

Kernmethoden

Skript zur Vorlesung
im
Frühjahrssemester 2023

Helmut Harbrecht

Stand: 9. Juni 2023

Vorwort

Diese Mitschrift kann und soll nicht ganz den Wortlaut der Vorlesung wiedergeben. Sie soll das Nacharbeiten des Inhalts der Vorlesung erleichtern. Hilfreich, aber nicht notwendig, zum Verstehen der Vorlesung sind Kenntnisse aus der Numerischen Mathematik, wie man sie beispielsweise in folgenden Büchern findet:

- M. Hanke-Bourgeois: *Grundlagen der Numerischen Mathematik und des Wissenschaftlichen Rechnens*, Teubner-Verlag
- R. Schaback und H. Wendland: *Numerische Mathematik*, Springer-Verlag
- J. Stoer und R. Bulirsch: *Numerische Mathematik I+II*, Springer-Verlag

Literatur zur Vorlesung:

- H. Wendland: *Scattered Data Approximation*, Cambridge University Press.
- G. Fasshauer und M. McCourt: *Kernel-Based Approximation Methods Using Matlab*, World Scientific Publishing Company.

Inhaltsverzeichnis

1	Motivation	5
2	Grundlagen	9
2.1	Die Räume $C^k(\Omega)$, $C^{k,\alpha}(\Omega)$ und $L^p(\Omega)$	9
2.2	Verallgemeinerte Ableitung und Sobolev-Räume	11
2.3	Distributionen und Sobolev-Räume	14
3	Native Spaces	20
3.1	Reproducing Kernel Hilbert Spaces	20
3.2	Positiv definite Kerne	21
3.3	Native Spaces und Sobolev-Räume	24
4	Fehleranalysis	27
4.1	Power Function	27
4.2	Fill Distance und Approximationsfehler	30
5	Pivotisierte Cholesky-Zerlegung	33
5.1	Über die Cholesky-Zerlegung	33
5.2	Niedrigrangapproximation	34
5.3	Newton-Basis	37
6	Spektrale Eigenschaften	40
6.1	Spektralzerlegung	40
6.2	Hilbert-Schmidt-Operatoren	43
6.3	Spektralabschätzungen	45
6.4	Spektrale Basen im RKHS	47
7	\mathcal{H}-Matrixapproximation	51
7.1	Niedrigrangapproximation	51
7.2	Clusterbaum	52
7.3	Partition der Kernmatrix	53
7.4	Kernentwicklung	55
7.5	Aufwand	55
8	Support Vector Machines	56
8.1	Lineare Support Vector Machines	56
8.2	Duale Formulierung	58
8.3	Nicht linear-separierbarer Fall	60
8.4	Feature Maps	61

8.5 Nichtlineare Support Vector Machines	62
--	----

1. Motivation

Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet, das auch unbeschränkt sein kann. Wir wollen gleich voll einsteigen mit folgender Definition:

Definition 1.1 (Reproducing Kernel Hilbert Space) Ein **reproduzierender Kern** κ von einem Hilbert-Raum \mathcal{H} mit Innenprodukt $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}}$ ist eine Funktion $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ derart, dass

1. $\kappa(\cdot, \mathbf{x}) \in \mathcal{H}$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega$,
2. $u(\mathbf{x}) = (u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}}$ für alle $u \in \mathcal{H}$ und alle $\mathbf{x} \in \Omega$.

Ein Hilbert-Raum \mathcal{H} mit reproduzierendem Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ wird **Reproducing Kernel Hilbert Space (RKHS)** genannt.

Ein stetiger Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ wird als *positiv semidefinit* auf $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ bezeichnet, wenn

$$\sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \geq 0 \quad (1.1)$$

gilt für alle $N \in \mathbb{N}$, alle Mengen paarweise verschiedener Punkte $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ und alle $\boldsymbol{\alpha} = (\alpha_1, \dots, \alpha_N)^\top \in \mathbb{R}^N$. Der Kern ist sogar *positiv definit*, falls die Ungleichung in (1.1) streng ist, sofern $\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{0}$ gilt.

Wir interessieren uns speziell für *radiale Kernfunktionen*, das heißt für Kerne der Form

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := \varphi(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|_2) \quad (1.2)$$

mit $\varphi : [0, \infty) \rightarrow \mathbb{R}$. Ein typisches Beispiel eines solchen radialen Kerns ist der *Gauß-Kern*

$$\varphi(r) = e^{-\sigma^2 r^2}. \quad (1.3)$$

Dieser ist ein Spezialfall der Klasse der *Matérn-Kerne*.

Definition 1.2 Es sei $\sigma \in (0, \infty)$. Dann ist der **Matérn-Kern** $\kappa_\nu(\mathbf{x}, \mathbf{x}') := \varphi_\nu(\|\mathbf{x} - \mathbf{x}'\|_2)$ der Ordnung $\nu > 0$ gegeben durch

$$\varphi_\nu(r) := \frac{2^{1-\nu}}{\Gamma(\nu)} \left(\frac{\sqrt{2\nu}r}{\sigma} \right)^\nu K_\nu \left(\frac{\sqrt{2\nu}r}{\sigma} \right). \quad (1.4)$$

Hierbei bezeichnet K_ν die modifizierte Bessel-Funktionen zweiter Art der Ordnung ν und Γ ist die Gamma-Funktion.

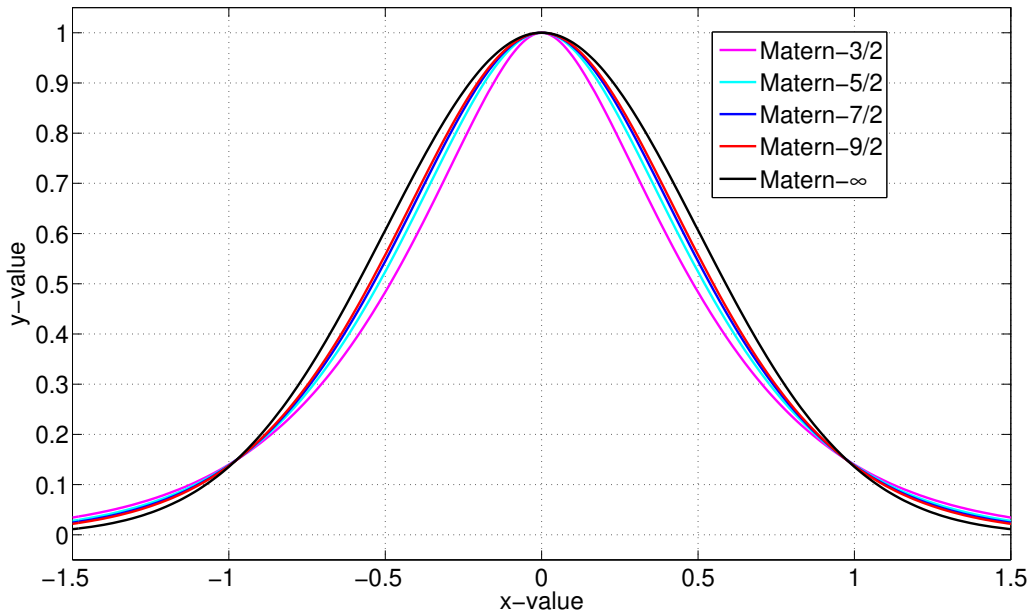


Abbildung 1.1: Matérn-Kerne für verschiedene Parameter ν .

Beispiel 1.3 Der Ausdruck (1.4) lässt sich im Fall $\nu = p + 1/2$ mit $p \in \mathbb{N}_0$ vereinfachen. Es gilt dann

$$\varphi_{p+1/2}(r) = \exp\left(-\frac{\sqrt{2\nu}r}{\sigma}\right) \frac{p!}{(2p)!} \sum_{i=0}^p \frac{(p+i)!}{i!(p-i)!} \left(\frac{\sqrt{8\nu}r}{\sigma}\right)^{p-i}.$$

So ergibt sich etwa

$$\begin{aligned} \nu = \frac{1}{2}, & \quad \varphi_{1/2}(r) = \exp\left(-\frac{r}{\sigma}\right), \\ \nu = \frac{3}{2}, & \quad \varphi_{3/2}(r) = \left(1 + \frac{\sqrt{3}r}{\sigma}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{3}r}{\sigma}\right), \\ \nu = \frac{5}{2}, & \quad \varphi_{5/2}(r) = \left(1 + \frac{\sqrt{5}r}{\sigma} + \frac{5r^2}{3\sigma^2}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{5}r}{\sigma}\right), \\ \nu = \frac{7}{2}, & \quad \varphi_{7/2}(r) = \left(1 + \frac{\sqrt{7}r}{\sigma} + \frac{14r^2}{5\sigma^2} + \frac{49\sqrt{7}r^3}{15\sigma^3}\right) \exp\left(-\frac{\sqrt{7}r}{\sigma}\right), \\ \nu = \frac{9}{2}, & \quad \varphi_{9/2}(r) = \left(1 + \frac{3r}{\sigma} + \frac{27r^2}{7\sigma^2} + \frac{18r^3}{7\sigma^3} + \frac{27r^4}{35\sigma^3}\right) \exp\left(-\frac{3r}{\sigma}\right), \\ \nu = \infty, & \quad \varphi_{\infty}(r) = \exp\left(-\frac{r^2}{2\sigma^2}\right). \end{aligned}$$

Ein Visualisierung dieser Kerne für verschiedene Werte von ν ist in Abbildung 1.1 zu finden. Aus dieser geht hervor, dass der Parameter ν offensichtlich die Glattheit der Kernfunktion beschreibt. Der analytische Gauß-Kern ergibt sich als Grenzfall $\nu \rightarrow \infty$.

△

Die erste Eigenschaft aus Definition 1.1 impliziert, dass \mathcal{H} alle Funktionen der Form

$$u = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i) \quad (1.5)$$

enthält, vorausgesetzt die Punkte $\{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ genügen für jedes $j \in \{1, \dots, N\}$ der Bedingung $\mathbf{x}_j \in \Omega$. Ist

$$v = \sum_{j=1}^N \beta_j \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j)$$

eine zweite Funktion der Form (1.5), so folgt wegen der zweiten Eigenschaft aus Definition 1.1, dass

$$(u, v)_{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \beta_j \underbrace{(\kappa(\cdot, \mathbf{x}_i), \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j))_{\mathcal{H}}}_{=\kappa(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_i)=\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)} = \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N \alpha_i \beta_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \quad (1.6)$$

Beachte, dass wir hier ausgenutzt haben, dass die Symmetrie des $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}}$ -Innenprodukts bereits die Symmetrie des reproduzierenden Kerns κ impliziert.

