 10^{-6}$	$3.92 \cdot 10^{-6}$	$7.35 \cdot 10^{-6}$

Regularisierung

Für das lineare Gleichungssystem erhält man

	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$
Tichonov-Cholesky	$1.41 \cdot 10^{-3}$	$2.03 \cdot 10^{-3}$	$3.51 \cdot 10^{-3}$
Tichonov-QR	$3.50 \cdot 10^{-6}$	$5.99 \cdot 10^{-6}$	$7.54 \cdot 10^{-6}$
Tichonov-SVD	$3.43 \cdot 10^{-6}$	$6.33 \cdot 10^{-6}$	$9.66 \cdot 10^{-6}$
Abgeschnittene SVD	$2.77 \cdot 10^{-6}$	$3.92 \cdot 10^{-6}$	$7.35 \cdot 10^{-6}$

Für das Ausgleichsproblem erhält man

	$n = 10$	$n = 20$	$n = 40$
Tichonov-Cholesky	$3.85 \cdot 10^{-4}$	$1.19 \cdot 10^{-3}$	$2.27 \cdot 10^{-3}$
Tichonov-QR	$2.24 \cdot 10^{-7}$	$1.79 \cdot 10^{-6}$	$6.24 \cdot 10^{-6}$
Tichonov-SVD	$8.51 \cdot 10^{-7}$	$1.61 \cdot 10^{-6}$	$3.45 \cdot 10^{-6}$
Abgeschnittene SVD	$7.21 \cdot 10^{-7}$	$1.94 \cdot 10^{-6}$	$7.70 \cdot 10^{-6}$

Regularisierung

Ein häufig verwendetes Verfahren zur Schätzung des optimalen Regularisierungsparameters ist die **L-Kurven Methode** (Hansen).

Regularisierung

Ein häufig verwendetes Verfahren zur Schätzung des optimalen Regularisierungsparameters ist die **L-Kurven Methode** (Hansen).

In ihr betrachtet man die Kurve

$$\alpha \mapsto (\|\mathbf{A}\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{b}\|_2, \|\mathbf{x}_\alpha\|_2).$$

Regularisierung

Ein häufig verwendetes Verfahren zur Schätzung des optimalen Regularisierungsparameters ist die **L-Kurven Methode** (Hansen).

In ihr betrachtet man die Kurve

$$\alpha \mapsto (\|\mathbf{Ax}_\alpha - \mathbf{b}\|_2, \|\mathbf{x}_\alpha\|_2).$$

Diese sog. **L-Kurve** hat häufig die Gestalt des Buchstaben „L“ wie in Abbildung 1 auf der übernächsten Folie, wobei der Parameter α , der zu dem „Knick“ gehört, optimal ist.

Regularisierung

Für Systeme, für die Koeffizienten $\mathbf{b}^T \mathbf{u}^j$ der (ungestörten) rechten Seite bzgl. der singulären Vektoren \mathbf{u}^j von \mathbf{A} schneller abfallen als die singulären Werte σ_j von \mathbf{A} , kann man die L-Kurven Methode begründen (vgl. Hansen). Im allgemeinen Fall kann diese Methode aber versagen.

Regularisierung

Für Systeme, für die Koeffizienten $\mathbf{b}^T \mathbf{u}^j$ der (ungestörten) rechten Seite bzgl. der singulären Vektoren \mathbf{u}^j von \mathbf{A} schneller abfallen als die singulären Werte σ_j von \mathbf{A} , kann man die L-Kurven Methode begründen (vgl. Hansen). Im allgemeinen Fall kann diese Methode aber versagen.

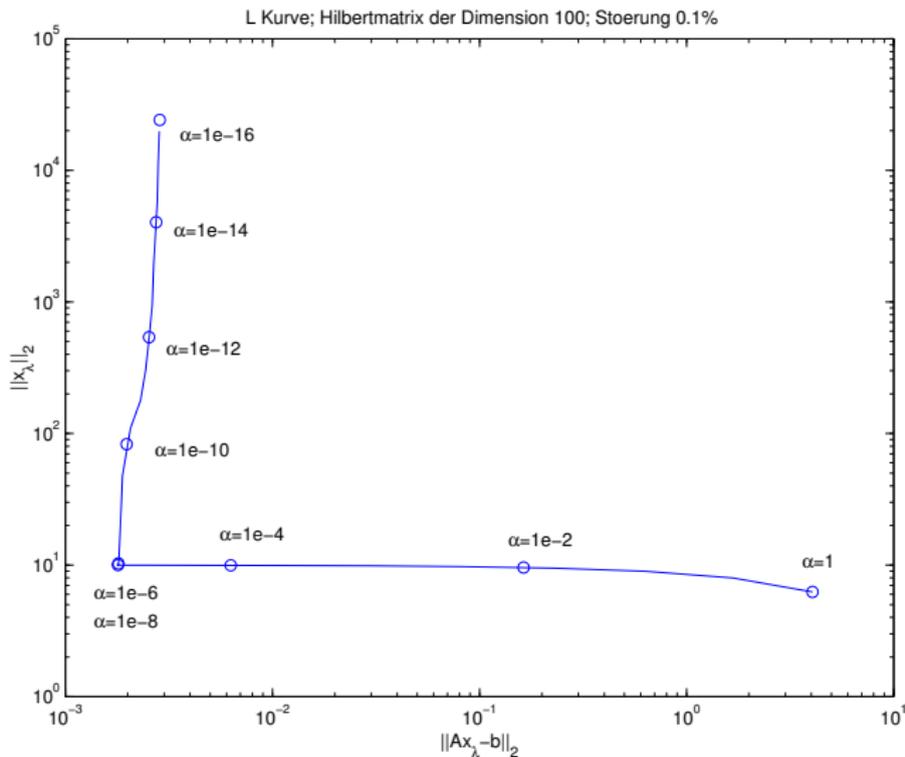
Abbildung 1 enthält die L-Kurve für das Gleichungssystem mit der Hilbert-Matrix der Dimension 100 und der Lösung

