

## Numerische Mathematik I

Wochenzusammenfassung der Woche 10.12. - 14.12.

Beste Approximationen sind, zumindest unter den Voraussetzungen von Satz 14, nicht eindeutig bestimmt. Eindeutigkeit gilt, wenn die Haarsche Bedingung erfüllt ist, und die eindeutige Lösung wird mit Alternantenbedingungen charakterisiert:

**Definition 8.** Sei  $V \subset C[a, b]$  ein  $\mathbb{R}$ -Vektorraum der Dimension  $n$ . Man sagt,  $V$  erfüllt die *Haarsche Bedingung auf  $[a, b]$* , wenn gilt

$$\text{Für je } n \text{ verschiedene Punkte } x_1, \dots, x_n \in [a, b] \text{ gilt} \quad (1) \\ v \in V, v(x_1) = v(x_2) = \dots = v(x_n) = 0 \Rightarrow v = 0.$$

(Man sagt in diesem Fall auch:  $V$  ist ein Haarscher Raum.)

$\varepsilon \in C[a, b]$  hat eine *Alternante in  $x_1, \dots, x_m$* , wenn  $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_m \leq b$  gilt und

$$\varepsilon(x_i)\varepsilon(x_{i+1}) < 0 \quad \text{für } i = 1, \dots, m-1.$$

Beispielsweise erfüllt  $\mathcal{P}_n$  die Haarscher Bedingung in jedem Intervall  $[a, b] \subset \mathbb{R}$ , denn ein Polynom vom Grad  $\leq n$  hat nur dann  $\dim \mathcal{P}_n = n+1$  verschiedene Nullstellen in  $[a, b]$ , wenn es das Nullpolynom ist.

**Satz 15.** Sei  $V$  ein Haarscher Unterraum von  $C[a, b]$  mit  $\dim(V) = n$  und sei  $f$  ein beliebiges Element von  $C[a, b]$ . Dann ist die beste Approximation  $v^*$  in  $V$  an  $f$  eindeutig bestimmt. Die Fehlerfunktion  $\varepsilon := f - v^*$  besitzt in diesem Fall eine Alternante  $x_1, \dots, x_m$  mit  $m \geq n+1$  und

$$|\varepsilon(x_i)| = \|\varepsilon\|_\infty \quad \text{für } i = 1, \dots, m. \quad (2)$$

Wenn umgekehrt für ein  $\tilde{v} \in V$  die Fehlerfunktion  $\varepsilon := f - \tilde{v}$  eine Alternante  $x_1, \dots, x_m$  besitzt mit  $m \geq n+1$  und gilt (2), dann ist  $\tilde{v} \in V$  die beste Approximation  $v^*$  an  $f$  in  $V$ .

**Beispiel.** In Satz 6 wurde schon eine beste Approximation berechnet: Hierbei war  $[a, b] = [-1, 1]$  und  $f(x) = x^{n+1}$  sowie  $V = \mathcal{P}_n$ . Es wurde gezeigt, dass das Polynom

$$v^* := f - 2^{-n}T_{n+1} \in \mathcal{P}_n$$

beste Approximation an  $f$  in  $V = \mathcal{P}_n$  ist. Die Fehlerfunktion  $\varepsilon = f - v^*$  ist hier  $2^{-n}T_{n+1}$  und hat in den Punkten  $\cos(\frac{2j\pi}{n+1})$ ,  $j = 0, \dots, n+1$ , eine Alternante aus  $n+2 = \dim \mathcal{P}_n + 1$  Punkten, die (2) erfüllt wegen

$$2^{-n}T_{n+1}(\cos(\frac{2j\pi}{n+1})) = 2^{-n}(-1)^j = (-1)^j \|2^{-n}T_{n+1}\|_\infty, \quad j = 0, \dots, n.$$

**Satz 16 (de la Vallée Poussin).** Seien  $V$  und  $f$  wie in Satz 15. Wenn für ein  $v^+ \in V$  die Fehlerfunktion  $\varepsilon := f - v^+$  eine Alternante  $x_1, \dots, x_m$  besitzt mit  $m \geq n+1$ , dann gilt

$$\min_{i=1}^m |\varepsilon(x_i)| \leq \|f - v^*\|_\infty \leq \|f - v^+\|_\infty.$$

Einen Beweis findet man z.B. im Buch von M.W.Müller: Approximationstheorie, Akad. Verlagsgesellschaft, Wiesbaden, 1979.

