Linear Systems and Least Squares

Vortragender: Gelin Jiofack Nguedong

Betreuer: Prof. Dr. Joachim Weickert

Proseminar: Matrixmethoden in Datenanalyse und Mustererkennung

Wintersemester 2015/2016

UNIVERSITÄT DES SAARLANDES

18. November 2015

Übersicht

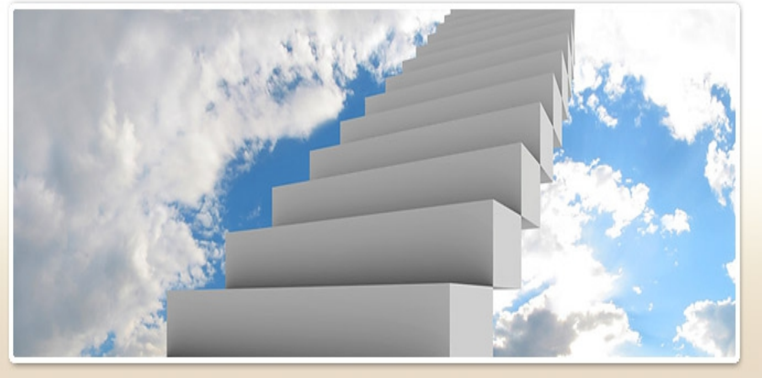
- Gaußsches Eliminationsverfahren
- Kondition
- Bandmatrix
- Methode der kleinsten Quadrate
- Literaturverzeichnis

Übersicht

- Gaußsches Eliminationsverfahren
- Kondition
- Bandmatrix
- Methode der kleinsten Quadrate
- Literaturverzeichnis

Gaußsches Eliminationsverfahren

Algorithmus aus den mathematischen Teilgebieten der linearen Algebra und der Numerik.



Carl Friedrich Gauß

Gaußsches Eliminationsverfahren

- Beispiel
- Pivotierung
- LR-Zerlegung
- Cholesky-Zerlegung

Beispiel

Lineares Gleichungssystem Ax=b mit drei Gleichungen:

$$\begin{array}{ccccccc} a_{11}x_1 & + & a_{12}x_2 & + & a_{13}x_3 & = & b_1, \\ a_{21}x_1 & + & a_{22}x_2 & + & a_{23}x_3 & = & b_2, \\ a_{31}x_1 & + & a_{32}x_2 & + & a_{33}x_3 & = & b_3. \end{array}$$

Algorithmus zur Berechnung der Variablen x_i:

1. Vorwärtselimination,
2. Rückwärtseinsetzen (Rücksubstitution).

Beispiel

1. $x_1 + 2x_2 + 3x_3 = 2$, hier: $a_{11} = 1$, $a_{12} = 2$, $a_{13} = 3$ und $b_1 = 2$
2. $x_1 + x_2 + x_3 = 2$
3. $3x_1 + 3x_2 + x_3 = 0$

Zur besseren Übersichtlichkeit, erweiterte Koeffizientenmatrix

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 1 & 0 \end{array}\right)$$

Hinweis: Kontrolle durch Zeilensumme

$$\begin{array}{ccc|c||c|l} 1 & 2 & 3 & 2 & 8 & *(-1) \quad *(-3) \\ 1 & 1 & 1 & 2 & 5 & + \\ 3 & 3 & 1 & 0 & 7 & \quad\quad\quad + \\ \hline 1 & 2 & 3 & 2 & 8 & \\ & -1 & -2 & 0 & -3 & *(-3) \\ & -3 & -8 & -6 & -17 & + \end{array}$$

