Algorithmen und Datenstrukturen (für ET/IT)

Sommersemester 2018

Dr. Stefanie Demirci

Computer Aided Medical Procedures
Technische Universität München

Organisatorisches

- Achtung: Änderung im Vorlesungsplan (siehe Webseite)
- keine Zentralübung am Mi!
- Tutorübungen finden aber wie geplant statt!

Programm heute

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

Wiederholung: LUP Zerlegung

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 $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$, so dass

$$PA = LU.$$

- Aufwand: $\sim \frac{2n^3}{3}$ FLOPs
- Lösung von $Ax = b$: betrachte $PAx = Pb \Leftrightarrow LUx = Pb$,
  - löse $Lz = Pb$ mit Vorwärts-Substitution nach z auf
  - löse $Ux = z$ mit Rückwärts-Substitution nach x auf

LUP-Zerlegung: Beispiel

- Lineares Gleichungssystem:

$$Ax = b,$$

mit

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

- LUP Zerlegung:

$$PA = LU$$

mit

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

LUP-Zerlegung: Beispiel (Forts.)

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

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

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

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

Die LU und LUP Zerlegung

LU Zerlegung:

- Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ invertierbar und seien $|a_{ii}| >> 0$ für alle $i = 1, \ldots, n$).
- 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

$$PA = LU.$$

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 $A' \in \mathbb{R}^{n-1 \times n-1}$.

Berechnung der LU Zerlegung 2

- Faktorisierung von A:

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

  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.

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 $A' - vw^T/a_{11} = L'U'$
- Vorsicht: $a_{11} \neq 0$ ist notwendig, ebenso für Rekursionsschritte $\rightarrow$ ok, da $\|a_{ii}\| >> 0$

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: $\Theta(n^3)$

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):

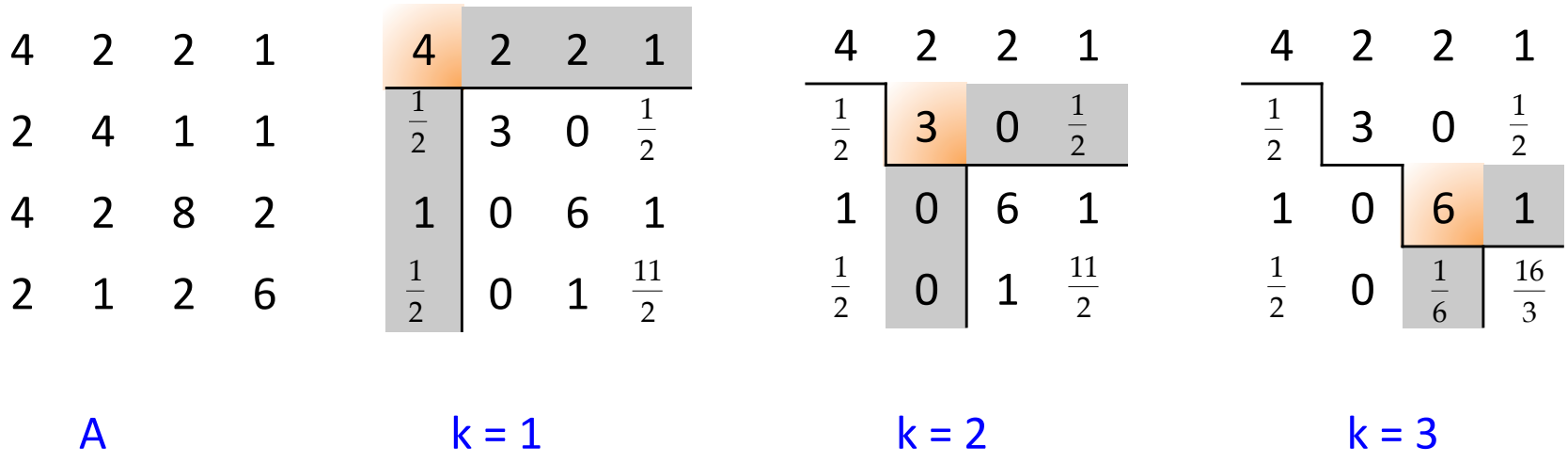
```
U = 0; L = I_n;
for k = 1 to n {
    u_kk = a_kk;
    for i=k+1 to n {
        l_ik = a_ik/u_kk; // entspricht v_k
        u_ki = a_ki; // entspricht w_i^T
    }
    for i = k+1 to n {
        for j = k+1 to n {
            a_ij = a_ij - l_ik u_kj;
        }
    }
}
```

