

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

Manuel Hinz

13. 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

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 $U^\perp = \text{span} \left\{ \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix} \right\}$.

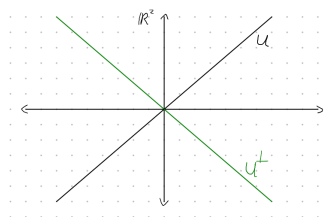


Abbildung 1.1: U und U^\perp

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:

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

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

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.

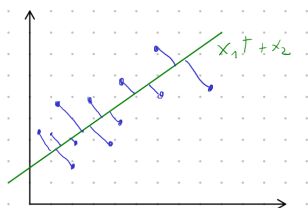


Abbildung 2.1: Datenpunkte und approximierte Gerade

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.:

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

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

Statt 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 $U = \text{Bild}(A)$,

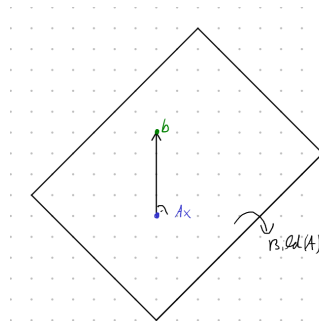


Abbildung 2.2: Hyperebene und Projektion

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:

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

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

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

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