Wir wählen nun N paarweise verschiedene Punkte $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ beliebig aber fest und setzen $\phi_j := \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j)$ für alle $j \in \{1, \dots, N\}$. Damit können wir den N -dimensionalen Unterraum

$$\mathcal{H}_X := \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_N\} \subset \mathcal{H}$$

definieren. Die \mathcal{H} -orthogonale Projektion einer vorgegebenen Funktion $f \in \mathcal{H}$ auf \mathcal{H}_X ist gegeben als Lösung des Variationsproblems

$$\text{suche } u \in \mathcal{H}_X, \text{ so dass } (u, v)_{\mathcal{H}} = (f, v)_{\mathcal{H}} \text{ für alle } v \in \mathcal{H}_X.$$

Der Ansatz $u = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi_i$ führt in Anbetracht von (1.6) und der zweiten Eigenschaft aus Definition 1.1 auf das lineare Gleichungssystem

$$\mathbf{A} \boldsymbol{\alpha} = \boldsymbol{\beta}$$

mit der Kernmatrix

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_1) & \cdots & \kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \kappa(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_1) & \cdots & \kappa(\mathbf{x}_N, \mathbf{x}_N) \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

und der rechten Seite $\boldsymbol{\beta} = (f(\mathbf{x}_1), \dots, f(\mathbf{x}_N))^{\top}$. Insbesondere erkennen wir, dass das entstehende Gleichungssystem gerade mit der Interpolation in den Punkten $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ zusammenfällt:

$$u(\mathbf{x}_j) = \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(\mathbf{x}_j) \stackrel{!}{=} f(\mathbf{x}_j) \text{ für alle } j = \{1, \dots, N\}.$$

In einem RKHS ist die Interpolation einer Funktion $u \in \mathcal{H}_X$ in den Punkten X demnach die Bestapproximation von $f \in \mathcal{H}$ in \mathcal{H}_X . Daher spricht man auch von *Kerninterpolation*. Da die Kerninterpolation auf beliebig unstrukturierten Punktmengen funktioniert, wird sie gerne zur Approximation unstrukturierter Daten eingesetzt. Solche unstrukturierten Daten gibt es in der Computergraphik, aber auch beim maschinellen Lernen hochdimensionaler Datensätze.

Wir wollen folgende Fragen beantworten:

1. Welche Eigenschaften haben RKHS? Wie sehen sinnvolle Kerne aus und welche Räume werden durch Kerne induziert?
2. Wie genau ist die Kerninterpolation? Wir wollen also die Frage beantworten, wie groß der Fehler

$$\inf_{u_X \in \mathcal{H}_X} \|u - u_X\|$$

bezüglich einer geeigneten Norm $\|\cdot\|$ ist.

3. Da der Kern κ im allgemeinen eine nichtlokale Funktion ist, ist die Kernmatrix \mathbf{A} aus (1.7) vollbesetzt. Das Speichern und Lösen des resultierenden Gleichungssystems ist daher nur im begrenzten Rahmen möglich. Wir werden geeignete Matrixnäherungsverfahren studieren, mit denen auch große Probleme gelöst werden können.

2. Grundlagen

2.1 Die Räume $C^k(\Omega)$, $C^{k,\alpha}(\Omega)$ und $L^p(\Omega)$

Definition 2.1 Für $d \in \mathbb{N}$ heißt der Vektor $\boldsymbol{\beta} = (\beta_1, \beta_2, \dots, \beta_d)$, $\beta_i \in \mathbb{N}_0$, **Multiindex** mit dem **Betrag** $|\boldsymbol{\beta}| = \beta_1 + \beta_2 + \dots + \beta_d$ und der **Fakultät** $\boldsymbol{\beta}! = \beta_1! \beta_2! \dots \beta_d!$.

Für $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ ist $\mathbf{x}^{\boldsymbol{\beta}} = x_1^{\beta_1} x_2^{\beta_2} \dots x_d^{\beta_d}$, und für eine hinreichend oft differenzierbare Funktion u kann die Berechnung partieller Ableitungen geschrieben werden als

$$\partial^{\boldsymbol{\beta}} u(\mathbf{x}) = \left(\frac{\partial}{\partial x_1} \right)^{\beta_1} \left(\frac{\partial}{\partial x_2} \right)^{\beta_2} \dots \left(\frac{\partial}{\partial x_d} \right)^{\beta_d} u(x_1, x_2, \dots, x_d).$$

Definition 2.2 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Gebiet und $k \in \mathbb{N}_0$, dann bezeichnet $\mathbf{C}^k(\Omega)$ den Raum der auf Ω beschränkten und k -mal stetig differenzierbaren Funktionen, versehen mit der Norm

$$\|u\|_{\mathbf{C}^k(\Omega)} := \sum_{|\boldsymbol{\beta}| \leq k} \sup_{\mathbf{x} \in \Omega} |\partial^{\boldsymbol{\beta}} u(\mathbf{x})|.$$

Entsprechend definiert $\mathbf{C}^\infty(\Omega)$ den Raum der beschränkten und unendlich oft differenzierbaren Funktionen, wobei

$$\mathbf{C}_0^\infty(\Omega) := \{u \in \mathbf{C}^\infty(\Omega) : \text{supp } u \subset \Omega\}$$

der Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen mit kompaktem Träger ist.

Die Funktionenräume der stetigen Funktionen können noch feiner eingeteilt werden, wenn man zusätzlich auch die Hölder-Stetigkeit der darin enthaltenen Funktionen misst.

Definition 2.3 Für $k \in \mathbb{N}_0$ und $\alpha \in (0, 1]$ definiert $\mathbf{C}^{k,\alpha}(\Omega)$ den Raum der auf Ω Hölder-stetigen Funktionen, versehen mit der Norm

$$\|u\|_{\mathbf{C}^{k,\alpha}(\Omega)} := \|u\|_{\mathbf{C}^k(\Omega)} + \sum_{|\boldsymbol{\beta}|=k} \sup_{\substack{\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega \\ \mathbf{x} \neq \mathbf{y}}} \frac{|\partial^{\boldsymbol{\beta}} u(\mathbf{x}) - \partial^{\boldsymbol{\beta}} u(\mathbf{y})|}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^\alpha}.$$

Speziell für $\alpha = 1$ ist $\mathbf{C}^{k,1}(\Omega)$ der Raum aller Funktionen, deren Ableitungen $\partial^{\boldsymbol{\beta}} u$ der Ordnung $|\boldsymbol{\beta}| = k$ Lipschitz-stetig sind.

Für alle $k \in \mathbb{N}_0$ und $\alpha \in (0, 1]$ sind sowohl $C^k(\Omega)$ als auch $C^{k,\alpha}(\Omega)$ Banach-Räume.

Definition 2.4 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$, $d \geq 2$, ein Gebiet. Das Gebiet wird als **Lipschitz-Gebiet** bezeichnet, falls der Rand $\Gamma = \partial\Omega$ kompakt ist und bezüglich einer beliebigen Zerlegung

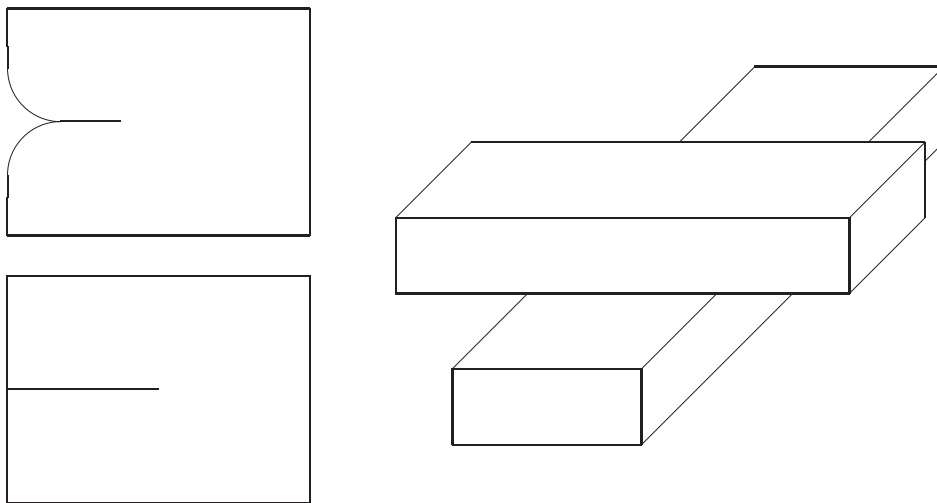
$$\Gamma = \bigcup_{i=1}^m \Gamma_i \quad \text{mit} \quad \Gamma_i = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d : \mathbf{x} = \boldsymbol{\gamma}_i(\mathbf{s}) \text{ für } \mathbf{s} \in \Sigma_i \subset \mathbb{R}^{d-1}\} \quad (2.1)$$

dargestellt werden kann, wobei jede Parametrisierung $\boldsymbol{\gamma}_i : \Sigma_i \rightarrow \Gamma_i$ der Form

$$\boldsymbol{\gamma}_i(\mathbf{s}) = \mathbf{T}_i \begin{bmatrix} \mathbf{s} \\ \zeta_i(\mathbf{s}) \end{bmatrix}$$

genüge mit einer Lipschitz-stetigen Funktion $\zeta_i : \Sigma_i \rightarrow \mathbb{R}$ und einer orthogonalen Matrix $\mathbf{T}_i \in \mathbb{R}^{d \times d}$. Hierbei werden die Parameterbereiche Σ_i und auch die Randstücke $\Gamma_i \subset \Gamma$ als offen vorausgesetzt. Die lokale Darstellung (2.1) ist im allgemeinen nicht eindeutig.

Beispiel 2.5 Keine Lipschitz-Gebiete sind etwa:



△

Erfüllen die lokalen Parametrisierungen sogar $\boldsymbol{\gamma}_i \in C^k(\Sigma_i)$ oder $\boldsymbol{\gamma}_i \in C^{k,\alpha}(\Sigma_i)$ für alle $i = 1, 2, \dots, m$, dann ist der Rand entsprechend k -mal stetig differenzierbar beziehungsweise Hölder-stetig zum Exponenten α . Gilt diese Regularität nur lokal, so heißt das Gebiet stückweise glatt berandet.

Definition 2.6 Mit $L^p(\Omega)$ wird der Raum von Äquivalenzklassen aller auf Ω definierten, messbaren Funktionen bezeichnet, deren p -te Potenz integrierbar ist. Die zugehörige Norm ist

$$\|u\|_{L^p(\Omega)} := \left(\int_{\Omega} |u(\mathbf{x})|^p \, d\mathbf{x} \right)^{1/p}, \quad 1 \leq p < \infty.$$

Zwei Funktionen $u, v \in L^p(\Omega)$ werden miteinander identifiziert, wenn sie sich nur auf einer Menge K vom Maß $\mu(K) = 0$ unterscheiden.

Mit $L^\infty(\Omega)$ wird der Raum der auf Ω messbaren und fast überall beschränkten Funktionen bezeichnet, versehen mit der Norm

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} := \operatorname{ess\,sup}_{\mathbf{x} \in \Omega} \{|u(\mathbf{x})|\} = \inf_{K \subset \Omega: \mu(K)=0} \sup_{\mathbf{x} \in \Omega \setminus K} \{|u(\mathbf{x})|\}.$$

Bezüglich der Normen $\|\cdot\|_{L^p(\Omega)}$ sind die $L^p(\Omega)$ -Räume vollständig, das heißt, diese Räume sind Banach-Räume. Für $u \in L^p(\Omega)$ und $v \in L^q(\Omega)$ mit

$$\frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1$$

gilt die *Hölder-Ungleichung*

$$\int_{\Omega} u(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \leq \|u\|_{L^p(\Omega)} \|v\|_{L^q(\Omega)}.$$

Mit der Definition des *Dualitätsprodukts*

$$(u, v)_{\Omega} := \int_{\Omega} u(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$$

folgt insbesondere

$$\|v\|_{L^q(\Omega)} = \sup_{u \in L^p(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{(u, v)_{\Omega}}{\|u\|_{L^p(\Omega)}} \quad \text{für } 1 \leq p < \infty \quad \text{und} \quad \frac{1}{p} + \frac{1}{q} = 1.$$

Für alle $L^p(\Omega)$ mit $1 \leq p < \infty$ ist $L^q(\Omega)$ der Dualraum. Speziell ist $L^\infty(\Omega)$ der Dualraum von $L^1(\Omega)$. Man beachte jedoch, dass $L^1(\Omega)$ *nicht* der Dualraum von $L^\infty(\Omega)$ ist.