- 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

Beispiel-Ablauf: LU Zerlegung

- **LU-Zerlegung**(A) mit in place Optimierung:



- Ergebnis:

$$\begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 1 \\ 2 & 4 & 1 & 1 \\ 4 & 2 & 8 & 2 \\ 2 & 1 & 2 & 6 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ \frac{1}{2} & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ \frac{1}{2} & 0 & \frac{1}{6} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 4 & 2 & 2 & 1 \\ 0 & 3 & 0 & \frac{1}{2} \\ 0 & 0 & 6 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & \frac{16}{3} \end{pmatrix}$$

LU vs. LUP Zerlegung

- Problem bei LU Zerlegung: Division durch a_{ii}
  - a_{ii} kann 0 sein (vermieden durch A diagonal dominant)
  - a_{ii} kann sehr klein sein, verursacht numerische Instabilitäten

- Lösung: vertauschen von Zeilen, so dass $a_{ii} \neq 0$ und groß
  - ist elementare Zeilenumformung, ändert also Lösung von Gleichungssystem nicht
  - dargestellt als Permutationsmatrix $P \in \mathbb{R}^{n \times n}$ so dass

$$PA = LU$$

  also LUP Zerlegung oder LU Zerlegung mit partiellem Pivoting

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:

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

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

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_{ii} steht
  - Bedingung A diagonal dominant ist nicht 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

$$\begin{aligned} v &= (a_{21}, a_{31}, \ldots, a_{k-1,1}, a_{11}, a_{k+1,1}, \ldots, a_{n1})^T \\ w^T &= (a_{k2}, a_{k3}, \ldots, a_{kn}) \end{aligned}$$

