

Algorithmen und Datenstrukturen (für ET/IT)

Wintersemester 2012/13

Dr. Tobias Lasser

Computer Aided Medical Procedures
Technische Universität München



Notizen

Klausur

- Klausurtermin: 21. Februar 2013
- Wiederholungsklausur: 8. April 2013
- Erlaubtes Material:
 - DIN A4 Blatt, handbeschrieben
 - evtl. Taschenrechner

Notizen

Programm heute

- 7 Fortgeschrittene Datenstrukturen
- 8 Such-Algorithmen
- 9 Graph-Algorithmen
- 10 Numerische Algorithmen
 - Matrizen
 - Lineare Gleichungen
 - Least Squares Probleme

Notizen

4

LUP-Zerlegung: Beispiel

- Lineares Gleichungssystem:

$$Ax = b,$$

mit

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 0 \\ 3 & 4 & 4 \\ 5 & 6 & 3 \end{pmatrix}, \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 7 \\ 8 \end{pmatrix}$$

- LUP Zerlegung:

$$PA = LU$$

mit

$$L = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0,2 & 1 & 0 \\ 0,6 & 0,5 & 1 \end{pmatrix}, \quad U = \begin{pmatrix} 5 & 6 & 3 \\ 0 & 0,8 & -0,6 \\ 0 & 0 & 2,5 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Notizen

5

LUP-Zerlegung: Beispiel (Forts.)

- statt $Ax = b$ löse $LUx = Pb$
- **Schritt 1:** löse $Lz = Pb$ (Vorwärts-Substitution):

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0,2 & 1 & 0 \\ 0,6 & 0,5 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 3 \\ 7 \end{pmatrix} \implies z = \begin{pmatrix} 8 \\ 1,4 \\ 1,5 \end{pmatrix}$$

- **Schritt 2:** löse $Ux = z$ (Rückwärts-Substitution):

$$\begin{pmatrix} 5 & 6 & 3 \\ 0 & 0,8 & -0,6 \\ 0 & 0 & 2,5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 8 \\ 1,4 \\ 1,5 \end{pmatrix} \implies x = \begin{pmatrix} -1,4 \\ 2,2 \\ 0,6 \end{pmatrix}$$

6

Notizen

Die LU und LUP Zerlegung

LU Zerlegung:

- Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und sei A^T diagonal dominant (d.h. $|a_{ii}| \geq \sum_{i \neq j} |a_{ij}|$ für alle $i = 1, \dots, n$).
- Dann gibt es eine untere Einheitsdreiecksmatrix $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und eine obere Dreiecksmatrix $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$A = LU.$$

LUP Zerlegung:

- Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar.
- Dann gibt es eine untere Einheitsdreiecksmatrix $L \in \mathbb{R}^{n \times n}$, eine obere Dreiecksmatrix $U \in \mathbb{R}^{n \times n}$ sowie eine Permutationsmatrix $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mit

$$PA = LU.$$

7

Notizen

Berechnung der LU Zerlegung 1

- Berechnung der LU Zerlegung mit **Gauss Elimination**
- **Rekursive Strategie:**

- Fall $n = 1$:

$$L = (1), U = A.$$

- Fall $n > 1$:

$$A = \left(\begin{array}{c|ccc} a_{11} & a_{21} & \cdots & a_{1n} \\ \hline a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{array} \right)$$
$$= \begin{pmatrix} a_{11} & w^T \\ v & A' \end{pmatrix}$$

mit $v, w \in \mathbb{R}^{n-1}$ und $A' \in \mathbb{R}^{n \times n}$.

Notizen

8

Berechnung der LU Zerlegung 2

- **Faktorisierung** von A :

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & w^T \\ v & A' \end{pmatrix}$$
$$= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ v/a_{11} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & w^T \\ 0 & A' - vw^T/a_{11} \end{pmatrix},$$

wobei I_{n-1} die $n-1 \times n-1$ Einheitsmatrix ist.

