

Einführung in die Grundlagen der Numerik (WS 22/23)

Manuel Hinz

25. Oktober 2022

Inhaltsverzeichnis

1	Orthogonalität	3
1.1	Grundlegende Definitionen	3
1.2	Bestapproximationseigenschaft	4
1.3	Orthonormalbasen	5
2	Das lineare Ausgleichsproblem	7
2.1	Problemstellung und Normalengleichung	7
2.2	Methode der Orthogonalisierung	9
2.3	Grundüberlegungen zu Orthogonalisierungsverfahren	10
2.4	QR -Zerlegung mittels Givens-Rotationen	11
2.5	QR -Zerlegung mittels Householder-Transformationen	13
2.6	Pseudoinverse	14
3	Iterative Verfahren für große, dünn besetzte, Gleichungssysteme	18
3.1	Motivation	18
3.2	Grundidee von Projektionsmethoden	19

Vorwort

Diese Mitschrift von der Vorlesung Einführung in die Grundlagen der Numerik (Dölz, WS 2022/2023) wird von mir neben der Vorlesung geschrieben und ist dementsprechend Fehleranfällig. Fehler gerne an mh@mssh.dev!

Kapitel 1

Orthogonalität

1.1 Grundlegende Definitionen

Definition 1.1. Sei X ein \mathbb{R} -Vektorraum und $\langle \cdot, \cdot \rangle : X \times X \rightarrow \mathbb{R}$ eine Abbildung. $\langle \cdot, \cdot \rangle$ heißt **Skalarprodukt** oder inneres Produkt, falls

$$\forall f \in X \setminus \{0\} : \langle f, f \rangle > 0 \quad (\text{Positivität})$$

$$\forall f, g \in X : \langle f, g \rangle = \langle g, f \rangle \quad (\text{Symmetrie})$$

$$\forall \alpha, \beta \in \mathbb{R}, f, g, h \in X : \langle \alpha f + \beta g, h \rangle = \alpha \langle f, h \rangle + \beta \langle g, h \rangle \quad (\text{Linearität im ersten Argument})$$

Bemerkung 1.2. Symmetrie und Linearität im ersten Argument implizieren, dass $\langle \cdot, \cdot \rangle$ eine bilineare Abbildung ist.

Definition 1.3. Sei X ein \mathbb{R} -Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Wir bezeichnen die zugehörige **Norm** (in Abhängigkeit von einem Vektor $f \in X$) mit

$$\|f\| = \sqrt{\langle f, f \rangle}.$$

Lemma 1.4. Sei X ein \mathbb{R} -Vektorraum mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Dann gilt die Cauchy-Schwarz-Ungleichung:

$$\forall f, g \in X : \langle f, g \rangle \leq \|f\| \cdot \|g\| \quad (\text{C.S.})$$

mit Gleichheit genau dann, wenn f und g linear abhängig sind.

Beweis. O.B.d.A. $f, g \neq 0$, da sonst offensichtlich Gleichheit gilt. Sei $\alpha \neq 0$, dann gilt mit $f, g \in X$ und $\alpha \in \mathbb{R}$:

$$0 \leq \|f - \alpha g\|^2 = \langle f - \alpha g, f - \alpha g \rangle = \|f\|^2 - 2\alpha \langle f, g \rangle + \alpha^2 \|g\|^2$$

Wählen wir jetzt $\alpha = \frac{\langle f, g \rangle}{\|g\|^2}$ folgt:

$$\begin{aligned} 0 &\leq \|f\|^2 - \frac{2\langle f, g \rangle^2}{\|g\|^2} + \frac{\langle f, g \rangle^2}{\|g\|^2} \\ &\implies \langle f, g \rangle^2 \leq \|f\|^2 \cdot \|g\|^2. \end{aligned}$$

□

Eingefügte Bemerkung. Rechnung zur Begründung von $\langle f - \alpha g, f - \alpha g \rangle = \|f\|^2 - 2\alpha \langle f, g \rangle + \alpha^2 \|g\|^2$:

$$\begin{aligned} &\langle f - \alpha g, f - \alpha g \rangle \\ &= \langle f, f - \alpha g \rangle - \alpha \langle g, f - \alpha g \rangle \\ &= \langle f, f \rangle - \alpha \langle f, g \rangle - \alpha \langle g, f \rangle + \alpha^2 \langle g, g \rangle \\ &= \|f\|^2 - 2\alpha \langle f, g \rangle + \alpha^2 \|g\|^2 \end{aligned}$$

Beispiel 1.5. 1. $X = \mathbb{R}^n$ und $\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^n x_i y_i$ (Euklidisches Skalarprodukt)

2. $X = \mathbb{R}^n$, $\langle x, y \rangle = x^\top A y$, wobei A positiv definit und symmetrisch ist

3. $I = [a, b]$, $w : I \rightarrow \mathbb{R}$ beschränkt und strikt positiv:

$$X = \left\{ f : I \rightarrow \mathbb{R} : \int_a^b f(x)^2 w(t) dt < \infty \right\} = L^2(I, w)$$

mit

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b f(t)g(t)w(t)dt$$

Eingefügte Bemerkung. Die Definition von $L^2(I, w)$ ist hier nicht ganz richtig, man müsste natürlich noch Äquivalenzklassen, bzgl. Gleichheit bis auf Nullmengen, bilden. Dies wird hier, da Analysis 3 / Wtheo. nicht nicht vorausgesetzt wird, ignoriert.

Definition 1.6. Sei X ein \mathbb{R} -VR mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$. $f, g \in X$ heißen **orthogonal**, falls $\langle f, g \rangle = 0$.

Bemerkung 1.7. Im \mathbb{R}^n mit dem euklidischen Skalarprodukt stimmt Definition 1.6, wegen

$$\langle x, y \rangle = \|x\| \|y\| \cos(\theta), \theta = \angle(x, y),$$

mit unserem bisherigen Verständnis überein.

1.2 Bestapproximationseigenschaft

Definition 1.8. Sei V ein \mathbb{R} -VR mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ und U ein Unterraum.

$$U^\perp = \{v \in V : \langle v, u \rangle = 0, \forall u \in U\}$$

heißt das **orthogonale Komplement** von U .

Satz 1.9. Unter den Annahmen von Definition 1.8 und der zusätzlichen Annahme, dass U endlich dimensional ist, gilt folgendes für $v \in V$:

$$\|v - u\| = \min_{w \in U} \|v - w\|$$

genau dann, wenn $v - u \in U^\perp$.

Beispiel 1.10. $V = \mathbb{R}^2$, $U = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \right\}$ mit euklidischem Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$. Dann ist $U^\perp = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}$.

