

Numerieke Benadering

Pieter Vanderschueren

Academiejaar 2024-2025

Inhoudsopgave

Lineaire Benaderingsproblemen	2
1 Benadering van vectoren	3
1.1 Terminologie	3
1.2 QR-factorisatie	6
1.3 Beste benadering van een vector in een deelruimte	8
2 Benadering van functies	9
2.1 Metrische ruimte	9
2.2 Vectorruimte	10
2.3 Unitaire ruimte en orthogonaliteit	13
3 Benadering door middel van veeltermen	17
3.1 Orthogonale veeltermen	17
3.2 Legendre-veeltermen	22
3.3 Chebyshev-veeltermen	23
4 Benadering door middel van splinefuncties	24
4.1 Splines	24
4.2 B-splines	25
5 Discrete benadering op basis van meetdata	29
6 Regularisatietechnieken	29
Data, Grafen en Eigenwaarden	30
7 Grafen en eigenwaarden in datawetenschappen	31
8 Eigenwaardenalgoritmes	31
Niet-lineaire Benaderingsproblemen	32
9 Niet-lineaire benaderingsproblemen	33
10 Optimalisatie-algoritmes	33
11 Ijle representatie en benaderingen	33
Appendix	34

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 $\{a_1, \dots, a_n\}$ orthogonaal, respectievelijk orthonormaal zijn. Als een basis niet orthogonaal is, spreken we van een scheve basis.

Definitie 1.2: Grammatrix

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

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

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

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

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

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 $Pv \in \mathcal{R}(P)$ volgens de definitie van het bereik, en is $(I - P)v \in \mathcal{N}(P)$, omdat

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

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 $x_1 = x_2$.

□

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

$$Q = [q_1 \quad \cdots \quad q_n \quad q_{n+1} \quad \cdots \quad q_m]$$

een unitaire matrix is. We verkrijgen:

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

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:

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

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

1.2 QR-factorisatie

Algoritme 1.1: Gram-Schmidt orthogonalisatie

```
1: for  $j = 1$  to  $n$  do
2:    $v_j = a_j$ 
3:   for  $i = 1$  to  $j - 1$  do
4:      $r_{ij} = q_i^* a_j$ 
5:      $v_j = v_j - r_{ij} q_i$  ( $= a_j - P_{\langle q_1, \dots, q_{j-1} \rangle} a_j$ )
6:   end for
7:    $r_{jj} = \|v_j\|_2$ 
8:    $q_j = v_j / r_{jj}$ 
9: end for
```

Algoritme 1.2: Gewijzigde Gram-Schmidt orthogonalisatie

```
1: for  $j = 1$  to  $n$  do
2:    $v_j = a_j$ 
3:   for  $i = 1$  to  $j - 1$  do
4:      $r_{ij} = q_i^* v_j$  ( $a_j \rightarrow v_j$ )
5:      $v_j = v_j - r_{ij} q_i$  ( $= (\mathbb{I} - P_{\langle q_{j-1} \rangle}) \dots (\mathbb{I} - P_{\langle q_2 \rangle}) (\mathbb{I} - P_{\langle q_1 \rangle}) a_j$ )
6:   end for
7:    $r_{jj} = \|v_j\|_2$ 
8:    $q_j = v_j / r_{jj}$ 
9: 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:

```
1:  $v_j = a_j$ 
2: for  $j = 1$  to  $j - 1$  do
3:    $r_{ij} = q_i^* v_j$ 
4:    $v_j = v_j - r_{ij} q_i$ 
5: end for
6:
7:  $w_j = v_j$ 
8: for  $i = 1$  to  $j - 1$  do
9:    $s_{ij} = q_i^* w_j$ 
10:   $v_j = v_j - s_{ij} q_i$ 
11:   $r_{ij} = r_{ij} + s_{ij}$ 
12: 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

```

1:  $Q = I, R = A$ 
2: for  $j = 1$  to  $n$  do
3:   for  $i = m$  downto  $j + 1$  do
4:      $c = \frac{r_{(i-1)j}}{\sqrt{r_{(i-1)j}^2 + r_{ij}^2}}, s = \frac{r_{ij}}{\sqrt{r_{(i-1)j}^2 + r_{ij}^2}}$ 
5:      $r_{ij} = 0, r_{(i-1)j} = \sqrt{r_{(i-1)j}^2 + r_{ij}^2}$ 
6:     for  $k = j + 1$  to  $n$  do
7:        $\begin{bmatrix} r_{(i-1)k} \\ r_{ik} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{c} & \bar{s} \\ -s & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_{(i-1)k} \\ r_{ik} \end{bmatrix}$ 
8:     end for
9:     for  $k = 1$  to  $m$  do
10:       $\begin{bmatrix} q_{k(i-1)} & q_{ki} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} q_{k(i-1)} & q_{ki} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{c} & \bar{s} \\ -s & c \end{bmatrix}$ 
11:    end for
12:  end for
13: end for

```

Algoritme 1.4: QR-facrotisatie met Householder-rotaties

```

1:  $R = A$ 
2: for  $j = 1$  to  $n$  do
3:    $x = R(j : m, j)$ 
4:    $v_j = x + \text{sign}(x_1) \|x\|_2 e_1$ 
5:    $v_j = v_j / \|v_j\|_2$ 
6:    $R_{jj} = -\text{sign}(x_1) \|x\|_2, R(j + 1 : m, j) = 0$ 
7:   for  $k = j + 1$  to  $n$  do
8:      $R(j : m, k) = R(j : m, k) - 2(v_j^* R(j : m, k)) v_j$ 
9:   end for
10: end for
11: for  $j = 1$  to  $m$  do
12:    $w = e_j$ 
13:   for  $k = n$  downto  $1$  do
14:      $w_{k:m} = w_{k:m} - 2(v_k^* w_{k:m}) v_k$ 
15:   end for
16:    $Q(:, j) = w$ 
17: end for

```


1.3 Beste benadering van een vector in een deelruimte

Stelling 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} . □

Stelling 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:

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

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). □

Stelling 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 $(b - A\hat{x}) \perp \mathcal{D} = \langle a_1, \dots, a_n \rangle$ 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.

□

2 Benadering van functies

2.1 Metrische ruimte

Definitie 2.1: Afstand

Men zegt dat over een verzameling A een afstand gedefinieerd is als er met elk paar elementen $x, y \in A$ een reëel getal $\rho(x, y)$ overeenstemt dat voldoet aan de volgende eigenschappen:

- Positief definitief: $\rho(x, y) \geq 0$ en $\rho(x, y) = 0 \Leftrightarrow x = y$
- Symmetrisch: $\rho(x, y) = \rho(y, x)$
- Driehoeksongelijkheid: $\rho(x, y) \leq \rho(x, z) + \rho(z, y)$

Een afstandsfunctie is bijgevolg een functionaal van de productverzameling $A \times A$ naar de verzameling \mathbb{R} van de reële getallen.

Definitie 2.2: Metrische ruimte

De verzameling A met een afstandsfunctie ρ noemt men een **metrische ruimte** (A, ρ) . De afstandsfunctie noemt men ook wel de **metriek** van de ruimte. De afstand tot een deelverzameling D van een metrische ruimte wordt gedefinieerd als:

$$\rho(x, D) = \inf \{ \rho(x, y) \mid y \in D \}$$

Definitie 2.3: Beste benadering

Zij D een deelverzameling van een metrische ruimte (A, ρ) . Een element $d \in D$ noemt men een beste benadering van een gegeven element $x \in A$, als er geen enkel ander element van D dichter bij x gelegen is dan d .