$$\bar{\mathbf{x}} = (1, \dots, 1)^T,$$

wobei zusätzlich die rechte Seite mit einem zufälligen Fehler von höchstens 0.1% verfälscht worden ist. Für dieses Beispiel ist die im letzten Absatz genannte Bedingung übrigens nicht erfüllt.

Regularisierung

Abbildung 1: L-Kurve



Regularisierung

Die Tabelle auf der nächsten Folie enthält $\|\mathbf{A}\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{b}\|_2$, $\|\mathbf{x}_\alpha\|_2$ und den Fehler $\|\mathbf{x}_\alpha - \bar{\mathbf{x}}\|_2$ für verschiedene Parameter α .

Regularisierung

Die Tabelle auf der nächsten Folie enthält $\|\mathbf{A}\mathbf{x}_\alpha - \mathbf{b}\|_2$, $\|\mathbf{x}_\alpha\|_2$ und den Fehler $\|\mathbf{x}_\alpha - \bar{\mathbf{x}}\|_2$ für verschiedene Parameter α .

Tatsächlich ist der Fehler minimal für $\alpha = 10^{-6}$, und bei diesem Parameter liegt auch der Knick der L-Kurve.

Regularisierung

α	$\ \mathbf{Ax}_\alpha - \mathbf{b}\ _2$	$\ \mathbf{x}_\alpha\ _2$	$\ \mathbf{x}_\alpha - \bar{\mathbf{x}}\ _2$
10^{+00}	$4.0508 \cdot 10^{+00}$	$6.2357 \cdot 10^{+00}$	$5.3199 \cdot 10^{+00}$
10^{-01}	$8.7802 \cdot 10^{-01}$	$8.6987 \cdot 10^{+00}$	$2.9868 \cdot 10^{+00}$
10^{-02}	$1.6321 \cdot 10^{-01}$	$9.5915 \cdot 10^{+00}$	$1.6413 \cdot 10^{+00}$
10^{-03}	$3.0354 \cdot 10^{-02}$	$9.8697 \cdot 10^{+00}$	$9.0701 \cdot 10^{-01}$
10^{-04}	$6.2919 \cdot 10^{-03}$	$9.9553 \cdot 10^{+00}$	$5.2049 \cdot 10^{-01}$
10^{-05}	$2.2522 \cdot 10^{-03}$	$9.9819 \cdot 10^{+00}$	$2.5714 \cdot 10^{-01}$
10^{-06}	$1.7941 \cdot 10^{-03}$	$9.9944 \cdot 10^{+00}$	$1.0069 \cdot 10^{-01}$
10^{-07}	$1.7862 \cdot 10^{-03}$	$1.0017 \cdot 10^{+01}$	$4.9295 \cdot 10^{-01}$
10^{-08}	$1.8052 \cdot 10^{-03}$	$1.0287 \cdot 10^{+01}$	$2.3157 \cdot 10^{+00}$
10^{-09}	$1.8355 \cdot 10^{-03}$	$1.7458 \cdot 10^{+01}$	$1.4260 \cdot 10^{+01}$
10^{-10}	$1.9748 \cdot 10^{-03}$	$8.3028 \cdot 10^{+01}$	$8.2396 \cdot 10^{+01}$
10^{-11}	$2.3529 \cdot 10^{-03}$	$2.0179 \cdot 10^{+02}$	$2.0153 \cdot 10^{+02}$
10^{-12}	$2.5359 \cdot 10^{-03}$	$5.3920 \cdot 10^{+02}$	$5.3911 \cdot 10^{+02}$
10^{-13}	$2.6525 \cdot 10^{-03}$	$1.4070 \cdot 10^{+03}$	$1.4070 \cdot 10^{+03}$
10^{-14}	$2.7449 \cdot 10^{-03}$	$4.0380 \cdot 10^{+03}$	$4.0380 \cdot 10^{+03}$
10^{-15}	$2.8050 \cdot 10^{-03}$	$1.0709 \cdot 10^{+04}$	$1.0709 \cdot 10^{+04}$
10^{-16}	$2.8535 \cdot 10^{-03}$	$2.4176 \cdot 10^{+04}$	$2.4176 \cdot 10^{+04}$