PROF. DR. BERND SIMEON
CHRISTIAN GOBERT
THOMAS MÄRZ

TECHNISCHE UNIVERSITÄT MÜNCHEN

Numerik

SS 2009

Lösungsvorschläge zu Übungsblatt 6

Aufgabe 1: *(Singulärwertzerlegung)*

Sei $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ beliebig. Dann gibt es unitäre Matrizen $U \in \mathbb{C}^{m\times m}$ und $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$ so, dass

$$A = U\Sigma V^H \quad \text{mit} \quad \Sigma = \begin{pmatrix} \hat{\Sigma} & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \in \mathbb{R}^{m\times n}\,, \quad \hat{\Sigma} = \operatorname{diag}(\sigma_1, \ldots, \sigma_p)\,.$$

Dabei gilt $\sigma_1 \geq \sigma_2 \geq \cdots \geq \sigma_p > 0$.

a) Die Null-blöcke in Σ können auch wegfallen. Unter welchen Konstellationen von n, m und $\operatorname{rang}(A)$ verschwinden welche dieser Null-blöcke? Was bedeutet der Index p ?

b) Partitionieren Sie $U = [U_1|U_2]$ und $V = [V_1|V_2]$ geeignet, um die sogenannte reduzierte Singulärwertzerlegung
$$A = U_1\hat{\Sigma}V_1^H$$
zu erhalten. Was haben die Informationen U_1, U_2, V_1, V_2 mit $\operatorname{kern}(A)$, $\operatorname{kern}(A^H)$, $\operatorname{bild}(A)$ und $\operatorname{bild}(A^H)$ zu tun ?

c) Benutzen Sie die Resultate aus b), um die Beziehungen
$$\operatorname{kern}(A) \perp \operatorname{bild}(A^H) \quad , \quad \operatorname{kern}(A^H) \perp \operatorname{bild}(A)$$
zu zeigen.

d) Zeigen Sie: Falls $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ normal ist, dann gelten
$$\operatorname{kern}(A) = \operatorname{kern}(A^H) \quad , \quad \operatorname{bild}(A) = \operatorname{bild}(A^H)\,.$$
Hinweis: Was haben die Matrizen der Diagonalisierung $A = QDQ^H$ mit denen der Singulärwertzerlegung zu tun ? Welche Beziehung besteht in diesem Spezialfall zwischen Eigenwert und Singulärwert ?

e) Die 2-Norm für Matrizen:

   i) Falls $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ hermitesch ist, so sind die Eigenwerte bekanntlich reell. Zeigen Sie für hermitsches A:
   $$\lambda_{\min} \leq \frac{x^H A x}{x^H x} \leq \lambda_{\max}\,,$$
   d.h. der Rayleigh-Quotient liegt zwischen minimalem und maximalem Eigenwert. Begründen Sie außerdem, dass die Grenzen angenommen werden.

   ii) Die 2-Norm für Matrizen $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$ ist mit Hilfe der 2-Norm für Vektoren definiert als
   $$\|A\|_2 = \max_{x\neq 0} \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2}\,.$$
   Benutzen Sie (a), um zu begründen, dass $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^H A)}$ gilt.

iii) Benutzen Sie (b) und die Singulärwertzerlegung von $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$, um zu begründen, dass

$$\sigma_1 = \|A\|_2$$

gilt, also der maximale Singulärwert genau die Norm ist.

iv) Sei jetzt $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ invertierbar. Begründen Sie, dass $\sigma_n \neq 0$ ist und außerdem

$$\frac{1}{\sigma_n} = \|A^{-1}\|_2$$

gilt. Wie berechnen Sie die Kondition $\kappa_2(A)$ bzgl. $\|.\|_2$?

f) Die Singulärwertzerlegung kann stabil berechnet werden, siehe z.B. das Buch "Matrix Computations" von G.H. Golub und C.F. van Loan. Zur Zusammenfassung: Warum ist das so toll ?

Lösung Aufgabe 1:

a) Der Index p is genau der Rang von A. Wenn der Rang nicht voll ist, dann hat man drei Null-blöcke. Wenn A vollen Rang hat fallen gewisse Null-blöcke weg:

(a) $n = m$, dann keine Null-blöcke.

(b) $m > n$, nur ein unterer Null-block.