Für $p = q = 2$ definiert $L^2(\Omega)$ den Raum der quadratisch integrierbaren Funktionen und die Hölder-Ungleichung ist die Cauchy-Schwarzsche Ungleichung. Weiterhin ist

$$(u, v)_{L^2(\Omega)} := \int_{\Omega} u(\mathbf{x})v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}$$

ein Skalarprodukt in $L^2(\Omega)$, mit dem der Raum $L^2(\Omega)$ ein Hilbert-Raum wird.

2.2 Verallgemeinerte Ableitung und Sobolev-Räume

Definition 2.7 Mit $L^1_{loc}(\Omega)$ wird der Raum der lokal integrierbaren Funktionen bezeichnet, das heißt, $u \in L^1_{loc}(\Omega)$ ist bezüglich jeder kompakten Teilmenge $K \subset \Omega$ integrierbar.

Beispiel 2.8 Sei $\Omega = (0, 1)$ und $u(x) = 1/x$. Wegen

$$\int_0^1 u(x) \, dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{\varepsilon}^1 \frac{1}{x} \, dx = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \log \left(\frac{1}{\varepsilon} \right) = \infty$$

ist $u \notin L^1(\Omega)$. Für beliebiges $K = [a, b] \subset (0, 1) = \Omega$ folgt jedoch

$$\int_K u(x) \, dx = \int_a^b \frac{1}{x} \, dx = \log \left(\frac{b}{a} \right) < \infty$$

und somit $u \in L^1_{loc}(\Omega)$. △

Für Funktionen $\varphi, \psi \in C_0^\infty(\Omega)$ gilt die Formel der partiellen Integration

$$\int_{\Omega} \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} \varphi(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} \psi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x}.$$

Die Integrale sind auch für nichtglatte Funktionen wohldefiniert. Dies motiviert die folgende Definition einer verallgemeinerten Ableitung:

Definition 2.9 Eine Funktion $u \in L_{loc}^1(\Omega)$ besitzt eine **schwache Ableitung** nach x_i , falls eine Funktion $v \in L_{loc}^1(\Omega)$ existiert, so dass gilt

$$\int_{\Omega} v(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = - \int_{\Omega} u(\mathbf{x}) \frac{\partial}{\partial x_i} \varphi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \text{für alle } \varphi \in C_0^\infty(\Omega). \quad (2.2)$$

Die schwache Ableitung wird wieder mit $\partial u / \partial x_i = v$ bezeichnet.

Die rekursive Anwendung von (2.2) ermöglicht durch

$$\int_{\Omega} \partial^\beta u(\mathbf{x}) \varphi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} = (-1)^{|\beta|} \int_{\Omega} u(\mathbf{x}) \partial^\beta \varphi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \text{für alle } \varphi \in C_0^\infty(\Omega)$$

die Definition der schwachen Ableitung $\partial^\beta u \in L_{loc}^1(\Omega)$.

Beispiel 2.10 Sei $u(x) = |x|$ für $x \in \Omega := (-1, 1)$. Für beliebiges $\varphi \in C_0^\infty(\Omega)$ ist

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 u(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) \, dx &= - \int_{-1}^0 x \frac{d}{dx} \varphi(x) \, dx + \int_0^1 x \frac{d}{dx} \varphi(x) \, dx \\ &= - \underbrace{[x\varphi(x)]_{-1}^0}_{=0} + \int_{-1}^0 \varphi(x) \, dx + \underbrace{[x\varphi(x)]_0^1}_{=0} - \int_0^1 \varphi(x) \, dx \\ &= - \int_{-1}^1 \text{sign}(x) \varphi(x) \, dx \end{aligned}$$

mit

$$\text{sign}(x) = \begin{cases} +1, & x > 0, \\ 0, & x = 0, \\ -1, & x < 0. \end{cases}$$

Deshalb ist die schwache Ableitung von $u(x) = |x|$ gegeben durch

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x) = \text{sign}(x) \in L_{loc}^1(\Omega).$$

Für die Berechnung der zweiten Ableitung ergibt sich

$$\int_{-1}^1 \text{sign}(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) \, dx = - \int_{-1}^0 \frac{d}{dx} \varphi(x) \, dx + \int_0^1 \frac{d}{dx} \varphi(x) \, dx = -2\varphi(0).$$

Es existiert jedoch *keine* lokal integrierbare Funktion $v \in L_{loc}^1(\Omega)$ mit

$$\int_{-1}^1 v(x) \varphi(x) \, dx = 2\varphi(0) \quad \text{für alle } \varphi \in C_0^\infty(\Omega).$$

Später wird die verallgemeinerte Ableitung von $\text{sign}(x)$ jedoch als Distribution erklärt. \triangle

Definition 2.11 Für $k \in \mathbb{N}_0$ ist der **Sobolev-Raum** $W^{k,p}(\Omega)$ definiert als Vervollständigung von $C^\infty(\Omega)$ bezüglich der Norm

$$\|u\|_{W^{k,p}(\Omega)} := \begin{cases} \left(\sum_{|\beta| \leq k} \|\partial^\beta u\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{1/p}, & 1 \leq p < \infty, \\ \max_{|\beta| \leq k} \|\partial^\beta u\|_{L^\infty(\Omega)}, & p = \infty. \end{cases} \quad (2.3)$$

Dies bedeutet, es existiert für jedes $u \in W^{k,p}(\Omega)$ eine Folge $\{\varphi_i\}_{i \in \mathbb{N}} \subset C^\infty(\Omega)$ mit

$$\lim_{i \rightarrow \infty} \|u - \varphi_i\|_{W^{k,p}(\Omega)} = 0.$$

Entsprechend definiert die Vervollständigung von $C_0^\infty(\Omega)$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{W^{k,p}(\Omega)}$ den Sobolev-Raum

$$W_0^{k,p}(\Omega) := \overline{C_0^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{W^{k,p}(\Omega)}}.$$

Die Definition der Sobolev-Normen und damit der Sobolev-Räume kann auf beliebige $s \in \mathbb{R}$ erweitert werden. Im Fall $s > 0$ definieren wir nämlich:

Definition 2.12 Sei $0 < s = k + \alpha$ mit $k \in \mathbb{N}_0$ und $\alpha \in (0, 1)$. Dann definiert

$$\|u\|_{W^{s,p}(\Omega)} := \left(\|u\|_{W^{k,p}(\Omega)}^p + |u|_{W^{s,p}(\Omega)}^p \right)^{1/p}$$

die **Sobolev-Slobodeckii-Norm** mit der Seminorm

$$|u|_{W^{s,p}(\Omega)} := \left(\sum_{|\beta|=k} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{|\partial^\beta u(\mathbf{x}) - \partial^\beta u(\mathbf{y})|^p}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^{d+p\alpha}} d\mathbf{x} d\mathbf{y} \right)^{1/p}.$$

Bemerkung Ist $s = k \in \mathbb{N}$, so definieren wir analog die Seminorm

$$|u|_{W^{s,p}(\Omega)} := \begin{cases} \left(\sum_{|\beta|=k} \|\partial^\beta u\|_{L^p(\Omega)}^p \right)^{1/p}, & 1 \leq p < \infty, \\ \max_{|\beta|=k} \|\partial^\beta u\|_{L^\infty(\Omega)}, & p = \infty. \end{cases}$$

△

Speziell für $p = 2$ ist $W^{s,2}(\Omega)$ ein Hilbert-Raum mit dem Skalarprodukt

$$\begin{aligned} (u, v)_{W^{s,2}(\Omega)} &:= \sum_{|\beta| \leq k} \int_{\Omega} \partial^\beta u(\mathbf{x}) \partial^\beta v(\mathbf{x}) d\mathbf{x} \\ &+ \sum_{|\beta|=k} \int_{\Omega} \int_{\Omega} \frac{(\partial^\beta u(\mathbf{x}) - \partial^\beta u(\mathbf{y})) (\partial^\beta v(\mathbf{x}) - \partial^\beta v(\mathbf{y}))}{\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|^{d+2\alpha}} d\mathbf{x} d\mathbf{y}. \end{aligned}$$

Dabei ist der letzte Term wegzulassen, falls $s = k \in \mathbb{N}_0$ ist.

Für $s < 0$ und $1 < p < \infty$ wird der Sobolev-Raum $W^{s,p}(\Omega)$ als Dualraum von $W_0^{-s,q}(\Omega)$ definiert. Dabei ist $1/p + 1/q = 1$ und

$$\|u\|_{W^{s,p}(\Omega)} := \sup_{v \in W^{-s,q}(\Omega) \setminus \{0\}} \frac{(u, v)_\Omega}{\|v\|_{W^{-s,q}(\Omega)}}.$$

Entsprechend wird $W_0^{s,p}(\Omega)$ als Dualraum von $W^{-s,q}(\Omega)$ definiert.

Satz 2.13 (Sobolevscher Einbettungssatz) Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein beschränktes Gebiet mit Lipschitz-Rand $\Gamma = \partial\Omega$ und sei

$$d \leq s \quad \text{für } p = 1$$

beziehungsweise

$$\frac{d}{p} < s \quad \text{für } p > 1.$$

Für $u \in W^{s,p}(\Omega)$ ist dann $u \in C(\Omega)$ und es gilt

$$\|u\|_{L^\infty(\Omega)} \leq c \|u\|_{W^{s,p}(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in W^{s,p}(\Omega).$$

Beweis. Einen Beweis findet der geneigte Leser beispielsweise in J. Wloka “Partielle Differentialgleichungen”. \square

2.3 Distributionen und Sobolev-Räume

Beispiel 2.10 hat gezeigt, dass nicht jede Funktion in $L_{loc}^1(\Omega)$ eine schwache Ableitung besitzt. Deshalb werden Ableitungen im distributionellen Sinn betrachtet. Dazu bezeichne $\mathcal{D}(\Omega) := C_0^\infty(\Omega)$ den Raum der Testfunktionen.

Definition 2.14 Eine **Distribution** ist eine stetige Linearform $T : \mathcal{D}(\Omega) \rightarrow \mathbb{C}$. Dabei heißt T stetig auf $\mathcal{D}(\Omega)$, falls aus $\varphi_k \rightarrow \varphi$ in $\mathcal{D}(\Omega)$ stets $T(\varphi_k) \rightarrow T(\varphi)$ in \mathbb{C} folgt. Die Gesamtheit aller Distributionen wird mit $\mathcal{D}'(\Omega)$ bezeichnet.

