1 Singulärwertzerlegung und Pseudoinverse

Singulärwertzerlegung

A sei eine Matrix mit n Spalten und m Zeilen. Zunächst sei $n \leq m$.

1. Bilde $B = A^\top A$. Dies ist eine $n \times n$-Matrix.
2. Berechne die Eigenwerte von B. Diese sind nicht-negativ und werden in der Reihenfolge $\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \cdots \geq \lambda_k > \lambda_{k+1} = \cdots = \lambda_n = 0$ nummeriert. Als Kontrolle kann möglicherweise benutzt werden, dass k der Rang der Matrix A (und auch der Rang von $A^\top A$) ist.
3. Bilde eine ON-Basis $\vec{v}_1, \ldots, \vec{v}_n$ des $\mathbb{R}^n$. Dabei ist $\vec{v}_i$ Eigenvektor zum Eigenwert λ_i. $V := [\vec{v}_1, \cdots, \vec{v}_n]$ ist dann eine orthogonale Matrix ($V^\top = V^{-1}$).
4. Die singulären Werte von A sind als $s_i = \sqrt{\lambda_i}$ definiert. Die Matrix $S = (s_{ij})$ ist eine Matrix vom Diagonaltyp, d.h. für $i \neq j$ ist $s_{ij} = 0$. S hat dieselbe Form wie A, also n Spalten und m Zeilen. Die Diagonalelemente sind durch die singulären Werte gegeben: $s_{ii} = s_i$.
5. Für $i \leq k$ definiere die Vektoren $\vec{u}_i = \frac{1}{\sqrt{\lambda_i}} A\vec{v}_i$. Diese Vektoren bilden ein Othonormalsystem. Ergänze diese Vektoren zu einer ON-Basis $\vec{u}_1, \ldots, \vec{u}_m$ des $\mathbb{R}^m$ und fasse sie in der Matrix $U = [\vec{u}_1, \cdots, \vec{u}_m]$ zusammen.
6. Die Singulärwertzerlegung von A ist dann

$$A = USV^\top.$$

singulären Werte

Diagonaltyp

Singulärwertzer-
legung

Eigenschaften der Singulärwertzerlegung:

Zerlegung von $A^\top$

$$A = USV^\top \Leftrightarrow A^\top = VS^\top U^\top$$

Ist A invertierbar, so ist $A^{-1} = US^{-1}V^\top$ (beachte: $U = U^\top$ und $V^{-1} = V^\top$).

Die erste Regel nutzt man aus, wenn $n > m$ ist (die Matrix ist breiter als hoch). Dann geht man so vor:

Setze $A_1 = A^\top$ und zerlege $A_1 = U_1 S_1 V_1^\top$. Die Zerlegung von A ist dann $A = USV^\top$ mit $U = V_1$, $S = S_1^\top$ und $V = U_1$.

Für die meisten Rechnungen braucht man weder die Eigenvektoren von $A^\top A$ zum Eigenwert $\lambda = 0$ noch die in 5 ergänzten Vektoren $\vec{u}_{k+1}$ bis $\vec{u}_m$ explizit.

Man erhält die Sparversion der Singulärwertzerlegung, wenn die Einträge in diesen Vektoren einfach durch $*$ ersetzt werden.

Sparversion

Beispiel 1: Singulärwertzerlegung von $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$

① Da $n = 2 < m = 3$ ist, kann man direkt losrechnen: Es ist $B = A^\top A$.

$$\begin{array}{cc} & \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} = B \end{array}$$

② Mit $p(\lambda) = \lambda^2 - 7\lambda + 6 = (\lambda - 6)(\lambda - 1)$ ist $\lambda_1 = 6$ und $\lambda_2 = 1$.

③ Eigenvektor zu $\lambda_1 = 6$: Es ist $B - 6E = \begin{bmatrix} -1 & 2 \\ 2 & -4 \end{bmatrix}$, also ist $\vec{v}_1 = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ Eigenvektor.

Entweder berechnet man analog $\vec{v}_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ -2 \end{bmatrix}$ als Eigenvektor zu $\lambda_2 = 1$ oder man nutzt die Tasache aus, dass die Eigenvektoren der symmetrischen Matrix B zu verschiedenen eigenwerten orthogonal sind.

