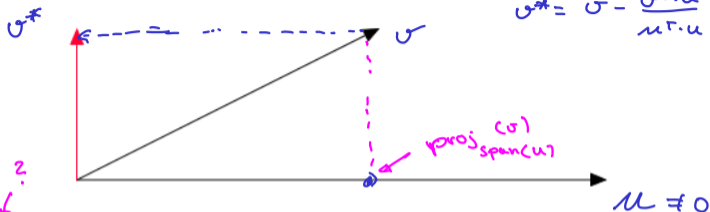


Heute (28.11.2013):

- ▶ Textbuch Kapitel 6.4, 6.5
- ▶ Gram-Schmidt Orthogonalisierungsverfahren
- ▶ Problem der kleinsten Quadrate (least squares)

# Orthogonale Projektion

$$\langle v^*, u \rangle = v^{*T} \cdot u = \underline{v^* \cdot u}$$



$$v^* = v - \frac{v^T \cdot u}{u^T \cdot u} \cdot u$$

$$v^* = v - \lambda \cdot u$$

$$\begin{aligned} \langle v^*, u \rangle = 0 &\Leftrightarrow \langle v - \lambda \cdot u, u \rangle = 0 \\ &\Leftrightarrow \langle v, u \rangle - \lambda \underbrace{\langle u, u \rangle}_{> 0} = 0 \\ \lambda &= \frac{\langle v, u \rangle}{\langle u, u \rangle} \end{aligned}$$

$$\left. \begin{aligned} v^{*T} \cdot u &= 0 \Leftrightarrow \\ (v - \lambda \cdot u)^T \cdot u &= 0 \\ \Leftrightarrow v^T \cdot u - \lambda \cdot u^T \cdot u &= 0 \\ \Leftrightarrow \lambda &= \frac{v^T \cdot u}{u^T \cdot u} \end{aligned} \right\}$$

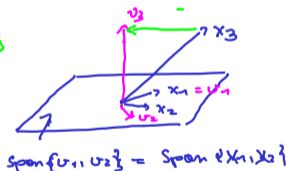
# Das Gram-Schmidt Verfahren

- ▶ Gegeben: Linear unabhängige  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p \in \mathbb{R}^n$
- ▶ Ziel: Berechne  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p$  mit den folgenden Eigenschaften
  - $\mathbf{v}_i \cdot \mathbf{v}_j = 0$  immer wenn  $i \neq j$
  - Für alle  $\ell \in \{1, \dots, p\}$  gilt

$$\text{Span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_\ell\} = \text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_\ell\}$$

$$v_3 = x_3 - u \quad , \text{ wobei } u \in \text{Span}\{v_1, v_2\}$$

$$v_3 \perp \text{Span}\{v_1, v_2\}$$



Wenn  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_j$  bestimmt sind ...

- ▶ Die  $\mathbf{v}_i$  sind orthogonal
- ▶ Für  $l \in \{1, \dots, j\}$  gilt

$$\text{Span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l\} = \text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_l\}$$

$$\mathbf{v}_3 = \mathbf{x}_3 - \lambda_1 \cdot \mathbf{v}_1 - \lambda_2 \cdot \mathbf{v}_2$$

$$\langle \mathbf{v}_3, \mathbf{v}_1 \rangle = 0$$

$$\Leftrightarrow (\mathbf{x}_3 - \lambda_1 \cdot \mathbf{v}_1 - \lambda_2 \cdot \mathbf{v}_2)^T \cdot \mathbf{v}_1 = 0$$

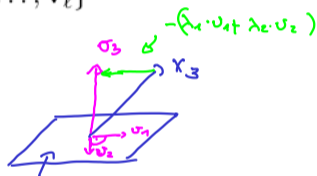
$$\Leftrightarrow \mathbf{x}_3^T \cdot \mathbf{v}_1 - \lambda_1 \cdot \mathbf{v}_1^T \cdot \mathbf{v}_1 - \underbrace{\lambda_2 \cdot \mathbf{v}_2^T \cdot \mathbf{v}_1}_{=0} = 0$$

$$\Leftrightarrow \mathbf{x}_3^T \cdot \mathbf{v}_1 = \lambda_1 \cdot \mathbf{v}_1^T \cdot \mathbf{v}_1 \quad (\Leftrightarrow) \quad \lambda_1 = \frac{\mathbf{x}_3^T \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1^T \cdot \mathbf{v}_1}$$

genauso:

$$\lambda_2 = \frac{\mathbf{x}_3^T \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2^T \cdot \mathbf{v}_2}$$

Frage: Wie bekommen wir  
nun  $\mathbf{v}_{j+1}$ .

