Numerieke Benadering

Pieter Vanderschueren

Academiejaar 2024-2025

Inhoudsopgave

Lineaire Benaderingsproblemen

1 Benadering van vectoren

1.1 Terminologie

Definitie 1.1: Orthogonale en orthonormale basissen

We spreken van een orthogonale, respectievelijk orthonormale basis als de basisvectoren $\{a_1, \ldots, a_n\}$ orthogonaal, respectievelijk orthonormaal zijn. Als een basis niet orthogonaal is, spreken we van een scheve basis.

Definitie 1.2: Grammatrix

Voor een basis $\{a_1, \ldots, a_n\}$ van deelruimte $\mathcal{D}$ en twee vectoren $v, w \in \mathcal{D}$ ontbonden als

$$v = \sum_{i=1}^{n} \alpha_i a_i,\ \ w = \sum_{i=1}^{n} \beta_i a_i$$

geldt dat het inwendig product ($\langle v, w \rangle = v^* w$) van v en w gelijk is aan

$$\langle v, w \rangle = \left(\sum_{i=1}^{n} \alpha_i a_i^* \right) \left(\sum_{i=1}^{n} \beta_i a_i \right) = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \cdots & \alpha_n \end{bmatrix} \underbrace{\begin{bmatrix} \langle a_1, a_1 \rangle & \cdots & \langle a_1, a_n \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle a_n, a_1 \rangle & \cdots & \langle a_n, a_n \rangle \end{bmatrix}}_{G} \begin{bmatrix} \beta_1 \\ \vdots \\ \beta_n \end{bmatrix}$$

waarbij deze G de zogenaamde grammatrix is horende bij de basis $\{a_1, \ldots, a_n\}$.

Eigenschap 1.1: Grammatrix

- Is de basis orthogonaal, dan is de grammatrix diagonaal.
- Is de basis orthonormaal, dan is de grammatrix de eenheidsmatrix.

Definitie 1.3: Projector

Een projector is een matrix $P \in \mathbb{C}^{m \times m}$ die idempotent is, dit is $P^2 = P$. De meetkundige betekenis is als volgt. Matrix P projecteert een vector op de ruimte $\mathcal{R}(P)$, waarbij de richting bepaald wordt door de nullspace $\mathcal{N}(P)$.

Toepassing 1.1: Projector

Stel $v \in \mathbb{C}^m$ een willekeurige vector en $P \in \mathbb{C}^{m\times m}$ een projector, dan is $Pv \in \mathcal{R}(P)$ olgens de definitie van het bereik, en is $(I-P)v \in \mathcal{N}(P)$, omdat

$$P(I-P)v = (P-P^2)v \overset{\text{idempotent}}{=} (P-P)v = 0$$

We kunnen dus v ontbinden in componenten volgens $\mathcal{R}(P)$ en $\mathcal{N}(P)$ als

$$v = Pv + (I-P)v$$

Deze ontbinding is uniek.

Eigenschap 1.2: Projector

- Als $v \in \mathcal{R}(P)$, dan is $Pv = v$.
- Er geldt dat $\mathcal{R}(P) \cap \mathcal{N}(P) = \{0\}$.
- Er geldt dat $\dim(\mathcal{R}(P)) + \dim(\mathcal{N}(P)) = m$.
- De ontbinding in componenten volgens $\mathcal{R}(P)$ en $\mathcal{N}(P)$ is uniek.

Bewijs 1.1: Projector

- Als $v \in \mathcal{R}(P)$, dan $\exists u : v = Pu$, en dus is $Pv = P^2u = Pu = v$.
- Stel $x \in \mathcal{R}(P)$ en $x \in \mathcal{N}(P)$. Er volgt dat $x = Px = 0$.
- Dit volgt uit de eerste dimensiestelling en vorige eigenschap.
- Stel $v = x_1 + y_1 = x_2 + y_2$, met $x_1, x_2 \in \mathcal{R}(P)$ en $y_1, y_2 \in \mathcal{N}(P)$. Er geldt voor $i \in 1, 2$ dat $Pv = Px_i + Py_i = x_i$. Hieruit volgt dat $x_1 = x_2$.

$\square$

Definitie 1.4: Complementaire projector

Stel P een projector, dan is $\tilde{P} = I - P$ de **complementaire projector** van P. Hierbij geldt:

$$\mathcal{R}(P) = \mathcal{N}(I-P) = \mathcal{N}(\tilde{P}) \quad \text{en} \quad \mathcal{N}(P) = \mathcal{R}(I-P) = \mathcal{R}(\tilde{P}).$$

De ontbinding kan geschreven worden als

$$v = \underbrace{(I-\tilde{P})v}_{\in\mathcal{R}(P)} + \underbrace{\tilde{P}v}_{\in\mathcal{N}(P)}$$

Matrix $\tilde{P}$ projecteert dus op $\mathcal{N}(P)$ waarbij de richting bepaald wordt door $\mathcal{R}(P)$.

