Einführung in die Grundlagen der Numerik

Institut für Numerische Simulation
Rheinische Friedrich-Wilhelms-Universität Bonn

Wintersemester 2014/2015

Definition

Zu gegebenem $b \in \mathbb{R}^M$ und $A \in \mathbb{R}^{M\times N}$ mit $M \geq N$, heißt das Problem: Finde $x \in \mathbb{R}^N$, so dass gilt

$$\|b - A\,x\|_2 \to \min$$

lineares Ausgleichsproblem. Die Lösung heißt Ausgleichslösung oder kleinste-Quadrate-Lösung.

Direkte Verallgemeinerung des klassischen Lösungsbegriffs $(M = N)$.

$$\|b - A\,x\|_2 \to \min \Leftrightarrow A\,x = b$$

Normalengleichungen

Satz

Die Ausgleichslösungen $\|b - A\,x\|_2 \to \min$ sind genau die Lösungen der Gaußschen Normalengleichungen

$$A^\star A x = A^\star b,$$

insbesondere existiert eine Lösung x. Falls z auch eine Lösung ist, dann gilt $A\,z = A\,x$. Das Residuum

$$r = b - A\,x$$

ist also eindeutig bestimmt und erfüllt

$$A^\star\, r = 0.$$

Eigenschaften der Systemmatrix

Satz

Die Matrix $A^\star A$ ist symmetrisch und positiv semidefinit. Sie ist genau dann positiv definit, wenn der Kern von A trivial ist, d.h. $ker(A) = \{0\}$. Dies gilt genau dann, wenn die Spalten von A linear unabhängig sind.

Lösung der Normalengleichung

Prinzipiell mittels Cholesky-Zerlegung möglich, falls $ker(A) = \{0\}$. Dies kann aber zu Stabilitätsproblemen führen. Betrachte $M = N$ und A^{-1} existiere, dann gilt für A

$$\begin{aligned}\mathrm{cond}_2(A) &= \|A\|_2 \|A^{-1}\|_2 \\ &= \sqrt{\rho(A^\star A)}\sqrt{\rho((A^{-1})^\star A^{-1})} = \sqrt{\frac{\lambda_{\max}(A^\star A)}{\lambda_{\min}(A^\star A)}}\end{aligned}$$

aber für die Normalengleichung

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

Ausgleichsproblem: Betrachte A oder $A^\star A$?

Gestalt von A

$A \in \mathbb{R}^{M \times N}$ ist rechteckig mit $M \geq N$ Zeilen und N Spalten. Wir nehmen an, dass $\mathrm{Rang}(A) = N$. So ein A könnte also folgende Gestalt haben:

$$A_0 = \begin{pmatrix} q & r & s \\ v & u & t \\ w & h & j \\ e & v & n \\ z & p & k \end{pmatrix}, \quad A_1 = \begin{pmatrix} a & b & c \\ d & e & f \\ g & h & j \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad A_2 = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ 0 & \delta & \eta \\ 0 & 0 & \tau \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Unitäre Matrizen

Definition

Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{N \times N}$ heißt unitär, falls gilt

$$Q^\star Q = \mathbb{I}.$$

Die Spalten von Q bilden also eine Orthonormalbasis des $\mathbb{R}^N$.

Eigenschaften:

- $\|Qx\|_2^2 = \|x\|_2^2$ für alle x
- $\|Q\|_2 = \|Q^\star\|_2 = \|Q^{-1}\|_2 = 1$
- $\mathrm{cond}_2(Q) = 1$
- P und Q unitär, dann auch PQ

Householder-Transformation

Definition

Sei $v \neq 0$, dann heißt die Matrix

$$P = \mathbb{I} - \frac{2}{\|v\|_2^2} v v^\star$$

Householder-Transformation zu v.

Eigenschaften:

- $P = P^\star$
- $P^2 = \mathbb{I}$
- $P\,v = -v$
- $P\,w = w$ für alle $w \perp v$

Transformation $x \to e_1$

Lemma

Gegeben sei $x \neq 0$ und $x \notin \operatorname{span}(e_1)$. Für

$$v := x + \sigma e_1, \quad \sigma := \frac{x_1}{|x_1|}\|x\|_2$$

(falls $x_1 = 0$, setze $\sigma := \|x\|_2$) gilt

$$(\mathbb{I} - \frac{2}{\|v\|_2^2} v v^\star) x = -\sigma e_1.$$

QR-Zerlegung

Satz

Sei $A \in \mathbb{R}^{M \times N}$ mit $\mathrm{Rang}(A) = N$, dann existiert ein unitäres Q und eine rechte obere Dreiecksmatrix R, so dass

$$A = QR.$$

Eine rechte obere Dreiecksmatrix hat die Gestalt

$$R = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ 0 & \delta & \eta \\ 0 & 0 & \tau \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Methode der Orthogonalisierung

Satz

Sei $A \in \mathbb{R}^{M \times N}$ mit $\operatorname{Rang}(A) = N$ mit $A = QR$, wobei $R = \begin{pmatrix} \tilde{R} \\ 0 \end{pmatrix}$.

Dann gilt für beliebiges $b \in \mathbb{R}^M$ mit

$$Q^\star b =: \begin{pmatrix} c \\ d \end{pmatrix},$$

dass die Lösung des Ausgleichsproblems $\|b - A\,x\|_2 \to \min$ durch

$$Rx = c$$

eindeutig bestimmt ist. Für das Residuum $r = b - A\,x$ gilt $\|r\|_2 = \|d\|_2$.

Wir können also das Ausgleichsproblems mit Hilfe der QR-Zerlegung von A ohne Verschlechterung der Kondition lösen.