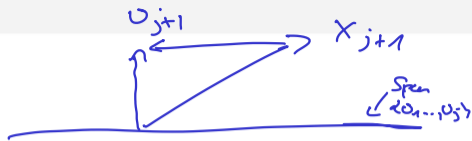


$$\text{Span}\{\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2\} = \text{Span}\{\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2\}$$

$$\text{Span}\{\mathbf{v}_i\} = \text{Span}\{\mathbf{x}_i\}$$

Wenn  $\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_j$  bestimmt sind ...

- ▶ Die  $\mathbf{v}_i$  sind orthogonal
- ▶ Für  $l \in \{1, \dots, j\}$  gilt



$$\text{Span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l\} = \text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_l\}$$

Es soll gelten:  $\mathbf{v}_{j+1} = \mathbf{x}_{j+1} - \lambda_1 \cdot \mathbf{v}_1 - \lambda_2 \cdot \mathbf{v}_2 - \dots - \lambda_j \cdot \mathbf{v}_j$

Damit gilt:  $\forall l \in \{1, \dots, j+1\}: \text{Span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_l\} = \text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_l\}$

Wir wählen noch:  $\mathbf{v}_{j+1} \perp \mathbf{v}_l \quad \forall l \in \{1, \dots, j\}$ .

Also  $\mathbf{v}_{j+1}^T \cdot \mathbf{v}_l = 0 \Leftrightarrow (\mathbf{x}_{j+1} - \lambda_1 \mathbf{v}_1 - \lambda_2 \mathbf{v}_2 - \dots - \lambda_j \mathbf{v}_j)^T \cdot \mathbf{v}_l = 0$

$$\Leftrightarrow \lambda_l = \frac{\mathbf{x}_{j+1}^T \cdot \mathbf{v}_l}{\mathbf{v}_l^T \cdot \mathbf{v}_l}$$



# Das Gram-Schmidt Verfahren

## Satz 77

Seien  $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_p\}$  eine Basis eines Unterraums  $W$  von  $\mathbb{R}^n$ . Wir definieren

▶  $\mathbf{v}_1 = \mathbf{x}_1$

▶  $\mathbf{v}_2 = \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{x}_2 \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1$

$$\mathbf{v}_2 = \mathbf{x}_2 - \frac{\mathbf{x}_2^T \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1^T \cdot \mathbf{v}_1} \cdot \mathbf{v}_1$$

▶  $\mathbf{v}_3 = \mathbf{x}_3 - \frac{\mathbf{x}_3 \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1 - \frac{\mathbf{x}_3 \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2} \mathbf{v}_2$

▶  $\vdots$

▶  $\mathbf{v}_p = \mathbf{x}_p - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_1}{\mathbf{v}_1 \cdot \mathbf{v}_1} \mathbf{v}_1 - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_2}{\mathbf{v}_2 \cdot \mathbf{v}_2} \mathbf{v}_2 - \dots - \frac{\mathbf{x}_p \cdot \mathbf{v}_{p-1}}{\mathbf{v}_{p-1} \cdot \mathbf{v}_{p-1}} \mathbf{v}_{p-1}$ .

Dann ist  $\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_p\}$  eine orthogonale Basis von  $W$  und für alle  $\ell \in \{1, \dots, p\}$  gilt

$$\text{Span}\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_\ell\} = \text{Span}\{\mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_\ell\}.$$

$$x_1, \dots, x_p.$$

$$A = (x_1 \dots x_p) = (\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_p) \begin{pmatrix} 1 & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ 0 & 1 & \lambda_{23} \\ \vdots & 0 & \vdots \\ 0 & 0 & \vdots \end{pmatrix}$$

$$v_1 = x_1$$

$$v_2 = x_2 - \frac{x_2^T \cdot \sigma_1}{\sigma_1^T \cdot \sigma_1} \cdot \sigma_1 \Leftrightarrow x_2 = \frac{x_2^T \cdot \sigma_1}{\sigma_1^T \cdot \sigma_1} \cdot \sigma_1 + v_2$$

$$v_3 = x_3 - \frac{x_3^T \cdot \sigma_1}{\sigma_1^T \cdot \sigma_1} \cdot \sigma_1 - \frac{x_3^T \cdot \sigma_2}{\sigma_2^T \cdot \sigma_2} \cdot \sigma_2$$

$\lambda_{13}$                        $\lambda_{23}$

$$A \cdot B$$

$$(A \cdot b_1, A \cdot b_2, \dots, A \cdot b_2)$$

$$B = (b_1, \dots, b_2)$$

$$x_3 = \lambda_{13} \cdot \sigma_1 + \lambda_{23} \cdot \sigma_2 + 1 \cdot \sigma_3$$