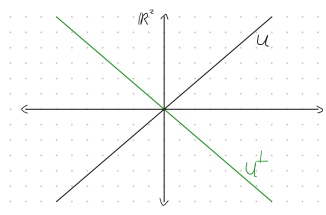


Abbildung 1.1: U und U^\perp

Beweis von Satz 1.9. Sei $v \in V$ und seien $u, w \in U$. Dann gilt:

$$\begin{aligned} \|v - w\|^2 &= \langle v - w, v - w \rangle = \langle (v - u) + (u - w), (v - u) + (u - w) \rangle \\ &= \|v - u\|^2 + 2 \underbrace{\langle v - u, u - w \rangle}_{\in U} + \|u - w\|^2 \geq \|v - u\|^2 \end{aligned}$$

mit Gleichheit genau dann, wenn $w - u = 0$ (da dann der $\|u - w\|$ Term verschwindet). □

Bemerkung 1.11. Der Satz sagt, dass es zu jedem $v \in V$ ein eindeutiges, bestmögliches $u \in U$ gibt.

Definition 1.12. Die Lösung aus Satz 1.9 heißt **orthogonale Projektion** von v auf U . Die Abbildung

$$P : V \rightarrow U, v \mapsto P(v) \text{ mit } \|v - Pv\| = \min_{w \in U} \|v - w\|$$

ist linear und wird **orthogonale Projektion** genannt.

Eingefügte Bemerkung (Beweis der Linearität). Für $v_1, v_2 \in V$ und $\alpha \in \mathbb{R}$ gilt:

$$\begin{aligned} v_1 - Pv_1 &\in U^\perp \\ v_2 - Pv_2 &\in U^\perp \end{aligned}$$

Daher

$$\alpha(v_1 - Pv_1) + (v_2 - Pv_2) = (\alpha v_1 + v_2) - (\alpha Pv_1 + Pv_2) \in U^\perp.$$

Aber dann muss $\alpha Pv_1 + Pv_2$ schon, wegen der Eindeutigkeit, $P(\alpha v_1 + v_2)$ sein.

Bemerkung 1.13. Satz 1.9 gilt auch, wenn U durch $W = w_0 + U$ ersetzt wird. Die orthogonale Projektion ist analog definiert..

Frage: Die Orthogonale Projektion hat offenbar gute Eigenschaften. Aber: wie berechnen wir sie? Wie wählen wir U ?

- Berechnung ist leicht
- U wählen schwierig

1.3 Orthonormalbasen

Definition 1.14. Sei X ein \mathbb{R} -VR mit Skalarprodukt $\langle \cdot, \cdot \rangle$ und $X_n \subset X$ ein endlich dimensionaler Teilraum mit Basis $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$. Die Basis heißt **Orthogonalbasis**, falls

$$\forall i \neq j : \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = 0$$

gilt und Orthonormalbasis (ONB), falls zusätzlich $\|\varphi_i\| = 1$ gilt. Das impliziert:

$$\langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \delta_{i,j}.$$

Beispiel 1.15. 1. \mathbb{R}^n mit euklidischem Skalarprodukt und kanonischer Basis

2. $X = L^2(I, 1)$ mit entsprechendem Skalarprodukt und X_n der Raum der trigonometrischen Polynome bis Grad n . Dann ist folgendes eine ONB:

$$\left\{ \frac{1}{\sqrt{2\pi}}, \frac{\sin(x)}{\sqrt{\pi}}, \frac{\cos(x)}{\sqrt{\pi}}, \dots, \frac{\sin(nx)}{\sqrt{\pi}}, \frac{\cos(nx)}{\sqrt{\pi}} \right\}$$

Eingefügte Bemerkung. Trigonometrische Polynome sind Funktionen der Form

$$f(t) = \sum_{k=1}^n a_k \cos(kx) + b_k \sin(kx).$$

Die größte Faktor vor dem x ist der Grad eines trigonometrischen Polynoms.

Satz 1.16. Sei $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$ eine ONB von $X_n \subset X$. Dann gilt

$$1. f = \sum_{i=1}^n \langle \varphi_i, f \rangle \varphi_i$$

2. $\|f\|^2 = \sum_{i=1}^n \langle \varphi_i, f \rangle^2$

3. Die orthogonale Projektion f_n von $f \in X \setminus X_n$ ist gegeben durch

$$f_n = \sum_{i=1}^n \langle \varphi_i, f \rangle \varphi_i$$

4. im Fall von 3.:

$$\|f_n\|^2 = \sum_{i=1}^n \langle \varphi_i, f \rangle^2 \leq \|f\|^2$$

Beweis. 1.:

$$\begin{aligned} f \in X_n &\implies \exists \alpha_i \in \mathbb{R} : f = \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i \\ \implies \langle \varphi_i, f \rangle &= \langle \varphi_i, \sum_{j=1}^n \alpha_j \varphi_j \rangle = \sum_{j=1}^n \alpha_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle = \alpha_i \end{aligned}$$

2.:

$$\begin{aligned} \|f\|^2 &= \langle f, f \rangle \\ &= \left\langle \sum_{i=1}^n \alpha_i \varphi_i, \sum_{j=1}^n \alpha_j \varphi_j \right\rangle = \sum_{i,j=1}^n \alpha_i \alpha_j \delta_{i,j} = \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 \end{aligned}$$

3.:

$f \in X \setminus X_n$:

$$\begin{aligned} \|f - \underbrace{\tilde{f}_n}_{\in X_n}\| &= \left\langle f - \sum_{i=1}^n \tilde{\alpha}_i \varphi_i, f - \sum_{i=1}^n \tilde{\alpha}_i \varphi_i \right\rangle \\ &= \|f\|^2 - 2 \sum_{i=1}^n \tilde{\alpha}_i \underbrace{\langle \varphi_i, f \rangle}_{=\alpha_i} + \sum_{i,j=1}^n \alpha_i \alpha_j \langle \varphi_i, \varphi_j \rangle \\ &= \|f\|^2 - \sum_{i=1}^n \tilde{\alpha}_i \alpha_i + \sum_{i=1}^n \tilde{\alpha}_i^2 \stackrel{\text{Quadratische Ergänzung}}{=} \|f\|^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i^2 + \sum_{i=1}^n \underbrace{(\alpha_i - \tilde{\alpha}_i)^2}_{\geq 0} \end{aligned} \quad (1.1)$$

Dies wird minimiert, wenn $\tilde{\alpha}_i = \alpha_i$ ist.