Besonders elegant ist die Ungleichungskette von Satz 16, wenn unter den Alternantenpunkten einer das Betragsmaximum  $\|f - v^+\|_\infty$  erreicht, also  $|\varepsilon(x_k)| = \|f - v^+\|_\infty$  für ein  $k$ . Dann gilt nämlich die Ungleichungskette

$$\min_{i=1}^m |\varepsilon(x_i)| \leq \|f - v^*\|_\infty \leq \max_{i=1}^m |\varepsilon(x_i)|.$$

**Beispiel.** Betrachte  $f \in C[-2, 2]$  mit  $f(x) := x^2 - 1$  und  $V := \mathcal{P}_1$ . Dann erfüllt  $V$  die Haarsche Bedingung, weil in  $V$  nur das Nullpolynom 2 (= dim  $V$ ) verschiedene Nullstellen in  $[-2, 2]$  besitzt. Wenn man als  $v^+ \in V$  ein konstantes Polynom wählt,  $v^+ = a \in \mathcal{P}_0 \subset \mathcal{P}_1$ , dann ist  $x_0 = -2$ ,  $x_1 = 0$ ,  $x_2 = 2$  genau dann eine Alternante für die Fehlerfunktion  $\varepsilon$ , wenn gilt

$$\varepsilon(-2) = 3 - a > 0, \quad \varepsilon(0) = -1 - a < 0, \quad \varepsilon(2) = 3 - a > 0,$$

also genau dann wenn  $-1 < a < 3$ . Weil hier das Maximum von  $|\varepsilon|$  am Rand oder im Punkt 0 angenommen wird, gibt der Satz 16 dann die Ungleichungskette

$$\min\{a+1, 3-a\} \leq \|f - v^*\|_\infty \leq \max\{a+1, 3-a\}.$$

Obere und untere Schranke fallen zusammen, wenn  $a+1 = 3-a$ , also  $a = 1$ . In diesem Fall gilt

$$2 = \|f - v^*\|_\infty = 2$$

und  $\|f - v^*\|_\infty = \|f - v^+\|_\infty$ , also  $v^* = v^+ = 1$ . Und die Fehlerfunktion  $\varepsilon = f - 1$  hat in  $-2, 0, 2$  Alternantenpunkte, in denen abwechselnd die Werte  $2, -2, 2$  angenommen werden.

## ACHTUNG: HIER NACHTRAG ZU KAPITEL 2

### 2.6 Die Singulärwertzerlegung

**Definition.** Sei  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ . Eine Zerlegung

$$A = U\Sigma V^H$$

wird *Singulärwertzerlegung von A* genannt (engl.: singular value decomposition, kurz: SVD), wenn  $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$  und  $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$  unitäre Matrizen sind und

$$\Sigma = \text{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_r, 0, \dots, 0) \in \mathbb{C}^{m \times n} \quad \text{mit } \sigma_1 \geq \dots \geq \sigma_r > 0.$$

$\sigma_1, \dots, \sigma_r$  werden als *Singulärwerte von A* bezeichnet.

**Lemma 1.** Ist  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$ , dann stimmen die positiven Eigenwerte von  $A^H A$  und  $AA^H$  überein und haben die selbe Vielfachheit, d.h.,

$$\dim \text{Kern}(A^H A - \lambda E_n) = \dim \text{Kern}(AA^H - \lambda E_m)$$

für alle Eigenwerte  $\lambda > 0$  von  $A^H A$  (und  $AA^H$ ).

**Erinnerung.** Wegen  $x^H A^H A x = \|Ax\|_2^2 \geq 0$  und  $y^H AA^H y = \|A^H y\|_2^2 \geq 0$  sind  $A^H A$  und  $AA^H$  positiv semidefinite Matrizen. Als Hermitesche Matrizen sind sie unitär diagonalisierbar und haben nur reelle Eigenwerte, d.h. es gibt unitäre Matrizen  $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$  und  $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$ , sodass  $V^H A^H A V$  und  $U^H AA^H U$  Diagonalmatrizen sind. Auf ihren Diagonalen stehen die (reellen) Eigenwerte von  $A^H A$  bzw.  $AA^H$ . Weil  $A^H A$  und  $AA^H$  positiv semidefinit sind, sind die Eigenwerte sogar nicht-negativ. Und Lemma 1 besagt jetzt, wenn  $V^H A^H A V = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0)$  mit  $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > 0$  und  $n - r$  Nullen auf der Diagonalen, dann ist auch (evtl. nach Umsortieren der Spalten von  $U$ ) auch die Diagonalmatrix  $U^H AA^H U$  gleich  $\text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_r, 0, \dots, 0)$  mit den selben  $\lambda_1, \dots, \lambda_r$  und  $m - r$  Nullen auf der Diagonalen.