2.2 Vectorruimte

Definitie 2.4: Vectorruimte

Een vectorruimte V over het veld \mathbb{F} is een verzameling van elementen waarop twee bewerkingen zijn gedefinieerd: optelling en een scalaire vermenigvuldiging met een element uit \mathbb{F} . Deze bewerkingen moeten voldoen aan volgende voorwaarden:

1. $\forall \vec{u}, \vec{v} \in V : \vec{u} + \vec{v} \in V$
2. $\forall \vec{u}, \vec{v}, \vec{w} \in V : \vec{u} + (\vec{v} + \vec{w}) = (\vec{u} + \vec{v}) + \vec{w}$
3. Er bestaat een element $\vec{0} \in V$ zodat $\forall \vec{u} \in V : \vec{u} + \vec{0} = \vec{u}$
4. Voor elke $\vec{v} \in V$ bestaat er element $-\vec{v} \in V$ zodat $\vec{v} + (-\vec{v}) = \vec{0}$
5. $\forall \vec{u}, \vec{v} \in V : \vec{u} + \vec{v} = \vec{v} + \vec{u}$
6. $\forall \vec{v} \in V, \forall f \in \mathbb{F} : f\vec{v} \in V$
7. $\forall \vec{v} \in V, \forall f, g \in \mathbb{F} : f(g\vec{v}) = (fg)\vec{v}$
8. Als 1 het eenheidselement is van \mathbb{F} , dan geldt $\forall \vec{v} \in V : 1\vec{v} = \vec{v}$
9. $\forall \vec{u}, \vec{v} \in V, \forall f \in \mathbb{F} : f(\vec{u} + \vec{v}) = f\vec{u} + f\vec{v}$
10. $\forall \vec{v} \in V, \forall f, g \in \mathbb{F} : (f + g)\vec{v} = f\vec{v} + g\vec{v}$

Definitie 2.5: Norm en genormeerde ruimte

Een **norm** over de vectorruimte V is een functionaal van V naar \mathbb{R} waarvan de beelden voldoen aan de volgende eigenschappen:

- Positief definit: $\|\vec{x}\| \geq 0$ en $\|\vec{x}\| = 0 \Leftrightarrow \vec{x} = \vec{0}$
- Homogeniteit: $\|a\vec{x}\| = |a|\|\vec{x}\|$
- Driehoeksongelijkheid: $\|\vec{x} + \vec{y}\| \leq \|\vec{x}\| + \|\vec{y}\|$

Een vectorruimte waarover een norm gedefinieerd is, is een **genormeerde ruimte**.

Stelling 2.1: Metriciteit van de vectorruimte

Als een vectorruimte genormeerd is, dan is ze ook metrisch. De functie

$$\rho(\vec{x}, \vec{y}) = \|\vec{x} - \vec{y}\|$$

voldoet aan de definitie van afstand.

Bewijs 2.1: Metriciteit van de vectorruimte

De norm is per definitie positief definit en triviaal symmetrisch. We willen nu aantonen dat het volgende geldt:

$$\|\vec{x} - \vec{y}\| \leq \|\vec{x} - \vec{z}\| + \|\vec{y} - \vec{z}\|.$$

Welnu voor normen geldt per definitie de driehoeksongelijkheid:

$$\|\vec{\alpha} + \vec{\beta}\| \leq \|\vec{\alpha}\| + \|\vec{\beta}\|;$$

stel hierin $\vec{\alpha} = \vec{x} - \vec{z}$ en $\vec{\beta} = \vec{z} - \vec{y}$, dan volgt het gestelde, namelijk:

$$\|\vec{x} - \vec{y}\| = \|\vec{x} - \vec{z} + \vec{z} - \vec{y}\| \leq \|\vec{x} - \vec{z}\| + \|\vec{z} - \vec{y}\|.$$

□

Stelling 2.2: Translatie-invariantie en homogeniteit

Een metrische vectorruimte kan genormeerd worden met een norm die voldoet aan de definitie van afstand als en slechts als de afstandsfunctie voldoet aan:

1. Translatie-invariantie: $\forall \vec{x}, \vec{y}, \vec{z} \in V : \rho(\vec{x}, \vec{y}) = \rho(\vec{x} + \vec{z}, \vec{y} + \vec{z})$
2. Homogeniteit: $\forall \vec{x}, \vec{y} \in V, \forall a \in \mathbb{R}^+ : \rho(a\vec{x}, a\vec{y}) = a\rho(\vec{x}, \vec{y})$

Definitie 2.6: Convexe en strikte convexe deelverzameling van een vectorruimte

Een deelverzameling C van een vectorruimte V is convex wanneer voor alle $\lambda > 0$ en $\mu > 0$ met $\lambda + \mu = 1$ en voor alle $\vec{x}, \vec{y} \in C$ geldt dat $\lambda\vec{x} + \mu\vec{y} \in C$. Wanneer al deze punten tot het inwendige van C behoren, dan noemt men C stikt convex. Meetkundig betekent dit dat elk open lijnstuk $L(x, y)$ dat twee punten x en y van C verbindt, volledig in C ligt.

Eigenschap 2.1: Convexiteit en genormeerde ruimte

In een genormeerde ruimte is elke gesloten bol $B(\vec{a}, r)$ convex.

Bewijs 2.2: Convexiteit en genormeerde ruimte

Inderdaad, zij \vec{x}_1 en \vec{x}_2 twee punten van $B(\vec{a}, r)$. Dan moeten we aantonen dat $\lambda\vec{x}_1 + (1 - \lambda)\vec{x}_2$ tot de bol behoort, of nog dat $\|\lambda\vec{x}_1 + (1 - \lambda)\vec{x}_2 - \vec{a}\| \leq r$. Welnu:

$$\|\lambda\vec{x}_1 + (1 - \lambda)\vec{x}_2 - \vec{a}\| \leq \lambda\|\vec{x}_1 - \vec{a}\| + (1 - \lambda)\|\vec{x}_2 - \vec{a}\| \leq \lambda r + (1 - \lambda)r = r.$$

□

Definitie 2.7: Strikt genormeerde ruimte en strikte norm

Een genormeerde ruimte is strikt genormeerd als de eenheidsbol $B(\vec{0}, 1)$ strikt convex is. De eenheidsbol is strikt convex als er geen ‘rechte’ lijnstukken in voorkomen, of wiskundig:

$$(\vec{x} \neq \vec{y} \wedge \|\vec{x}\| = \|\vec{y}\| = 1) \Rightarrow \|\vec{x} + \vec{y}\| < 2.$$

Men spreekt dan van een strikte norm.

Opmerking: De 1-norm en de ∞ -norm in \mathbb{R}^n zijn **geen** strikte normen, omdat de eenheidsbol in deze normen niet strikt convex is.

Stelling 2.3: Beste benadering in een deelruimte

Zij \mathcal{D} een eindigdimensionale deelruimte van een strikt genormeerde ruimte V en zij $\vec{v} \in V$. Dan bestaat de beste benadering van $\vec{v} \in \mathcal{D}$ en is deze uniek.

