Lösung linearer Ausgleichsprobleme

- **Lineares Ausgleichsproblem:**

$$\|r(x_*)\| = \min_{x\in\mathbb{R}^n} \|b - Ax\|, \quad A \in \mathbb{R}^{m\times n}, b \in \mathbb{R}^m.$$

Für $\|.\| = \|.\|_2$: **Gaußsche Fehlerquadratmethode, LLS**.

- **Lösung des LLS für** $\operatorname{Rang} A = n$**:**

Lösung x_* existiert und ist eindeutig, $\|r(x_*)\|_2$ ist der zugehörige **Defekt**.

  – **Lösung mit QR-Zerlegung:** Sei $A = QR = Q\begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix}$ QR-Zerlegung mit $R_1 \in \mathbb{R}^{n\times n}$ invertierbare obere Dreiecksmatrix, dann

$$\|r(x)\|_2 = \|b - QRx\|_2 = \|Q^T b - Rx\|_2 = \| \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \end{bmatrix} x\|_2$$

$\Longrightarrow x_* = R_1^{-1}c_1, \quad \|r(x_*)\|_2 = \|c_2\|_2.$

  – **Lösung über Normalengleichungen:**

$$\begin{aligned} \|r(x)\|_2 = \min \;&\Leftrightarrow\; \|r(x)\|_2^2 = \min! \\ &\Leftrightarrow\; (b - Ax)^T(b - Ax) = \min! \end{aligned}$$

$\Longrightarrow A^TAx_* = A^Tb$ bzw. $x_* = (A^TA)^{-1}A^Tb = A^+b.$

Beachte: Lösung über QR-Zerlegung ist numerisch rückwärts stabil, Lösung über Normalengleichungen (Cholesky-Zerlegung von A^TA nicht)!

- **Moore-Penrose-Pseudoinverse:**

Zu $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ $\exists$ eindeutige Matrix $A^+ = X \in \mathbb{R}^{n\times m}$ mit

$$\begin{array}{llll} \text{(i)} & AXA = A, & \text{(iii)} & (AX)^T = AX, \\ \text{(ii)} & XAX = X, & \text{(iv)} & (XA)^T = XA. \end{array}$$

Für $\operatorname{Rang} A = n$: $A^+ = (A^TA)^{-1}A^T$.

- **Lösung des LLS für** Rang $A < n$**:**
  - Lösung existiert, ist aber nicht eindeutig.
  - Zusatzbedingung liefert Eindeutigkeit: $\|x_*\|_2 = \min\{\|x\|_2 \mid x \in \mathbb{R}^n \text{ löst LLS}\}$.
    $\Longrightarrow x_* = A^+b$.
  - **QR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung:**
    Für $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$ mit Rang $A = s \leq \min\{m, n\}$ existieren $Q \in \mathbb{R}^{m\times m}$ orthogonal, $R \in \mathbb{R}^{m\times n}$ und Permutationsmatrix $P \in \mathbb{R}^{n\times n}$, so daß

$$AP = QR, \quad R = \begin{bmatrix} \hat{R} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} R_1 & R_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad R_1 \in \mathbb{R}^{s\times s} \text{ invertierbar.}$$

  - Alle Lösungen des LLS erhält man durch QR-Zerlegung mit Spaltenpivotisierung:

$$\|r(x)\|_2 = \|b - QR\underbrace{P^T x}_{=:\tilde{x}}\|_2 = \|Q^T b - R\tilde{x}\|_2 = \| \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} R_1 & R_2 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{bmatrix} \|_2.$$

$$\Longrightarrow x = P \begin{bmatrix} R_1^{-1}(c_1 - R_2\tilde{x}_2) \\ \tilde{x}_2 \end{bmatrix} \text{ löst LLS } \forall\, \tilde{x}_2 \in \mathbb{R}^{n-s}.$$

  - Lösung minimaler Norm erhält man durch **Singulärwertzerlegung (SVD)** $A = U \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^T$, $\Sigma_1 \in \mathbb{R}^{s\times s}$ invertierbare Diagonalmatrix, U, V orthogonal:

$$\|r(x)\|_2 = \|b - U\Sigma\underbrace{V^T x}_{=\tilde{x}}\|_2 = \|U^T b - \Sigma\tilde{x}\|_2 = \| \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \Sigma_1 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \tilde{x}_1 \\ \tilde{x}_2 \end{bmatrix} \|_2$$

$$\Longrightarrow x_* = V \begin{bmatrix} \Sigma_1^{-1} c_1 \\ 0 \end{bmatrix} b = A^+ b.$$