- $A' - vw^T/a_{11}$ heißt **Schur-Komplement** von A bezüglich a_{11}
- Falls A eine LU Zerlegung hat, hat auch das Schur-Komplement eine LU Zerlegung
- **Annahme:**

$$A' - vw^T/a_{11} = L'U'$$

mit $L' \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}$ untere Einheitsdreiecksmatrix,
 $U' \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}$ obere Dreiecksmatrix.

Notizen

9

Berechnung der LU Zerlegung 3

- Faktorisierung von A zusammen mit Annahme ergibt:

$$\begin{aligned} A &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ v/a_{11} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & w^T \\ 0 & A' - vw^T/a_{11} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ v/a_{11} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & w^T \\ 0 & L'U' \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ v/a_{11} & L' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{11} & w^T \\ 0 & U' \end{pmatrix} \\ &= LU \end{aligned}$$

- dann Rekursion für $A' = L'U'$
- Vorsicht: $a_{11} \neq 0$ ist notwendig, ebenso für Rekursionsschritte
→ ok, da A diagonal dominant

Notizen

10

Algorithmus LU Zerlegung

Input: Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Output: Matrizen $L, U \in \mathbb{R}^{n \times n}$

LU-Zerlegung(A):

$U = 0; L = I_n;$

for $k = 1$ **to** n {

$u_{kk} = a_{kk};$

for $i = k + 1$ **to** n {

$l_{ik} = a_{ik}/u_{kk};$ // entspricht v_k

$u_{ki} = a_{ki};$ // entspricht w_i^T

 }

for $i = k + 1$ **to** n {

for $j = k + 1$ **to** n {

$a_{ij} = a_{ij} - l_{ik}u_{kj};$

 }

 }

}

- Rekursion wurde durch Iteration ersetzt
- Aufwand: $\Theta(n^3)$
- Optimierung: falls A nicht weiter benötigt wird, können L, U direkt in A abgespeichert werden (in place)
 - L hat nur 1 auf der Diagonalen, wird nicht explizit gespeichert
 - Diagonale von U in Diagonale von A
 - Modifikation: ersetze l, u durch a

Notizen

11

Permutationsmatrizen

Permutationsmatrix

$P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt **Permutationsmatrix**, falls sie in jeder Zeile und jeder Spalte jeweils eine 1 enthält und sonst nur 0.

- **Beispiel:**

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

- **Anwendung:**

$$Px = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ x_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} x_2 \\ x_3 \\ x_1 \end{pmatrix}$$

14

Notizen

Permutationsmatrizen

- Ist $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ Permutationsmatrix, dann
 - PA ist A mit vertauschten Zeilen
 - AP ist A mit vertauschten Spalten

- **Beispiel:**

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \end{pmatrix}, \quad P = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$PA = \begin{pmatrix} 4 & 5 & 6 \\ 7 & 8 & 9 \\ 1 & 2 & 3 \end{pmatrix}, \quad AP = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 2 \\ 6 & 4 & 5 \\ 9 & 7 & 8 \end{pmatrix}$$

- **Implementation:** oft einfacher als Feld π statt als Matrix P
 - $\pi[i] = j$ bedeutet P hat 1 in Zeile i , Spalte j

15

Notizen

Berechnung der LUP Zerlegung 1

- LUP Zerlegung ist LU Zerlegung mit **Pivoting-Strategie**
- **Pivoting-Strategie**: vertausche Zeilen, so daß Element mit **höchstem Absolutwert** an Stelle von a_{ij} steht
 - keine Bedingung A diagonal dominant mehr nötig
 - A invertierbar sichert, daß keine 0 Spalten existieren
- **Rekursiver Ansatz** für $n > 1$:
 - Q Permutationsmatrix, so daß a_{k1} Pivot-Element

$$QA = \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ v & A' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ v/a_{k1} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & A' - vw^T/a_{k1} \end{pmatrix}$$

mit $v, w \in \mathbb{R}^{n-1}$, $A' \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)}$ und

$$\begin{aligned} v &= (a_{21}, a_{31}, \dots, a_{k-1,1}, a_{k+1,1}, \dots, a_{n1})^T \\ w^T &= (a_{k2}, a_{k3}, \dots, a_{kn}) \end{aligned}$$