V ist nun die Matrix der normierten Eigenvektoren: $V = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & -2 \end{bmatrix}$

④ S enthält auf der Diagonalen die Wurzeln der Eigenwerte von B: $S = \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$.

⑤ Es ist $\vec{u}_1 = \frac{1}{\sqrt{6}} A\vec{v}_1 = \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix}$ und $\vec{u}_2 = \frac{1}{\sqrt{1}} A\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{5}} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ -2 \end{bmatrix}$.

Um $\vec{u}_1$ und $\vec{u}_2$ zu einer ON-Basis des $\mathbb{R}^3$ zu ergänzen, kann man

- entweder das Gram-Schmidt-Verfahren verwenden:
  $\vec{u}_1$ und $\vec{u}_2$ sind ja schon zueinander senkrecht und normiert, man lässt also das Orthonormalisierungsverfahren auf einen beliebigen davon linear unabhängigen Vektor des $\mathbb{R}^3$ los, z.B. auf $\vec{e}_2$, weil dann das Skalarprodunkt mit $\vec{u}_2$ schon Null ist:

  $$\vec{w}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \left\langle \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}, \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} \right\rangle \frac{1}{\sqrt{30}} \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix} - \frac{5}{30} \begin{bmatrix} 2 \\ 5 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$$

  Man erhält $\vec{u}_3 = \frac{1}{\|\vec{w}_3\|} \vec{w}_3 = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} -2 \\ 1 \\ -1 \end{bmatrix}$.

- oder man nutzt die Tatsache aus, dass die Rechnung im $\mathbb{R}^3$ stattfindet und berechnet $\vec{u}_3 = \vec{u_1} \times \vec{u}_2$.

Damit wird $U = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{30}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{5}{\sqrt{30}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{30}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix}$.

⑥ Die Singulärwertzerlegung von A ist

$$A = USV^\top = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{30}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{6}} \\ \frac{5}{\sqrt{30}} & 0 & \frac{1}{\sqrt{6}} \\ \frac{1}{\sqrt{30}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & -\frac{1}{\sqrt{6}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}.$$

Bei der Sparversion wird der rechenaufwändige Basisergänzungsschritt in ⑤ weggelassen und man hat

$$A = USV^\top = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{30}} & \frac{1}{\sqrt{5}} & * \\ \frac{5}{\sqrt{30}} & 0 & * \\ \frac{1}{\sqrt{30}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} & * \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sqrt{6} & 0 \\ 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix}.$$

Man sieht dass beim Ausmultiplizieren die $*$-Werte gerade mit den Nullen der S_1-Matrix multipliziert werden.

Beispiel 2: Singulärwertzerlegung von $A = \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}$

Da die Matrix A breiter als hoch ist, wird eine Zerlegung von $A_1 = A^\top$ vorgenommen.

① Man sieht $B = A_1^\top A_1 = AA^\top = [9]$.

② $\lambda_1 = 9$ ist der einzige Eigenwert dieser 1×1-Matrix.

③ $\vec{v}_1 = [1]$ ist eine ONB des $\mathbb{R}^1$, $V_1 = [1]$.

④ $S_1 = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

⑤ $\vec{u}_1 = \frac{1}{3}A_1\vec{v}_1 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix}2\\2\\1\end{bmatrix}$. Statt $\vec{u}_1$ mit dem Gram-Schmidt-Verfahren zu einer ON-Basis des $\mathbb{R}^3$ zu ergänzen, benutzen wir wieder das Kreuzprodukt: sicher steht $\vec{w}_2 = \begin{bmatrix}1\\-1\\0\end{bmatrix}$ auf $\vec{u}_1$ senkrecht, und $\vec{w}_3 = \begin{bmatrix}2\\2\\1\end{bmatrix} \times \begin{bmatrix}1\\-1\\0\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}1\\1\\-4\end{bmatrix}$ steht auf beiden senkrecht. Damit muss man $\vec{w}_2$ und $\vec{w}_3$ nur noch normieren:

$$U_1 = \begin{bmatrix}\vec{u_1} & \vec{u_2} & \vec{u_3}\end{bmatrix} = \begin{bmatrix}\frac{2}{3} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{3\sqrt{2}}\\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{3\sqrt{2}}\\ \frac{1}{3} & 0 & -\frac{4}{3\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