Definitie 1.5: Orthogonale projector

Een projector P is orthogonaal indien $\mathcal{R}(P)$ en $\mathcal{N}(P)$ onderling orthogonale ruimte zijn. Een prokector die niet orthogonaal is, noemen we een scheve projector.

Eigenschap 1.3: Orthogonale projector

Een projector P is orthogonaal als en alleen als $P = P^*$.

Bewijs 1.2: Orthogonale projector

"$\Rightarrow$": Beschouw een orthonormale basis $\{q_1, \ldots, q_n\}$ van $\mathcal{R}(P)$ en een orthonormale basis $\{q_{n+1}, \ldots, q_m\}$ van $\mathcal{N}(P)$. Omdat volgens de definitie beide ruimten orthogonaal zijn, volgt dat

$$Q = \begin{bmatrix} q_1 & \cdots & q_n & q_{n+1} & \cdots & q_m \end{bmatrix}$$

een unitaire matrix is. We verkrijgen:

$$PQ = \begin{bmatrix} q_1 & \cdots & q_n & 0 & \cdots & 0 \end{bmatrix} \Rightarrow Q^*PQ = \begin{bmatrix} I_n & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

Vermits Q^*PQ dus reëel is, geldt:

$$Q^*PQ = (Q^*PQ)^* = Q^*P^*Q$$

waaruit het gestelde volgt.

"$\Leftarrow$": Neem willekeurige $x = Pu \in \mathcal{R}(P)$ en $y \in \mathcal{N}(P)$. Dan is:

$$\langle x, y \rangle = x^*y = (Pu)^*y = u^*P^*vy = u^*Py = 0.$$

De ruimten $\mathcal{R}(P)$ en $\mathcal{N}(P)$ zijn dus orthogonaal. $\square$

1.2 QR-factorisatie

Algoritme 1.1: Gram-Schmidt orthogonalisatie

for $j = 1$ to n **do**
  $v_j = a_j$
  for $i = 1$ to $j-1$ **do**
    $r_{ij} = q_i^* a_j$
    $v_j = v_j - r_{ij} q_i \quad (= a_j - P_{<q_1,\dots,q_{j-1}>} a_j)$
  end for
  $r_{jj} = \|v_j\|_2$
  $q_j = v_j / r_{jj}$
end for

Algoritme 1.2: Gewijzigde Gram-Schmidt orthogonalisatie

for $j = 1$ to n **do**
  $v_j = a_j$
  for $i = 1$ to $j-1$ **do**
    $r_{ij} = q_i^* \boldsymbol{v_j} \quad (a_j \to v_j)$
    $v_j = v_j - r_{ij} q_i \quad (= (\mathbb{I} - P_{<q_{j-1}>}) \dots (\mathbb{I} - P_{<q_2>})(\mathbb{I} - P_{<q_1>}) a_j)$
  end for
  $r_{jj} = \|v_j\|_2$
  $q_j = v_j / r_{jj}$
end for

Toepassing 1.2: Herorthogonalisatie van Gram-Schmidt

De Gram-Schmidt orthogonalisatie is numeriek instabiel. Dit kan verholpen worden door herorthogonalisatie, hieronder twee varianten waarvan de eerste de meest gebruikte is.

1. **Stapsgewijze variant**:

$v_j = a_j$
for $j = 1$ to $j-1$ **do**
  $r_{ij} = q_i^* v_j$
  $v_j = v_j - r_{ij} q_i$
end for

$w_j = v_j$
for $i = 1$ to $j-1$ **do**
  $s_{ij} = q_i^* w_j$
  $v_j = v_j - s_{ij} q_i$
  $r_{ij} = r_{ij} + s_{ij}$
end for

2. **Simultane variant**: Na het berekenen van de onvolledige QR-factorisatie, die resulteert in factoren $\hat{Q}_1$ en $\hat{R}_1$ wordt het algoritme opnieuw toegepast met als input de eerste factor, wat resulteert in $\hat{Q}_1 \approx \hat{Q}_2\hat{R}_2$. We bepalen dan $\hat{Q} = \hat{Q}_2$ en $\hat{R} = \hat{R}_2\hat{R}_1$. Bij het gewijzigde algoritme van Gram-Schmidt (Algoritme 1.2) is dit meestal voldoende om orthogonaliteit van de kolommen van $\hat{Q}$ te garanderen, bij het standaard algoritme (Algoritme 1.1) is soms meermaals herhalen van deze procedure noodzakelijk.