Bewijs 2.3: Beste benadering in een deelruimte

- **Existentie:** Noem $d = \inf\{\|\vec{v} - \vec{w}\| \mid \vec{w} \in \mathcal{D}\}$. We tonen aan dat dit infimum in feite een minimum is. Volgens de definitie van een infimum bestaat er een rij van vectoren $\{\vec{w}_k\}_{k>1}$ in \mathcal{D} zodat $\{\|\vec{v} - \vec{w}_k\|\}_{k>1}$ een dalende rij is die convergeert naar d . De rij $\{\vec{w}_k\}_{k>1}$ is bovendien uniform begrensd omdat

$$\forall k > 1: \|\vec{w}_k\| = \|(\vec{w}_k - \vec{v}) + \vec{v}\| \leq \|\vec{w}_k - \vec{v}\| + \|\vec{v}\| \leq \|\vec{w}_1 - \vec{v}\| + \|\vec{v}\| \quad (1)$$

Stel n gelijk aan de dimensie van \mathcal{D} en beschouw $\{\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n\}$ van \mathcal{D} . Dan kunnen we \vec{w}_k met $k > 1$ ontbinden als:

$$\vec{w}_k = \sum_{i=1}^n \alpha_{ki} \vec{a}_i$$

Uit (1) volgt dat de rij $\{\alpha_{k1}, \dots, \alpha_{kn}\}_{k>1}$ uniform begrensd is. Deze rij heeft bijgevolg steeds een convergente deelrij (**stelling van Weierstrass-Bolzano**) waarvan we de limiet $(\hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_n)$ noemen. Daarom kunnen we, zonder algemeenheid in te boeten, in wat volgt veronderstellen dat de rij $\{\alpha_{k1}, \dots, \alpha_{kn}\}_{k>1}$ convergeert naar $(\hat{\alpha}_1, \dots, \hat{\alpha}_n)$. Stel nu dat

$$\vec{\zeta} = \sum_{i=1}^n \hat{\alpha}_i \vec{a}_i$$

dan geldt er voor alle $k \geq 1$ dat

$$\|\vec{v} - \vec{\zeta}\| \leq \underbrace{\|\vec{v} - \vec{w}_k\|}_{\rightarrow d} + \underbrace{\|\vec{w}_k - \vec{\zeta}\|}_{\rightarrow 0},$$

wat $\|\vec{v} - \vec{\zeta}\| = d$ impliceert. De vector $\vec{\zeta}$ is bijgevolg de beste benadering van \vec{v} in \mathcal{D} .

- **Uniciteit:** Het bewijs is uit het ongeruimde. Veronderstel dat er twee verschillende beste benaderingen zijn, $\vec{\zeta}_1$ en $\vec{\zeta}_2$, zodat

$$\|\vec{v} - \vec{\zeta}_1\| = \|\vec{v} - \vec{\zeta}_2\| = d.$$

Merk dat $\vec{e}_i = \frac{1}{d}(\vec{v} - \vec{\zeta}_i)$ op de eenheidsbol in V ligt voor $i = 1, 2$. Omdat de eenheidsbol strikt convex is geldt

$$\left\| \vec{v} - \frac{\vec{\zeta}_1 + \vec{\zeta}_2}{2} \right\| = d \left\| \underbrace{\frac{1}{2}}_{\lambda} \vec{e}_1 + \underbrace{\frac{1}{2}}_{\mu} \vec{e}_2 \right\| < d,$$

Dus $\frac{1}{2}(\vec{\zeta}_1 + \vec{\zeta}_2) \in \mathcal{D}$ is een betere benadering van \vec{v} dan $\vec{\zeta}_1$ en $\vec{\zeta}_2$, wat in tegenspraak is met de veronderstelling.

□

2.3 Unitaire ruimte en orthogonaliteit

Definitie 2.8: Unitaire ruimte

Men noemt een vectorruimte V over de complexe getallen unitair als er met elk paar elementen $\vec{x}, \vec{y} \in V$ een complex getal (\vec{x}, \vec{y}) overeenstemt dat voldoet aan de volgende eigenschappen:

1. $\forall a \in \mathbb{C} : (\vec{x}, a\vec{y}) = a(\vec{x}, \vec{y})$
2. $(\vec{x} + \vec{y}, \vec{z}) = (\vec{x}, \vec{z}) + (\vec{y}, \vec{z})$
3. $(\vec{x}, \vec{y}) = \overline{(\vec{y}, \vec{x})}$
4. $(\vec{x}, \vec{x}) > 0$ als $\vec{x} \neq \vec{0}$

Men noemt (\vec{x}, \vec{y}) het scalair product van \vec{x} en \vec{y} .

Opmerking: Uit de derde eigenschap volgt dat (\vec{x}, \vec{x}) reëel is. Hierdoor is het scalair product over het veld \mathbb{R} symmetrisch.

Stelling 2.4: Unitair impliceert genormeerd

Als een vectorruimte unitair is, dan is ze ook genormeerd. De functie

$$\|\vec{x}\| = \sqrt{(\vec{x}, \vec{x})}$$

voldoet aan de definitie van een norm.

Bewijs 2.4: Unitair impliceert genormeerd

De eerste ‘drie’ normeigenschappen (positief definitief, homogeniteit) zijn gemakkelijk te bewijzen. De driehoeksongelijkheid volgt (voor $\vec{x} + \vec{y} \neq \vec{0}$) uit de Cauchy-Schwarz ongelijkheid:

$$\begin{aligned}(\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y}) &= (\vec{x}, \vec{x} + \vec{y}) + (\vec{y}, \vec{x} + \vec{y}) \\ &\leq \sqrt{(\vec{x}, \vec{x})} \sqrt{(\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y})} + \sqrt{(\vec{y}, \vec{y})} \sqrt{(\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y})}\end{aligned}$$

en dus

$$\sqrt{(\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y})} \leq \sqrt{(\vec{x}, \vec{x})} + \sqrt{(\vec{y}, \vec{y})}.$$

Voor het geval $\vec{x} + \vec{y} = \vec{0}$ is de driehoeksongelijkheid triviaal.

□

Stelling 2.5: Genormeerd naar unitair

Een genormeerde vectorruimte is een unitaire ruimte met een scalaire product dat voldoet aan Stelling 2.4, als en slechts als de norm voldoet aan de parallelogramongelijkheid:

$$\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x} - \vec{y}\|^2 = 2(\|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2).$$

Bewijs 2.5: Genormeerd naar unitair

Het nodig zijn wordt als volgt aangetoond:

$$\begin{aligned}\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 + \|\vec{x} - \vec{y}\|^2 &= (\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y}) + (\vec{x} - \vec{y}, \vec{x} - \vec{y}) \\ &= 2(\vec{x}, \vec{x}) + 2(\vec{y}, \vec{y}).\end{aligned}$$

Voor een reële vectorruimte wordt het voldoende zijn bewezen door aan te tonen dat

$$(\vec{x}, \vec{y}) = \frac{1}{4} \{ \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 - \|\vec{x}\|^2 - \|\vec{y}\|^2 \}$$

een scalaire product is, en dat de natuurlijke norm van dit scalaire product de oorspronkelijke norm is. Het bewijs is nogal technisch en laten we achterwege.

□

Stelling 2.6: Eenheidsbol in unitaire ruimte

De eenheidsbol in een unitaire ruimte is strikt convex.

Bewijs 2.6: Eenheidsbol in unitaire ruimte

Het volstaat aan te tonen dat de geziene formule in Definitie 2.7 geldt. Welnu, neem $\vec{x} \neq \vec{y}$ met $\|\vec{x}\| = \|\vec{y}\| = 1$. Dan volgt uit de parallellogramongelijkheid

$$\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 = -\|\vec{x} - \vec{y}\|^2 + 2(\|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2) = -\|\vec{x} - \vec{y}\|^2 + 4 < 4.$$

En dus is $\|\vec{x} + \vec{y}\| < 2$.