Gaußsches Eliminationsverfahren

- Beispiel
- Pivotierung
- LR-Zerlegung
- Cholesky-Zerlegung

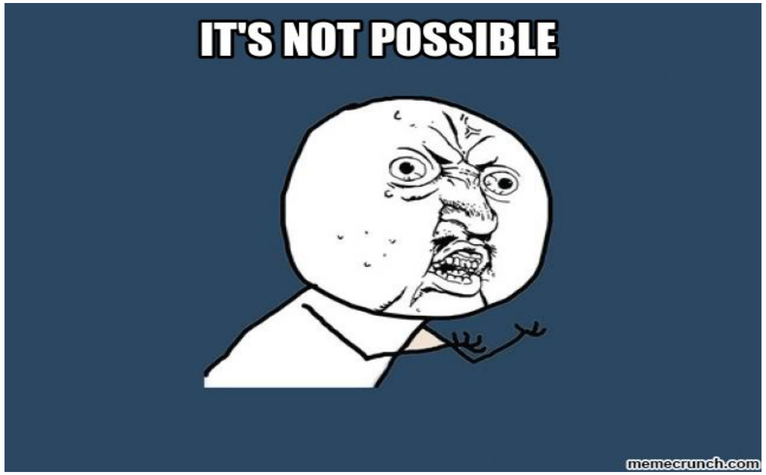
Pivotierung

Im Allgemeinen nicht ohne Zeilenvertauschungen durchführbar.

Beispiel:

Ersetze 1 durch 0

$$\left(\begin{array}{ccc|c} 1 & 2 & 3 & 2 \\ 1 & 1 & 1 & 2 \\ 3 & 3 & 1 & 0 \end{array}\right)$$



Wie löse ich das???

Pivotierung

Ich weiß!!!

x_1	x_2	x_3	b
0	2	3	4
1	1	1	2
3	3	1	0

→

x_1	x_2	x_3	b
1	1	1	2
0	2	3	4
3	3	1	0

Gaußsches Eliminationsverfahren

- Beispiel
- Pivotierung
- LR-Zerlegung
- Cholesky-Zerlegung

LR-Zerlegung

Lineares Gleichungssystem *Ax=b mit LR-Zerlegung:*

1. Zerlege $A = L.\,R$ mit dem Gauß-Algorithmus
2. Löse $Ax = LRx = b$ in zwei Schritten:
   - Löse $Ly = b$ durch Vorwärtssubstitution
   - Löse $Rx = y$ durch Rückwärtssubstitution

Aufwand: $\frac{2}{3}n^3$

Beispiel:

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix}1&4&7\\2&5&8\\3&6&10\end{bmatrix}\begin{array}{cc} -2 & -3 \\ & \\ & \end{array} \longrightarrow \begin{bmatrix}1&4&7\\0&-3&-6\\0&-6&-11\end{bmatrix}\begin{array}{c} \\ -2 \\ \end{array} \longrightarrow \begin{bmatrix}1&4&7\\0&-3&-6\\0&0&1\end{bmatrix},$$

das heißt

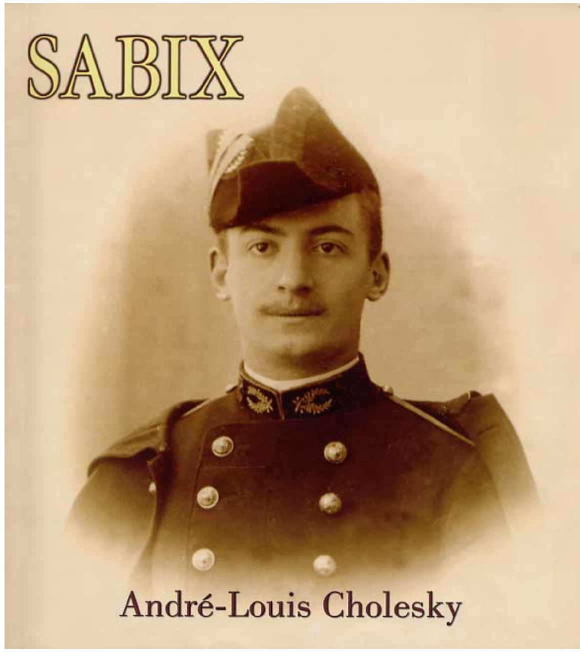
$$\mathbf{R} = \begin{bmatrix}1&4&7\\0&-3&-6\\0&0&1\end{bmatrix}, \qquad \mathbf{L} = \begin{bmatrix}1&0&0\\2&1&0\\3&2&1\end{bmatrix}.$$