4.:

$f \in X_n$ wurde in 2. gezeigt. Sonst:

$f \notin x_n \implies$ mit $\alpha_i = \tilde{\alpha}_i$ in (1.1) :

$$0 \leq \|f - f_n\|^2 = \|f\|^2 - \sum_{i=1}^n \underbrace{\alpha_i^2}_{\langle \varphi_i, f \rangle^2}$$

Es folgt die Behauptung. □

Vorteile von Orthogonalität:

- Bestapproximation
- Einfache Basisdarstellung

Kapitel 2

Das lineare Ausgleichsproblem

2.1 Problemstellung und Normalengleichung

Gegeben seien Punkte $(t_i, b_i) \in \mathbb{R}^2$ mit $i = 1, \dots, m$. Wir nehmen an, dass es eine Gestzmäßigkeit im Sinne eines parameterabhängigen Modelles

$$b_i = b(t_i) = b(t_i; \underbrace{x_1, \dots, x_n}_{\text{Parameter}}),$$

wobei die Parameter x_1, \dots, x_n unbekannt seien, gibt. In der Praxis sind die Messungen zusätzlich mit Fehlern behaftet und das Modell gilt nur approximativ. Zusätzlich gibt es oft mehr Messungen als Parameter, d.h. $m > n$.

Frage: Gegeben die Messungen, können wir zugehörige Parameter bestimmen?

Annahme: b ist linear in den Parametern, d.h. es gibt Funktionen

$$a_i : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$$

s.d.

$$b(t; x_1, \dots, x_n) = a_1(t)x_1 + \dots + a_n(t)x_n.$$

Idee: Formuliere ein lineares Gleichungssystem:

$$b_i \approx b(t_i; x_1, \dots, x_n) = a_1(t_i)x_1 + \dots + a_n(t_i)x_n, i = 1, \dots, m$$

kurz $Ax \approx b$ mit $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, x \in \mathbb{R}^n, b \in \mathbb{R}^m$.

Problem: Durch Modell- und Messfehler gilt das Gleichungssystem nur ungefähr, und wir mehr Gleichungen als Unbekannte ("das Gleichungssystem ist überbestimmt"). Wir können unser Gleichungssystem also im Allgemeinen nicht lösen.

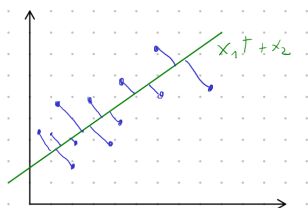


Abbildung 2.1: Datenpunkte und approximierte Gerade

Beispiel 2.1.

Idee: Finde Parameter, sodass das Modell "bestmöglich" mit den Messpunkten übereinstimmt, d.h. finde $(x_1, \dots, x_n)^t = x \in \mathbb{R}^n$ s.d.:

$$\|Ax - b\| = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|Ay - b\| \quad (2.1)$$

Definition 2.2. Die Gleichung (2.1) heißt **lineares Ausgleichsproblem**. Der Term $Ax - b$ heißt **Residuum**.

Bemerkung: $V = \mathbb{R}^m, U = \text{Bild}(A) \subset V, \dim(\text{Bild}(A)) \leq n \leq m$
Grundannahme

Statte V mit euklidischem Skalarprodukt aus.

$\xRightarrow{\text{Satz 1.9}}$ Es gibt genau ein $Ax \in \text{Bild}(A)$ so, dass

$$\|Ax - b\| = \min_{w \in U} \|w - b\|$$

gilt.

Aber: Wie berechnen wir x ?

Satz 2.3. Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, b \in \mathbb{R}^m, m \geq n, x \in \mathbb{R}^n$ ist genau dann eine Lösung von (2.1) bezüglich der euklidischen Norm, falls

$$A^t Ax = A^t b. \quad (2.2)$$

Insbesondere ist das lineare Ausgleichsproblem genau dann lösbar, falls $\text{rang}(A) = n$.

Beweis.

$$\begin{aligned} \|Ax - b\| &= \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|Ay - b\| \\ &\xLeftrightarrow{\text{Satz (1.9)}} Ax - b \in U^\perp = \text{Bild}(A)^\perp \\ &\iff \forall y \in \mathbb{R}^n : \langle Ax - b, Ay \rangle = 0 \\ &\iff \forall y \in \mathbb{R}^n : \langle A^t Ax - A^t b, y \rangle = 0 \\ &\iff A^t Ax = A^t b \end{aligned}$$

Die letzte Gleichung ist genau dann invertierbar, wenn $A^t A$ vollen Rang hat, also wenn A vollen Rang (n) hat. \square

Bemerkung 2.4. Im beweis verwenden wir, dass $Ax - b$ orthogonal zu $U = \text{Bild}(A)$,

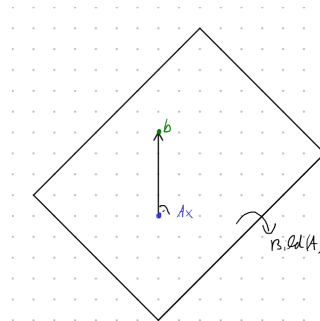


Abbildung 2.2: Hyperebene und Projektion

d.h. eine Normale zur Hyperebene $\text{Bild}(A)$ im \mathbb{R}^m , ist. Deshalb heißt (2.2) auch **Normalengleichung**.

Bemerkung 2.5. Für $m = n$ und $\text{rang}(A) = n$ ist die Lösung des linearen Ausgleichsproblems exakt (im mathematischen Sinne).

Satz 2.6. Für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ ist $A^t A$ symmetrisch und positiv semidefinit. Falls $m \geq n$ ist $A^t A$ genau dann positiv definit, wenn $\text{rang}(A) = n$.

Beweis. • Symmetrisch: klar

• positiv semidefinit:

$$\forall x \in \mathbb{R}^n : x^t (A^t A) x = (Ax^t)(Ax) = \|Ax\|_2^2 \geq 0$$

- positiv definit: $\text{rang}(A) = n \implies Ax = 0 \iff x = 0 \implies \|Ax\|_2 = 0 \iff x = 0 \implies \text{Behauptung.}$

□

Einfachste Möglichkeit zur Lösung von (2.2): Berechne $A^t A$, $A^t b$, löse LGS mittels Cholesky. Kosten sind ungefähr:

$$\frac{n^2 m}{2} + m \cdot n + \frac{n^3}{6} + \frac{n^2}{2} + \frac{n^2}{2} \approx \frac{mn^2}{2} \text{ für } m \gg n.$$

Eingefügte Bemerkung. Anmerkung vom Dozent: $A^t A$ eig. immer schlecht zu berechnen.