16

Notizen

Berechnung der LUP Zerlegung 2

- **Annahme**:
$$P'(A' - vw^T/a_{k1}) = L'U'$$
mit P' Permutationsmatrix
- Mit Permutationsmatrix

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P' \end{pmatrix} Q$$

folgt

$$\begin{aligned} PA &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P' \end{pmatrix} QA \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & P' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ v/a_{k1} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & A' - vw^T/a_{k1} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P'v/a_{k1} & P' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & A' - vw^T/a_{k1} \end{pmatrix} \end{aligned}$$

17

Notizen

Berechnung der LUP Zerlegung 3

$$\begin{aligned}
 PA &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P'v/a_{k1} & P' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & A' - vw^T/a_{k1} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P'v/a_{k1} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & P'(A' - vw^T/a_{k1}) \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P'v/a_{k1} & I_{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & L'U' \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ P'v/a_{k1} & L' \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{k1} & w^T \\ 0 & U' \end{pmatrix} \\
 &= LU
 \end{aligned}$$

Notizen

18

Algorithmus LUP Zerlegung

Input: Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$

Output: Matrizen $L, U \in \mathbb{R}^{n \times n}$, Feld π

LUP-Zerlegung(A):

```

π = Feld Länge n;
for i = 1 to n { π[i] = i; }
for k = 1 to n {
  p = 0; // Pivot-Element
  for i = k to n {
    if (|aik| > p)
      p = |aik|; k' = i;
  }
  if (p == 0) error("Matrix singular");
  vertausche π[k] mit π[k'];
  for i = 1 to n
    vertausche aki mit ak'i;
  for i = k + 1 to n {
    aik = aik/akk;
    for j = k + 1 to n
      aij = aij - aikakj;
  }
}

```

- Rekursion wurde durch Iteration ersetzt
- Variante mit **in place** Optimierung
- Aufwand: $\Theta(n^3)$
 - extra Aufwand Pivoting nur quadratisch

Notizen

19

Anwendung der LU(P) Zerlegung

- Lösen von linearen System $Ax = b$ mittels:
 - $PAx = Pb \Leftrightarrow LUx = Pb$
 - löse $Lz = Pb$ mit Vorwärts-Substitution nach z auf
 - löse $Ux = z$ mit Rückwärts-Substitution nach x auf
- Berechnen von Inverser von $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$
 - Matrix-Gleichung $AX = I_n$ mit $X = (X_1, \dots, X_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$
 - berechne $PA = LU$
 - löse $AX_i = e_i$ nach X_i mit LUP-Zerlegung für $i = 1, \dots, n$ (e_i i -ter Einheitsvektor)
 - am Ende: $X = A^{-1}$
 - Aufwand: $\Theta(n^3)$