(c) $n > m$, nur ein rechter Null-block.

b) Die Submatrizen U_1 und V_1 für die Partitionierung $U = [U_1|U_2]$ und $V = [V_1|V_2]$ bestehen jeweils aus den ersten p Spalten. Partitionierung in die Singulärwertzerlegung einsetzen und durchrechnen liefert:

$$A = U_1\hat{\Sigma}V_1^H \ .$$

An der reduzierten Gestalt lässt sich ablesen:

- $A = U_1 \cdot (\hat{\Sigma}V_1^H)$, also U_1 ist ONB von bild(A).
- $A^H = V_1 \cdot (\hat{\Sigma}U_1^H)$, also V_1 ist ONB von bild(A^H).
- Wegen Orthogonalität gilt $AV_2 = U_1\hat{\Sigma}V_1^H V_2 = 0$, also V_2 ist ONB von kern(A).
- Wegen Orthogonalität gilt $A^H U_2 = V_1\hat{\Sigma}U_1^H U_2 = 0$, also U_2 ist ONB von kern(A^H).

c) Wir haben vorher rausgefunden:

- bild$(A) =$ span(U_1)
- bild$(A^H) =$ span(V_1)
- kern$(A) =$ span(V_2)
- kern$(A^H) =$ span(U_2)

damit sind die zu zeigenden Aussagen klar.

d) Generell: die Produktmatrizen AA^H und $A^H A$ sind hermitesch und Matrizen U, V aus der Singulärwertzerlegung sind dann wegen

$$AA^H = U\Sigma^2 U^H \quad , \quad A^H A = V\Sigma^2 V^H$$

die Transformationsmatrizen der Eigenwertzerlegungen dieser Produktmatrizen. Wenn nun A selbst normal ist, haben wir mit $A = QDQ^H$

$$AA^H = QDD^HQ^H = QD^HDQ^H = A^HA \; .$$

Man einige sich auf die Reihenfolge der Eigenwerte in D so, dass die Diagonale in der reellen Matrix DD^H absteigend sortiert ist, dann muss wegen Eindeutigkeit $Q = U = V$ gelten und Teil c) liefert die Aussagen. Außerdem haben wir $\Sigma^2 = DD^H$, also für normale Matrizen sind die Singulärwerte die Beträge der Eigenwerte.

e) Die 2-Norm für Matrizen:

   i) Wir haben $A = QDQ^H$ als Eigenwertzerlegung und reelle Eigenwerte. Außerdem gilt dann

   $$\frac{x^HAx}{x^Hx} = \frac{x^HQDQ^Hx}{x^HQQ^Hx} = \frac{y^HDy}{y^Hy}$$

   also die Rayleigh-Quotientenfunktion von A und die von D haben den selben Wertebereich.

   $$\frac{y^HDy}{y^Hy} = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \frac{\bar{y}_k y_k}{\|y\|^2} = \sum_{k=1}^{n} \lambda_k \frac{|y_k|^2}{\|y\|^2} \; ,$$

   nachdem nun

   $$\frac{|y_k|^2}{\|y\|^2} \geq 0 \quad , \quad \sum_{k=1}^{n} \frac{|y_k|^2}{\|y\|^2} = 1$$

   gelten, steht oben eine Konvexkombination der Eigenwerte, die zwangsläufig zwischen Minimum und Maximum liegt. Nachdem es zu jedem Eigenwert mindestens einen Eigenvektor gibt, werden diese Grenzen auch angenommen.

   ii) Man schreibe:

   $$\frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} = \sqrt{\frac{x^H(A^HA)x}{x^Hx}} \; .$$

   Weil (A^HA) hermitesch und positiv semidefinit ist folgt aus (a) sofort $\|A\|_2 = \sqrt{\lambda_{\max}(A^HA)}$.

   iii) Es gilt ja $A^HA = V\Sigma^2V^H$ also ist $\sigma_1^2 = \lambda_{\max}(A^HA)$ und (b) liefert die Beh.

   iv) A muss vollen Rang haben, also $p = n$ und somit $\sigma_n > 0$. Über

   $$A^{-1} = U\Sigma^{-1}V^H$$

   erhalten wir eine Singulärwertzerlegung der Inversen. Dabei sind die Singulärwerte jetzt aufsteigend auf der Diagonalen sortiert also folgt

   $$\frac{1}{\sigma_n} = \|A^{-1}\|_2 \quad \text{und} \quad \kappa_2(A) = \frac{\sigma_1}{\sigma_n} \; .$$

f) Ist halt so.

Aufgabe 2: *Robertson-Beispiel*

Die chemische Reaktion dreier Substanzen A, B, C sei durch die folgenden Gesetze beschrieben:

$$\begin{aligned} A &\overset{k_1}{\to} B, && (1)\\ B+B &\overset{k_2}{\to} B+C, && (2)\\ B+C &\overset{k_3}{\to} A+C && (3) \end{aligned}$$

mit Reaktionsgeschwindigkeiten $k_1 = 0.04, k_2 = 3\cdot 10^7, k_3 = 10^4$. Man stelle das zugehörige Differentialgleichungssystem für die Konzentrationen $y_1 = [A], y_2 = [B], y_3 = [C]$ auf.

Lösung Aufgabe 2:

Aufstellen der DGL siehe Skript. Hier mit derselben Notation:

$$\alpha = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\gamma = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Damit:

$$\begin{aligned} \dot{y}_1 &= -k_1 y_1 + k_3 y_2 y_3 && (4)\\ \dot{y}_2 &= k_1 y_1 - k_2 y_2^2 - k_3 y_2 y_3 && (5)\\ \dot{y}_3 &= k_2 y_2^2 && (6) \end{aligned}$$