Aber: Dieser Vorgang ist schlechter konditioniert als das lineare Ausgleichsproblem:

Eingeschobene Definition / Wiederholung

$$\text{cond}(A) = \|A\| \|A^{-1}\|$$

$$\|A\| = \max_{\|x\|=1} \|Ax\|$$

Falls $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ spd (symmetrisch, positiv definit) gilt $\text{cond}_2((A^t A)) = \text{cond}_2(A)^2$.

Für $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$ gelten ähnliche Überlegungen, siehe Deuffhard & Hohmann.

Beispiel 2.7. Sei $A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{bmatrix}$ mit $\epsilon > \underbrace{\epsilon}_{\text{Maschinenengenauigkeit}}, \epsilon^2 < \epsilon$.

$$\implies A^t A = \begin{bmatrix} 1 + \epsilon^2 & 1 \\ 1 & 1 + \epsilon^2 \end{bmatrix} \stackrel{\text{im Computer}}{=} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}$$

$\implies A^t A$ ist im Computer singular, obwohl A vollen Rang hat!

Idee / Wunsch: Gebe einen Algorithmus an, der das lineare Ausgleichsproblem löst und nur auf A arbeitet.

2.2 Methode der Orthogonalisierung

Definition 2.8. Eine Matrix $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ heißt **orthogonal**, wenn $Q^t Q = I$, d.h. falls die Spalten von Q eine ONB bzgl. des euklidischen Skalarprodukts bilden. Schreibe $Q \in O(n)$.

Notation: $\langle \cdot, \cdot \rangle_2, \|\cdot\|_2$ für das euklidische Skalarprodukt / die euklidische Norm.

Lemma 2.9. Für alle $Q \in O(n)$ gilt

1. $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$ (Invarianz der Norm bzgl. orthogonaler Projektionen)

2. $\text{cond}_2(Q) = 1$

Beweis. 1.: $\|Qx\|_2^2 = \langle Qx, Qx \rangle_2 = \langle Q^t Qx, x \rangle_2 = \langle x, x \rangle_2 = \|x\|_2^2$

2.: $\|Q\|_2 = \max_{\|x\|_2=1} \|Qx\|_2 = 1$ und auch $\|Q^{-1}\|_2 = 1 \implies \text{Behauptung.}$

□

Satz 2.10. $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m \geq n, \text{rang}(A) = n$. Dann hat A eine QR-Zerlegung:

$$A = Q \begin{pmatrix} R \\ 0 \end{pmatrix}$$

wobei $Q \in O(m), R \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine obere Dreiecksmatrix ist.

Beweis. Schreibe das Gram-Schmidt-Orthogonalisierungsverfahren in Matrixform:

$$Q = \underbrace{\begin{bmatrix} A_n & \dots & A_2 & A_1 \end{bmatrix}}_{[B_n \dots B_1]} \underbrace{\begin{bmatrix} 1 & \dots & \dots & \dots & -\frac{\langle A_n, A_1 \rangle_2}{\|A_1\|_2^2} \\ & \ddots & & & \vdots \\ & & 1 & -\frac{\langle A_3, A_2 \rangle_2}{\|A_2\|_2^2} & -\frac{\langle A_3, A_1 \rangle_2}{\|A_1\|_2^2} \\ & & & 1 & -\frac{\langle A_2, A_1 \rangle_2}{\|A_1\|_2^2} \\ \mathbf{0} & & & & 1 \end{bmatrix}}_{R'} \underbrace{\begin{bmatrix} \frac{1}{\|B_1\|_2} & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & \frac{1}{\|B_n\|_2} \end{bmatrix}}_{R''}$$

$\Rightarrow Q \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $R'R''$ ist obere Dreiecksmatrix mit nicht-null Diagonaleinträgen

\Rightarrow invertierbar: $R = (R'R'')^{-1}$

$\Rightarrow QR = A$, wenn wir Q zu einer ONB von \mathbb{R}^m erweitern. □

— Ende von Vorlesung 02 am 13.10.2022 —

Satz 2.11. Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$, $\text{rang}(A) = n$, $b \in \mathbb{R}^n$. Sei $A = QR$ eine QR-Zerlegung von A und

$$\underbrace{Q^t A}_{=R} = Q^t b = \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} \quad \begin{matrix} \in \mathbb{R}^n \\ \in \mathbb{R}^{m-n} \end{matrix}.$$

Dann ist $x = R_1^{-1}b_1$ die Lösung des linearen Ausgleichsproblems, wobei $R_1 \in \mathbb{R}^{n \times n}$ der obere Teil von R ist.

Beweis.

$$\begin{aligned} \|Ax - b\|_2^2 &\stackrel{\text{Lemma 2.9}}{=} \|Q^t(Ax - b)\|_2^2 \\ &= \left\| \begin{bmatrix} R_1 x - b \\ b_2 \end{bmatrix} \right\|_2^2 = \|R_1 x - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2 \\ &\geq \|b_2\|_2^2 \end{aligned}$$

$n = \text{rang}(A) = \text{rang}(R) = \text{rang}(R_1) \Rightarrow R_1$ invertierbar \Rightarrow Behauptung □

Problem:

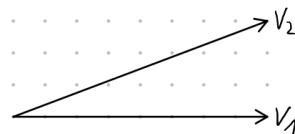


Abbildung 2.3: Problemstellung

$w_2 = v_2 - \frac{\langle v_2, v_1 \rangle_2}{\langle v_1, v_1 \rangle_2} v_1$ ist problematisch, falls $v_1 \approx v_2$ (Auslöschung). Beim Gram-Schmidt-Verfahren können Rundungsfehler auftreten. Es ist instabil.

Ziel: Stabiler Algorithmus um QR-Zerlegungen zu berechnen.

2.3 Grundüberlegungen zu Orthogonalisierungsverfahren

Problemstellung: Gegeben $v_1 = \alpha e_1 \in \mathbb{R}^2$, $v_2 \in \mathbb{R}^2$ transformiere v_2 auf $\tilde{w}_2 = \beta e_2$, gebe β an.