Gaußsches Eliminationsverfahren

- Beispiel
- Pivotierung
- LR-Zerlegung
- Cholesky-Zerlegung

Cholesky-Zerlegung

Zerlegung einer symmetrischen positiv definiten Matrix in ein Produkt aus einer unteren Dreiecksmatrix und deren Transponierter. (LR-Zerlegung ohne Pivotierung)



$A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ Positiv definite Matrix $\Rightarrow$ $A = LDL^T$

L untere Dreiecksmatrix mit Diagonalelemente = 1

D Diagonalmatrix mit positiven Einträgen

UNIVERSITÄT DES SAARLANDES

Cholesky-Zerlegung

Mit $D = D^{1/2} D^{1/2}$ und $G := LD^{1/2}$

Neue Formulierung der Cholesky-Zerlegung: $A = GG^T$

Gleichungssystem Ax=b effizient durch Vorwärts- und Rückwärtseinsetzen lösbar:

- Durch Vorwärtseinsetzen Lösung des LGS $Gy = b$
- Durch anschließendes Rückwärtseinsetzen Lösung des LGS $G^T x = y$

Cholesky-Zerlegung

Berechnung

Formeln

$$g_{ij} = \begin{cases} 0 & \text{für } i < j \\ \sqrt{a_{ii} - \sum_{k=1}^{i-1} g_{ik}^2} & \text{für } i = j \\ \frac{1}{g_{jj}} \left(a_{ij} - \sum_{k=1}^{j-1} g_{ik} g_{jk} \right) & \text{für } i > j \end{cases}$$

Aufwand: $\frac{1}{3} n^3$

Cholesky-Zerlegung

Beispiel:

$$A = GG^T \text{ mit } \quad A = \begin{pmatrix} 4 & 2 & 0 \\ 2 & 5 & 2 \\ 0 & 2 & 5 \end{pmatrix} \quad G = \begin{pmatrix} g_{11} & 0 & 0 \\ g_{21} & g_{22} & 0 \\ g_{31} & g_{32} & g_{33} \end{pmatrix} \quad G^T = \begin{pmatrix} g_{11} & g_{21} & g_{31} \\ 0 & g_{22} & g_{32} \\ 0 & 0 & g_{33} \end{pmatrix}$$

$$\Rightarrow \quad GG^T = \begin{pmatrix} g_{11}^2 & g_{11}g_{21} & g_{11}g_{31} \\ g_{21}g_{11} & g_{21}^2 + g_{22}^2 & g_{21}g_{31} + g_{22}g_{32} \\ g_{31}g_{11} & g_{31}g_{21} + g_{22}g_{32} & g_{31}^2 + g_{32}^2 + g_{33}^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{21} & a_{31} \\ a_{21} & a_{22} & a_{32} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix} = A$$

Durch Gleichsetzen der Matrixelemente folgt:

$$g_{11}^2 = a_{11} = 4 \qquad \Rightarrow \qquad g_{11} = 2$$

$$g_{21} \cdot g_{11} = a_{21} = 2 \qquad \Rightarrow \qquad g_{21} = 1$$

Schließlich

$$G = \begin{pmatrix} 2 & 0 & 0 \\ 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix} \quad \text{und} \quad G^T = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 0 \\ 0 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

Übersicht

- Gaußsches Eliminationsverfahren
- Kondition
- Bandmatrix
- Methode der kleinsten Quadrate
- Literaturverzeichnis

Kondition

Abhängigkeit der Lösung eines Problems von der Störung der Eingangsdaten.