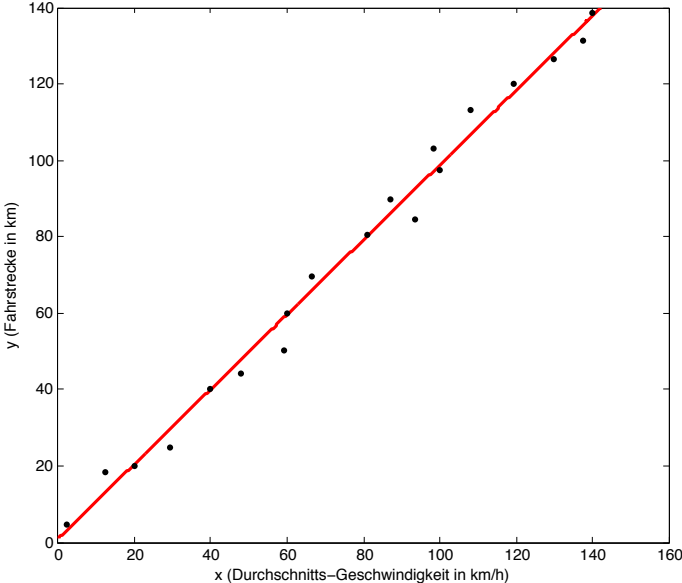
Notizen

Programm heute

- 7 Fortgeschrittene Datenstrukturen
- 8 Such-Algorithmen
- 9 Graph-Algorithmen
- 10 Numerische Algorithmen
 - Matrizen
 - Lineare Gleichungen
 - Least Squares Probleme

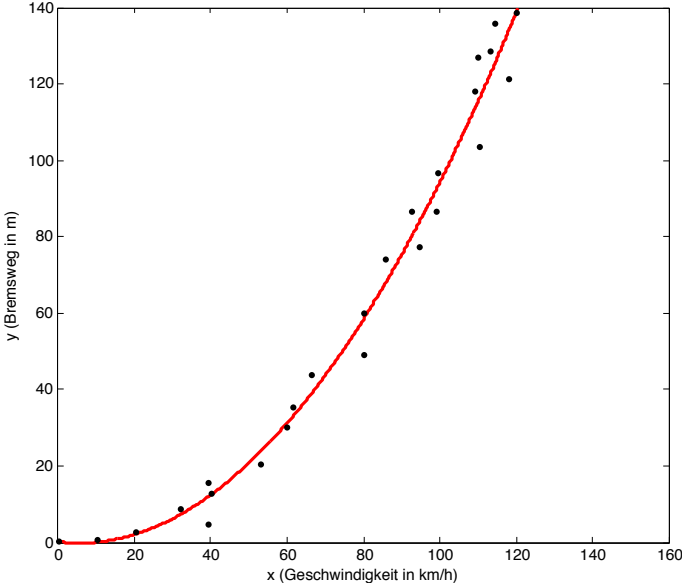
Notizen

Beispiel-Problem: Geschwindigkeit vs. Fahrstrecke



Notizen

Beispiel-Problem: Geschwindigkeit vs. Bremsweg



Notizen

Problemstellung Least Squares

- **Gegeben:** Datenreihe mit m Datenpunkten

$$(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_m, y_m)$$

mit $x_j, y_j \in \mathbb{R}$ für $j = 1, \dots, m$

- **Erwartung:** y_j enthalten Meßfehler ($j = 1, \dots, m$)
- **Gesucht:** Funktion $F : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$ so daß **Approximationsfehler**

$$\eta_j = F(x_j) - y_j$$

für alle $j = 1, \dots, m$ möglichst gering

- **Annahme:** F lässt sich darstellen als Summe von Basisfunktionen f_i ,

$$F(x) = \sum_{i=1}^n c_i f_i(x)$$

Notizen

26

Wahl der Basisfunktionen

- Wahl der Basisfunktionen f_i für F :
 - typische Wahl: $f_i(x) = x^{i-1}$, dann

$$F(x) = c_1 + c_2x + c_3x^2 + \dots + c_nx^{n-1}$$

(Polynom in x vom Grad $n - 1$)

- auch oft mit $n = 2$, dann

$$F(x) = c_1 + c_2x$$

(Gerade) auch genannt **lineare Regression**

- im Fall von Tomographie: Pixel- oder Voxel-Basisfunktionen

Notizen

27

Matrix-Notation

- für die verschiedenen Datenpunkte $x_j, j = 1, \dots, m$, kann F geschrieben werden als:

$$\begin{pmatrix} F(x_1) \\ \vdots \\ F(x_m) \end{pmatrix} = \underbrace{\begin{pmatrix} f_1(x_1) & \cdots & f_n(x_1) \\ \vdots & & \vdots \\ f_1(x_m) & \cdots & f_n(x_m) \end{pmatrix}}_{=:A} \underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix}}_{=:c}$$

mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, c \in \mathbb{R}^n$.