□

Definitie 2.9: Orthogonaliteit

Twee vectoren \vec{x} en \vec{y} in een unitaire ruimte V zijn orthogonaal als hun scalair product nul is, of nog als:

$$\vec{x} \perp \vec{y} \Rightarrow (\vec{x}, \vec{y}) = 0.$$

Stelling 2.7: Pythagoras

Wanneer \vec{x} en \vec{y} orthogonaal zijn in een unitaire ruimte V , dan geldt t.o.v. de natuurlijke norm in V dat

$$\|\vec{x} + \vec{y}\|^2 = \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2.$$

Bewijs 2.7: Pythagoras

Het gestelde volgt triviaal uit een expansie van $\|\vec{x} + \vec{y}\|^2$, namelijk:

$$\begin{aligned} \|\vec{x} + \vec{y}\|^2 &= (\vec{x} + \vec{y}, \vec{x} + \vec{y}) \\ &= (\vec{x}, \vec{x}) + (\vec{y}, \vec{y}) + 2(\vec{x}, \vec{y}) \\ &= \|\vec{x}\|^2 + \|\vec{y}\|^2. \end{aligned}$$

□

Stelling 2.8: Hermitiaans positief definit

Neem de grammatrix G van een stel vectoren $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$, namelijk:

$$G = G(\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n) = \begin{bmatrix} (\vec{a}_1, \vec{a}_1) & \cdots & (\vec{a}_1, \vec{a}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\vec{a}_n, \vec{a}_1) & \cdots & (\vec{a}_n, \vec{a}_n) \end{bmatrix}.$$

Indien deze matrix Hermitiaans positief definit is, dan zijn de vectoren $\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n$ lineair onafhankelijk. Hieruit volgt dat de matrix G een inverteerbare matrix is (als en slechts als de vectoren lineair onafhankelijk zijn).

Bewijs 2.8: Hermitiaans positief definit

- **Hermitiaans:** Uit de derde voorwaarde voor een scalaire product (zoals gezien in Definitie 2.8) volgt dat $G = G^*$, dus G is een Hermitiaanse matrix.
- **Positief definitief:** Zij $v = [v_1 \ \cdots \ v_n]$ een vector in \mathbb{C}^n . Steunend op de lineariteit van het scalaire product kunnen we de uitdrukking v^*Gv schrijven als:

$$\begin{aligned} v^*Gv &= [v_1 \ \cdots \ v_n] \begin{bmatrix} (\vec{a}_1, \vec{a}_1) & \cdots & (\vec{a}_1, \vec{a}_n) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ (\vec{a}_n, \vec{a}_1) & \cdots & (\vec{a}_n, \vec{a}_n) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_n \end{bmatrix} \\ &= [v_1 \ \cdots \ v_n] \begin{bmatrix} (\vec{a}_1, v_1\vec{a}_1 + \cdots + v_n\vec{a}_n) \\ \vdots \\ (\vec{a}_n, v_1\vec{a}_1 + \cdots + v_n\vec{a}_n) \end{bmatrix} \\ &= \left(\sum_{i=1}^n v_i \vec{a}_i, \sum_{j=1}^n v_j \vec{a}_j \right) = \left\| \sum_{i=1}^n v_i \vec{a}_i \right\|^2. \end{aligned}$$

Als $\{\vec{a}_1, \dots, \vec{a}_n\}$ lineair onafhankelijk zijn, dan geldt voor $v \neq 0$ dat $\sum_{i=1}^n v_i \vec{a}_i \neq 0$ en dus $v^*Gv > 0$. Dit bewijst dat G positief definitief is.

□

Eigenschap 2.2: Orthogonale projector

Een projector P is orthogonaal als en alleen als:

$$\forall \vec{v}, \vec{w} \in V : (P\vec{v}, \vec{w}) = (\vec{v}, P\vec{w}).$$

Bewijs 2.9: Orthogonale projector

“ \Rightarrow ”: Als $\mathcal{R}(P)$ en $\mathcal{N}(P)$ orthogonaal zijn, dan is:

$$\forall \vec{v}, \vec{w} \in V : (P\vec{v}, (I - P)\vec{w}) = ((I - P)\vec{v}, P\vec{w}) = 0,$$

waaruit volgt dat $(P\vec{v}, \vec{w}) = (P\vec{v}, P\vec{w}) = (\vec{v}, P\vec{w})$.

“ \Leftarrow ”: Neem willekeurige $\vec{x} = P\vec{u} \in \mathcal{R}(P)$ en $\vec{y} \in \mathcal{N}(P)$. Dan geldt:

$$(\vec{x}, \vec{y}) = (P\vec{u}, \vec{y}) = (\vec{u}, P\vec{y}) = (\vec{u}, \vec{0}) = 0,$$

wat de orthogonaliteit bewijst.

□

Algoritme 2.1: Gram-Schmidt algoritem in een unitaire ruimte

```
1: for  $j = 1$  to  $n$  do
2:    $\vec{v}_j = \vec{a}_j$ 
3:   for  $i = 1$  to  $j - 1$  do
4:      $r_{ij} = (\vec{q}_i, \vec{a}_j)$ 
5:      $\vec{v}_j = \vec{v}_j - r_{ij}\vec{q}_i$  ( $= \vec{a}_j - P_{\vec{q}_1, \dots, \vec{q}_{j-1}} \vec{a}_j$ )
6:   end for
7:    $r_{jj} = \|\vec{v}_j\|_2$ 
8:    $\vec{q}_j = \vec{v}_j / r_{jj}$ 
9: end for
```

Opmerking: In vergelijking tot Algoritme 1.1 zijn inwendige producten tussen vectoren in \mathbb{C}^n vervangen door scalaire producten in V en de Euclidische norm door de natuurlijke norm geïnduceerd door het scalaire product, dit is $\|\cdot\| = \sqrt{(\cdot, \cdot)}$.

3 Benadering door middel van veeltermen

3.1 Orthogonale veeltermen

Eigenschap 3.1: Orthogonale veeltermen

Het stel orthogonale veeltermen $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_n(x)$ vormt een basis van de ruimte $P_n[a, b]$.

Bewijs 3.1: Orthogonale veeltermen

Het stel van $n + 1$ veeltermen is lineair onafhankelijk in een ruimte met dimensie $n + 1$, dit volgt uit de inverteerbaarheid van de grammatrix. Het stel is dus een basis van $P_n[a, b]$.

□

Stelling 3.1: Lageregraadstermen en orthogonaliteit

Een veelterm die behoort tot een rij orthogonale veeltermen is ook orthogonaal tot alle veeltermen van een lagere graad.

Stelling 3.2: Orthogonale veeltermen over de reële getallen

De orthogonale veeltermen $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_n(x)$ voldoen aan een drietermrecursiebetrekking:

$$\begin{aligned}\phi_0(x) &= \lambda_0, \\ \phi_1(x) &= \lambda_1 \left(x - \frac{(x, 1)}{(1, 1)} \right) \phi_0(x), \\ \phi_k(x) &= \lambda_k (x - \alpha_k) \phi_{k-1}(x) - \beta_k \phi_{k-2}(x).\end{aligned}$$

waarbij

$$\alpha_k = \frac{(x\phi_{k-1}, \phi_{k-1})}{(\phi_{k-1}, \phi_{k-1})}, \quad \beta_k = \frac{(x\phi_{k-1}, \phi_{k-2})}{(\phi_{k-2}, \phi_{k-2})},$$

en λ_k een normalisatieconstante is.

Opmerking: De formules werden afgeleid voor een algemeen scalair product gedefinieerd op een vectorruimte over de reële getallen.