$$\frac{\|Ax - A\bar{x}\|}{\|Ax\|} \leq \frac{\max_{\|x\|=1} \|Ax\|}{\min_{\|x\|=1} \|Ax\|} \cdot \frac{\|x - \bar{x}\|}{\|x\|}$$

Abschätzung der Kondition von Matrizen durch die größtmögliche Verzerrung der Einheitskugel

$$\kappa(A) \leq \frac{\max_{\|x\|=1} \|Ax\|}{\min_{\|x\|=1} \|Ax\|}.$$

Vektoren ungleich 0 und auf die Null abgebildet, dann $\kappa=\infty$.

Für reguläre Matrizen unter Verwendung der natürlichen Matrixnorm:

$$\kappa(A) = \|A\| \, \|A^{-1}\|$$

UNIVERSITÄT DES SAARLANDES

Kondition

Interpretation:

- Konditionszahl κ deutlich größer als 1 => schlecht konditioniertes Problem
- Sonst, gut konditioniertes Problem
- Konditionszahl unendlich => schlecht gestelltes Problem

Übersicht

- Gaußsches Eliminationsverfahren
- Kondition
- Bandmatrix
- Methode der kleinsten Quadrate
- Literaturverzeichnis

Bandmatrix

Matrix mit bestimmter Anzahl Nebendiagonalen Elemente ungleich null neben der Hauptdiagonalen

$p, q \in \mathbb{N}$ mit $p, q \geq 0$. A Bandmatrix der Bandbreite w = p + q + 1, wenn für a_{ij} gilt:

$a_{ij} = 0$ für $j + p < i$ oder $i + q < j$.

$$
\begin{pmatrix}
a_{11} & \cdots & a_{1(q+1)} & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\
\vdots & \ddots & & \ddots & \ddots & & & \vdots \\
a_{(p+1)1} & & \ddots & & \ddots & \ddots & & \vdots \\
0 & \ddots & & \ddots & & \ddots & \ddots & \vdots \\
\vdots & \ddots & \ddots & & \ddots & & \ddots & 0 \\
\vdots & & \ddots & \ddots & & \ddots & & a_{(n-q)n} \\
\vdots & & & \ddots & \ddots & & \ddots & \vdots \\
0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & a_{n(n-p)} & \cdots & a_{nn}
\end{pmatrix}
$$

Bandmatrix

Tridiagonalmatrix

quadratische Matrix mit Hauptdiagonalen und zwei Nebendiagonalen Einträgen unglich null.

(mit $p = q = 1$)

$$A = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & & & \\ \gamma_2 & \alpha_2 & \beta_2 & & & \\ & \gamma_3 & \alpha_3 & \beta_3 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \gamma_{n-1} & \alpha_{n-1} & \beta_{n-1} \\ & & & & \gamma_n & \alpha_n \end{pmatrix}$$

Übersicht

- Gaußsches Eliminationsverfahren
- Kondition
- Bandmatrix
- Methode der kleinsten Quadrate
- Literaturverzeichnis

Methode der kleinsten Quadrate

Zu einer Datenpunktwolke eine Kurve möglichst nahe an den Datenpunkten.

In der Stochastik als Schätzmethode in der Regressionsanalyse.

Beispiel:

$$b = \frac{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x}) \cdot (y_i - \bar{y})}{\sum_{i=1}^{n}(x_i - \overline{x})^2} \qquad a = \bar{y} - b \cdot \overline{x}$$

Übersicht

- Gaußsches Eliminationsverfahren
- Kondition
- Bandmatrix
- Methode der kleinsten Quadrate
- Literaturverzeichnis

Literaturverzeichnis

Lars Elden:

Matrix Methods in Data Mining and Pattern Recognition.

SIAM, Philadelpia, 2007.

Wikipedia

Mathepedia

https://www.wiwiweb.de/statistik/zeitreihenan/zeitverfahre/kleinstequad.html

Vielen Dank fur die Aufmerksamkeit