⑥ Damit ist $A_1 = U_1S_1V_1^\top = \begin{bmatrix}\frac{2}{3} & \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{3\sqrt{2}}\\ \frac{2}{3} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{3\sqrt{2}}\\ \frac{1}{3} & 0 & -\frac{4}{3\sqrt{2}}\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3\\0\\0\end{bmatrix}[1]$

$$\text{und} \qquad A = A_1^\top = V_1S_1^\top U_1^\top = [1]\begin{bmatrix}3 & 0 & 0\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\frac{2}{3} & \frac{2}{3} & \frac{1}{3}\\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0\\ \frac{1}{3\sqrt{2}} & \frac{1}{3\sqrt{2}} & -\frac{4}{3\sqrt{2}}\end{bmatrix}$$

In der Sparversion hat man

⑤ $\vec{u}_1 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix}2\\2\\1\end{bmatrix}$, $\vec{u}_2 = \begin{bmatrix}*\\*\\*\end{bmatrix}$, $\vec{u}_3 = \begin{bmatrix}*\\*\\*\end{bmatrix}$ und

$$U_1 = \begin{bmatrix}\frac{2}{3} & * & *\\ \frac{2}{3} & * & *\\ \frac{1}{3} & * & *\end{bmatrix} \quad \text{und damit} \quad A_1 = U_1S_1V_1^\top = \begin{bmatrix}\frac{2}{3} & * & *\\ \frac{2}{3} & * & *\\ \frac{1}{3} & * & *\end{bmatrix}\begin{bmatrix}3\\0\\0\end{bmatrix}[1]$$

Man kann die Singulärwertzerlegung von A natürlich auch direkt berechnen:

① Es ist $B = A^\top A = \begin{bmatrix}4 & 4 & 2\\4 & 4 & 2\\2 & 2 & 1\end{bmatrix}$.

② Hier sieht man, wo der größere Aufwand steckt: das charakteristische Polynom ist $p(\lambda) = -\lambda^3 + 9\lambda^2$, also $\lambda_1 = 9$, $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$.

③ Mit etwas Mühe und dem Gauss-Algorithmus berechnet man $\vec{v}_1 = \frac{1}{3}\begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ als Eigenvektor zu $\lambda_1 = 9$ und genaus wie oben z.B. $\vec{v}_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ -1 \\ 0 \end{bmatrix}$ und $\vec{v}_3 = \frac{1}{3\sqrt{2}}\begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ -4 \end{bmatrix}$ als Eigenvektoren zu $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$.

④ In S stehen wieder die Wurzeln der Eigenwerte: $S = \begin{bmatrix} 3 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$.

⑤ U ist diesmal die 1×1-Matrix, die nur aus $\vec{u}_1 = \frac{1}{3} A\vec{v}_1 = \frac{1}{3}[3] = [1]$ besteht.

⑥ $A = USV^\top$ hat damit dieselben Komponenten wie oben.

Pseudoinverse, Moore-Penrose-Inverse, Pseudonormallösung

Ist $S = (s_{ij})$ eine $n \times m$-Matrix vom Diagonaltyp, so definiert man die $m \times n$-Matrix $S^+ = (s^+_{ji})$ durch $s^+_{ij} = \begin{cases} \frac{1}{s_{ii}} & \text{falls } s_{ii} \neq 0 \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$. Das heisst, dass S^+ aus S dadurch entsteht, dass S transponiert wird und die Nicht-Null-Elemente auf der Diagonalen durch ihre Kehrwerte ersetzt werden.

Ist $A = USV^\top$, so ist die Moore-Penrose-Inverse oder Pseudoinverse A^+ von A durch $A^+ = VS^+U^\top$ definiert.

$$A = USV^\top \Rightarrow A^+ = VS^+U^\top$$

Hier reicht die Sparversion der Singulärwertzerlegung.

$$(A^+)^\top = (A^\top)^+, \qquad A^{-1} \text{existiert} \Rightarrow A^{-1} = A^+$$

Achtung: im allg. ist $(AB)^+ \neq B^+A^+$.