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

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

Berechnung der LUP Zerlegung 3

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

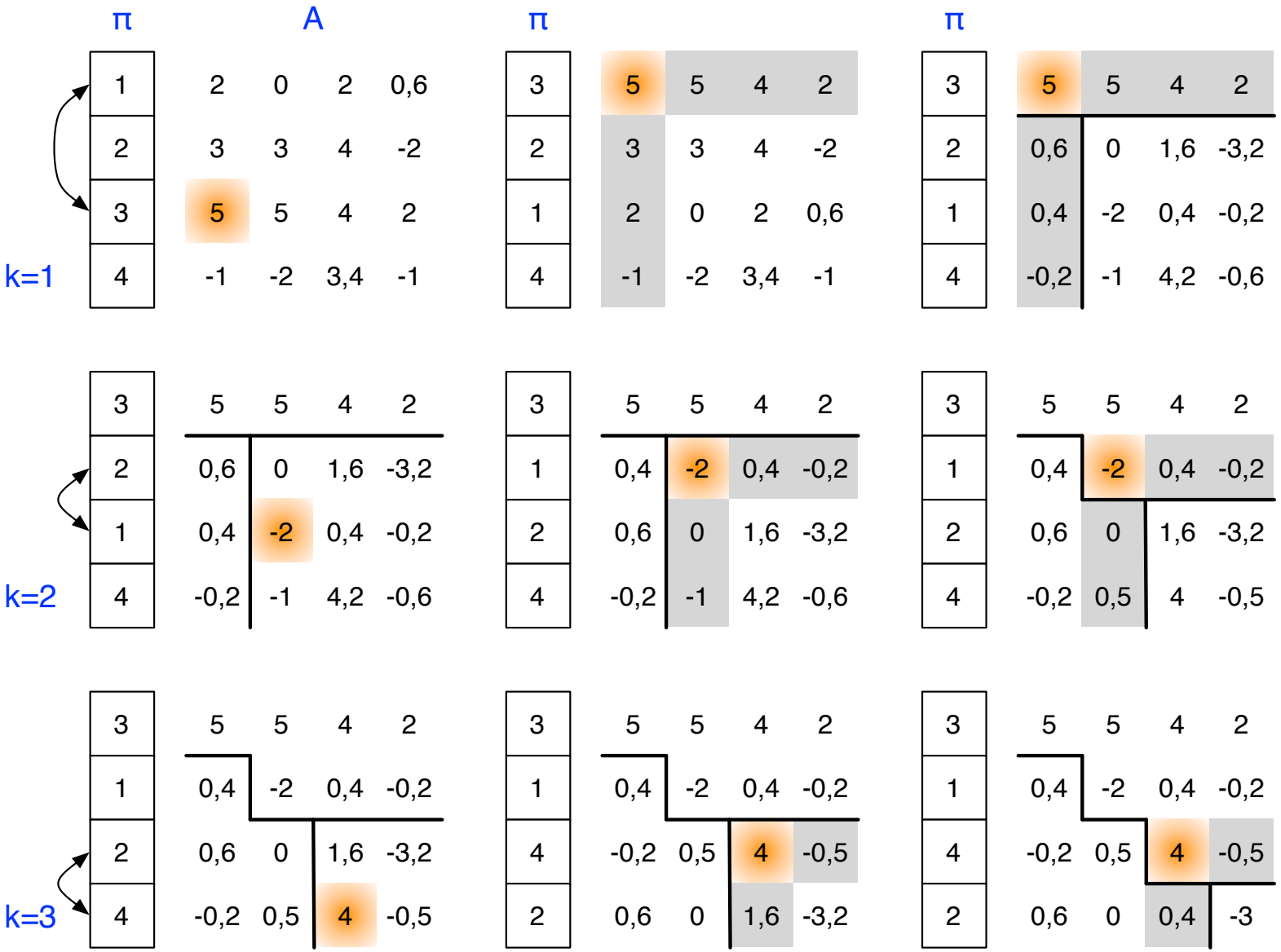
Algorithmus LUP Zerlegung

Input: Matrix $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$
Output: Matrizen L, U direkt in A, 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 (|a_ik| > p)
            p = |a_ik|; k' = i;
    }
    if (p == 0) error("Matrix singulär");
    vertausche π[k] mit π[k'];
    for i = 1 to n
        vertausche a_ki mit a_k'i;
    for i = k + 1 to n {
        a_ik = a_ik / a_kk;
        for j = k + 1 to n
            a_ij = a_ij − a_ik a_kj;
    }
}
```

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

Beispiel-Ablauf: LUP Zerlegung



Beispiel-Ablauf: LUP Zerlegung 2

- Ergebnis von **LUP-Zerlegung:**

3	5	5	4	2
1	0,4	-2	0,4	-0,2
4	-0,2	0,5	4	-0,5
2	0,6	0	0,4	-3

- bzw. $PA = LU$ mit

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 2 & 0 & 2 & 0,6 \\ 3 & 3 & 4 & -2 \\ 5 & 5 & 4 & 2 \\ -1 & -2 & 3,4 & -1 \end{pmatrix} =$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0,4 & 1 & 0 & 0 \\ -0,2 & 0,5 & 1 & 0 \\ 0,6 & 0 & 0,4 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & 5 & 4 & 2 \\ 0 & -2 & 0,4 & -0,2 \\ 0 & 0 & 4 & -0,5 \\ 0 & 0 & 0 & -3 \end{pmatrix}$$