Zu jedem $u \in L_{loc}^1(\Omega)$ definiert

$$T_u(\varphi) := \int_{\Omega} u(\mathbf{x})\varphi(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega) \tag{2.4}$$

eine Distribution. Distributionen, die wie (2.4) durch Funktionen induziert werden, werden *regulär* genannt. Der Raum $L_{loc}^1(\Omega)$ kann als eine Teilmenge von $\mathcal{D}'(\Omega)$ aufgefasst werden, da man die Äquivalenzklassen von u aus (2.4) zurückgewinnen kann. Deshalb schreibt man statt $T_u \in \mathcal{D}'(\Omega)$ auch $u \in \mathcal{D}'(\Omega)$. Nichtreguläre Distributionen heißen *singulär*. Wichtigstes Beispiel einer singulären Distribution ist die für $\mathbf{x}_0 \in \Omega$ durch

$$\delta_{\mathbf{x}_0}(\varphi) := \varphi(\mathbf{x}_0) \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega)$$

definierte δ - oder *Dirac-Distribution*.

Analog zur schwachen Ableitung können wir nun die distributionelle Ableitung definieren:

Definition 2.15 Die Distribution $\partial^\beta T_u \in \mathcal{D}'(\Omega)$ heißt **distributionelle Ableitung** von $T_u \in \mathcal{D}'(\Omega)$, falls gilt

$$(\partial^\beta T_u)(\varphi) = (-1)^{|\beta|} T_u(\partial^\beta \varphi) \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Beispiel 2.16 (Fortsetzung von Beispiel 2.10) Für die Funktion $u(x) = \text{sign}(x) \in L^1_{loc}(\Omega)$ und $\Omega = (-1, 1)$ ergibt sich durch partielle Integration

$$\int_{-1}^1 \text{sign}(x) \frac{d}{dx} \varphi(x) dx = -2\varphi(0) = - \int_{-1}^1 \frac{\partial}{\partial x} u(x) \varphi(x) dx \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{D}(\Omega).$$

Somit ist die distributionelle Ableitung von u gegeben durch

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x) = 2\delta_0(x) \in \mathcal{D}'(\Omega).$$

△

Im folgenden führen wir Sobolev-Räume $H^s(\Omega)$ ein, die unter bestimmten Voraussetzungen an die Glattheit des Gebiets Ω äquivalent zu den Räumen $W^{s,2}(\Omega)$ sind.

Definition 2.17 Der Raum $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ der schnell abklingenden Funktionen ist der Raum der in \mathbb{R}^d unendlich oft differenzierbaren Funktionen φ mit

$$\|\varphi\|_{k,\ell} := \sup_{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d} \left\{ (1 + \|\mathbf{x}\|^k) \sum_{|\beta| \leq \ell} |\partial^\beta \varphi(\mathbf{x})| \right\} < \infty \quad \text{für alle } k, \ell \in \mathbb{N}_0.$$

Dies bedeutet, φ klingt mitsamt seiner Ableitungen schneller ab als jedes Polynom.

Beispiel 2.18 Für die Funktion $\varphi(\mathbf{x}) := e^{-\|\mathbf{x}\|^2}$ ist $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, aber es gilt $\varphi \notin C_0^\infty(\mathbb{R}^d)$.
△

Analog zur Definition 2.14 wird der Raum $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ der *temperierten Distributionen* erklärt als der Raum der über $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ komplexwertigen und stetigen Linearformen.

Definition 2.19 Für Funktionen $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ definiert

$$\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi}) := (\mathcal{F}\varphi)(\boldsymbol{\xi}) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} \varphi(\mathbf{x}) d\mathbf{x}, \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$$

die **Fourier-Transformierte** $\widehat{\varphi} \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$.

Die Abbildung $\mathcal{F} : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ ist eine Isometrie (und damit eindeutig) und die inverse Fourier-Transformation ist gegeben durch

$$(\mathcal{F}^{-1}\widehat{\varphi})(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} \widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi}, \quad \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d.$$

Darüber hinaus gelten für alle $\varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ und $\boldsymbol{\beta} \in \mathbb{N}_0^d$ die Rechenregeln

$$\begin{aligned} \partial^{\boldsymbol{\beta}}(\mathcal{F}\varphi)(\boldsymbol{\xi}) &= (-i)^{|\boldsymbol{\beta}|} \mathcal{F}(\mathbf{x}^{\boldsymbol{\beta}}\varphi)(\boldsymbol{\xi}), \\ \boldsymbol{\xi}^{\boldsymbol{\beta}}(\mathcal{F}\varphi)(\boldsymbol{\xi}) &= (-i)^{|\boldsymbol{\beta}|} \mathcal{F}(\partial^{\boldsymbol{\beta}}\varphi)(\boldsymbol{\xi}). \end{aligned} \tag{2.5}$$

Weitere Eigenschaften der Fourier-Transformation sind in folgender Tabelle zusammengefasst:

Funktion $f(\mathbf{x})$	Fourier-Transformierte $\widehat{f}(\boldsymbol{\xi})$
$f(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} \widehat{f}(\boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi}$	$\widehat{f}(\mathbf{x}) = (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} e^{-i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} f(\boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi}$
$f(\mathbf{x} - \mathbf{x}_0)$	$e^{-i\langle \mathbf{x}_0, \boldsymbol{\xi} \rangle} \widehat{f}(\boldsymbol{\xi})$
$f(\alpha\mathbf{x})$	$\frac{1}{ \alpha } \widehat{f}\left(\frac{\boldsymbol{\xi}}{\alpha}\right)$
$\overline{f(\mathbf{x})}$	$\overline{\widehat{f}(-\boldsymbol{\xi})}$
$(f * g)(\mathbf{x}) = \int_{\mathbb{R}^d} f(\mathbf{x} - \mathbf{y})g(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}$	$\widehat{f}(\boldsymbol{\xi}) \cdot \widehat{g}(\boldsymbol{\xi})$
f gerade / ungerade	\widehat{f} gerade / ungerade
f reell	$\operatorname{Re}(\widehat{f})$ gerade / $\operatorname{Im}(\widehat{f})$ ungerade

Bemerkung Das Unschärfeprinzip besagt, dass aus $\varphi \in \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ immer $\widehat{\varphi} \notin \mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$ folgt. \triangle

Lemma 2.20 Die Fourier-Transformation erhält die Rotationssymmetrie, das heißt, für $u \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ gilt $\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|)$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$ genau dann, wenn $u(\mathbf{x}) = u(\|\mathbf{x}\|)$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$ gilt.

Beweis. Sei zunächst $d = 2$. Die Darstellung in Polarkoordinaten

$$\boldsymbol{\xi} = \|\boldsymbol{\xi}\| \begin{bmatrix} \cos \psi \\ \sin \psi \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = r \begin{bmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \end{bmatrix}$$

ergibt

$$\begin{aligned} \widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) &= \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\|(\cos \phi \cos \psi + \sin \phi \sin \psi)} u(r) r \, d\phi \, dr \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \cos(\phi - \psi)} u(r) r \, d\phi \, dr. \end{aligned}$$

Für $\psi_0 \in [0, 2\pi)$ und der Substitution $\tilde{\phi} = \phi - \psi_0$ erhalten wir deshalb

$$\begin{aligned}\widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi + \psi_0) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \cos(\phi - \psi - \psi_0)} u(r) r \, d\phi \, dr \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_{-\psi_0}^{2\pi - \psi_0} e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \cos(\tilde{\phi} - \psi)} u(r) r \, d\tilde{\phi} \, dr.\end{aligned}$$

Hieraus folgt wegen

$$\int_{-\psi_0}^0 e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \cos(\tilde{\phi} - \psi)} \, d\tilde{\phi} = \int_{2\pi - \psi_0}^{2\pi} e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \cos(\tilde{\phi} - \psi)} \, d\tilde{\phi}$$

die Rotationssymmetrie $\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|)$: für beliebiges $\psi_0 \in [0, 2\pi)$ ist

$$\widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi + \psi_0) = \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \cos(\tilde{\phi} - \psi)} u(r) r \, d\tilde{\phi} \, dr = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi).$$

Für $d = 3$ verwenden wir Kugelkoordinaten

$$\boldsymbol{\xi} = \|\boldsymbol{\xi}\| \begin{bmatrix} \cos \psi \sin \vartheta \\ \sin \psi \sin \vartheta \\ \cos \vartheta \end{bmatrix}, \quad \mathbf{x} = r \begin{bmatrix} \cos \phi \sin \theta \\ \sin \phi \sin \theta \\ \cos \theta \end{bmatrix}.$$

Dann ist

$$\begin{aligned}\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) &= \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi, \vartheta) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \int_0^\infty \int_0^{2\pi} \int_0^\pi e^{-ir\|\boldsymbol{\xi}\| \{\cos(\phi - \psi) \sin \theta \sin \vartheta + \cos \theta \cos \vartheta\}} u(r) r^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dr.\end{aligned}$$

Wie im Fall $d = 2$ ergibt sich

$$\widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi + \psi_0, \vartheta) = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|, \psi, \vartheta) \quad \text{für alle } \psi_0 \in [0, 2\pi).$$

Für festes $\vartheta \in [0, \pi)$ und vorgegebenen Radius ρ gilt folglich $\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|) = \widehat{u}(\rho)$ entlang der Kreislinie

$$\xi_1^2 + \xi_2^2 = \rho^2 \quad \text{und} \quad \xi_3 = \rho \cos \vartheta.$$

Die Verwendung vertauschter Kugelkoordinaten liefert allerdings auch $\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|) = \widehat{u}(\rho)$ entlang der Kreislinie

$$\xi_1^2 + \xi_3^2 = \rho^2 \quad \text{und} \quad \xi_2 = \rho \cos \vartheta.$$

Dies impliziert die Behauptung $\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \widehat{u}(\|\boldsymbol{\xi}\|)$ für alle $\boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d$. □

Wir wollen die Fourier-Transformation mittels Dualität auf $\mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ übertragen: Für Distributionen $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ wird die Fourier-Transformierte $\widehat{T} \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ durch

$$\widehat{T}(\varphi) := T(\widehat{\varphi}) \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

definiert. Die Abbildung $\mathcal{F} : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ ist eindeutig und die inverse Fourier-Transformation ist durch

$$(\mathcal{F}^{-1}T)(\varphi) := T(\mathcal{F}^{-1}\varphi) \quad \text{für } \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

erklärt. Die Rechenregeln (2.5) bleiben entsprechend für Distributionen $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ gültig.

Definition 2.21 Für $s \in \mathbb{R}$ ist der **Bessel-Potentialoperator** $\mathcal{J}^s : \mathcal{S}(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$ definiert durch

$$(\mathcal{J}^s u)(\mathbf{x}) := (2\pi)^{-d/2} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + \|\boldsymbol{\xi}\|^2)^{s/2} \widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) e^{i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} d\boldsymbol{\xi}, \quad \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d.$$

Wie man leicht nachrechnet ist

$$\mathcal{J}^s u = \mathcal{F}^{-1} \left((1 + \|\boldsymbol{\xi}\|^2)^{s/2} \mathcal{F}u \right),$$

das heißt, \mathcal{J}^s ist linear und beschränkt. Im Fourier-transformierten Raum entspricht für $s > 0$ aufgrund der Gleichung

$$\mathcal{F} \mathcal{J}^s u = (1 + \|\boldsymbol{\xi}\|^2)^{s/2} \mathcal{F}u$$

die Anwendung von \mathcal{J}^s der Multiplikation mit einer Funktion der Ordnung $\mathcal{O}(\|\boldsymbol{\xi}\|^s)$. Gemäß (2.5) kann \mathcal{J}^s daher als Differentialoperator der Ordnung s angesehen werden.