Bewijs 3.2: Orthogonale veeltermen over de reële getallen

Veeltermen $\phi_0(x)$ en $\phi_1(x)$ verkrijgt men door orthogonalisatie van 1 en x met de Gram-Schmidtprocedure. De waarden van λ_0 en λ_1 volgen uit de normalisatievoorwaarde.

Vermits de veelterm $x\phi_{k-1}(x)$ een veelterm van graad k is, kan ze ontbonden worden als een lineaire combinatie van de orthogonale veeltermen $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_k(x)$. Herneem formule

$$y_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i \phi_i(x), \quad \alpha_k = \frac{(\phi_k, f)}{(\phi_k, \phi_k)}.$$

Nu krijgen we:

$$x\phi_{k-1}(x) = \sum_{i=0}^{k-1} b_i \phi_i(x), \quad \forall \ell \leq k: b_\ell = \frac{(x\phi_{k-1}, \phi_\ell)}{(\phi_\ell, \phi_\ell)} = \frac{(\phi_{k-1}, \phi_\ell)}{(\phi_\ell, \phi_\ell)}.$$

De veelterm $x\phi_\ell(x)$ is van graad $\ell + 1$. Uit Stelling 3.1 volgt dan dat b_ℓ gelijk is aan nul wanneer $k - 1 > \ell + 1$, of nog, wanneer $\ell < k - 2$. In het rechterlid van de bovenstaande vergelijking blijven enkel de termen over met $k - 2 \leq \ell \leq k$. We vinden dus:

$$x\phi_{k-1}(x) = b_{k-2}\phi_{k-2}(x) + b_{k-1}\phi_{k-1}(x) + b_k\phi_k(x).$$

Dit herschrijven we als:

$$\phi_k(x) = \frac{1}{b_k} ((x - b_{k-1})\phi_{k-1}(x) - b_{k-2}\phi_{k-2}(x)).$$

Dit geeft ons de drietermrecursiebetrekking.

□

Toepassing 3.1: Orthogonale veeltermen

Met een gebruik van het continue scalair product voor een gewichtsfunctie $w(x)$ over een interval $[a, b]$ kunnen de coëfficiënten van de recursiebetrekking voluit geschreven worden als:

$$\alpha_k = \frac{\int_a^b w(x)x\phi_{k-1}^2(x)dx}{\int_a^b w(x)\phi_{k-1}^2(x)dx}, \quad \beta_k = \frac{\int_a^b w(x)x\phi_{k-1}(x)\phi_{k-2}(x)dx}{\int_a^b w(x)\phi_{k-2}^2(x)dx}.$$

Stelling 3.3: Nulpunten van orthogonale veeltermen

De veelterm $\phi_k(x)$ die behoort tot een stel veeltermen dat orthogonaal is over een interval $[a, b]$ heeft k enkelvoudige reële nulpunten in het open interval (a, b) .

Bewijs 3.3: Nulpunten van orthogonale veeltermen

Voor $k = 0$ is de stelling triviaal; het bewijs dat hier volgt, geldt voor $k > 0$.

Daar $\phi_k(x)$ een veelterm is van de k -de graad, heeft hij hoogstens k reële nulpunten. Hij kan dus hoogstens k maal van teken veranderen in (a, b) , en dit enkel als alle nulpunten reëel en enkelvoudig zijn. Als we dus kunnen bewijzen dat deze veeltermen k maal van teken verandert in (a, b) , dan is de stelling bewezen.

Veronderstel dat $\phi_k(x)$ slechts m keer van teken verandert met $m < k$. Noem de punten waar dit gebeurt x_1, \dots, x_m . Beschouw dan de veelterm:

$$\psi(x) = \phi_k(x) \prod_{i=1}^m (x - x_i).$$

Telens als $\phi_k(x)$ van teken wisselt, bijvoorbeeld in x_i , wordt dit opgeheven door de aanwezigheid van een factor $(x - x_i)$ die er ook van teken wisselt. De functie $\psi(x)$ verandert dus nergens van teken in (a, b) . Vanwege de continuïteit is $\psi(x)$ dus overal positief of overal negatief. De integraal

$$\int_a^b w(x)\psi(x)dx = \int_a^b w(x)\phi_k(x) \prod_{i=1}^m (x - x_i)dx$$

is bijgevolg verschillend van nul.

Welnu, $\prod_{i=1}^m (x - x_i)$ is een veelterm van graad $m < k$, en dus orthogonaal tot $\phi_k(x)$; dus moet de integraal wel nul zijn. De aanname $m < k$ is bijgevolg onjuist.

□

Stelling 3.4: Eigenwaarden en tridiagonale matrix

De nulpunten van de veelterm $\phi_n(x)$ zijn de eigenwaarden van $\mathbf{tridiag}(v_{k-1}; \alpha_k; \mu_k)$, de $n \times n$ tridiagonale matrix, met $v_k = \beta_{k+1}$ en $\mu_k = \frac{1}{\lambda_k}$, waarbij α_k, β_k en λ_k gegeven worden door Stelling 3.2.

Bewijs 3.4: Eigenwaarden en tridiagonale matrix

Definieer de $n \times n$ tridiagonale matrix A en de n -vector $\Phi(x)$ als:

$$A = \begin{bmatrix} \alpha_1 & \mu_1 & 0 & \cdots & 0 \\ v_1 & \alpha_2 & \mu_2 & \ddots & \vdots \\ 0 & v_2 & \alpha_3 & \ddots & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \mu_{n-1} \\ 0 & \cdots & 0 & v_{n-1} & \alpha_n \end{bmatrix} \quad \text{en} \quad \Phi(x) = \begin{bmatrix} \phi_0(x) \\ \phi_1(x) \\ \vdots \\ \phi_{n-1}(x) \\ \phi_{n-1}(x) \end{bmatrix}.$$

De fundamentele recursiebetrekking kan herschreven worden als:

$$\beta_k \phi_{k-2}(x) + \alpha_k \phi_{k-1}(x) + \frac{1}{\lambda_k} \phi_k(x) = x \phi_{k-1}(x).$$

Stel nu $v_k = \beta_{k+1}$ en $\mu_k = \frac{1}{\lambda_k}$, dan wordt dit:

$$v_{k-1} \phi_{k-2}(x) + \alpha_k \phi_{k-1}(x) + \mu_k \phi_k(x) = x \phi_{k-1}(x).$$

Gebruik makend van bovenstaande betrekking, kan men het matrix-vectorproduct $A\Phi(x)$ vereenvoudigen tot:

$$A\Phi(x) = x \begin{bmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \\ \vdots \\ \phi_{n-2}(x) \\ \phi_{n-1}(x) \end{bmatrix} - \mu_n \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \phi_n(x) \end{bmatrix} = x\Phi(x) - \mu_n \Psi(x).$$

Evalueren we deze betrekking in een nulpunt x_k van de veelterm $\phi_n(x)$, dan vinden we:

$$A\Phi(x_k) = x_k \Phi(x_k).$$

Dit wil zeggen dat x_k een eigenwaarde is van A , met $\Phi(x_k)$ als corresponderende eigenvector. Dit geldt voor alle nulpunten x_k van $\phi_n(x)$. Vermits een $n \times n$ matrix hoogstens n verschillende eigenwaarden heeft, moeten alle eigenwaarden nulpunten zijn (en omgekeerd).