**Lemma 2.** Für  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$  ist

$$\text{Rang}(A) = \text{Rang}(A^H) = \text{Rang}(A^H A) = \text{Rang}(AA^H)$$

gleich der Anzahl der positiven Eigenwerte von  $A^H A$  (bzw.  $AA^H$ ) mit Vielfachheit gezählt.

**Satz 11.** Sei  $A \in \mathbb{C}^{m \times n}$  mit  $r = \text{Rang}(A)$ . Dann existieren unitäre Matrizen  $U \in \mathbb{C}^{m \times m}$  und  $V \in \mathbb{C}^{n \times n}$  mit

$$U^H A V = \begin{pmatrix} \sigma_1 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \sigma_2 & & & & \\ \vdots & & \ddots & & & \\ 0 & & & \sigma_r & & \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 0 & & \cdots & & & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{C}^{m \times n},$$

wobei  $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \dots \geq \sigma_r > 0$ .

Der Beweis zeigt, dass  $V$  als Spalten die Eigenvektoren  $v_i$  von  $A^H A$  enthält mit  $v_i^H v_j = \delta_{ij}$  und  $A^H A v_i = \lambda_i v_i$  mit  $\lambda_1 \geq \dots \geq \lambda_r > \lambda_{r+1} = \dots = \lambda_n = 0$ . Man kann die Spalten  $u_i$  von  $U$  so wählen, dass sie orthonormal sind und dass  $u_i = \frac{1}{\sigma_i} A v_i$  für  $i = 1, \dots, r$  gilt. Die Singulärwerte sind  $\sigma_i = \sqrt{\lambda_i}$ ,  $i = 1, \dots, r$ .

Sei jetzt  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $b \in \mathbb{R}^m$ . Bei der Methode der kleinsten Quadrate ist das  $x^* \in \mathbb{R}^n$ , das

$$\|Ax^* - b\|_2^2 = \min_{x \in \mathbb{R}^n} \|Ax - b\|_2^2$$

löst, nicht eindeutig durch die Normalgleichungen

$$A^T A x^* = A^T b$$

bestimmt.  $x^*$  ist genau dann eindeutig bestimmt, wenn die  $n \times n$ -Matrix  $A^T A$  vollen Rang hat. Dann gilt  $x^* = (A^T A)^{-1} A^T b$ . Um in den anderen Fällen auch von einer eindeutigen Lösung des Minimierungsproblems reden zu können, fordern wir, dass  $x^*$  nicht nur die Normalgleichungen löst, sondern sogar

$$x \in \mathbb{R}^n, \quad A^T A x = A^T b \Rightarrow \|x\|_2 \geq \|x^*\|_2, \quad (3)$$

erfüllt, dass also unter allen Lösungen der Normalgleichungen  $x^*$  die kleinste Norm hat. Es zeigt sich mit Hilfe der Singulärwerte, dass hierdurch das  $x^*$  eindeutig bestimmt ist:

**Satz 12.** Es sei  $A = U \Sigma V^T$  die Singulärwertzerlegung von  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $\text{Rang}(A) = r$ . Dann ist

$$x^* = \sum_{i=1}^r \frac{u_i^T b}{\sigma_i} v_i$$

die eindeutig bestimmte Lösung der Normalgleichungen, die (3) erfüllt. Für die Fehlerfunktion  $\varepsilon := Ax^* - b$  gilt

$$\|\varepsilon\|_2^2 = \sum_{i=r+1}^m (u_i^T b)^2.$$

Mit  $\Sigma^+ := \text{diag}(\sigma_1^{-1}, \sigma_2^{-1}, \dots, \sigma_r^{-1}, 0, \dots, 0) \in \mathbb{R}^{n \times m}$  kann man  $x^*$  kompakter schreiben als

$$x^* = V\Sigma^+U^Tb$$

oder noch kürzer mit  $A^+ := V\Sigma^+U^T$  als

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

Die Norm der Fehlerfunktion  $\varepsilon := Ax^* - b$  hat dann die Darstellung

$$\|\varepsilon\|_2 = \|(E - AA^+)b\|_2.$$

Die Matrix  $A^+ \in \mathbb{R}^{n \times n}$  heißt *Moore-Penrose Inverse* oder auch *Pseudo-Inverse*.