Der Bessel-Potentialoperator \mathcal{J}^s kann per Dualität ebenfalls auf Distributionen angewendet werden. Für $T \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ wird durch

$$(\mathcal{J}^s T)(\varphi) = T(\mathcal{J}^s \varphi) \quad \text{für alle } \varphi \in \mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$$

ein beschränkter, linearer Operator $\mathcal{J}^s : \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d) \rightarrow \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ auf dem Raum der temperierten Distributionen definiert.

Definition 2.22 Für alle $s \in \mathbb{R}$ ist der **Sobolev-Raum** $H^s(\mathbb{R}^d)$ der Raum aller Distributionen $u \in \mathcal{S}'(\mathbb{R}^d)$ mit $\mathcal{J}^s u \in L^2(\mathbb{R}^d)$, ausgestattet mit dem Innenprodukt

$$(u, v)_{H^s(\mathbb{R}^d)} = (\mathcal{J}^s u, \mathcal{J}^s v)_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \int_{\mathbb{R}^d} (\mathcal{J}^s u)(\mathbf{x}) \overline{(\mathcal{J}^s v)(\mathbf{x})} d\mathbf{x}.$$

Dieses induziert die Norm

$$\|u\|_{H^s(\mathbb{R}^d)}^2 = \|\mathcal{J}^s u\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = \frac{1}{(2\pi)^d} \int_{\mathbb{R}^d} (1 + \|\boldsymbol{\xi}\|^2)^s |\widehat{u}(\boldsymbol{\xi})|^2 d\boldsymbol{\xi}.$$

Für ein Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und $s \in \mathbb{R}$ ist der Sobolev-Raum $H^s(\Omega)$ definiert durch

$$H^s(\Omega) := \{u = \tilde{u}|_{\Omega} : \tilde{u} \in H^s(\mathbb{R}^d)\}$$

mit der Norm

$$\|u\|_{H^s(\Omega)} = \inf_{\tilde{u} \in H^s(\mathbb{R}^d) : \tilde{u}|_{\Omega} = u} \|\tilde{u}\|_{H^s(\mathbb{R}^d)}.$$

Außerdem werden die Sobolev-Räume

$$\tilde{H}^s(\Omega) := \overline{C_0^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^s(\mathbb{R}^d)}}, \quad H_0^s(\Omega) := \overline{C_0^\infty(\Omega)}^{\|\cdot\|_{H^s(\Omega)}}$$

eingeführt, die für fast alle $s \geq 0$ zusammenfallen.

Satz 2.23 Für ein Lipschitz-Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ und $s \geq 0$ gilt

$$\tilde{H}^s(\Omega) \subset H_0^s(\Omega).$$

Insbesondere ist

$$\tilde{H}^s(\Omega) = H_0^s(\Omega) \quad \text{für alle } s \notin \left\{ \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots \right\}.$$

Weiterhin ist

$$\tilde{H}^s(\Omega) = (H^{-s}(\Omega))', \quad H^s(\Omega) = (\tilde{H}^{-s}(\Omega))' \quad \text{für alle } s \in \mathbb{R}.$$

Beweis. Der interessierte Leser sei auf W. McLean “Strongly elliptic systems and boundary integral equations” verwiesen. \square

Die Äquivalenz der Sobolev-Räume $W^{s,2}(\Omega)$ und $H^s(\Omega)$ gilt nur bei hinreichender Glattheit des Gebiets Ω :

Satz 2.24 Für ein Lipschitz-Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ gilt

$$W^{s,2}(\Omega) = H^s(\Omega) \quad \text{für alle } s \geq 0, \tag{2.6}$$

woraus insbesondere auch

$$W_0^{s,2}(\Omega) = H_0^s(\Omega) \quad \text{für alle } s \geq 0$$

folgt. Ist $\Omega = \mathbb{R}^d$, so gilt die Gleichung (2.6) sogar für alle $s \in \mathbb{R}$.

Beweis. Einen Beweis dieses Satzes findet man zum Beispiel in J. Wloka “Partielle Differentialgleichungen”. \square

3. Native Spaces

3.1 Reproducing Kernel Hilbert Spaces

In Definition 1.1 haben wir Reproducing Kernel Hilbert Spaces eingeführt. Dabei ist der reproduzierende Kern eindeutig. Denn sind κ_1 und κ_2 zwei reproduzierende Kerne, so folgt aus der zweiten Eigenschaft von Definition 1.1, dass

$$(u, \kappa_1(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_2(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} = 0$$

für alle $u \in \mathcal{H}$ und $\mathbf{x} \in \Omega$ ist. Setzen wir $u := \kappa_1(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_2(\cdot, \mathbf{x})$ ein, so folgt

$$\|\kappa_1(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_2(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}} = 0$$

und damit die Eindeutigkeit des reproduzierenden Kerns.

Satz 3.1 Sei \mathcal{H} ein Hilbert-Raum von Funktionen $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Dann sind folgende Aussagen äquivalent:

1. Die Punktauswertung ist stetig, das heißt, es ist $\delta_{\mathbf{x}} \in \mathcal{H}'$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega$.
2. Der Raum \mathcal{H} besitzt einen reproduzierenden Kern.

Beweis. Ist die Punktauswertung stetig, so gibt es gemäß des Riesz'schen Darstellungssatzes für jedes $\mathbf{x} \in \Omega$ ein $\kappa_{\mathbf{x}} \in \mathcal{H}$, so dass $\delta_{\mathbf{x}} = (u, \kappa_{\mathbf{x}})_{\mathcal{H}}$ für alle $u \in \mathcal{H}$ gilt. Damit ist $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \kappa_{\mathbf{x}}(\mathbf{y})$ der reproduzierende Kern von \mathcal{H} .

Ist nun umgekehrt \mathcal{H} ein RKHS, so erfüllt der reproduzierende Kern

$$\delta_{\mathbf{x}}(u) = (u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \leq \|u\|_{\mathcal{H}} \|\kappa(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}}$$

für alle $u \in \mathcal{H}$. Damit ist $\delta_{\mathbf{x}}$ stetig für jedes $\mathbf{x} \in \Omega$. □

Ein RKHS besitzt viele Eigenschaften. Wir wollen hier einige davon zusammenfassen.

Satz 3.2 Sei \mathcal{H} ein Hilbert-Raum von Funktionen $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ mit reproduzierendem Kern κ . Dann gelten die folgenden Aussagen:

1. Es gilt die Gleichung

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{y}))_{\mathcal{H}} = (\delta_{\mathbf{x}}, \delta_{\mathbf{y}})_{\mathcal{H}'}$$

2. Der reproduzierende Kern ist symmetrisch

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega.$$

3. Konvergiert $u_n \rightarrow u$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_{\mathcal{H}}$, dann konvergiert $u_n \rightarrow u$ auch punktweise.

Beweis. Der Rieszsche Darstellungssatz liefert eine Abbildung $\mathcal{R} : \mathcal{H}' \rightarrow \mathcal{H}$, die jeder Punktevaluation $\delta_{\mathbf{x}} \in \mathcal{H}'$ die Funktion $\mathcal{R}(\delta_{\mathbf{x}}) = \kappa(\cdot, \mathbf{x}) \in \mathcal{H}$ zuordnet aufgrund der Eigenschaften des RKHS. Daraus folgt

$$(\delta_{\mathbf{x}}, \delta_{\mathbf{y}})_{\mathcal{H}'} = (\mathcal{R}(\delta_{\mathbf{x}}), \mathcal{R}(\delta_{\mathbf{y}}))_{\mathcal{H}} = (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{y}))_{\mathcal{H}}.$$

Weiter gilt auch

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta_{\mathbf{x}}(\kappa(\cdot, \mathbf{y})) = (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{y}))_{\mathcal{H}},$$

was die erste Aussage beweist.

Die zweite Aussage folgt direkt aus der ersten, während sich die dritte Aussage aus

$$|u_n(\mathbf{x}) - u(\mathbf{x})| = |(u_n - u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}}| \leq \|u_n - u\|_{\mathcal{H}} \|\kappa(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}}$$

ergibt. □

Das nächste Resultat zeigt, dass reproduzierende Kerne stets positiv semidefinit sind.

Satz 3.3 Der Kern $\kappa(\cdot, \cdot)$ eines RKHS \mathcal{H} ist positiv semidefinit. Er ist sogar positiv definit, sofern alle Punktauswertungen linear unabhängig in \mathcal{H}' sind.

Beweis. Der Kern ist reell und symmetrisch, weshalb sich für paarweise verschiedene Punkte $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$ und $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^N$

$$\sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) = \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \delta_{\mathbf{x}_i}, \sum_{j=1}^N \alpha_j \delta_{\mathbf{x}_j} \right)_{\mathcal{H}'} = \left\| \sum_{i=1}^N \alpha_i \delta_{\mathbf{x}_i} \right\|_{\mathcal{H}'}^2 \geq 0$$

ergibt. Hierin ist letzte Ausdruck stets von Null verschieden, falls Punktauswertungen stets linear unabhängig sind und $\boldsymbol{\alpha} \neq \mathbf{0}$ ist. □

3.2 Positiv definite Kerne

Die zweite Eigenschaft aus Definition 1.1 impliziert, dass alle Funktionen der Form $u = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i)$ in \mathcal{H} liegen falls $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N \subset \Omega$. Ferner gilt

$$\|u\|_{\mathcal{H}}^2 = \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^N \alpha_j \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j) \right)_{\mathcal{H}} = \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

Wir wollen diese Eigenschaft benutzen, um für einen positiv definiten Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ einen RKHS zu konstruieren, wobei wir stets annehmen, dass der Kern eine auf $\Omega \times \Omega$ stetige Funktion ist. Dazu definieren wir den reellen Vektorraum

$$H_\kappa(\Omega) := \text{span}\{\kappa(\cdot, \mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Omega\}.$$

Auf $H_\kappa(\Omega)$ wollen wir die folgende Bilinearform betrachten:

$$\left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^M \beta_j \kappa(\cdot, \mathbf{y}_j) \right)_\kappa := \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^M \alpha_i \beta_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{y}_j).$$

Hierbei gelte $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N, \{\mathbf{y}_j\}_{j=1}^M \subset \Omega$.

Satz 3.4 Ist der Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ positiv definit, so definiert $(\cdot, \cdot)_\kappa$ ein Innenprodukt. Speziell ist $H_\kappa(\Omega)$ ein Prä-Hilbert-Raum (das ist ein Vektorraum mit Innenprodukt) mit reproduzierendem Kern κ .

Beweis. Offenbar ist $(\cdot, \cdot)_\kappa$ bilinear und symmetrisch. Wählen wir eine Funktion $u = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i) \in H_\kappa(\Omega) \setminus \{0\}$, so erhalten wir¹⁾

$$(u, u)_\kappa = \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) > 0,$$

weil κ positiv definit ist. Schließlich ergibt sich die Reproduktionseigenschaft des Kerns aus

$$(u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_\kappa = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = u(\mathbf{x}).$$

□

Die Vervollständigung $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ von $H_\kappa(\Omega)$ bezüglich der Norm $\|\cdot\|_\kappa$ ist der kanonische Kandidat, um einen RKHS zum Kern κ zu erhalten. Allerdings sind dessen Elemente dann abstrakte Objekte, welche wir nun als Funktionen interpretieren müssen.