Ist $A\vec{x} = \vec{b}$ ein (möglicherweise mehrdeutig lösbares oder unlösbares) lineares Gleichungssystem, so ist die Pseudonormallösung $\vec{x}^+$ definiert als $\vec{x}^+ = A^+\vec{b}$.

$\vec{x}^+$ ist dadurch charakterisiert, dass gilt:

(i) Die Norm des Fehlers $A\vec{x}^+ - \vec{b}$ ist minimal und

(ii) die Norm von $\vec{x}^+$ ist minimal.

Insbesondere ist im Fall eine eindeutig lösbaren Systems $\vec{x}^+$ die Lösung und in mehrdeutig lösbaren Systemen die Lösung mit der kleinsten Norm.

Ein wichtiger Spezialfall ist:

Ist A injektiv (d.h. rang $A = n$), so sind A^+ und $\vec{x}^+$ ohne Singulärwertzerlegung bestimmbar:

$$A^+ = (A^\top A)^{-1} A^\top \quad \text{und } \vec{x}^+ \text{ ist eindeutige Lösung von} \quad A^\top A \vec{x}^+ = A^\top \vec{b}.$$

Beispiel 3: Pseudoinverse von $A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ und Pseudonormallösung von $A\vec{x} = \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

Da der Rang von A zwei ist, kann man die Formel oben anwenden:

$$B = A^\top A = \begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \Rightarrow B^{-1} = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 2 & -2 \\ -2 & 5 \end{bmatrix} \Rightarrow A^+ = B^{-1} A^\top = \frac{1}{6} \begin{bmatrix} 2 & 2 & -2 \\ -2 & 1 & 5 \end{bmatrix}$$

Damit berechnet man sofort die Pseudonormallösung

$$\vec{x}^+ = A^+ \vec{b} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 2 & 2 & -2 \\ -2 & 1 & 5 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 3 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Wenn man die Pseudoinverse nicht benötigt, berechnet man noch schneller $A^\top \vec{b} = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \end{bmatrix}$ und $\vec{x}^+$ als Lösung von

$$\begin{bmatrix} 5 & 2 \\ 2 & 2 \end{bmatrix} \vec{x}^+ = \begin{bmatrix} 5 \\ 2 \end{bmatrix}.$$

Die Berechnung von $A^+ = VS^+U^\top$ über die Singulärwertzerlegung bzw. die Sparversion ist mühsamer (liefert aber natürlich dasselbe Ergebnis):

$$A^+ = \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{5}} & \frac{1}{\sqrt{5}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & -\frac{2}{\sqrt{5}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{6}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{2}{\sqrt{30}} & \frac{5}{\sqrt{30}} & \frac{1}{\sqrt{30}} \\ \frac{1}{\sqrt{5}} & 0 & -\frac{2}{\sqrt{5}} \\ * & * & * \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{3} & \frac{1}{3} & -\frac{1}{3} \\ -\frac{1}{3} & \frac{1}{6} & \frac{5}{6} \end{bmatrix}$$

Beispiel 4: Pseudonormallösung von $\begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \vec{x} = [4]$

Da die Matrix nicht Rang 3 hat, kann man die obige Formel nicht direkt verwenden.

Allerdings hat $A^\top = \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}$ den Rang 1 und deshalb ist

$$(A^\top)^+ = \left(\begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \right)^{-1} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 1 \end{bmatrix}.$$

Mit Hilfe der Formel $(A^\top)^+ = (A^+)^\top$, also $A^+ = ((A^\top)^+)^\top$ folgt

$$A^+ = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} \text{ und } \vec{x}^+ = A^+ \vec{b} = \frac{1}{9} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix} [4] = \frac{4}{9} \begin{bmatrix} 2 \\ 2 \\ 1 \end{bmatrix}.$$

Anwendung: Numerischer Rangabfall

Von numerischem Rangabfall spricht man, wenn eine Matrix A sehr nahe an einer mit kleinerem Rang liegt. Dies führt dazu, dass die Konditionszahl ($\|A\| \, \|A^{-1}\|$) sehr groß wird. Kleine Abweichungen in den Daten des linearen Gleichungssystems $A\vec{x} = \vec{b}$ führen zu großen Abweichungen in der Lösung $\vec{x}$.