□

Stelling 3.5: Kleinste-kwadratenbenadering

Zij een orthogonaal stel veeltermen $\phi_0(x), \phi_1(x), \dots, \phi_n(x)$ en een continue te benaderen functie $f(x)$. De kleinste-kwadratenbenadering van de n -de graad is dan gelijk aan:

$$y_n(x) = \sum_{k=0}^n \alpha_k \phi_k(x) \quad \text{met} \quad \alpha_k = \frac{\int_a^b w(x) f(x) \phi_k(x) dx}{\int_a^b w(x) \phi_k^2(x) dx}.$$

De fout of het residu van de kleinste-kwadratenbenadering t.o.v. de n -de graad is dan gelijk aan:

$$r_n(x) = f(x) - y_n(x) \simeq -\alpha_{n+1} \phi_{n+1}(x).$$

Stelling 3.6: Interpolerende eigenschap van de kleinste-kwadratenbenadering

Zij f een continue functie op het interval $[a, b]$. Dan geldt dat de fout van de n -de graadsbenadering nul wordt in minstens $n + 1$ punten van het open interval (a, b) .

Bewijs 3.5: Interpolerende eigenschap van de kleinste-kwadratenbenadering

We tonen aan dat het residu minstens $n + 1$ tekenwisselingen ondergaat in het open interval (a, b) . Uit de continuïteit van $f(x)$ volgt dan dat het residu minstens $n + 1$ nulpunten heeft.

Veronderstel dat $r_n(x)$ slechts m tekenwisselingen zou ondergaan, met $m \leq n$, namelijk in de punten $x_1 < x_2 < \dots < x_m$, gelegen in het open interval (a, b) . Dan heeft de functie:

$$r_n(x) \prod_{i=1}^m (x - x_i)$$

geen enkele tekenverandering in $[a, b]$ en is dus:

$$\int_a^b w(x) r_n(x) \prod_{i=1}^m (x - x_i) dx \neq 0.$$

Wegens Stelling 1.1 staat de functie $r_n(x)$ dus ook orthogonaal tot de veelterm $\prod_{i=1}^m (x - x_i)$. Hieruit zou dus volgen:

$$\int_a^b w(x) r_n(x) \prod_{i=1}^m (x - x_i) dx = 0,$$

wat in tegenspraak is met de aanname. De veronderstelling $m \leq n$ is dus onjuist, ofwel het residu heeft minstens $n + 1$ tekenwisselingen in (a, b) . □

3.2 Legendre-veeltermen

Definitie 3.1: Legendre-veeltermen

De veeltermen $P_0(x), P_1(x), P_2(x), \dots$ met $P_k(1) = 1$ die een orthogonale rij vormen voor het scalair product

$$(p, q) = \int_{-1}^1 w(x)p(x)q(x)dx$$

waarbij $w(x) = 1$, noemt men de Legendre-veeltermen. De veeltermen worden door volgende algemene uitdrukking gegeven:

$$P_k(x) = \frac{1}{2^k} \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} (-1)^j \binom{k}{j} \binom{2k-2j}{k} x^{k-2j},$$

waarbij

$$A_k = \frac{(2k)!}{2^k (k!)^2}, \quad \|P_k\| = \sqrt{\frac{2}{2k+1}}$$

met A_k de hoogstegraadscoëfficiënt en $\|\cdot\|$ de natuurlijke norm.

Definitie 3.2: Legendre-benadering

De Legendre-benadering over het interval $[-1, 1]$ van een functie $f(x)$ wordt gegeven door:

$$y_n(x) = \sum_{k=0}^n \alpha_k P_k(x) \quad \text{met} \quad \alpha_k = \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_k(x) dx.$$

Indien we de momenten $I_k = \int_{-1}^1 x^k f(x) dx$ van de functie erbij halen, dan kunnen we de coëfficiënten α_k ook schrijven als:

$$\begin{aligned} \alpha_k &= \frac{2k+1}{2} \int_{-1}^1 f(x) P_k(x) dx \\ &= \frac{2k+1}{2^{k+1}} \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} (-1)^j \binom{k}{j} \binom{2k-2j}{k} \int_{-1}^1 f(x) x^{k-2j} dx \\ &= \frac{2k+1}{2^{k+1}} \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} (-1)^j \binom{k}{j} \binom{2k-2j}{k} I_{k-2j}. \end{aligned}$$

3.3 Chebyshev-veeltermen

Definitie 3.3: Chebyshev-veeltermen

De veeltermen $T_0(x), T_1(x), T_2(x), \dots$ met $T_k(1) = 1$ die een orthogonale rij vormen voor het scalair

$$(p, q) = \int_{-1}^1 w(x)p(x)q(x)dx$$

waarbij $w(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, noemt men de Chebyshev-veeltermen (van de eerste soort). De veeltermen worden door volgende goniometrische uitdrukking gegeven:

$$T_k(x) = \cos(k \arccos(x)), \quad \text{voor } x \in [-1, 1].$$

Hieruit volgt de orthogonaliteit van de veeltermen op het interval $[-1, 1]$. De algemene uitdrukking voor de Chebyshev-veeltermen is:

$$T_k(x) = \frac{k}{2} \sum_{j=0}^{\lfloor k/2 \rfloor} (-1)^j \frac{(k-j-1)!}{j!(k-2j)!} (2x)^{k-2j}.$$

waarbij

$$\forall k \geq 1: A_k = 2^{k-1}, \quad \|T_k\| = \begin{cases} \sqrt{\pi} & \text{indien } k = 0, \\ \sqrt{\frac{\pi}{2}} & \text{indien } k \neq 0. \end{cases}$$

met A_k de hoogstegraadscoëfficiënt en $\|\cdot\|$ de natuurlijke norm.

Definitie 3.4: Chebyshev-benadering

De Chebyshev-kleinste-kwadratenveelterm met graad n voor een functie $f(x)$ is gelijk aan:

$$y_n(x) = \sum_{k=0}^n \alpha_k T_k(x) \quad \text{met} \quad \alpha_k = \frac{1}{\|T_k\|^2} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

We kunnen α_k ook schrijven als:

$$\alpha_0 = \frac{1}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_0(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad \alpha_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad \text{voor } k \geq 1.$$

De benaderingsfout of residu $r_n(x)$ van deze benadering is gelijk aan:

$$r_n(x) \simeq -\alpha_{n+1}T_{n+1}(x).$$

Opmerking: In de literatuur wordt soms voor algemeenheid gebruikgemaakt van een licht gewijzigd sommatiesymbool:

$$y_n(x) = \sum_{k=0}^n{}' \alpha_k T_k(x) := \frac{1}{2} \alpha_0 T_0(x) + \sum_{k=1}^n \alpha_k T_k(x).$$

waardoor dan α_k dan in alle gevallen gelijk is aan $\frac{1}{\|T_k\|^2} \int_{-1}^1 \frac{f(x)T_k(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx$.

Definitie 3.5: Minimaxcriterium

Het minimaxcriterium zoekt een veelterm y_n van graad n die de maximale fout over $[a, b]$ minimaliseert:

$$E_n = \max_{x \in [a, b]} |f(x) - y_n(x)|.$$

Als de functie f continue is, bestaat zulke veelterm.

Opmerking: De term $f(x) - y_n(x)$ komt overeen met het residu $r_n(x)$ uit Stelling 3.5.

Stelling 3.7: Borel

Voor elke functie $f(x)$ die continu is over het compacte interval $[a, b]$, bestaat er een veelterm $y_n(x)$ van graad n of lager waarvoor geldt dat:

$$\forall p_n \in P_n[a, b] : \max_{x \in [a, b]} |f(x) - y_n(x)| \leq \max_{x \in [a, b]} |f(x) - p_n(x)|.$$

De punten in het interval $[a, b]$ waar het maximum $E_n (= \max_{x \in [a, b]} |f(x) - y_n(x)|)$ wordt bereikt, worden extremaalpunten genoemd. Een punt waar $f(x) - y_n(x) = E_n$ noemt men een +punt, waar $f(x) - y_n = -E_n$ een -punt.