Gram-Schmidt: $\beta = \|w\|_2$

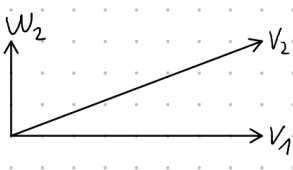


Abbildung 2.4: Gram-Schmidt

Drehungen: $\tilde{w}_2 = Qv_2$

$$Q = \begin{bmatrix} \cos(-\theta) & \sin(-\theta) \\ -\sin(-\theta) & \cos(-\theta) \end{bmatrix}$$

$$\beta = \|v_2\|_2$$

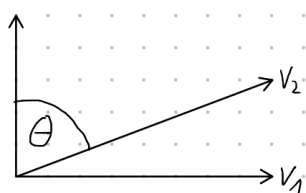


Abbildung 2.5: Drehungsansatz

Spiegelungen: $\tilde{w}_2 = Qv_2$, $Q = I - 2\frac{vv^t}{v^t v}$ und $\beta = \|v_2\|_2$

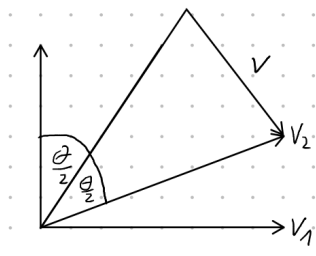


Abbildung 2.6: Spiegelungsansatz

Idee: Benutze orthogonale Transformationen Q_1, \dots, Q_n um $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\text{rang}(A) = n$, sukzessive zu reduzieren.

$$A \rightsquigarrow Q_1 A \rightsquigarrow Q_2 Q_1 A \rightsquigarrow \dots \rightsquigarrow \begin{bmatrix} R_1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Weil $\text{cond}_2(Q) = 1$ ist die Vorgehensweise stabil, bzw. gut konditioniert.

Aber: Wie wählen wir Q_1, \dots, Q_n ?

2.4 QR-Zerlegung mittels Givens-Rotationen

Definition 2.12. Eine Matrix der Form

$$\delta_{k,l} = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & c & & s & \\ & & & 1 & & \\ & & -s & & c & \\ & & & & & 1 & \\ & & & & & & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{bmatrix}$$

, wobei die s, c Einträge in der k, l ten Zeile / Spalte sind, heißen Givens-Rotationen.

Bemerkung: Für $c = \cos(\theta)$, $s = \sin(\theta)$ ist $\delta_{k,l}$ eine Drehung um θ in in der Koordinaten (k, l) . $\delta_{k,l}$ ist Orthogonal.

Frage: Wie wählen wir c, s ?

Gegeben $x \in \mathbb{R}^n$, eliminiere l te Koordinate zu 0.

$$\begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x_k \\ x_l \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} r \\ 0 \end{bmatrix}$$

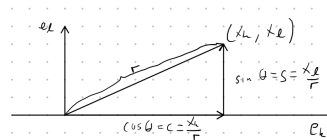


Abbildung 2.7: Trigonometriesetting

$$r^2 = x_k^2 + x_l^2 \implies \pm \sqrt{x_k^2 + x_l^2}$$

Aber: Diese Berechnungsweise ist nicht unbedingt stabil ($x_k \gg x_l$)

Stabile Variante:

$$\begin{aligned} \text{Falls } |x_l| > |x_k| &\implies \tau = \frac{x_k}{x_l}, s = \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}}, c = s\tau \\ \text{Sonst: } \tau = \frac{x_l}{x_k}, c &= \frac{1}{\sqrt{1+\tau^2}}, s = c\tau \end{aligned} \quad (2.3)$$

Beispielprozess:

$$\begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \end{bmatrix} \rightsquigarrow \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ * & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix} \rightsquigarrow \begin{bmatrix} * & * & * \\ * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & * & * \end{bmatrix} \rightsquigarrow \begin{bmatrix} * & * & * \\ 0 & * & * \\ 0 & 0 & * \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

Algorithm 2.13

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $m \geq n$

Output: R von der QR -Zerlegung (A wird zerstört "in place")

for $j = 1, \dots, n$ **do**

for $i = m, m-1, \dots, j+1$ **do**

 Berechne c, s wie in (2.3)

$$A[i-1:i, j:n] = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}^t A[i-1:i, j:n]$$

end for

end for

$m \approx n$:

c, s : In jedem Eintrag einmal Wurzeln ziehen: $\implies \frac{n^2}{2}$ Quadratwurzeln und $\frac{4n^3}{3}$ Multiplikationen

$m \gg n$: $m \cdot n$ Quadratwurzeln und $2m \cdot n^2$ Multiplikationen

Bemerkung 2.14. Der Algorithmus 2.4 berechnet nur R von der QR-Zerlegung. Zur Berechnung von Q müssten zusätzliche Operationen investiert werden um die Givens-Rotation auf I anzuwenden.

Für das lineare Ausgleichsproblem benötigen wir $Q^t b$, weshalb wir den Algorithmus auf $\begin{bmatrix} A & | & b \end{bmatrix}$ anwenden können (da $R = Q^t A$).

Bemerkung 2.15. Für $m = n$ ist die QR-Zerlegung eine (teure) Alternative zur LR-Zerlegung.

2.5 QR-Zerlegung mittels Householder-Transformationen

Definition 2.16. Für $v \in \mathbb{R}^n, v \neq 0$, heißt

$$Q = I - 2 \frac{\overbrace{vv^t}^{\in \mathbb{R}^{n \times n}}}{\underbrace{v^t v}_{\in \mathbb{R}}}$$

Householder-Transformation / Reflexion / Spiegelung.

Wichtig!

Nicht vv^t berechnen, das ist sehr uneffizient!

Für $a, v \in \mathbb{R}^n, v \neq 0$ ist $Qa = \left(I - 2 \frac{vv^t}{v^t v}\right) a = a - 2 \frac{\langle v, a \rangle_2}{\langle v, v \rangle_2} v$

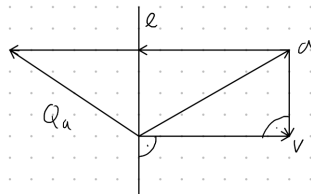


Abbildung 2.8: Householder-Transformationssetting

Qa ist a an l gespiegelt.

Lemma 2.17. Für eine Householder-Transformation $Q \in \mathbb{R}^{n \times n}$ gilt:

1. Q ist symmetrisch
2. Q ist orthogonal
3. Q ist involutionsch (eine Involution), d.h. $Q^2 = I$

Beweis. Nachrechnen. □

Frage: Gegeben $a \in \mathbb{R}^n$, wie müssen wir v wählen, so dass $Qa = \alpha e_1$ für $\alpha \in \mathbb{R}$?