- untersucht wird dann der **Approximationsfehler** η

$$\eta = Ac - y$$

mit $\eta = (\eta_1, \dots, \eta_m) \in \mathbb{R}^m, y = (y_1, \dots, y_m) \in \mathbb{R}^m$.

Notizen

28

Daten mit Meßfehler

- ist $m = n$ und A invertierbar, so kann direkt

$$Ac - y = 0$$

gelöst werden

- Problem:**
 - selbst wenn A invertierbar ist, y enthält Meßfehler
 - Lösung F ist dann meist **nicht** die **gewünschte** Lösung
 - passt sich zu sehr an "Ausreisser" an
- besser:** mehr Datenpunkte, $m \gg n$

Notizen

29

Minimierung des Approximationsfehlers

- zur Minimierung des Approximationsfehlers kann z.B. die Norm $\|\eta\|$ betrachtet werden

$$\|\eta\| = \left(\sum_{j=1}^m \eta_j^2 \right)^{\frac{1}{2}}$$

- zur Vereinfachung betrachtet man üblicherweise

$$\|\eta\|^2 = \|Ac - y\|^2 = \sum_{j=1}^m \left(\sum_{i=1}^n a_{ji} c_i - y_j \right)^2$$

- daher der Name: Methode der kleinsten Quadrate oder Least squares

Notizen

30

Least-squares Lösung

Least-squares Lösung

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $y \in \mathbb{R}^m$ mit $m \geq n$. Eine Lösung $c \in \mathbb{R}^n$ des Minimierungs-Problems

$$\min_c \|Ac - y\| \quad \text{or} \quad \min_c \|Ac - y\|^2$$

heißt Least-squares Lösung.

Anwendungs-Beispiele:

- Tracking von Objekten mit Kameras
- Kalibrierung von Kameras, Robotern, etc.
- Iterative Rekonstruktion für Tomographie

Notizen

31

Normalengleichung

- Berechnung der **Least-squares Lösung** mit Standard-Technik "Ableitung gleich Null setzen"
- hier: partielle Ableitungen für $k = 1, \dots, n$

$$\frac{\partial \|\eta\|^2}{\partial c_k} = \sum_{j=1}^m 2 \left(\sum_{i=1}^n a_{ji} c_i - y_j \right) a_{jk} = 0$$

- daraus folgt

$$(Ac - y)^T A = 0 \quad \Leftrightarrow \quad A^T (Ac - y) = 0$$

- umgeformt ergibt sich

$$A^T Ac = A^T y$$

auch genannt die **Normalengleichung**.

Notizen

32

Normalengleichung

Normalengleichung

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $y \in \mathbb{R}^m$ mit $m \geq n$. $c \in \mathbb{R}^n$ ist eine Least-squares Lösung von $\min_c \|Ac - y\|$ genau dann, wenn die **Normalengleichung** gilt,

$$A^T Ac = A^T y.$$

Insbesondere ist die Normalengleichung lösbar, falls $\text{rank}(A) = n$.

- die Matrix $A^T A$ ist immer **symmetrisch**
- falls $\text{rank}(A) = n$ ist $A^T A$ auf **positiv definit** und damit invertierbar
- die Lösung der Normalengleichung ist dann

$$c = ((A^T A)^{-1} A^T) y$$

Notizen

33

Pseudoinverse

Pseudoinverse

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ mit $m \geq n$ und $\text{rank}(A) = n$. Die Matrix

$$A^+ := (A^T A)^{-1} A^T$$

heißt **Pseudoinverse** von A (auch **Moore-Penrose Inverse** genannt).