Da Punktauswertungen stetig in $H_\kappa(\Omega)$ sind, bleiben diese auch stetig bezüglich der Vervollständigung $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$. Daher können wir sie benutzen, um die durch die Vervollständigung erhaltenen Objekte zu charakterisieren. Dazu definieren wir die Abbildung

$$\mathcal{E} : \mathcal{H}_\kappa(\Omega) \rightarrow C(\Omega), \quad (\mathcal{E}u)(\mathbf{x}) := (u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_\kappa. \quad (3.1)$$

Die so entstehenden Funktionen sind in der Tat stetig, da

$$|(\mathcal{E}u)(\mathbf{x}) - (\mathcal{E}u)(\mathbf{y})| = |(u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa(\cdot, \mathbf{y}))_\kappa| \leq \|u\|_\kappa \|\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa(\cdot, \mathbf{y})\|_\kappa$$

und

$$\|\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa(\cdot, \mathbf{y})\|_\kappa^2 = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{y}).$$

Außerdem gilt $(\mathcal{E}u)(\mathbf{x}) = u(\mathbf{x})$ für alle $u \in H_\kappa(\Omega)$ und $\mathbf{x} \in \Omega$.

¹⁾Beachte, dass $u = 0$ äquivalent ist zu $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}$. Denn die Kernmatrix $\mathbf{K} := [\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]_{i,j=1}^N$ ist symmetrisch und positiv definit, also regulär, woraus $\mathbf{K}\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}$ nur für $\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{0}$ folgt.

Lemma 3.5 Die lineare Abbildung $\mathcal{E} : \mathcal{H}_\kappa(\Omega) \rightarrow C(\Omega)$ aus (3.1) ist injektiv.

Beweis. Zu zeigen ist, dass aus $u \neq v$ folgt $\mathcal{E}u \neq \mathcal{E}v$. Dies ist aufgrund der Linearität von \mathcal{E} gleichbedeutend damit, dass $\mathcal{E}u = 0$ nur für $u = 0$ gilt. Nun impliziert $\mathcal{E}u = 0$ für ein $u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$, dass $(u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_\kappa = 0$ ist für alle $\mathbf{x} \in \Omega$. Mit anderen Worten, es gilt $u \perp H_\kappa(\Omega)$. Da $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ die Vervollständigung von $H_\kappa(\Omega)$ ist, ist $u = 0$ das einzige Element aus $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$, das orthogonal auf $H_\kappa(\Omega)$ steht. \square

Definition 3.6 Der **Native Space** $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ zum reproduzierenden Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ist gegeben durch

$$\mathcal{N}_\kappa(\Omega) := \mathcal{E}(\mathcal{H}_\kappa(\Omega)).$$

Dieser besitzt das Innenprodukt

$$(u, v)_{\mathcal{N}_\kappa(\Omega)} := (\mathcal{E}^{-1}u, \mathcal{E}^{-1}v)_\kappa.$$

Satz 3.7 Der zu einem positiv definiten Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ gehörige Native Space $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ ist ein RKHS.

Beweis. Der Native Space ist offenbar ein Hilbert-Raum stetiger Funktionen mit reproduzierendem Kern κ : Weil $\kappa(\cdot, \mathbf{x}) \in H_\kappa(\Omega)$ und damit invariant unter \mathcal{E} ist, folgt nämlich

$$u(\mathbf{x}) = (\mathcal{E}^{-1}u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_\kappa = (u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{N}_\kappa(\Omega)}.$$

\square

Es ist per Konstruktion $H_\kappa(\Omega) \subset \mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ dicht in $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ und es gilt

$$\|u\|_\kappa = \|u\|_{\mathcal{N}_\kappa(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in H_\kappa(\Omega).$$

Der nachfolgende Satz besagt weiter, dass der Native Space zum Kern κ eindeutig ist in dem Sinne, dass es keinen weiteren RHKS mit diesem reproduzierenden Kern gibt.

Satz 3.8 Seien $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein symmetrischer und positiv definiter Kern und \mathcal{H} ein zugehöriger RKHS von Funktionen $u : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$. Dann gilt $\mathcal{H} = \mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ und das Innenprodukt stimmt überein.

Beweis. Aufgrund der Anmerkungen am Anfang dieses Unterkapitels folgt $H_\kappa(\Omega) \subset \mathcal{H}$ und

$$\|u\|_{\mathcal{H}} = \|u\|_{\mathcal{N}_\kappa(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in H_\kappa(\Omega).$$

Sei nun $u \in \mathcal{N}_\kappa(\Omega)$. Dann existiert eine Cauchy-Folge $\{u_n\}_{n=1}^\infty \subset H_\kappa(\Omega)$ mit $u_n \rightarrow u$ in $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ (beachte, dass $u_n = \mathcal{E}^{-1}u_n$ gilt). Wegen Satz 3.2 konvergiert $u_n \rightarrow u$ auch punktweise. Allerdings ist $\{u_n\}_{n=1}^\infty$ auch eine Cauchy-Folge in \mathcal{H} und konvergiert daher

auch gegen ein $v \in \mathcal{H}$. Diese Konvergenz ist aber auch wieder punktweise, da \mathcal{H} ein RHKS ist. Daher folgt $u(\mathbf{x}) = v(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega$ und damit $u = v \in \mathcal{H}$, das heißt $\mathcal{N}_\kappa(\Omega) \subset \mathcal{H}$ und $\|u\|_{\mathcal{N}_\kappa(\Omega)} = \|u\|_{\mathcal{H}}$ für alle $u \in \mathcal{N}_\kappa(\Omega)$.

Angenommen, es gilt $\mathcal{N}_\kappa(\Omega) \neq \mathcal{H}$. Da $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ abgeschlossen ist, können wir ein $v \in \mathcal{H} \setminus \{0\}$ finden, das orthogonal auf $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ steht. Dies bedeutet jedoch $v(\mathbf{x}) = (v, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} = 0$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega$, was $v \neq 0$ widerspricht. Da die Normen in $\mathcal{N}_\kappa(\Omega)$ und \mathcal{H} nach dem bereits gezeigten übereinstimmen, stimmen auch die Innenprodukte überein aufgrund der Polarisationsformel. \square

3.3 Native Spaces und Sobolev-Räume

Im folgenden sei $\Omega = \mathbb{R}^d$. Wir wollen nun für gegebenes $\varphi \in C(\mathbb{R}^d)$ Kerne von der Form

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{y}), \quad \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d \quad (3.2)$$

betrachten. Offensichtlich muss φ symmetrisch sein: $\varphi(\mathbf{x}) = \varphi(-\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. Außerdem liefert für beliebiges $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ die positive Definitheit des Kerns

$$0 \leq \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \pm 2\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) + \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{y}).$$

Setzen wir $\mathbf{z} := \mathbf{x} - \mathbf{y}$, so erhalten wir hieraus

$$|\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})| = |\varphi(\mathbf{z})| \leq \varphi(\mathbf{0}) = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{y}).$$

Positiv definite Kerne der Form (3.2) genügen demnach der Abschätzung

$$|\varphi(\mathbf{x})| \leq \varphi(\mathbf{0}) \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \mathbb{R}^d. \quad (3.3)$$

Satz 3.9 Sei $\varphi \in C(\mathbb{R}^d) \cap L^1(\mathbb{R}^d)$ eine reellwertige Funktion derart, dass $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ symmetrisch und positiv definit ist. Dann ist der Raum

$$\mathcal{H} := \left\{ u \in C(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d) : \widehat{u}/\sqrt{\widehat{\varphi}} \in L^2(\mathbb{R}^d) \right\}$$

ein Hilbert-Raum mit dem Innenprodukt

$$(u, v)_{\mathcal{H}} := (2\pi)^{-d/2} (\widehat{u}/\sqrt{\widehat{\varphi}}, \widehat{v}/\sqrt{\widehat{\varphi}})_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} d\boldsymbol{\xi}$$

und dem reproduzierenden Kern κ . Insbesondere gilt $\mathcal{H} = \mathcal{N}_\kappa(\mathbb{R}^d)$ und die Innenprodukte stimmen überein und jedes $u \in \mathcal{H}$ kann durch seine Fourier-Transformierte $\widehat{u} \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d)$ rekonstruiert werden.

Beweis. Wir benutzen das folgende Resultat aus der Fourier-Analyse: Ist $\varphi \in C(\mathbb{R}^d) \cap L^1(\mathbb{R}^d)$ und κ symmetrisch und positiv definit, so ist $\widehat{\varphi} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ nichtnegativ und verschwindet nicht. Insbesondere ist $\widehat{\varphi}$ auch symmetrisch und reell. Für gegebenes $u \in \mathcal{H}$ gilt daher $\widehat{u} \in L^1(\mathbb{R}^d)$ wegen

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{u}(\boldsymbol{\xi})| d\boldsymbol{\xi} \leq \sqrt{\int_{\mathbb{R}^d} \frac{|\widehat{u}(\boldsymbol{\xi})|^2}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} d\boldsymbol{\xi}} \sqrt{\int_{\mathbb{R}^d} \widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi}) d\boldsymbol{\xi}} < \infty.$$

Deshalb ist die inverse Fourier-Transformation von \widehat{u} wohldefiniert und die Stetigkeit von u erlaubt die punktweise Rekonstruktion

$$u(\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} \widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi}.$$

Wir zeigen nun, dass die Bilinearform $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{H}}$ ein Innenprodukt darstellt. Zunächst beobachten wir in Anbetracht von $u(\mathbf{x}) \mapsto \widehat{u}(\boldsymbol{\xi})$ und $\overline{u(\mathbf{x})} \mapsto \overline{\widehat{u}(-\boldsymbol{\xi})}$, dass für eine reellwertige Funktion u die Identität $\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) = \overline{\widehat{u}(-\boldsymbol{\xi})}$ gilt. Daraus schließen wir

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} \, d\boldsymbol{\xi} &= \int_{\xi_1 > 0} \left(\frac{\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} + \frac{\widehat{u}(-\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(-\boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(-\boldsymbol{\xi})} \right) \, d\boldsymbol{\xi} \\ &= \int_{\xi_1 > 0} \left(\frac{\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} + \frac{\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} \right) \, d\boldsymbol{\xi} \\ &= 2 \int_{\xi_1 > 0} \frac{\operatorname{Re}(\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})})}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} \, d\boldsymbol{\xi}, \end{aligned}$$

dies bedeutet, die Bilinearform ist reell. Als gewichtetes L^2 -Innenprodukt ist sie auch positiv definit. Damit ist \mathcal{H} ein Prä-Hilbert-Raum.