$\Rightarrow$  Gram-Schmidt Verfahren Berechnet für eine Matrix  $A \in \mathbb{R}^{n \times p}$  mit vollr. Spaltenvektoren eine Matrix  $\tilde{Q}$ , deren Spalten orthogonal sind und  $R = \begin{pmatrix} 1 & \dots & \lambda_{13} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 1 \end{pmatrix}$

oben D, I, I.

$$\text{mit } A = \underset{\substack{\uparrow \\ \mathbb{R}^{n \times p}}}{\tilde{Q}} \cdot \underset{\substack{\uparrow \\ \mathbb{R}^{p \times p}}}{R}$$



Beispiel:  $A = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$

$$A = \tilde{Q} \cdot \begin{pmatrix} 1 & \dots & \mu's \\ 0 & & \\ & & 1 \end{pmatrix}$$

$\uparrow$   $\mathbb{R}^{4 \times 3}$                        $\uparrow$   $\mathbb{R}^{3 \times 3}$

Spalten von  $Q$  sollen orthog. sein.

$$x_1 = v_1$$

$$v_2 = x_2 - \frac{x_2^T \cdot v_1}{v_1^T \cdot v_1} \cdot v_1$$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{3}{4} \cdot \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -3/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ -1/4 \end{bmatrix}$$

$$\tilde{Q} = \begin{bmatrix} 1 & -3/4 & 0 \\ 1 & 1/4 & -2/3 \\ 1 & 1/4 & 1/3 \\ 1 & 1/4 & 1/3 \end{bmatrix}$$

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

$$v_3 = x_3 - \frac{x_3^T \cdot v_1}{v_1^T \cdot v_1} \cdot v_1 - \frac{x_3^T \cdot v_2}{v_2^T \cdot v_2} \cdot v_2$$

$$= \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} - \frac{2}{3} \begin{bmatrix} -3/4 \\ 1/4 \\ 1/4 \\ -1/4 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1/2 \\ -1/2 \\ 1/2 \\ -1/2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -1/2 \\ 1/6 \\ 1/6 \\ 1/6 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ -2/3 \\ 1/3 \\ 1/3 \end{bmatrix}$$

# Die QR-Zerlegung

$$\tilde{Q} = \begin{pmatrix} 1 & -3/4 & 0 \\ 1 & 1/4 & -2/3 \\ 1 & 1/4 & 1/3 \\ 1 & 1/4 & 1/3 \end{pmatrix}$$

## Satz 78

Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  eine Matrix mit linear unabhängigen Spalten. Dann kann  $A$  in der Form

$$A = Q \cdot R \quad \tilde{R} = \begin{pmatrix} 1 & 3/4 & 1/2 \\ 0 & 1 & 2/3 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

faktoriert werden, wobei  $Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$  eine Matrix mit orthonormalen Spalten und  $R \in \mathbb{R}^{n \times n}$  eine obere Dreiecksmatrix mit echt positiven Diagonaleinträgen ist.

Bemerkung: Die Spalten von  $Q$  sind eine orthonormale Basis von  $\text{Col}(A)$

$$Q = \begin{pmatrix} 1/2 & 3/4 & 0 \\ 1/2 & 1/4 & -2/3 \\ 1/2 & 1/4 & 1/3 \\ 1/2 & 1/4 & 1/3 \end{pmatrix}$$

*Annotations:*  $\sqrt{2}$  above the first column,  $\sqrt{3/2}$  above the second column.

$$R = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 0 & \sqrt{3/2} & 0 \\ 0 & 0 & \sqrt{2/3} \end{pmatrix} \cdot \tilde{R}$$

## Beispiel

Berechne die QR-Zerlegung von

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



# Kleinste Quadrate

$a^i$ :  $i$ -te Zeile von  $A$

## Definition

Seien  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $b \in \mathbb{R}^m$ . Eine Lösung des Problems der kleinsten Quadrate ist ein  $\hat{x} \in \mathbb{R}^n$  mit

$$\|b - A\hat{x}\| \leq \|b - Ax\| \text{ für alle } x \in \mathbb{R}^n.$$

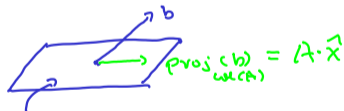
Motivation:

GLS

$$Ax = b$$

nicht lösbar. ( $b \notin \text{Col}(A)$ )

$$A \in \mathbb{R}^{m \times n}$$



Finde das (in gewissem Sinne) beste  
 $\hat{x}$

$$\text{Col}(A) = \{ A \cdot x : x \in \mathbb{R}^n \}$$

# Lösung des Problems der kleinsten Quadrate

- Berechne  $\hat{\mathbf{b}} = \text{proj}_{\text{Col}(A)}(\mathbf{b})$
- Löse  $A\mathbf{x} = \hat{\mathbf{b}}$

$\mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}$  ist senkrecht auf allen Spalten von  $A$ .