Beobachte:

1. $|\alpha| = \|\alpha e_1\|_2 = \|Qa\|_2 = \|a\|_2$

$$2. \underbrace{a - 2 \frac{\langle v, a \rangle}{\langle v, v \rangle}}_{\in \mathbb{R}} v = Qa$$

$$\implies v \in \text{span}(\alpha e_1 - a) \implies \alpha = \pm \|a\|_2$$

$$\text{Vermeide Auslöschung} \implies \alpha = -\text{sign}(a_1) \cdot \|a\|_2$$

Effiziente Berechnung: Beobachte:

$$\begin{aligned} \|v\|_2^2 &= \langle v, v \rangle_2 = \langle a - \alpha e_1, a - \alpha e_1 \rangle_2 \\ &= \|a\|_2^2 - 2\alpha a_1 + \alpha^2 \\ &= -2\alpha(a_1 - \alpha) \\ \implies Qa &= a - 2 \frac{\langle v, a \rangle_2}{\|v\|_2^2} = a + \frac{\langle v, a \rangle_2}{\alpha(a_1 - \alpha)} v \end{aligned}$$

— Ende von Vorlesung 03 am 18.10.2022 —

Lemma 2.18. *Sie $\alpha \in \mathbb{R}^n, a \neq 0, a \notin \text{span}\{e_1\}$. Sei*

$$v = a - \alpha e_1, \alpha = -\text{sign}(a_1) \cdot \|a\|_2 \quad (2.4)$$

Dann ist

$$\left(I - 2 \frac{vv^t}{v^t v} \right) a = a + \frac{v^t a}{\alpha(a_1 - \alpha)} v = \alpha e_1. \quad (2.5)$$

Beweis. Siehe oben. □

Algorithm 2.19

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m \geq n$ “Mehr Zeilen als Spalten”

Output: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, obere rechte Dreiecksmatrix R , Rest Householder-Transformationen

for $j = 1, \dots, n$ **do**

Berechne v, α wie in (2.4), mit $a = A[j : m, j] \in \mathbb{R}^{m-j+1}$

$v = \frac{1}{v_1} v$

Berechne $A[j : m, j : n] = \left(I - \frac{vv^t}{v^t v} \right) A[j : m, j : n]$ wie in (2.5)

if $j < m$ **then**

$A[j+1:m, j] = v[2:m-j+1]$

end if

end for

▷ Iterieren über die Spalten

▷ Erster Eintrag wird nicht gespeichert, daher normalisieren wir

▷ Index startet von 1

Bemerkung 2.20. Die Skalierung $v = \frac{1}{v_1} v$ stellt sicher, dass die der erste Eintrag von v nicht gespeichert werden muss.

Aufwand: $m \sim n \rightsquigarrow \frac{2}{3}n^3$ Multiplikationen

$m \gg n \rightsquigarrow 2n^2m$ Multiplikationen

Schneller als Givensrotationen, stabiler als Normalengleichungen

2.6 Pseudoinverse

Ausgangspunkt: Wir wollen ein stabiles numerisches Verfahren, dass

$$Ax = b, A \in \mathbb{R}^{m \times n}, m \geq n, \text{rang}(A) = n, b \in \mathbb{R}^n$$

“lösen” kann, d.h. es gilt

$$\|Ax - b\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|Ay - b\|_2$$

Mathematisch können wir die Abbildung $b \mapsto x$, wegen der Normalengleichung (2.2), schreiben als

$$x = \underbrace{(A^t A)^{-1} A^t}_{:= A^\dagger} b = A^\dagger b$$

$A^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times m}$. Wegen $A^\dagger A = I$ heißt A^\dagger auch **Pseudoinverse**.

Frage: Können wir den Begriff der Inversen noch weiter verallgemeinern? Auf beliebige Matrizen?

Satz 1.9: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}, U = \text{Bild}(A)$

$$\begin{aligned} \implies \|Ax - b\|_2 &= \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|Ay - b\|_2 \xLeftrightarrow{\text{Satz 1.9}} Ax - b \in \text{Bild}(A)^\perp \\ \iff Ax - Pb - \underbrace{(b - Pb)}_{\in U^\perp: \text{Satz 1.9}} &\in \text{Bild}(A)^\perp, Pb \text{ ist die orthogonale Projektion von } b \text{ auf } U \\ \iff \underbrace{Ax}_{\in U} - \underbrace{Pb}_{\in U} &\in \text{Bild}(A)^\perp \\ \iff Ax = Pb \end{aligned}$$

Falls $\text{rang}(A) < n$ (z.B., falls $m < n$) ist $Ax = Pb$ nicht eindeutig lösbar (aber es existiert immer eine Lösung).

Für $\tilde{x} \in \mathbb{R}^n$ mit $A\tilde{x} = Pb, x' \in \ker(A)$ ist $A(\tilde{x} + x') = Pb$.

$$\begin{aligned} L(b) &= \left\{ x \in \mathbb{R}^n : \|Ax - b\|_2 = \min_{y \in \mathbb{R}^n} \|Ay - b\|_2 \right\} \\ &= \{x \in \mathbb{R}^n : Ax = Pb\} \\ &= \tilde{x} + \ker(A) \end{aligned}$$

Sind gewisse Lösungen sinnvoller als andere?

Wähle: $x \in \tilde{x} + \ker(A)$ mit minimaler Norm als "eindeutige" Lösung von $Ax = b$.

$$\begin{aligned} \xRightarrow{\text{Bem. 1.13}} \|x - 0\|_2 &= \min_{y \in \tilde{x} + \ker(A)} \|y - 0\|_2 \iff x \in (\tilde{x} + \ker(A))^\perp \\ &\iff x \in \ker(A)^\perp \end{aligned}$$

Anmerkung

Hier ist nicht ganz klar, was mit $(\tilde{x} + \ker(A))^\perp$ gemeint ist, da dies z.B. für $\ker(A) = \text{span}\{(0, 1)^t\}$ und $\tilde{x} = (1, 0)^t$ nur $\{0\}$ ist, was natürlich nicht der Intuition entspricht!

Statt der ursprünglichen Definition müssen wir hier wieder zurück schieben ($-\tilde{x}$ rechnen), was kein Problem ist, da wir o.B.d.A. $\tilde{x} \perp \ker(A)$ voraussetzen dürfen, bevor wir das Skalarprodukt berechnen!