Wir wollen nun zeigen, dass \mathcal{H} vollständig ist. Dazu sei $\{u_n\}_{n=1}^{\infty}$ eine Cauchy-Folge aus \mathcal{H} . Dies bedeutet, dass $\{\widehat{u}_n/\sqrt{\widehat{\varphi}}\}_{n=1}^{\infty}$ eine Cauchy-Folge in $L^2(\mathbb{R}^d)$ ist und daher dort ein Grenzwert $\widehat{v} \in L^2(\mathbb{R}^d)$ existiert. Wir können aufgrund unserer Annahmen schließen $\widehat{v}\sqrt{\widehat{\varphi}} \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap L^2(\mathbb{R}^d)$, denn es ist

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{v}(\boldsymbol{\xi}) \sqrt{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})}| \, d\boldsymbol{\xi} \leq \sqrt{\int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{v}(\boldsymbol{\xi})|^2 \, d\boldsymbol{\xi}} \sqrt{\int_{\mathbb{R}^d} \widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi}) \, d\boldsymbol{\xi}} < \infty$$

und

$$\int_{\mathbb{R}^d} |\widehat{v}(\boldsymbol{\xi}) \sqrt{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})}|^2 \, d\boldsymbol{\xi} \leq \|\widehat{\varphi}\|_{L^\infty(\mathbb{R}^d)} \|\widehat{v}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2.$$

Deshalb ist

$$u(\mathbf{x}) := \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} e^{i\langle \mathbf{x}, \boldsymbol{\xi} \rangle} \widehat{v}(\boldsymbol{\xi}) \sqrt{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} \, d\boldsymbol{\xi}.$$

wohldefiniert, stetig, aus $L^2(\mathbb{R}^d)$ und genügt der Gleichung $\widehat{u}/\sqrt{\widehat{\varphi}} = \widehat{v} \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Insbesondere gilt

$$\begin{aligned} |u(\mathbf{x}) - u_n(\mathbf{x})| &\leq \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \left| \widehat{v}(\boldsymbol{\xi}) \sqrt{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} - \widehat{u}_n(\boldsymbol{\xi}) \right| \, d\boldsymbol{\xi} \\ &\leq \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \|\widehat{v} - \widehat{u}_n/\sqrt{\widehat{\varphi}}\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \|\widehat{\varphi}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}^{1/2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0, \end{aligned}$$

spricht u ist ebenfalls reell und daher ist $u \in \mathcal{H}$. Schließlich haben wir auch

$$\|u - u_n\|_{\mathcal{H}} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left\| \frac{\widehat{u}}{\sqrt{\widehat{\varphi}}} - \frac{\widehat{u}_n}{\sqrt{\widehat{\varphi}}} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} = \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \left\| \widehat{v} - \frac{\widehat{u}_n}{\sqrt{\widehat{\varphi}}} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0,$$

das heißt \mathcal{H} ist vollständig.

Es verbleibt zu zeigen, dass $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ der reproduzierende Kern von \mathcal{H} ist. Wegen (3.3) ist der $\varphi \in L^1(\mathbb{R}^d)$ durch $\varphi(\mathbf{0})$ auf ganz \mathbb{R}^d beschränkt und es folgt $\varphi \in L^2(\mathbb{R}^d)$. Wegen

$$\left\| \widehat{\varphi(\cdot - \mathbf{x})} / \sqrt{\widehat{\varphi}} \right\|_{L^2(\mathbb{R}^d)}^2 = \|\widehat{\varphi}\|_{L^1(\mathbb{R}^d)}$$

gilt außerdem $\varphi(\cdot - \mathbf{x}) \in \mathcal{H}$ für jedes $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d$. Die Reproduktionseigenschaft ergibt sich schließlich aus

$$\begin{aligned} (u, \varphi(\cdot - \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \frac{\widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) \overline{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} e^{-i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})}}{\widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi})} d\boldsymbol{\xi} \\ &= \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \int_{\mathbb{R}^d} \widehat{u}(\boldsymbol{\xi}) e^{i(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi})} d\boldsymbol{\xi} \\ &= u(\mathbf{x}). \end{aligned}$$

□

Native Spaces sind aufgrund dieses Resultats eine Verallgemeinerung von Sobolev-Räumen. Dazu beachten wir, dass für $s > d/2$ die Sobolev-Räume der Ordnung s definiert sind als

$$H^s(\mathbb{R}^d) := \{u \in L^2(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d) : \widehat{u}(1 + \|\cdot\|_2^2)^{s/2} \in L^2(\mathbb{R}^d)\}.$$

Daher ist der Native Space zu einem algebraisch abklingenden Kern ein Sobolev-Raum.

Korollar 3.10 Angenommen, $\varphi \in L^1(\mathbb{R}^d) \cap C(\mathbb{R}^d)$ genügt für $s > d/2$ der Abschätzung

$$\underline{c}(1 + \|\boldsymbol{\xi}\|_2^2)^{-s} \leq \widehat{\varphi}(\boldsymbol{\xi}) \leq \bar{c}(1 + \|\boldsymbol{\xi}\|_2^2)^{-s} \quad \text{für alle } \boldsymbol{\xi} \in \mathbb{R}^d. \quad (3.4)$$

Dann stimmt der Native Space $\mathcal{N}_{\kappa}(\mathbb{R}^d)$ zum Kern $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ mit dem Sobolev-Raum $H^s(\mathbb{R}^d)$ überein, wobei die Normen $\|\cdot\|_{\mathcal{N}_{\kappa}(\mathbb{R}^d)}$ und $\|\cdot\|_{H^s(\mathbb{R}^d)}$ äquivalent sind.

Die Fourier-Transformation des Matérn-Kerns $\varphi_{\nu}(\|\mathbf{z}\|_2)$ aus Beispiel 1.3 erfüllt

$$\widehat{\varphi}_{\nu}(\boldsymbol{\xi}) = \alpha \left(1 + \frac{\ell^2}{2\nu} \|\boldsymbol{\xi}\|_2^2 \right)^{-\nu-d/2},$$

wobei α ein Skalierungsfaktor ist, der von ν , ℓ und d abhängt. Bei entsprechender Wahl von $\ell := \sqrt{2\nu}$ gilt also (3.4) mit $\underline{c} = \alpha = \bar{c}$. Demnach sind die Matérn-Kerne genau die reproduzierenden Kerne der Sobolev-Räume $H^s(\mathbb{R}^d)$ mit $s = \nu + d/2$.

4. Fehleranalyse

4.1 Power Function

Um Fehlerabschätzungen für die Kerninterpolation zu erzielen, benötigen wir die folgende Definition.

Definition 4.1 Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein symmetrischer und positiv definit Kern. Ferner sei $X := \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ eine Menge paarweise verschiedener Punkte. Dann ist für jedes $\mathbf{x} \in \Omega$ die **Power Function** gegeben durch

$$P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x}) := \sup_{f \in \mathcal{H} \setminus \{0\}} \frac{|f(\mathbf{x}) - f_X(\mathbf{x})|}{\|f\|_{\mathcal{H}}}.$$

Für gegebenes $f \in \mathcal{H}$ und zugehöriger Kerninterpolante $f_X \in \mathcal{H}_X$ folgt mit Hilfe der Power Function offenbar sofort die Fehlerabschätzung

$$|f(\mathbf{x}) - f_X(\mathbf{x})| \leq P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x}) \|f\|_{\mathcal{H}}.$$

Wir müssen also nur noch $P_{\mathcal{H}_X}$ abschätzen. Dazu benötigen wir zunächst folgendes Lemma.

Lemma 4.2 Die Power Function genügt der Gleichung

$$P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x}) = \|\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}}.$$

Beweis. Wir setzen $g(\mathbf{x}) := f(\mathbf{x}) - f_X(\mathbf{x})$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega$. Dann gilt $g \in \mathcal{H}$ und es folgt mit Hilfe der Galerkin-Orthogonalität

$$\begin{aligned} |g(\mathbf{x})| &= \left| (g, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \right| = \left| (g, \kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \right| \\ &= \left| (f, \kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \right| \leq \|f\|_{\mathcal{H}} \|\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}}. \end{aligned}$$

Somit ist $P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x}) \leq \|\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}}$. Setzen wir allerdings $f := \kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}) \in \mathcal{H}$ ein, so folgt wegen $f = g$ sogar Gleichheit und damit die Behauptung. \square

Die Funktion $\kappa_X(\cdot, \mathbf{x})$ besitzt die Darstellung

$$\kappa_X(\cdot, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N L_j(\mathbf{x}) \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j). \quad (4.1)$$

Indem wir nun $\mathbf{x} = \mathbf{x}_k$ einsetzen und dann $\kappa_X(\cdot, \mathbf{x}_k)$ im Punkt \mathbf{x}_i auswerten, so erkennt man

$$L_i(\mathbf{x}_k) = \delta_{i,k} \quad \text{für alle } i, k = 1, \dots, N.$$

Der folgende Satz zeigt, dass die Funktionen $\{L_i\}_{i=1}^N$ die *Lagrange-Basis* in \mathcal{H}_X bilden.

Satz 4.3 Es gilt $\{L_i\}_{i=1}^N \subset \mathcal{H}_X$ und die Interpolante $f_X \in \mathcal{H}_X$ von $f \in \mathcal{H}$ besitzt die Darstellung

$$f_X = \sum_{j=1}^N L_j(\cdot) f(\mathbf{x}_j).$$

Beweis. Die Kerninterpolante von f besitzt die Darstellung $f_X = \sum_{k=1}^N \alpha_k \kappa(\cdot, \mathbf{x}_k) \in \mathcal{H}_X$. Außerdem folgt aus (4.1) die Gleichung

$$\kappa(\cdot, \mathbf{x}_k) = \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}_k) = \sum_{j=1}^N L_j(\cdot) \kappa(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k).$$

Daraus ergibt sich

$$f_X = \sum_{k=1}^N \alpha_k \kappa(\cdot, \mathbf{x}_k) = \sum_{k=1}^N \alpha_k \sum_{j=1}^N L_j(\cdot) \kappa(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k).$$

Umsortieren der Summe und Beachtung der Interpolationseigenschaft $f_X(\mathbf{x}_j) = f(\mathbf{x}_j)$ liefern

$$f_X = \sum_{j=1}^N L_j(\cdot) \sum_{k=1}^N \alpha_k \kappa(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}_k) = \sum_{j=1}^N L_j(\cdot) f(\mathbf{x}_j).$$

Da diese Identität für jedes $f_X \in \mathcal{H}_X$ gilt, schließen wir insbesondere auch $\{L_i\}_{i=1}^N \subset \mathcal{H}_X$. \square

Satz 4.4 Die Power Function besitzt die explizite Darstellung

$$[P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x})]^2 = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2 \sum_{j=1}^N L_j(\mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) + \sum_{i,j=1}^N L_i(\mathbf{x}) L_j(\mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

Beweis. Es gilt gemäß Satz 4.2

$$\begin{aligned} [P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x})]^2 &= (\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \\ &= (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} - 2(\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} + (\kappa_X(\cdot, \mathbf{x}), \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}}. \end{aligned}$$

Der erste Term auf der rechten Seite ist identisch zu $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x})$ aufgrund von Satz 3.2. Für den zweiten Term erhalten wir unter Verwendung von (4.1)

$$\begin{aligned} (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} &= \sum_{j=1}^N L_j(\mathbf{x}) (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j))_{\mathcal{H}} \\ &= \sum_{j=1}^N L_j(\mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j), \end{aligned}$$

wobei wir wieder im letzten Schritt Satz 3.2 verwendet haben. Schließlich ergibt sich für den dritten Term vollständig analog

$$(\kappa_X(\cdot, \mathbf{x}), \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} = \sum_{i,j=1}^N L_i(\mathbf{x}) L_j(\mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

□

Aufgrund der Galerkin-Orthogonalität folgt

$$\begin{aligned} [P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x})]^2 &= (\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \\ &= (\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \kappa_X(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}} \\ &= \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \kappa_X(\mathbf{x}, \mathbf{x}). \end{aligned}$$

Daher erhalten wir folgende, zu Satz 4.4 äquivalente Darstellung der Power Function.