**Definition 10.** Das Matrizenpaar  $(A, B)$  mit  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $B \in \mathbb{R}^{n \times m}$  erfüllt die sogenannten *vier Moore-Penrose Gleichungen*, wenn gilt

$$\begin{aligned} AB &= (AB)^T, & BA &= (BA)^T, \\ ABA &= A, & BAB &= B. \end{aligned}$$

**Satz 13.** Sei  $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$  und  $A^+$  sei Pseudo-Inverse zu  $A$ . Dann gilt

- (i)  $(A, A^+)$  erfüllt die vier Moore-Penrose Gleichungen.
- (ii) Wenn  $(A, B)$  und  $(A, C)$  die vier Moore-Penrose Gleichungen erfüllen, dann gilt  $B = C$ .
- (iii)  $(A^+)^T = (A^T)^+$ .
- (iv) Ist  $\text{Rang}(A) = n$ , dann gilt  $A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$ .
- (v) Ist  $\text{Rang}(A) = m$ , dann gilt  $A^+ = A^T (A A^T)^{-1}$ .
- (vi) Ist  $n = m = \text{Rang}(A)$ , dann gilt  $A^+ = A^{-1}$ .

**Beispiel.**  $A := (-1, 1, 0) \in \mathbb{R}^{1 \times 3}$  hat vollen Zeilenrang. Also nach Satz 13(v)

$$A^+ = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \left( (-1, 1, 0) \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \right)^{-1} = \begin{pmatrix} -1 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix} \cdot \frac{1}{2} = \begin{pmatrix} -1/2 \\ 1/2 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Die Matrix

$$A_1 = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

hat Rang 1. Es gilt

$$A_1^T A_1 = \begin{pmatrix} 3 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 3 \\ 3 & 3 & 3 \end{pmatrix}.$$

Der Vektor  $(1, 1, 1)^T$  ist Eigenvektor zum Eigenwert 9 von  $A_1^T A_1$ . Auf (Eu-  
klidische) Länge 1 normiert gibt das

$$v_1 := \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right)^T.$$

Orthonormierte Eigenvektoren zum Eigenwert 0 sind

$$v_2 := \left( \frac{1}{\sqrt{2}}, -\frac{1}{\sqrt{2}}, 0 \right)^T \quad \text{und} \quad v_3 := \left( \frac{1}{\sqrt{6}}, \frac{1}{\sqrt{6}}, -\frac{2}{\sqrt{6}} \right)^T.$$

Der (einzige) Singulärwert von  $A_1$  ist dann  $\sigma_1 = 3$ . Man erhält aus  $u_1 = \frac{1}{\sigma_1} A_1 v_1$ , dass  $u_1 = v_1$  gilt. Wählt man dann  $u_2 = v_2$  und  $u_3 = v_3$ , dann bekommt man die Singulärwertzerlegung

$$V \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} V^T = 3v_1 v_1^T = A_1$$

und

$$A_1^+ = V \begin{pmatrix} 1/3 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} V^T = \frac{1}{9} A_1.$$

Für  $\varepsilon \neq 1$  sei

$$A_\varepsilon = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & \varepsilon \end{pmatrix}.$$

Es gilt  $\text{Rang}(A_\varepsilon) = 2$ . (Harte) Rechnung gibt

$$A_\varepsilon^+ = \begin{pmatrix} \frac{\varepsilon}{4\varepsilon-4} & \frac{\varepsilon}{4\varepsilon-4} & \frac{-1}{2\varepsilon-2} \\ \frac{\varepsilon}{4\varepsilon-4} & \frac{\varepsilon}{4\varepsilon-4} & \frac{-1}{2\varepsilon-2} \\ \frac{-1}{2\varepsilon-2} & \frac{-1}{2\varepsilon-2} & \frac{1}{\varepsilon-1} \end{pmatrix}.$$

Dieses Beispiel zeigt, dass die Pseudo-Inverse  $A^+$  nicht stetige Funktion der  
Einträge der Matrix  $A$  ist, denn hier gilt

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 1} A_\varepsilon^+ \neq A_1^+.$$

Es gibt Verfahren zur Berechnung der Pseudo-Inversen ohne Verwendung der  
Singulärwerte (s. ergänzendes Material zur Moore-Penrose-Inversen). In dem  
ergänzenden Material wird ein Algorithmus gezeigt, der nur mit rationalen  
Operationen arbeitet. Wenn also alle Einträge von  $A$  rational sind, dann  
sind auch die Einträge von  $A^+$  rational. Bei Benutzung der (in der Regel  
irrationalen) Singulärwerte ist dieses Phänomen nicht offensichtlich.