Beispiel 5: $A\vec{x} = \vec{b}$ mit $A = \begin{bmatrix} 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4.001 \\ 3 & 4 & 5 \end{bmatrix}$ und $\vec{b} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix}$

Man sieht leicht (oder rechnet nach), dass A invertierbar ist. Die Lösung $\vec{x}$ ist also eindeutig bestimmt:

Die exakte Lösung ist $\vec{x} = \begin{bmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{bmatrix}$. Allerdings ist z.B. $\vec{y} = \begin{bmatrix} -0.5 \\ 0 \\ 0.5 \end{bmatrix}$ eine fast „genau so gute“ Lösung: Es ist $A\vec{y} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1.0005 \\ 1 \end{bmatrix}$.

Wenn man die Lösung des leicht gestörten Systems $A\vec{x}_1 = \vec{b}_1$ mit $\vec{b}_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0.9 \\ 1 \end{bmatrix}$ berechnet, erhält man $\vec{x}_1 = \begin{bmatrix} -101.0000 \\ 201.0000 \\ -100.0000 \end{bmatrix}$

Der Schlüssel zu dieser Problematik liegt in der Singulärwertzerlegung von A: Es ist $A = USV^\top$ mit $S = \begin{bmatrix} 10.3873 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3338 & 0 \\ 0 & 0 & 0.0003 \end{bmatrix}$ und unitären Matrizen U und V.
Man sieht, dass A einen sehr kleinen singulären Wert hat. Die singulären Werte von A^{-1} sind die Kehrwerte der singulären Werte von A und der größte davon ist ≈ 3467.

In solchen Fällen kann man so vorgehen:

> ① Zerlege $A = USV^\top$.
>
> ② Die Matrix S_1 entsteht, indem in S alle singulären Werte, die kleiner als eine vorgegebene Zahl $\varepsilon > 0$ sind, durch Null ersetzt werden.
>
> ③ Statt der Lösungen von $A\vec{x} = \vec{b}$ bestimme die Pseudonormallösungen von $A_1\vec{x} = \vec{b}$ durch
> $$\vec{x}^+ = A_1^+\vec{b} = VS_1^+U^\top\vec{b}$$

In diesem Beispiel ersetzt man den dritten singulären Wert duch Null und erhält

$$S_1 = \begin{bmatrix} 10.3873 & 0 & 0 \\ 0 & 0.3338 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad S_1^+ = \begin{bmatrix} 0.0963 & 0 & 0 \\ 0 & 2.9961 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Damit wird

$$A_1^+ = \begin{bmatrix} -1.1633 & -1.1674 & 1.8314 \\ -0.1669 & -0.1676 & 0.3342 \\ 0.8316 & 0.8344 & -1.1662 \end{bmatrix}$$

$$\text{und} \quad \vec{x}^+ = A_1^+ \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.4992 \\ -0.0002 \\ 0.4997 \end{bmatrix} \text{ und } \quad \vec{x}_1^+ = A_1^+ \begin{bmatrix} 1 \\ 0.9 \\ 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.3825 \\ 0.0165 \\ 0.4163 \end{bmatrix}$$

Anwendung: Ausgleichsrechnung

Andere Bezeichnungen: Gaußsche Methode der kleinsten Quadrate, Ausgleichspolynome, Ausgleichsgerade, Regressionsgerade

Ausgleichsgerade

Wichtigster Fall: Ausgleichsgerade

Gegeben sind $n > 2$ Punktepaare (x_i, y_i), wobei mindestens zwei verschiedene x-Koordinaten auftreten sollen. Gesucht ist eine Gerade $y = ax + b$, die diese Punkte bestmöglich annähert, d.h. Zahlen a und b, so dass der quadratische Fehler
$\sum_{i=1}^{n} \Big((ax_i + b) - y_i\Big)^2$ möglichst klein wird.

Die Lösung dieses Problems wird gegeben durch die Pseudonormallösung des folgenden Gleichungssystems:

$$\begin{array}{c} b + ax_1 = y_1 \\ \vdots \\ b + ax_n = y_n \end{array}, \quad \text{also} \quad A\begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \vec{y} \quad \text{mit} \quad A = \begin{bmatrix} 1 & x_1 \\ \vdots & \vdots \\ 1 & x_n \end{bmatrix} \quad \text{und} \quad \vec{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}$$

Da die Matrix A injektiv ist, läßt sich die Pseudonormallösung mit Hilfe der Transponierten berechnen: $\begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = (A^\top A)^{-1} A^\top \vec{y}$.