Stelling 3.8: Equioscillatiestelling

Zij $f(x)$ een continue functie op een compact interval $[a, b]$ en zij $y_n(x)$ een veelterm van graad n . Dan is y_n een beste benadering van graad n volgens het minimaxcriterium als en alleen als er in het interval $[a, b]$ een rij van $n + 2$ extremaalpunten bestaat die afwisselen tussen +punten en -punten.

4 Benadering door middel van splinefuncties

4.1 Splines

Definitie 4.1: Splinefunctie

Zij een strikt stijgende rij van reële getallen gegeven, die voldoet aan

$$a = t_0 < t_1 < t_2 < \dots < t_{n-1} < t_n = b.$$

Een spline functie $s(x)$ van graad $k > 0$ of orde $k + 1$ met knooppunten t_0, \dots, t_n is een functie gedefinieerd op $[a, b]$ die voldoet aan de volgende eigenschappen:

1. in elk interval $[t_i, t_{i+1}]$ is $s(x)$ een veelterm van graad k of lager;
2. de functie $s(x)$ en haar afgeleiden tot en met orde $k - 1$ zijn continu in $[a, b]$.

Stelling 4.1: Dimensie van de ruimte van splinefuncties

De vectorruimte van de splinefuncties van graad k met knooppunten t_0, \dots, t_n heeft dimensie $n + k$.

Toepassing 4.1: Interpolerende splinefunctie

Een splinefunctie wordt **interpolerend** genoemd als hij in de knooppunten t_0, \dots, t_n bepaalde opgegeven waarden f_0, \dots, f_n aanneemt.

Toepassing 4.2: Natuurlijke splinefunctie

Een **natuurlijke splinefunctie** is een splinefunctie van oneven graad $\exists m \geq 1 : k = 2m + 1$, waarvoor geldt dat

$$\forall j \in [m + 1, 2m] : s^{(j)}(a) = s^{(j)}(b) = 0.$$

Opmerking: De meest courant gebruikte interpolerende splinefuncties zijn natuurlijke, interpolerende splinefuncties, d.w.z. dat dergelijke functie behoort tot oneven graad $k = 2m + 1$ en voldoet aan:

$$\forall j \in [0, m] : s^{(j)}(a) = s^{(j)}(b) = 0 \quad \text{en} \quad \forall i \in [0, n] : s(t_i) = f_i.$$

Dat zijn $(n + 1) + 2m = n + k$ bijkomende voorwaarden en dus volgt, vermits de splimeruimte dimensie $n + k$ heeft (Stelling 4.1), dat deze functie eenduidig bepaald is.

Toepassing 4.3: Periodieke splinefunctie

Een **periodieke splinefunctie** is een splinefunctie die voldoet aan

$$\forall j \in [0, k - 1] : s^{(j)}(a) = s^{(j)}(b).$$

4.2 B-splines

Definitie 4.2: Gedeelde differentie

De gedeelde differentie van orde nul van een functie f in een punt x_i is gelijk aan

$$f[x_i] = f(x_i) = f_i.$$

De gedeelde differentie van orde $k = j - i$ voor $j > i$ van een functie f in de verschillende punten x_i, \dots, x_j wordt gedefinieerd als

$$f[x_i, \dots, x_j] = \frac{f[x_{i+1}, \dots, x_j] - f[x_i, \dots, x_{j-1}]}{x_j - x_i} \quad (= \Delta_t^k(x_i, \dots, x_{i+k})f(t)).$$

Eigenschap 4.1: Gedeelde differentie

1. De gedeelde differentie $f[x_i, \dots, x_j]$ is lineair in f , d.w.z.

$$(af + bg)[x_i, \dots, x_j] = af[x_i, \dots, x_j] + bg[x_i, \dots, x_j].$$

2. **Newton-vorm:** De interpolerende veelterm van graad $j - i$ door $(x_i, f_i), \dots, (x_j, f_j)$ is gelijk aan:

$$p_{j-i}(x) = a_0 + a_1(x - x_i) + a_2(x - x_i)(x - x_{i+1}) + \dots + a_{j-i} \prod_{k=0}^{j-i-1} (x - x_{i+k}),$$

waarbij de coëfficiënten worden gegeven door:

$$a_k = f[x_i, \dots, x_{i+k}]$$

3. De gedeelde differentie $f[x_i, \dots, x_j]$ is continu in de argumenten x_i, \dots, x_j als $f(x)$ $(j - i)$ -maal differentieerbaar is met continue $(j - i)$ -de afgeleide.

4. De gedeelde differentie van orde $j - i$ van een veelterm $p_m(x)$ van graad m met $m < j - i$, heeft de waarde nul, d.w.z. dat

$$\exists m < j - i : p_m[x_i, \dots, x_j] = 0.$$

5. De gedeelde differentie $f[x_i, \dots, x_j]$ is een lineaire samenstelling van de functie waarden f_i, \dots, f_j , d.w.z. dat

$$f[x_i, \dots, x_j] = \sum_{k=i}^j \lambda_k f_k.$$

6. De **formule van Leibniz** voor de gedeelde differentie van een product van twee functies luidt als volgt:

$$f(x) = g(x)h(x) \Rightarrow f[x_i, \dots, x_j] = \sum_{k=i}^j g[x_i, \dots, x_k]h[x_k, \dots, x_j].$$

Definitie 4.3: Afgeknotte machtsfunctie

Een veelgebruikte functie in de numerieke wiskunde is de afgeknotte machtsfunctie, die gedefinieerd is als

$$(t - x)_+^k = \begin{cases} (t - x)^k & \text{als } t > x, \\ 0 & \text{als } t \leq x. \end{cases}$$

Definitie 4.4: Gewone B-spline

De gewone B-spline van graad k of orde $k + 1$ wordt gegeven door:

$$M_{i,k+1}(x) = \Delta_t^{k+1}(t_i, \dots, t_{i+k+1})(t - x)_+^k.$$

Definitie 4.5: Genormaliseerde B-spline

De Genormaliseerde B-spline van graad k of orde $k + 1$ wordt gegeven door:

$$N_{i,k+1}(x) = (t_{i+k+1} - t_i)M_{i,k+1}(x).$$

Stelling 4.2: Geldigheid van B-splines

De gewone B-splinefunctie $M_{i,k+1}(x)$ en de genormaliseerde B-splinefunctie $N_{i,k+1}(x)$ zijn splinefuncties.