Anwendung der LU(P) Zerlegung

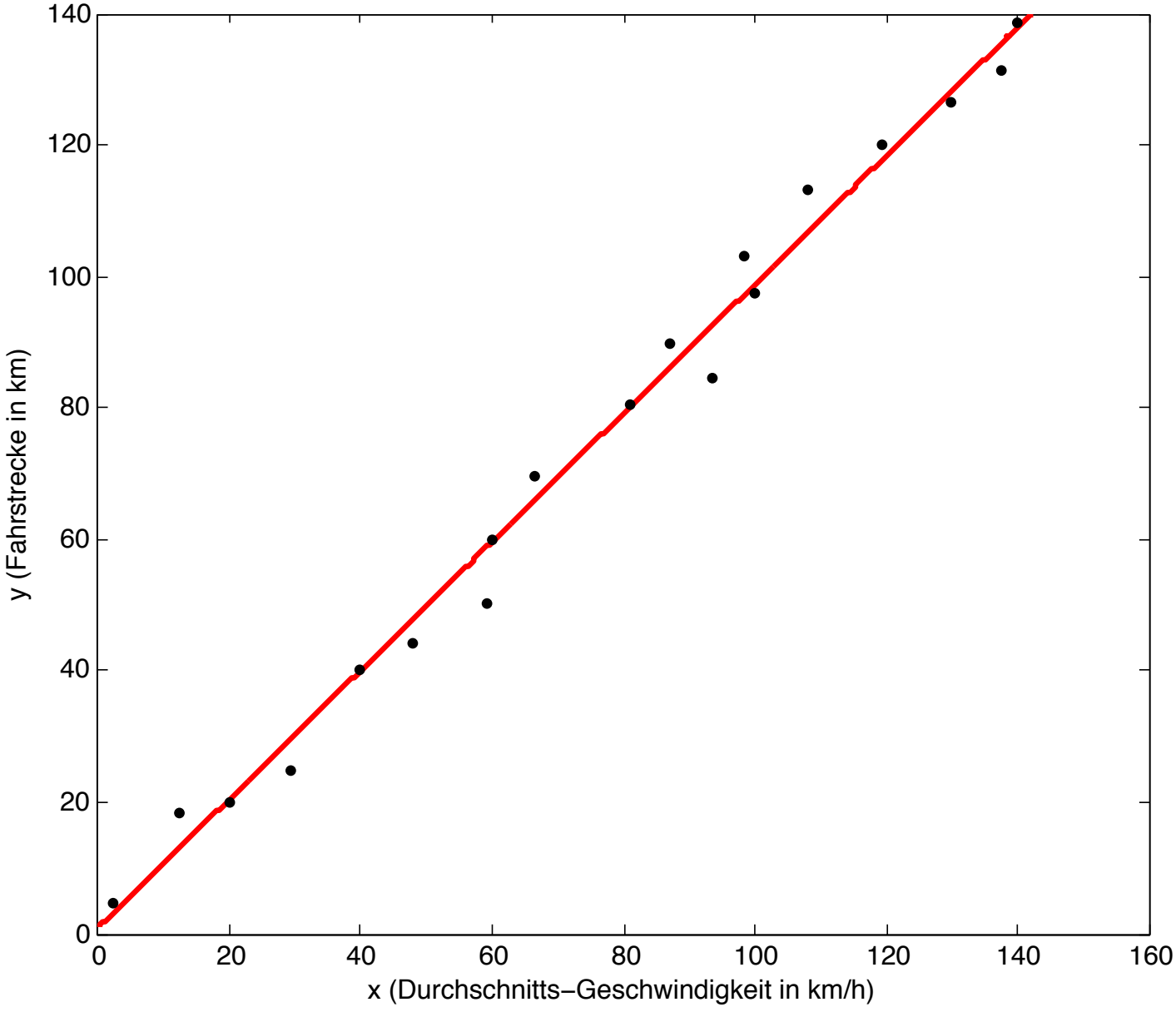
- Lösen von linearen System $Ax = b$ mittels:
  - $PAx = Pb \Leftrightarrow LUx = Pb$
  - löse $Lz = Pb$ mit Vorwärts-Substitution nach z auf
  - löse $Ux = z$ mit Rückwärts-Substitution nach x auf

- Berechen von Inverser von $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$
  - Matrix-Gleichung $AX = I_n$ mit $X = (X_1, \ldots, X_n) \in \mathbb{R}^{n \times n}$
  - berechne $PA = LU$
  - löse $AX_i = e_i$ nach X_i mit LUP-Zerlegung für $i = 1, \ldots, n$ (e_i i-ter Einheitsvektor)
  - am Ende: $X = A^{-1}$
  - Aufwand: $\Theta(n^3)$

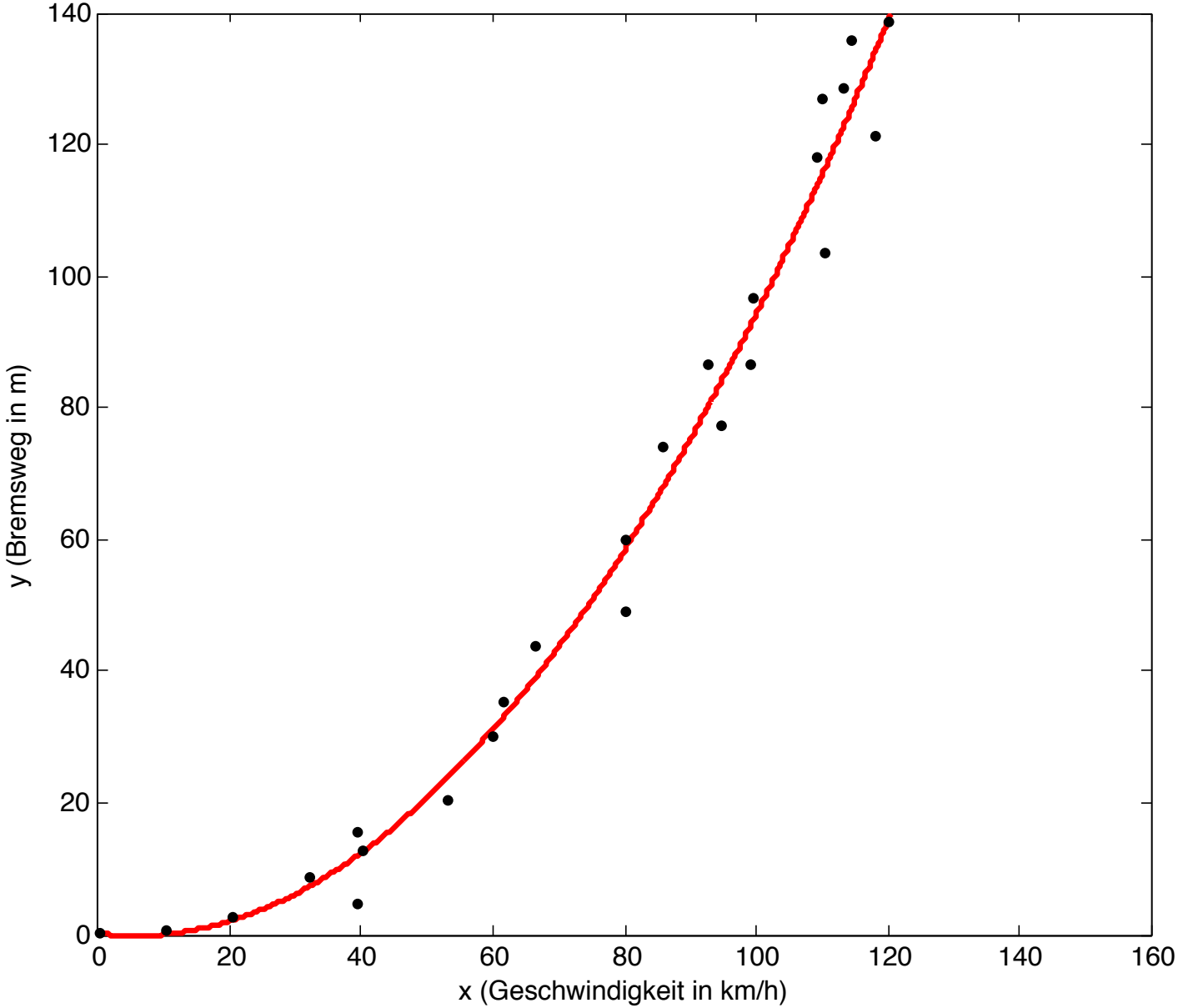
Programm heute

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

Beispiel-Problem: Geschwindigkeit vs. Fahrstrecke



Beispiel-Problem: Geschwindigkeit vs. Bremsweg



Problemstellung Least Squares

- Gegeben: Datenreihe mit m Datenpunkten

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

  mit $x_j, y_j \in \mathbb{R}$ für $j = 1, \ldots, m$