$\hat{\mathbf{b}} = A \cdot \hat{\mathbf{x}}$  mit geeignetem  $\hat{\mathbf{x}}$ .

$\forall a_i$ : Spalte von  $A$ .  
 $= \mathbf{b} - \hat{\mathbf{b}}$

$$a_i^T \cdot (\mathbf{b} - A \cdot \hat{\mathbf{x}}) = 0$$

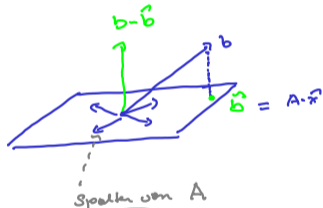
$$\Rightarrow A^T \cdot (\mathbf{b} - A \cdot \hat{\mathbf{x}}) = \mathbf{0}$$

$\Leftrightarrow$

$$A^T \cdot \mathbf{b} = A^T \cdot A \cdot \hat{\mathbf{x}}$$

$\Rightarrow$  d.h. gesucht  $\hat{\mathbf{x}}$   
ist Lösung des GLS.  $A^T \cdot A \cdot \hat{\mathbf{x}} = \hat{\mathbf{x}}^T \cdot \mathbf{b}$

Erinnerung:  $\hat{\mathbf{b}}$  ist der zu  $\mathbf{b}$  nächst Punkt bezgl.  $\|\cdot\|_2$  zu  $\mathbf{b}$ .



Annahme  
 $\hat{\mathbf{x}}$  Lsg.  
 $\hat{\mathbf{b}} = A \cdot \hat{\mathbf{x}}$

# Lösung des Problems der kleinsten Quadrate

## Satz 79

*Die Menge der Lösungen des Problems der kleinsten Quadrate ist die Menge der Lösungen des Gleichungssystems*

$$A^T Ax = A^T b$$

## Beispiel

- Finde eine Lösung des P.d.k.Q. für  $Ax = b$  mit

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 11 \end{pmatrix}$$

$$A^T \cdot A \cdot x = A^T \cdot b$$

$$\begin{pmatrix} 4 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 4 & 0 & 1 \\ 0 & 2 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 11 \end{pmatrix}$$

$$\left[ \begin{array}{cc|c} 17 & 1 & 19 \\ 1 & 5 & 11 \end{array} \right]$$

$$\begin{pmatrix} 17 & 1 \\ 1 & 5 \end{pmatrix} x = \begin{pmatrix} 19 \\ 11 \end{pmatrix}$$

$$\left[ \begin{array}{cc|c} 1 & 5 & 11 \\ 0 & \cancel{1} & \cancel{2} \end{array} \right]$$

$$\left[ \begin{array}{cc|c} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \end{array} \right] \quad x = (1, 2)$$



## Beispiel

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} -3 \\ -1 \\ 0 \\ 2 \\ 5 \\ 1 \end{pmatrix}$$

## Wann existiert eine eindeutige Lösung

### Satz 80

Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ . Die folgenden Aussagen sind äquivalent.

- Das Problem der kleinsten Quadrate hat für jedes  $b \in \mathbb{R}^m$  eine eindeutige Lösung.
- Die Spalten von  $A$  sind linear unabhängig.
- Die Matrix  $A^T A$  ist invertierbar.



# Der Fehler

## Definition

Der *Fehler des kleinste Quadrate Problems* für  $Ax = b$  ist

$$\|b - \mathbf{proj}_{\text{Col}(A)} b\|$$

Beispiel:

Betrachte das Beispiel von vorher:

$$A = \begin{pmatrix} 4 & 0 \\ 0 & 2 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 2 \\ 0 \\ 11 \end{pmatrix}$$

Der Fehler des k.Q.P. ist:

## Das k.Q.P. und die QR-Zerlegung

## Das k.Q.P. und die QR-Zerlegung

### Satz 81

Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  mit linear unabhängigen Spalten und sei  $A = QR$  eine QR-Faktorisierung von  $A$ , wie in Satz 78. Dann ist die eindeutige Lösung des k.Q.P. für  $Ax = b$

$$\hat{\mathbf{x}} = R^{-1}Q^T b.$$

## Beispiel

Finde die Lösung des k.Q.P. für  $Ax = b$  mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \\ -3 \end{pmatrix}$$

## Beispiel

Finde die Lösung des k.Q.P. für  $Ax = b$  mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 3 & 5 \\ 1 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 2 \\ 1 & 3 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \\ 7 \\ -3 \end{pmatrix}$$