Bewijs 4.1: Geldigheid van B-splines

Herneem de eigenschap dat de gedeelde differentie een lineaire samenstelling is van functiewaarden f_i, \dots, f_j (zoals gezien in Propositie 4.1), namelijk:

$$f[x_i, \dots, x_j] = \sum_{k=i}^j \lambda_k f_k.$$

De functie $M_{i,k+1}(x)$ is dus een lineaire samenstelling van afgeknotte-machtsfuncties van graad k van de volgende vorm:

$$1, x, x^2, \dots, x^k, (t_1 - x)_+^k, \dots, (t_{n-1} - x)_+^k.$$

Deze lineaire samenstelling vormt een basis van de vectorruimte van de splinefuncties van graad k met knooppunten t_0, \dots, t_n en dus is $M_{i,k+1}(x)$ een splinefunctie. Hetzelfde geldt voor $N_{i,k+1}(x)$. □

Eigenschap 4.2: B-splines

1. Voor een gegeven i zijn de B-splines van orde 1 als volgt gedefinieerd:

$$\begin{aligned} \bullet M_{i,1}(x) &= \begin{cases} \frac{1}{t_{i+1}-t_i} & \text{als } t_i \leq x < t_{i+1}, \\ 0 & \text{anders,} \end{cases} \\ \bullet N_{i,1}(x) &= \begin{cases} 1 & \text{als } t_i \leq x < t_{i+1}, \\ 0 & \text{anders.} \end{cases} \end{aligned}$$

2. Voor een gegeven i en $k \geq 1$, geldt voor $x \leq t_i$ of $(x \geq t_{i+k+1})$ dat

$$M_{i,k+1}(x) = 0$$

3. Voor de gewone en de genormaliseerde B-splines gelden volgende recursiebetrekkingen:

$$\begin{aligned} \bullet M_{i,k+1}(x) &= \frac{x-t_i}{t_{i+k+1}-t_i} M_{i,k}(x) + \frac{t_{i+k+1}-x}{t_{i+k+1}-t_i} M_{i+1,k}(x), \\ \bullet N_{i,k+1}(x) &= \frac{x-t_i}{t_{i+k}-t_i} N_{i,k}(x) + \frac{t_{i+k+1}-x}{t_{i+k+1}-t_{i+1}} N_{i+1,k}(x). \end{aligned}$$

4. Voor een gegeven $k \geq 1$ en $x \in (t_i, t_{i+k+1})$ geldt dat

$$M_{i,k+1}(x) > 0$$

Bewijs 4.2: B-splines

1. Per definitie van $M_{i,k+1}(x)$ geldt dat

$$\begin{aligned} M_{i,1}(x) &= \Delta_t^1(t_i, t_{i+1})(t-x)_+^0 \\ &= \frac{1}{t_{i+1} - t_i} (t-x)_+ \\ &= \frac{(t_{i+1} - x)_+^0 - (t_i - x)_+^0}{t_{i+1} - t_i}. \end{aligned}$$

Het bovenste deel van de breuk is gelijk aan 1 als $t_i \leq x < t_{i+1}$ en 0 anders, hierdoor volgt dus:

$$M_{i,1}(x) = \begin{cases} \frac{1}{t_{i+1} - t_i} & \text{als } t_i \leq x < t_{i+1}, \\ 0 & \text{anders.} \end{cases}$$

Hieruit volgt ook $N_{i,1}(x)$, sinds dit neer komt op vermenigvuldigen met $(t_{i+1} - t_i)$.

2. We leidden vroeger reeds af dat

$$M_{i,k+1}(x) = \sum_{s=i}^{i+k+1} \lambda_s f_s \quad \text{met} \quad f_s = (t_s - x)_+^k.$$

Wanneer nu $x \geq t_{i+k+1}$, dan zijn alle f_s in bovenstaande formule nul. Als $x \leq t_i$, dan mogen we in de uitdrukking voor f_s het vervangen door equivalente $(t - x)^k$ en dit voor elke s . De gewone B-spline wordt dan:

$$M_{i,k+1}(x) = \Delta_t^{k+1}(t_i, \dots, t_{i+k+1})(t-x)^k.$$

Dat is identiek nul, want differentie van orde $k+1$ van een veelterm van graad k is nul.

3. Voor $k \geq 1$ kunnen we schrijven dat:

$$(t-x)_+^k = (t-x)_+^{k-1}(t-x).$$

We vullen dit in in de definitie van $M_{i,k+1}(x)$ en passen de formule van Leibniz voor gedeelde differentie (zie Eigenschap 4.1) toe, namelijk:

$$f(x) = g(x)h(x) \Rightarrow f[x_i, \dots, x_j] = \sum_{k=i}^j g[x_i, \dots, x_k]h[x_k, \dots, x_j].$$

Omwillen van de factor $(t-x)$, een veelterm van graad 1 in t , bevatten de meeste termen in de

bovenstaande som een factor die gelijk is aan nul. We vinden:

$$\begin{aligned}
M_{i,k+1}(x) &= \Delta_t^{k+1}(t_i, \dots, t_{i+k+1})(t-x)_+^k \\
&= \Delta_t^{k+1}(t_i, \dots, t_{i+k+1})\{(t-x)_+^{k-1}(t-x)\} \\
&= \Delta_t^{k+1}(t_i, \dots, t_{i+k+1})(t-x)_+^{k-1} \cdot \Delta_t^0(t_{i+k+1})(t-x) + \\
&\quad \Delta_t^k(t_i, \dots, t_{i+k})(t-x)_+^{k-1} \cdot \Delta_t^1(t_{i+k}, t_{i+k+1})(t-x) \\
&= \Delta_t^{k+1}(t_i, \dots, t_{i+k+1})(t-x)_+^{k-1}(t_{i+k+1}-x) + M_{i,k}(x)
\end{aligned}$$

Men gebruikt nu de recursieve definitie van gedeelde differentie, om de differentie van orde $k+1$ in bovenstaande uitdrukking te schrijven als een lineaire combinatie van twee gedeelde differenties van orde k . Rekening houdend met de definitie van B-spline, verkrijgt men:

$$M_{i,k+1}(x) = \frac{M_{i+1,k}(x) - M_{i,k}(x)}{t_{i+k+1} - t_i}(t_{i+k+1} - x) + M_{i,k}(x).$$

Hieruit volgt de recursiebetrekking voor $M_{i,k+1}(x)$. De recursiebetrekking voor $N_{i,k+1}(x)$ volgt op analoge wijze.

4. We geven een bewijs gebaseerd op de recursiebetrekking en maken gebruik van volledige inductie.

Voor $k=1$ luidt de recursiebetrekking

$$M_{i,2}(x) = \frac{x - t_i}{t_{i+2} - t_i} M_{i,1}(x) + \frac{t_{i+2} - x}{t_{i+2} - t_{i+1}} M_{i+1,1}(x).$$

Schrijven we het rechterlid als $AB + CD$, dan is $A > 0$ voor $x \in (t_i, \infty)$, $B > 0$ voor $x \in [t_i, t_{i+1})$ en nul daarbuiten, $C > 0$ voor $x \in (-\infty, t_{i+2})$, $D > 0$ voor $x \in [t_{i+1}, t_{i+2})$ en nul daarbuiten. Uit dit alles volgt dat $M_{i,2}(x) > 0$ als $x \in (t_i, t_{i+2})$.

Voor de inductie stap bekijken we de recursiebetrekking M_i^{k+1} ,

$$M_{i,k+1}(x) = \frac{x - t_i}{t_{i+k+1} - t_i} M_{i,k}(x) + \frac{t_{i+k+1} - x}{t_{i+k+1} - t_i} M_{i+1,k}(x).$$

Schrijven we ook hier het rechterlid als $AB + CD$, dan is $A > 0$ voor $x \in (t_i, \infty)$, $B > 0$ als $x \in [t_i, t_{i+k})$ en nul daarbuiten, $C > 0$ voor $x \in (-\infty, t_{i+k+1})$, $D > 0$ als $x \in [t_{i+k}, t_{i+k+1})$ en nul daarbuiten. Er volgt dat $M_{i,k+1}(x) > 0$ als $x \in (t_i, t_{i+k+1})$.

□

5 Discrete benadering op basis van meetdata

6 Regularisatietechnieken

Data, Grafen en Eigenwaarden

- 7 Grafen en eigenwaarden in datawetenschappen
- 8 Eigenwaardenalgoritmes

Niet-lineaire Benaderingsproblemen

9 Niet-lineaire benaderingsproblemen

10 Optimalisatie-algoritmes

11 Ijle representatie en benaderingen

Appendix