- Erwartung: y_j enthalten Messfehler ($j = 1, \ldots, m$)
- Gesucht: Funktion $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ so dass Approximationsfehler

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

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

Problemstellung Least Squares

- Gegeben: Datenreihe mit m Datenpunkten

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

  mit $x_j, y_j \in \mathbb{R}$ für $j = 1, \ldots, m$
- Erwartung: y_j enthalten Messfehler ($j = 1, \ldots, m$)
- Gesucht: Funktion $F : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ so dass Approximationsfehler

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

  für alle $j = 1, \ldots, m$ möglichst gering
- Annahme: F lässt sich darstellen als Summe von Basisfunktionen f_i,

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

Wahl der Basisfunktionen

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

$$F(x) = c_1 + c_2 x + c_3 x^2 + \ldots + c_n x^{n-1}$$

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

  - auch oft mit $n = 2$, dann

$$F(x) = c_1 + c_2 x$$

    (Gerade) auch genannt lineare Regression

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

Matrix-Notation

- für die verschiedenen Datenpunkte x_j, $j = 1, \ldots, m$, 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 $\eta = (\eta_1, \ldots, \eta_m) \in \mathbb{R}^m$, $y = (y_1, \ldots, y_m) \in \mathbb{R}^m$.

Daten mit Meßfehler

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

$$Ac - y = 0$$

gelöst werden.

$\neq 0$ immer !

- 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, $m >> n$

Minimierung des Approximationsfehlers

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

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

- 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

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

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

heißt Least-squares Lösung.

Anwendungs-Beispiele:

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

Normalengleichung

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

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

- daraus folgt

$$\nabla \|\eta\|^2 = A^T (Ac - y) = 0$$

- umgeformt ergibt sich

$$A^T A c = A^T y$$

auch genannt die Normalengleichung.

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:

$$A^T A c = A^T y$$

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