Der Korrelationskoeffizient r ist ein Maß für die Güte der Approximation durch die Ausgleichsgerade. Stets ist $|r| \leq 1$, und je näher $|r|$ bei 1 ist, desto stärker ist die (lineare) Abhängigkeit der y- von den x-Werten.

Korrelationskoeffizient

Berechnung

Die Berechnung beruht auf der Anwendung der Cramerschen Regel auf das Gleichungssystem $A^\top A \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = A^\top \vec{y}$.

Der Einfachheit halber sind die Summationsgrenzen weggelassen. Alle Summen laufen von $i = 1$ bis n.

1. Berechne $\Delta = n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2$
2. Die Ausgleichsgerade $y = ax + b$ hat die Koeffizienten

$$a = \frac{1}{\Delta}(n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i)$$

$$\text{und} \quad b = \frac{1}{\Delta}\Big(\sum x_i^2 \sum y_i - \sum x_i y_i \sum x_i\Big).$$

3. Es ist $r = \dfrac{n \sum x_i y_i - \sum x_i \sum y_i}{\sqrt{\Big(n \sum x_i^2 - (\sum x_i)^2\Big)\Big(n \sum y_i^2 - (\sum y_i)^2\Big)}}$

Praktische Durchführung: Die Werte werden in eine Tabelle eingetragen, die von außen nach innen ausgefüllt wird.

Beispiel 6: $n = 5$ mit den Wertepaaren $(0, 0)$, $(2, 3)$, $(2, 5)$, $(4, 4)$ und $(5, 6)$.

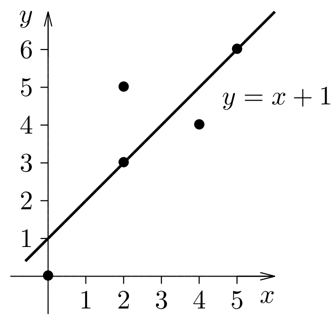
Die Starttabelle wird ausgefüllt. In die letzte Zeile werden die Summen eingetragen. Eine Spalte mit y_i^2 braucht man nur, wenn auch der Korrelationskoeffizient bestimmt werden soll.

x_i	x_i^2	$x_i y_i$	y_i^2	y_i
0				0
2				3
2				5
4				4
5				6

wird zu

x_i	x_i^2	$x_i y_i$	y_i^2	y_i
0	0	0	0	0
2	4	6	9	3
2	4	10	25	5
4	16	16	16	4
5	25	30	36	6
13	49	62	86	18

Damit wird



$$\Delta = 5 \cdot 49 - 13^2 = 245 - 169 = 76$$

$a = \dfrac{1}{76}(5 \cdot 62 - 13 \cdot 18) = \dfrac{1}{76}(310 - 234) = 1$ und

$b = \dfrac{1}{76}(49 \cdot 18 - 62 \cdot 13) = \dfrac{1}{76}(882 - 806) = 1$

Die Ausgleichsgerade ist also $y = x + 1$.

Der Korrelationskoeffizient ist

$$r = \frac{5 \cdot 62 - 13 \cdot 18}{\sqrt{(5 \cdot 49 - 13^2)(5 \cdot 86 - 18^2)}} = \frac{76}{\sqrt{76 \cdot 106}} \approx 0.847.$$

Allgemeines Grundproblem der Ausgleichsrechnung

Allgemeines Grundproblem

Gegeben sind n Datenpaare (x_i, y_i), $i = 1, \ldots, n$ und $k < n$ Funktionen f_1 bis f_k. Gesucht ist eine Linearkombination $f(x) = \sum_{j=1}^{k} \alpha_j f_j(x)$ dieser f_j, so dass die Summe der quadrierten Abweichungen von f an den Stellen x_i zu y_i minimal wird:

$$F = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) - y_i)^2 = \sum_{i=1}^{n} \left(\sum_{j=1}^{k} \alpha_j f_j(x_i) - y_i \right)^2 \stackrel{!}{=} \text{Min.}$$