Algoritme 1.3: QR-facrotisatie met Givens-rotaties

$Q = I$, $R = A$
for $j = 1$ to n **do**
  for $i = m$ downto $j + 1$ **do**
    $c = \frac{r_{(i-1)j}}{\sqrt{r_{(i-1)j}^2 + r_{ij}^2}}$, $s = \frac{r_{ij}}{\sqrt{r_{(i-1)j}^2 + r_{ij}^2}}$
    $r_{ij} = 0, \ \ r_{(i-1)j} = \sqrt{r_{(i-1)j}^2 + r_{ij}^2}$
    for $k = j + 1$ to n **do**
      $\begin{bmatrix} r_{(i-1)k} \\ r_{ik} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \overline{c} & \overline{s} \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{(i-1)k} \\ r_{ik} \end{bmatrix}$
    end for
    for $k = 1$ to m **do**
      $\begin{bmatrix} q_{k(i-1)} & q_{ki} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{k(i-1)} & q_{ki} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \overline{c} & \overline{s} \\ -s & c \end{bmatrix}$
    end for
  end for
end for

Algoritme 1.4: QR-facrotisatie met Householder-rotaties

$R = A$
for $j = 1$ to n **do**
  $x = R(j : m, j)$
  $v_j = x + \text{sign}(x_1)\|x\|_2\boldsymbol{e}_1$
  $v_j = v_j/\|v_j\|_2$
  $R_{jj} = -\text{sign}(x_1)\|x\|_2, \ \ R(j+1 : m, j) = 0$
  for $k = j + 1$ to n **do**
    $R(j : m, k) = R(j : m, k) - 2(v_j^* R(j : m, k))v_j$
  end for
end for
for $j = 1$ to m **do**
  $w = \boldsymbol{e}_i$
  for $k = n$ downto 1 **do**
    $w_{k:m} = w_{k:m} - 2(v_k^* w_{k:m})v_k$
  end for
  $Q(:, i) = w$
end for

1.3 Beste benadering van een vector in een deelruimte

Lemma 1.1: Beste benaderingsstelling

Een vector $\hat{y}$ is een beste benadering in deelruimte $\mathcal{D}$ voor b als $b - \hat{y}$ orthogonaal is ten opzichte van $\mathcal{D}$.

Bewijs 1.3: Beste benaderingsstelling

Neem een willekeurige $y \in \mathcal{D}$. Vermits $y - \hat{y} \in \mathcal{D}$ en dus orthogonal is ten opzichte van $b - \hat{y}$ geldt, volgens de stelling van Pythagoras:

$$\|b - y\|_2^2 = \|b - \hat{y}\|_2^2 + \|\hat{y} - y\|_2^2 \geq \|b - \hat{y}\|_2^2,$$

m.a.w. y benadert b niet beter dan $\hat{y}$. □

Lemma 1.2: Orthogonale projectiestelling

De beste benadering in deelruimte $\mathcal{D}$ voor vector b bestaat en is uniek. Ze wordt gegeven door de orthogonale projectie van b op $\mathcal{D}$, namelijk:

$$\hat{y} = P_{\mathcal{D}} y$$

met $P_{\mathcal{D}}$ de orthogonale projector op $\mathcal{D}$.

Bewijs 1.4: Orthogonale projectiestelling

Per definitie van een projector, kan b ontbonden worden als

$$b = \underbrace{P_{\mathcal{D}} b}_{\in \mathcal{R}(P_{\mathcal{D}})} + \underbrace{(I - P_{\mathcal{D}}) b}_{\in \mathcal{N}(P_{\mathcal{D}})}$$

waaruit volgt dat $b - \hat{y} = b - P_{\mathcal{D}} b \in \mathcal{N}(P_{\mathcal{D}}) = \mathcal{R}(P_{\mathcal{D}^\perp})$. Volgens de beste benaderingsstelling (Stelling 1.1) is $\hat{y}$ een beste benadering. De uniciteit volgt uit het voorgaande bewijs (Bewijs 1.3). □

Lemma 1.3: Normaalstelsel

Een vector $\hat{x}$ is een oplossing van het kleinste-kwadratenprobleem, namelijk

$$\min_{x \in \mathbb{C}^n} \|Ax - b\|_2,$$

als en alleen als $x = \hat{x}$ voldoet aan het zogenaamde normaalstelsel:

$$A^* A x = A^* b.$$

Bewijs 1.5: Normaalstelsel

"$\Rightarrow$": Veronderstel dat $A\hat{x} = \hat{y}$, met $\hat{y}$ gegeven door $\hat{y} = P_{\mathcal{D}}y$. We weten dat $(b - A\hat{x}) \perp \mathcal{D} =< a_1, \ldots, a_n >$ waaruit volgt

$$\forall i \in [1, n] : \langle a_i, (b - A\hat{x}) \rangle = 0 \Leftrightarrow a_i^*(b - A\hat{x}) = 0$$

wat equivalent is aan het gestelde in matrixvorm.

"$\Leftarrow$": De gelijkheid kan geschreven worden als $A^*(A\hat{x} - b)$, wat impliceert $(A\hat{x} - b) \perp \mathcal{D}$ en dus is $\hat{x}$ de beste benadering.

$\square$

2 Benadering van functies

3 Benadering door middel van veeltermen

4 Discrete benadering op basis van meetdata

5 Regularisatietechnieken

Data, Grafen en Eigenwaarden

6 Grafen en eigenwaarden in datawetenschappen

7 Eigenwaardenalgoritmes

Niet-lineaire Benaderingsproblemen

8 Niet-lineaire benaderingsproblemen

9 Optimalisatie-algoritmes

10 Ijle representatie en benaderingen