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:

$$A^T A c = A^T y$$

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

- Die Matrix $A^T A$ ist immer symmetrisch.
- Falls $\text{rank}(A) = n$ ist $A^T A$ auch positiv definit und damit invertierbar
- Die Lösung der Normalengleichung ist dann

$$c = \left((A^T A)^{-1} A^T\right) y.$$

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 $A^+ = A^{-1}$.

Algorithmen zur Berechnung der Pseudoinversen 1

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

- Option 1: QR Methode
  - berechne QR-Zerlegung $A = QR$, dann (Q ug. orthogonal) $\Rightarrow Q^T Q = I$

$$A^T A = (QR)^T (QR) = R^T Q^T QR = R^T R$$

  - löse die Matrix-Gleichung nach A^+

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T \Leftrightarrow (A^T A) A^+ = A^T \Leftrightarrow (R^T R) A^+ = A^T$$

mittels Vorwärts- und Rückwärts-Substitution.

A^+ wird spaltenweise berechnet.

Algorithmen zur Berechnung der Pseudoinversen 2

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

- Option 2: SVD Methode
  - berechne SVD-Zerlegung $A = U\Sigma V^T$, dann

$$A^T A = V\Sigma U^T U\Sigma V^T = V\Sigma^2 V^T$$

  - berechne $(A^T A)^{-1}$