- die Pseudoinverse verallgemeinert das Konzept der Inversen für nicht-quadratische Matrizen
- ist A invertierbar, dann gilt $A^+ = A^{-1}$

Notizen

Beispiel: Least squares Problem 1

- **Gegeben:** 5 Datenpunkte

$$(x_1, y_1) = (-1, 2), \quad (x_2, y_2) = (1, 1), \quad (x_3, y_3) = (2, 1)$$

$$(x_4, y_4) = (3, 0), \quad (x_5, y_5) = (5, 3)$$

- **Gesucht:** quadratisches Polynom

$$F(x) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2$$

Notizen

Beispiel: Least squares Problem 2

- Aufstellen der Matrix A :

$$A = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 \\ 1 & x_2 & x_2^2 \\ 1 & x_3 & x_3^2 \\ 1 & x_4 & x_4^2 \\ 1 & x_5 & x_5^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 2 & 4 \\ 1 & 3 & 9 \\ 1 & 5 & 25 \end{pmatrix}$$

- Berechnen der Pseudoinversen A^+ :

$$A^+ = \begin{pmatrix} 0,500 & 0,300 & 0,200 & 0,100 & -0,100 \\ -0,388 & 0,093 & 0,190 & 0,193 & -0,088 \\ 0,060 & -0,036 & -0,048 & -0,036 & 0,060 \end{pmatrix}$$

- Lösen nach c :

$$c = \begin{pmatrix} 1,200 \\ -0,757 \\ 0,214 \end{pmatrix}$$

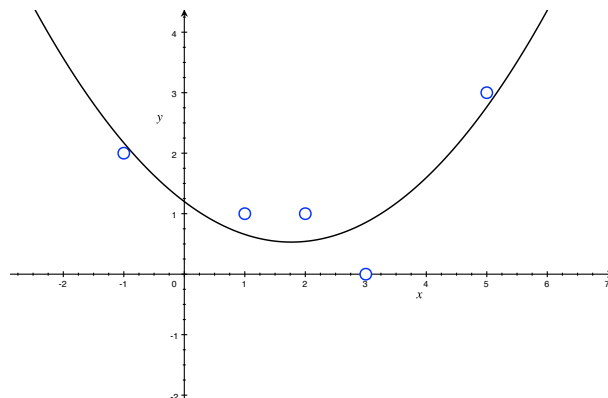
Notizen

36

Beispiel: Least squares Problem 3

Lösung:

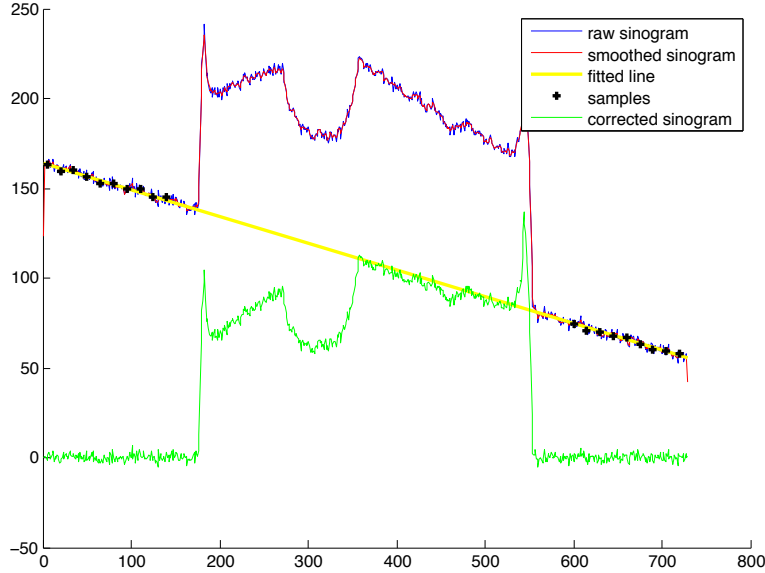
$$F(x) = 1,200 - 0,757x + 0,214x^2$$



Notizen

37

Anwendungsbeispiel Tomographie



Notizen

Zusammenfassung

- 7 Fortgeschrittene Datenstrukturen
- 8 Such-Algorithmen
- 9 Graph-Algorithmen
- 10 Numerische Algorithmen
 - Matrizen
 - Lineare Gleichungen
 - Least Squares Probleme

Notizen