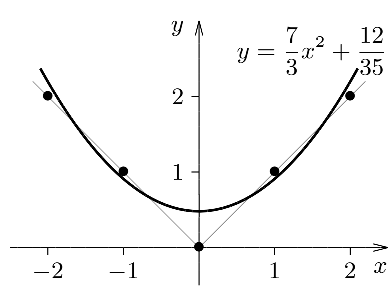
Die Lösung dieses Problems wird durch die Pseudonormallösung des folgenden Gleichungssystems gegeben:

Löse $A\vec{a} = \vec{y}$. Dabei enthält $\vec{a} = (\alpha_1, \ldots, \alpha_k)^\top$ die gesuchten Koeffizienten,

$$A = \begin{bmatrix} f_1(x_1) & f_2(x_1) & \cdots & f_k(x_1) \\ f_1(x_2) & f_2(x_2) & \cdots & f_k(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ f_1(x_n) & f_2(x_n) & \cdots & f_k(x_n) \end{bmatrix} \quad \text{und } \vec{y} = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

Beispiel 7: Approximation von $|x|$ an den Stellen -2, -1, 0, 1 und 2 durch eine Funktion der Form $f(x) = \alpha_1 + \alpha_2 x^2$

Es ist $f_1(x) = 1$ und $f_2(x) = x^2$.
Gesucht ist die Pseudonormallösung von



$$\begin{array}{llll} \alpha_1 & +4\alpha_2 & = 2 & (x = -2) \\ \alpha_1 & +1\alpha_2 & = 1 & (x = -1) \\ \alpha_1 & & = 1 & (x = 0) \\ \alpha_1 & +1\alpha_2 & = 1 & (x = 1) \\ \alpha_1 & +4\alpha_2 & = 2 & (x = 2) \end{array}$$

Mit $A = \begin{bmatrix} 1 & 4 \\ 1 & 1 \\ 1 & 0 \\ 1 & 1 \\ 1 & 4 \end{bmatrix}$ und $\vec{b} = \begin{bmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 1 \\ 2 \end{bmatrix}$ berechnet man $A^\top A = \begin{bmatrix} 5 & 10 \\ 10 & 34 \end{bmatrix}$ $\quad A^\top \vec{b} = \begin{bmatrix} 6 \\ 18 \end{bmatrix}$ und damit $\alpha_1 = \frac{24}{70} = \frac{12}{35}$ und $\alpha_2 = \frac{30}{70} = \frac{3}{7}$. Das Ausgleichspolynom ist also $y = \frac{3}{7}x^2 + \frac{12}{35}$.

Linearisierung und Gewichte

Die Ausgleichsrechnung (insbesondere Die Ausgleichsgerade) läßt sich mit den obigen Methoden nur finden, wenn die unbekannten Paramerter α_1 bis α_k als Koeffizienten einer Linearkombination auftreten. Einige andere Fälle lassen sich durch Linearisierung darauf zurückführen:

Linearisierung

- Typ $y = ae^{bx}$
  Mit $z = \ln y$ erhält man $z = \ln a + bx$. Man ermittelt also eine Ausgleichgerade $z = c + dx$ für die $(x_i, z_i) = (x_i, \ln y_i)$-Punkte und findet so Werte für $a = e^c$ und $b = d$.

  Dieser Fall enthält auch Funktionen des Typs $y = ab^{cx}$, da sich dies wegen $b^{cx} = e^{c \ln bx}$ wie oben schreiben läßt.

- Typ $y = cx^d$
  Wegen $x^d = e^{d \ln x}$ ergibt Logarithmieren von x und y die Beziehung $\ln y = \ln c + d \ln x$. Hat also die Ausgleichsgerade für die Wertepaare $(w_i, z_i) = (\ln x_i, \ln y_i)$ die Form $z = \alpha + \beta w$, so ist die Ausgleichsfunktion der Originaldaten $y = e^\alpha x^\beta$.

- Typ $y = \frac{1}{ax + b}$
  Für $z = \frac{1}{y}$ sucht man die Ausgleichsgerade für die Wertepaare (x_i, z_i) in der Form $z = ax + b$. Die Ausgleichsfunktion ist dann $y = \frac{1}{ax + b}$.