$$(A^T A)^{-1} = V\Sigma_+^{-2} V^T,$$

wobei $\Sigma_+^{-2} = \mathrm{diag}(1/\sigma_1^2, \ldots, 1/\sigma_k^2, 0, \ldots, 0)$
mit k größter Index so dass $\sigma_k > 0$

  - berechne A^+

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T = V\Sigma_+^{-2} V^T V\Sigma U^T = V\Sigma_+^{-1} U^T$$

Beispiel: Least squares Problem 1

y nicht genau

- 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

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

Beispiel: Least squares Problem 2

- Aufstellen der Matrix A: Vandermonde-Matrix

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

- Berechnen der Pseudoinversen A^+:

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

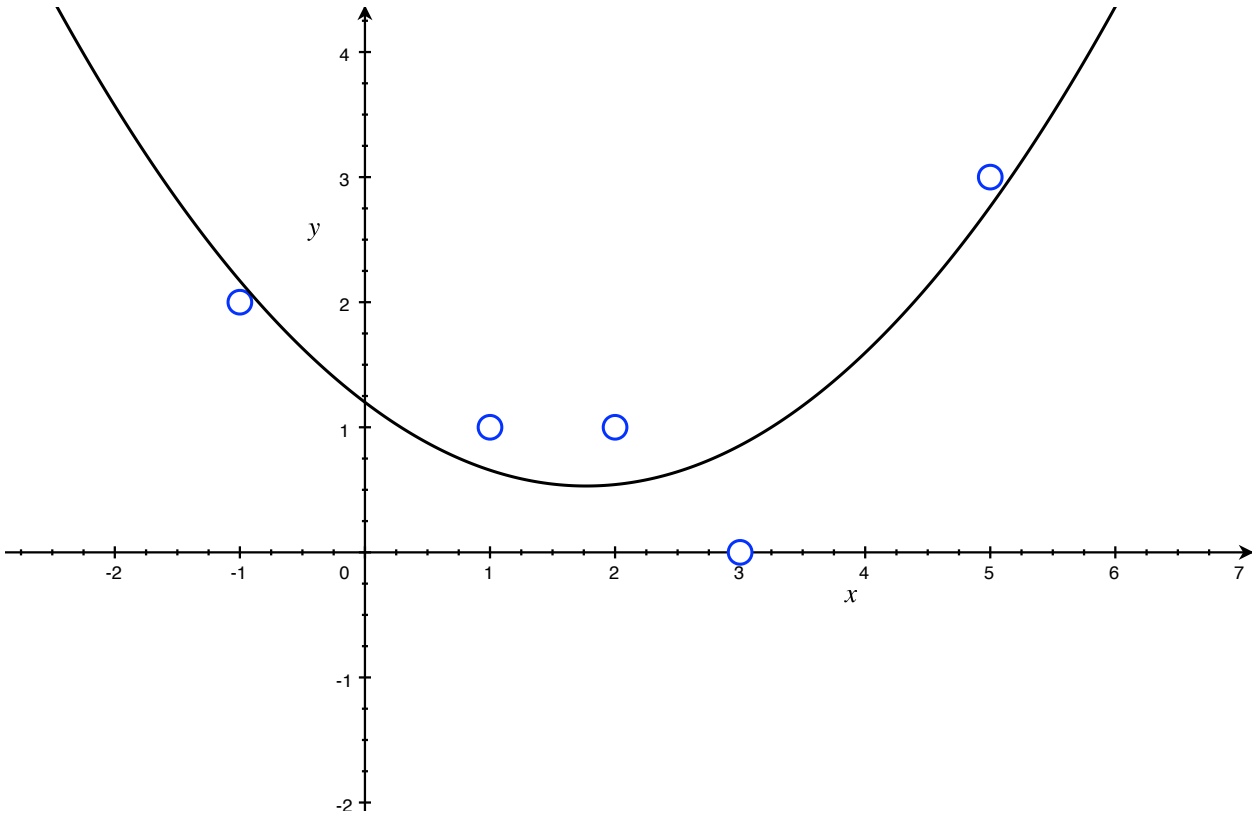
- Lösen nach c:

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

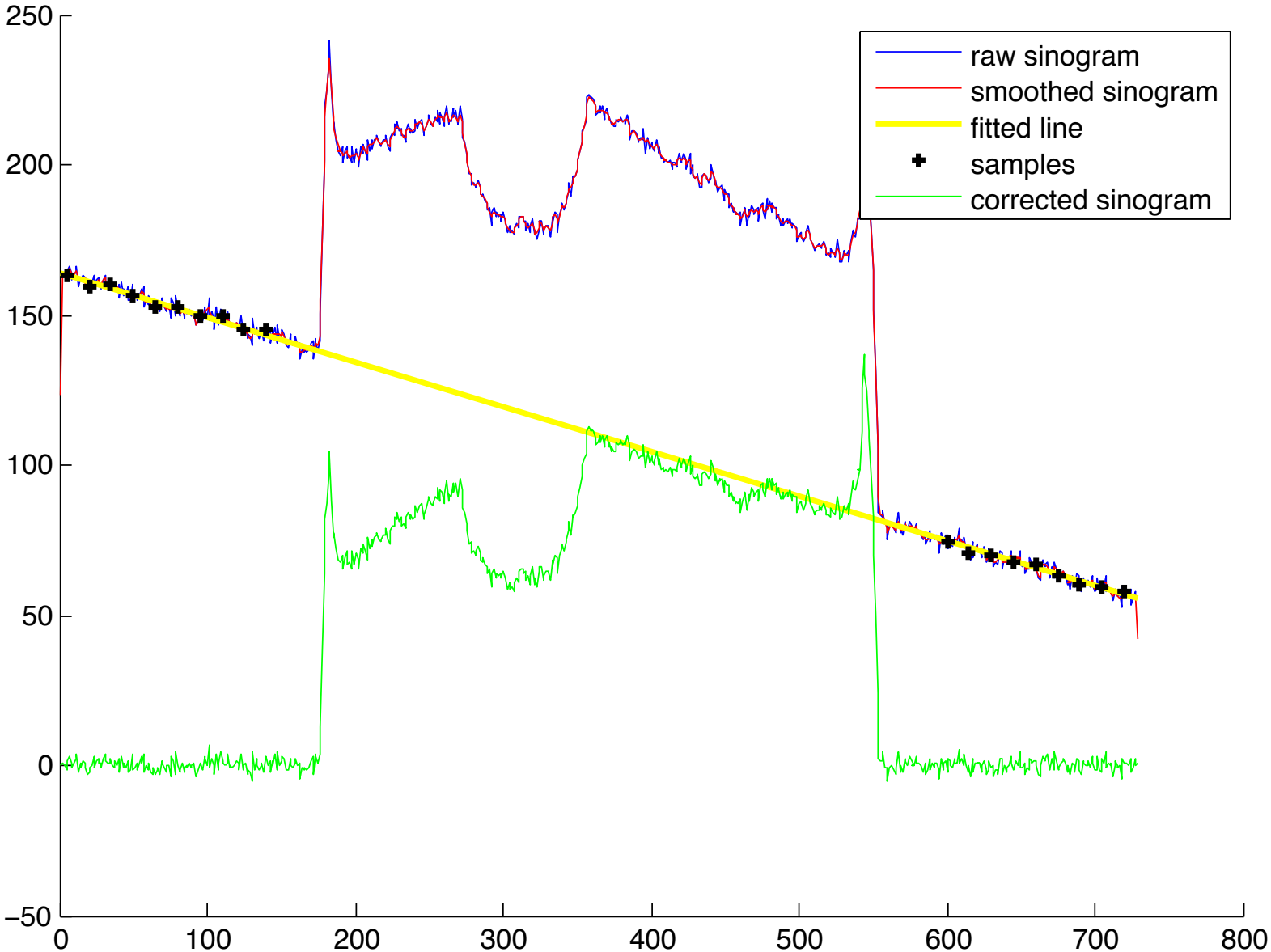
Beispiel: Least squares Problem 3

Lösung:

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



Anwendungsbeispiel Tomographie



Zusammenfassung

7. Fortgeschrittene Datenstrukturen

8. Such-Algorithmen

9. Graph-Algorithmen

10. Numerische Algorithmen
    - Matrizen
    - Lineare Gleichungen
    - Die LUP-Zerlegung
    - Least Squares Probleme