Zum Beispiel ist also $v = (1, 0)^t$ im obigen Beispiel doch im orthogonalen Komplement, da $\langle v, \tilde{x} + u - \tilde{x} \rangle_2 = 0$ für $u \in \ker(A)$

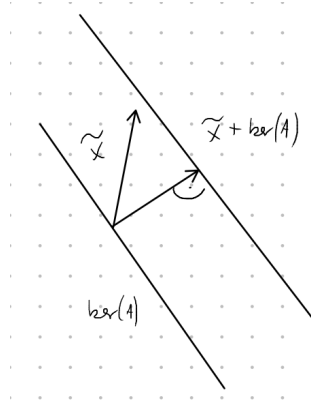


Abbildung 2.9: Setting

Bemerkung 2.21. Diese Wahl von x für $b \mapsto x$ ist linear: Für $b_1, b_2 \in \mathbb{R}^m$ ist:

$$\left. \begin{array}{l} Ax_1 = b_1 \quad x_1 \in \ker(A)^\perp \\ Ax_2 = b_2 \quad x_2 \in \ker(A)^\perp \end{array} \right\} \implies P(x_1 + x_2) = P(x_1) + P(x_2) = Ax_1 + Ax_2 = A(x_1 + x_2), x_1 + x_2 \in \ker(A)^\perp$$

Definition 2.22. Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Die Abbildungsmatrix $A^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times m}$ von $b \mapsto x$ heißt **Pseudoinverse** oder **Moore-Pensore-Inverse** von A . D.h. gegeben $b \in \mathbb{R}^n$, dann ist $x = A^\dagger b$ die eindeutige Lösung von

$$\min_{y \in \ker(A)^\perp} \|Ay - b\|_2 = \|Ax - b\|_2.$$

Satz 2.23. $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$. Dann ist $A^\dagger \in \mathbb{R}^{n \times m}$ eindeutig über die Moore-Penrose-Axiome definiert:

1. $(A^\dagger A)^t = AA^\dagger$
2. $(AA^\dagger)^t = A^\dagger A$
3. $A^\dagger AA^\dagger = A^\dagger$
4. $AA^\dagger A = A$

Beweis. Siehe Literatur oder später

□

Frage: Wie berechnen wir $x = A^\dagger b$?

Sei $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $\text{rang}(A) = p \leq \min(m, n)$. Bringe A mittels orthogonaler Transformationen (z.B. Householder) auf obere Dreiecksgestalt, d.h.:

$$Q^t A = \begin{bmatrix} R & S \\ * & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (2.6)$$

wobei $S \in \mathbb{R}^{p \times (n-p)}$. Setze Analog $x = \begin{bmatrix} x_1 \in \mathbb{R}^p \\ x_2 \in \mathbb{R}^{n-p} \end{bmatrix}$, $Q^t b = \begin{bmatrix} b_1 \in \mathbb{R}^p \\ b_2 \in \mathbb{R}^{m-p} \end{bmatrix}$

Lemma 2.24. Mit obigen Bezeichnungen ist $x = A^\dagger b$ genau dann, wenn

$$x_1 = R^{-1}b_1 - R^{-1}Sx_2.$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
\|Ax - b\|_2^2 &= \|Q^t(Ax - b)\|_2^2 \\
&= \left\| \begin{pmatrix} Rx_1 + Sx_2 - b \\ -b_2 \end{pmatrix} \right\|_2^2 \\
&= \|Rx_1 + Sx_2 - b_1\|_2^2 + \|b_2\|_2^2
\end{aligned}$$

ist minimal, falls $Rx_1 = b_1 - Sx_2$. □

Wir sehen $p = \text{rang}(A) = n \implies$ wie vorher, lineares Ausgleichsproblem!

Sonst: $x_2 = ?$

Lemma 2.25. Sei $p < n$, $V = R^{-1}S \in \mathbb{R}^{n \times (n-p)}$ und $u = R^{-1}b_1 \in \mathbb{R}^p$. Dann ist

$$\begin{aligned}
x &= A^\dagger b \\
&\iff (I + V^t V)x_2 = V^t u \\
x_1 &= u - Vx_2
\end{aligned}$$

Beweis.

$$\begin{aligned}
\|x\|_2^2 &= \|x_1\|_2^2 + \|x_2\|_2^2 \\
&\stackrel{\text{Lemma 2.24}}{=} \|u - Vx_2\|_2^2 + \|x_2\|_2^2 \\
&= \|u\|_2^2 - 2\langle u, Vx_2 \rangle_2 + \langle Vx_2, Vx_2 \rangle_2 + \langle x_2, x_2 \rangle_2 \\
&= \|u\|_2^2 + \langle x_2, (I + V^t V)x_2 - 2V^t u \rangle_2 = \varphi(x_2)
\end{aligned}$$

Minimiere $\varphi(x_2)$:

$$\begin{aligned}
\varphi'(x_2) &= -2V^t u + 2(I + V^t V)x_2 \\
\varphi'(x_2) &= 2(I + V^t V) \implies \text{spd}
\end{aligned}$$

φ minimal $\iff \varphi'(x_2) = 0 \implies$ Behauptung. □

Algorithm 2.26

Input: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$, $b \in \mathbb{R}^m$

Output: $x = A^\dagger b$

Berechne QR -Zerlegung (2.6) von A

$$\begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \end{bmatrix} = Q^t b$$

$V = R^{-1}S$ mittels Rückwertssubstitution

$u = R^{-1}b_1$ mittels Rückwertssubstitution

Löse $(I + V^t V)x_2 = V^t u$ mittels Cholesky-Zerlegung

$$x_1 = u - Vx_2$$

$$x = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \end{bmatrix}$$

—Ende von Vorlesung 04 am 20.10.2022—

Kapitel 3

Iterative Verfahren für große, dünn besetzte, Gleichungssysteme

3.1 Motivation

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d, d \in \mathbb{N}$. Betrachte die stationäre Wärmeleitungsgleichung, eine partielle Differenzialgleichung

$$\begin{cases} -\Delta u(x) = f(x) & x \in \Omega \\ u(x) = 0 & x \in \partial\Omega \end{cases} \quad (3.1)$$

mit Wärmequelle $f \in C(\Omega)$ und dem Laplace-Operator:

$$\Delta u = \sum_{i=1}^n \frac{\partial^2 u(x)}{\partial x_i^2}. \quad (3.2)$$

Die Lösung $u \in C^2(\Omega)$, falls existent, beschreibt die Temperaturverteilung im Raum Ω .

Diese Gleichung ist i.A. nicht von Hand lösbar!

Idee: Berechne approximative Lösung im Computer.

Ansatz: Für $g \in C^2(\mathbb{R})$ ist

$$\begin{aligned} g''(x) &= \lim_{h \searrow 0} \frac{g'(x+h) - g'(x)}{h} \approx \frac{g'(x+h) - g'(x)}{h} \\ &\approx \frac{\frac{g(x+h) - g(x)}{h} - \frac{g(x) - g(x-h)}{h}}{h} \\ &\approx \frac{g(x+h) - 2g(x) + g(x-h)}{h^2} \end{aligned}$$

\rightsquigarrow Ersetze $\frac{\partial^2 u}{\partial x_i^2}$ in (3.2)

\rightsquigarrow Überziehe Ω mit einem regelmäßigen Gitter mit Maschenweite $h = \frac{1}{n}, n \in \mathbb{N}$.