Ein gewichtetes Ausgleichsproblem liegt vor, wenn die Quadrate von $(ax_i + b) - y_i$ nicht gleichgewichtet eingehen, sondern wenn das Minimum einer Funktion der Form

gewichtetes Ausgleichsproblem

$$F = \sum_{i=1}^{n} \gamma_i((ax_i + b) - y_i)^2 \qquad (\gamma_i > 0)$$

gesucht wird. Die Zahlen γ_i sind die Gewichte.

Gewichte

① Ist $A\vec{x} = \vec{y}$ das Gleichungssystems des ungewichteten Ausgleichsproblems, so entstehen A_1 und $\vec{y}_1$ dadurch, dass für $k = 1$ bis n die k-te Zeile von A und der k-te Eintrag in $\vec{y}$ mit γ_k multipliziert werden.

② Die Lösung des gewichteten Systems ist die Pseudonormallösung von $(A^\top A_1)\vec{x} = A^\top \vec{y}_1$. In vielen Fällen ist $A^\top A_1$ invertierbar und das Problem hat eine eindeutige Lösung.

Beispiel 8: Die Ausgleichsfunktion vom Typ $y = \dfrac{1}{ax+b}$ zu den Punkten $(x_1, y_2) = (0, 1)$, $(x_2, y_2) = (2, 1)$ und $(x_3, y_3) = (3, \frac{1}{4})$.

① Rückführung auf Ausgleichsgerade: mit $z = \dfrac{1}{y}$ ist $z_1 = z_2 = 1$, $z_3 = 4$.

② Das Gleichungssystem $A \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \vec{z}$ ist $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 2 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 4 \end{bmatrix}$.

③ Mit der Tabelle erhält man

x_i	x_i^2	$x_i z_i$	z_i
0	0	0	1
2	4	2	1
3	9	12	4
5	13	14	6

also $\Delta = 3 \cdot 13 - 5^4 = 14$

$$\alpha_1 = \frac{13 \cdot 6 - 14 \cdot 5}{14} = \frac{8}{14} = \frac{4}{7}, \alpha_2 = \frac{3 \cdot 14 - 5 \cdot 6}{14} = \frac{12}{14} = \frac{6}{7}$$

Die Ausgleichsfunktion des Ausgabgsproblems ist also $y = \dfrac{1}{z} = \dfrac{7}{6x+4}$.

Beispiel 9: Die Ausgleichsgerade zu den Punkte $(0, 1)$, $(2, 1)$ und $(3, 4)$ mit und ohne den Gewichten $\gamma_1 = \gamma_3 = 1$ und $\gamma_2 = 3$.

Die Ausgleichsgerade für den Fall ohne Gewichte ist in Beispiel 7 schon berechnet worden: $y = \frac{6}{7}x + \frac{4}{7}$.

① Die Matrizen erhält man durch Abwandlung des Systems aus Beispiel 8:

$$A_1 \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \vec{y}_1 \Leftrightarrow \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 3 & 6 \\ 1 & 3 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 \\ 3 \\ 4 \end{bmatrix}.$$

② Es ist $A^\top A_1 = \begin{bmatrix} 5 & 9 \\ 9 & 21 \end{bmatrix}$ und $A^\top \vec{y}_1 = \begin{bmatrix} 8 \\ 18 \end{bmatrix}$. Daraus liest man die Lösung $b = \frac{6}{24} = \frac{1}{4}$ und $a = \frac{18}{24} = \frac{3}{4}$ ab. Die Ausgleichsgerade des gewichteten Problems ist also $y = \frac{3}{4}x + \frac{1}{4}$.

Warnungen:

(i) Die Matrix $A^\top A_1$ in Beispiel 9 ist nur zufällig symmetrisch, i.allg. ist das nicht so.

(ii) Die in Beispiel 8 berechnete Ausgleichsfunktion löst nicht das nichtlineare Problem $\sum_{i=1}^{3} \gamma_i \Big(\frac{1}{ax_i + b} - y_i\Big)^2 \stackrel{!}{=} \text{Min}$, das mit Hilfe der mehrdimensionalen Differentialrechnung bearbeitet werden kann. Die Lösung ist ungefähr $y = \frac{1}{0.27x + 0.96}$ und ist in der Skizze dünn gestrichelt.