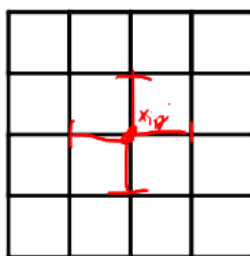


Abbildung 3.1: Gitter

Bezeichne die Gitterpunkte mit x_{ij} und $u_{ij} = u(x_{ij})$.

$$\stackrel{d=2}{\implies} \frac{1}{h^2} (4u_{ij} - u_{i+1j} - u_{i-1j} - u_{ij+1} - u_{ij-1}) = f_{ij} : i, j \in 1, \dots, n-1$$

$$u_{ij} = 0, i \in \{0, n\} \text{ oder } j \in \{0, n\}$$

Wir erhalten ein lineares Gleichungssystem mit $N = (n-1)^2$ Unbekannten und $O(1)$ Einträgen pro Zeile.
 $\implies A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ hat $O(N)$ Einträge. Wir haben das Lösen einer (linearen) partiellen Differentialgleichung durch das Lösen eines linearen Gleichungssystems ersetzt.

Beispiel 3.1. $\Omega = (0, 1)^2, n = 4 \implies h = \frac{1}{4}$. Erhalte:

$$\left[\begin{array}{ccc|cc} 4 & -1 & & -1 & & \\ -1 & 4 & -1 & & -1 & \\ & -1 & 4 & & & -1 \\ \hline -1 & & & 4 & -1 & \\ & -1 & & -1 & 4 & -1 \\ & & -1 & & -1 & 4 \\ \hline & & & -1 & & \\ & & & & -1 & \\ & & & & & -1 \end{array} \right] \begin{bmatrix} u_{11} \\ u_{12} \\ u_{13} \\ u_{21} \\ u_{22} \\ u_{23} \\ u_{31} \\ u_{32} \\ u_{33} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} f_{11} \\ f_{12} \\ f_{13} \\ f_{21} \\ f_{22} \\ f_{23} \\ f_{31} \\ f_{32} \\ f_{33} \end{bmatrix}$$

Aber: Um die Lösung von (3.1) gut zu approximieren ist oft $N \gg 1$ erforderlich. Für kleine bis mittlere N , d.h. in 2022 je nach Modell ~ 10 Millionen, sind graphenbasierte Löser eine Option.

Was tun für große N ?

Beobachtung: Matrix-Vektor-Multiplikation sind für dünn besetzte Matrizen in $O(N)$ berechenbar.

Frage: Wie bauen wir gute Löser für LGS (lineare Gleichungssysteme) nur unter Anwendung von Matrix-Vektor-Multiplikationen?

Idee: Benutze Orthogonalität um eine Bestapproximationseigenschaft zu erhalten.

3.2 Grundidee von Projektionsmethoden

Sei $A \in \mathbb{R}^{n \times n}, b \in \mathbb{R}^n$ und K, L Unterräume vom \mathbb{R}^n .

Idee: Finde eine approximative Lösung \tilde{x} zu $Ax = b$ mit

$$\tilde{x} \in K \text{ und } b - A\tilde{x} \perp_2 L$$

Kanonische Wahl: $L = AK$.

Falls wir eine Startnäherung x_0 zu x kennen, können wir \tilde{x} in $x_0 + K$ suchen:

Finde $\tilde{x} \in x_0 + K$ mit $b - A\tilde{x} \perp_2 L$

Beobachtung: $\tilde{x} \in x_0 + K \implies \exists d \in K : \tilde{x} = x_0 + d$

$$\implies \underbrace{b - A(x_0 + d)}_r \perp_2 L$$

$$\iff r_0 - Ad \perp_2 L$$

Eine approximative Lösung $\tilde{x} = x_0 + d$ muss also erfüllen:

$$\begin{cases} \tilde{x} = x_0 + d \\ \langle r_0 - Ad, w \rangle_2 = 0 \quad \forall w \in L \end{cases} \quad (3.3)$$

Idee: Wähle x_0, K, L , berechne $d \in K$ durch Lösen eines Unterproblems. Setze $x_1 = x_0 + d$, wähle neue Unterräume, beginne von vorne.

Wie implementieren wir diese Idee im Computer?

Sei $K = \text{span}\{v_1, \dots, v_n\}$, $L = \{w_1, \dots, w_n\}$

$V = [v_1 | \dots | v_n]$ und $W = [w_1 | \dots | w_n]$

(3.3) ist äquivalent zu

$$\begin{cases} \tilde{x} = x_0 + Vy & y \in \mathbb{R}^m \\ W_i^t AVy = W_i^t r_0 & i = 1, \dots, n \end{cases} \iff \underbrace{W^t AV}_{m \times m} y = W^t r_0 \quad (3.4)$$

$$\implies \tilde{x} = x_0 + V(W^t AV)^{-1} W^t r_0$$

Algorithm 3.2 Prototyp einer iterativen Projektionsmethode

Input: $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$, $b \in \mathbb{R}^n$, Fehlertoleranz α

Output: Näherung $x_{i+1} \approx x$

i=0

while Fehlertoleranz noch nicht erreicht **do**

 Wähle K_i, L_i

 Wähle Basen V, W von K_i, L_i

$r_1 = Ax_i$

$y = (W^t AV)^{-1} W^t r_i$

$x_{i+1} = x_i + Vy_i$

$i = i + 1$

end while

Aber: $W^t AV$ ist nicht notwendigerweise invertierbar:

Beispiel 3.3.

$$A = \left[\begin{array}{c|c} 0 & I \\ \hline I & I \end{array} \right] \in \mathbb{R}^{2m \times 2m}$$

$$K = L = \text{span}\{e_1, \dots, e_m\} \implies V = W = \left[\begin{array}{c} I_m \\ 0 \end{array} \right] \in K^{2m \times m}$$

$$\implies W^t AV = 0 \text{ ist nicht invertierbar.}$$

Lemma 3.4. Sei einer der folgenden Bedingungen erfüllt:

1. A ist spd, $K = L$

2. A invertierbar, $L = AK$

Dann ist $W^t AV$ für alle Basen von K, L invertierbar.

Beweis. 1.: $L = K \implies W = V\delta$ mit $\delta \in \mathbb{R}^{m \times m}$ invertierbar.
 $\implies B = W^t A V = \delta^t V^t A V$

$$0 < \underbrace{y^t A y}_{\substack{\text{spd, invertierbar}}}, y = Vx$$

2.: $L = AK \implies W = AV\delta, \delta \in \mathbb{R}^{m \times m}$ invertierbar

$$\implies B = W^t A V = \delta^t \underbrace{V^t A^t A V}_{\text{spd}} \implies \text{invertierbar} \implies \text{Beh.}$$

□

Ende von Vorlesung 05 am 25.10.2022