Satz 4.5 Für zwei Punktmengen $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ und $Y = \{\mathbf{y}_1, \dots, \mathbf{y}_M\}$ sei

$$\mathbf{A}_{X,Y} := \begin{bmatrix} \kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_1) & \dots & \kappa(\mathbf{x}_1, \mathbf{y}_M) \\ \vdots & & \vdots \\ \kappa(\mathbf{x}_N, \mathbf{y}_1) & \dots & \kappa(\mathbf{x}_N, \mathbf{y}_M) \end{bmatrix}.$$

Dann gilt

$$P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x}) = \sqrt{\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{A}_{X,X}^{-1} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}}.$$

Beweis. Die Koeffizienten von $\kappa_X(\cdot, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j)$ sind gegeben durch

$$\boldsymbol{\alpha} = \mathbf{A}_{X,X}^{-1} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}.$$

Wegen

$$\kappa_X(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \alpha_j \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) = \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{A}_{X,X}^{-1} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}$$

folgt das Behauptete aufgrund der oben stehenden Formel für die Power Function. □

4.2 Fill Distance und Approximationsfehler

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein symmetrischer und positiv definit Kern zum Native Space $\mathcal{H} := \mathcal{N}_\kappa(\Omega)$. Ferner sei $X := \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ eine Menge paarweise verschiedener Punkte. Wie wir in Kapitel 1 gesehen haben, führt die Kerninterpolation einer Funktion $f \in \mathcal{H}$ auf die Bestapproximation f_X im Raum

$$\mathcal{H}_X := \text{span}\{\phi_1, \dots, \phi_N\} \subset \mathcal{H} \quad \text{mit} \quad \phi_i := \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i), \quad i = 1, \dots, N.$$

Um den Interpolationsfehler $|f(\mathbf{x}) - f_X(\mathbf{x})|$ für $\mathbf{x} \in \Omega$ abschätzen zu können, benötigen wir einen Begriff, der die Güte einer zugrundeliegenden Punktverteilung X beschreibt.

Definition 4.6 Der **Fill Distance** der Punktmenge $X := \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ in einem beschränkten Gebiet $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ist definiert als

$$h_{X,\Omega} := \sup_{\mathbf{x} \in \Omega} \min_{1 \leq i \leq N} \|\mathbf{x} - \mathbf{x}_i\|_2.$$

Für jedes $\mathbf{x} \in \Omega$ ist der Abstand zum nächstgelegenen Punkt $\mathbf{x}_i \in X$ höchstens $h_{X,\Omega}$. Im folgenden wollen wir uns nun mit der Konvergenz des Interpolationsfehler für $h_{X,\Omega} \rightarrow 0$ beschäftigen. Dazu benötigen wir folgendes Lemma aus der Approximationstheorie.

Lemma 4.7 Angenommen, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ist beschränkt und erfüllt eine Kegelbedingung, und sei $k \in \mathbb{N}_0$ fest gewählt. Dann existieren positive Konstanten H, \underline{c} und \bar{c} derart, dass für alle $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ mit $h_{X,\Omega} \leq H$ und alle $\mathbf{x} \in \Omega$ Zahlen $v_1(\mathbf{x}), \dots, v_N(\mathbf{x})$ existieren mit

1. $\sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) p(\mathbf{x}_j) = p(\mathbf{x})$ für alle $p \in \Pi_k(\mathbb{R}^d)$,
2. $\sum_{j=1}^N |v_j(\mathbf{x})| \leq \bar{c}$,
3. $v_j(\mathbf{x}) = 0$ falls $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2 \geq \underline{c} h_{X,\Omega}$.

Die erste Bedingung ist die polynomiale Exaktheit, die dritte Bedingung bedeutet Lokalität. Die Konstante aus der zweiten Bedingung ist als *Lebesgue-Konstante* bekannt.

Satz 4.8 Angenommen, $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ist beschränkt und erfüllt eine Kegelbedingung. Der Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ sei symmetrisch, positiv definit und aus $C^{2k}(\Omega \times \Omega)$. Dann existieren positive Konstanten H und c , so dass

$$|f(\mathbf{x}) - f_X(\mathbf{x})| \leq c h_{X,\Omega}^k \sqrt{C_\kappa(\mathbf{x})} \|f\|_{\mathcal{H}}$$

gilt für alle $\mathbf{x} \in \Omega$ und $f \in \mathcal{H}$, vorausgesetzt es ist $h_{X,\Omega} \leq H$. Dabei ist

$$C_\kappa(\mathbf{x}) = \max_{|\beta|=2k} \max_{\mathbf{y}, \mathbf{y}' \in \Omega \cap B_{\mathbf{x}}(\underline{c} h_{X,\Omega})} |\partial^\beta \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{y}')|.$$

Beweis. Zu zeigen ist die Abschätzung

$$P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x}) \leq ch_{X,\Omega}^k \sqrt{C_\kappa(\mathbf{x})}.$$

Da gemäß Lemma 4.2 die Power Function den Ausdruck

$$\|\kappa(\cdot, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^N \alpha_j \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j)\|_{\mathcal{H}}$$

minimiert unter allen $\alpha \in \mathbb{R}^N$, folgt in Anbetracht von Satz 4.4, dass

$$[P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x})]^2 \leq Q(\mathbf{x}) := \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2 \sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) + \sum_{i,j=1}^N v_i(\mathbf{x}) v_j(\mathbf{x}) \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j).$$

Taylor-Entwicklung des Kerns $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ bezüglich \mathbf{y} um \mathbf{x} liefert

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{|\beta| < 2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^\beta \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x})}{\beta!} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^\beta + R(\mathbf{x}, \mathbf{y})$$

mit dem Restglied

$$R(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{|\beta|=2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^\beta \kappa(\mathbf{x}, \boldsymbol{\xi}_{(\mathbf{x}, \mathbf{y})})}{\beta!} (\mathbf{y} - \mathbf{x})^\beta,$$

wobei $\boldsymbol{\xi}_{(\mathbf{x}, \mathbf{y})}$ auf der Verbindungsstrecke von \mathbf{x} und \mathbf{y} liegt. Wir setzen diese oben ein

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}) &= \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2 \sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) \left[\sum_{|\beta| < 2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^\beta \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x})}{\beta!} (\mathbf{x}_j - \mathbf{x})^\beta + R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) \right] \\ &\quad + \sum_{i,j=1}^N v_i(\mathbf{x}) v_j(\mathbf{x}) \left[\sum_{|\beta| < 2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^\beta \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i)}{\beta!} (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_i)^\beta + R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right]. \end{aligned}$$

Die erste Eigenschaft aus Lemma 4.7 impliziert für $p := (\cdot - \mathbf{z})^\beta \in \Pi_{2k}(\mathbb{R}^d)$, dass

$$\sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) (\mathbf{x}_j - \mathbf{z})^\beta \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} = (\mathbf{x} - \mathbf{z})^\beta \Big|_{\mathbf{z}=\mathbf{x}} = 0 \quad \text{für alle } \beta \neq \mathbf{0}.$$

Damit ergibt sich

$$\begin{aligned} Q(\mathbf{x}) &= \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - 2 \sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) \\ &\quad + \sum_{i=1}^N v_i(\mathbf{x}) \sum_{|\beta| < 2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^\beta \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i)}{\beta!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^\beta + \sum_{i,j=1}^N v_i(\mathbf{x}) v_j(\mathbf{x}) R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j). \end{aligned}$$

Die Taylor-Entwicklung liefert die Identität

$$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \sum_{|\beta| < 2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^\beta \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_i)}{\beta!} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_i)^\beta + R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}),$$

was auf

$$Q(\mathbf{x}) = -\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) \left[2R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) - \sum_{i=1}^N v_i(\mathbf{x}) R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right] \\ + \sum_{i=1}^N v_i(\mathbf{x}) [\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) - R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x})]$$

führt. Mit Hilfe einer letzten Taylor-Entwicklung

$$\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) = \sum_{|\beta| < 2k} \frac{\partial_{\mathbf{y}}^{\beta} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x})}{\beta!} (\mathbf{x}_i - \mathbf{x})^{\beta} + R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i)$$

erhalten wir schließlich

$$Q(\mathbf{x}) = - \sum_{j=1}^N v_j(\mathbf{x}) \left[R(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j) + R(\mathbf{x}_j, \mathbf{x}) - \sum_{i=1}^N v_i(\mathbf{x}) R(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right].$$

Aus Lemma 4.7 folgt $\sum_{j=1}^N |v_j(\mathbf{x})| \leq \bar{c}$. Außerdem kann $\|\mathbf{x} - \mathbf{x}_j\|_2 \leq \bar{c}h_{X,\Omega}$ und $\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2 \leq 2\bar{c}h_{X,\Omega}$ angenommen werden, da ansonsten die Koeffizienten $v_j(\mathbf{x}) = 0$ sind. Daher können alle drei Terme in der Klammer durch $ch_{X,\Omega}^{2k} C_{\kappa}(\mathbf{x})$ beschränkt werden. Daraus folgt die Behauptung. \square

Bemerkung Eine verfeinerte Fehleranalyse liefert das folgende Resultat: Ist der Kern von der Gestalt $\kappa(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \varphi(\mathbf{x} - \mathbf{y})$ und erfüllt $\hat{\varphi}$ die Abschätzung (3.4) für ein $s > d/2$, dann gilt die Abschätzung

$$\|f(\mathbf{x}) - f_X(\mathbf{x})\|_{L^2(\Omega)} \leq ch_{X,\Omega}^s \|f\|_{\mathcal{H}},$$

sofern $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ beschränkt ist und einer Kegelbedingung genügt. \triangle

5. Pivotisierte Cholesky-Zerlegung

5.1 Über die Cholesky-Zerlegung

Es $\mathbf{0} \neq \mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ eine symmetrische and positiv semidefinite Matrix mit den Eigenwerten $\lambda_i \geq 0$, $i = 1, 2, \dots, n$. Aufgrund der Identität $\text{trace}(\mathbf{A}) = \sum_{i=1}^n \lambda_i > 0$ existiert mindestens ein positiver Diagonaleintrag $a > 0$. Wir nehmen ohne Beschränkung der Allgemeinheit an, dass sich dieser an der $(1, 1)$ -Position befindet. Andernfalls finden wir einen Index $2 \leq \ell \leq n$ derart, dass der ℓ -te Diagonaleintrag positiv ist und vertauschen jeweils die erste Zeile und Spalte mit der ℓ -ten Zeile und Spalte. Dies kann durch eine symmetrische Permutationsmatrix $\mathbf{P} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ ausgedrückt werden, welche $\mathbf{P}^2 = \mathbf{I}$ erfüllt.

Lemma 5.1 Die Matrix

$$\mathbf{A} = \left[\begin{array}{c|c} a & \mathbf{b}^\top \\ \hline \mathbf{b} & \mathbf{C} \end{array} \right] \in \mathbb{R}^{n \times n}$$

sei symmetrisch und positiv semidefinit mit $a > 0$. Dann ist das Schur-Komplement

$$\mathbf{S} := \mathbf{C} - \frac{1}{a} \mathbf{b} \mathbf{b}^\top \in \mathbb{R}^{(n-1) \times (n-1)} \quad (5.1)$$

wohldefiniert und ebenso symmetrisch und positiv semidefinit.

Beweis. Da $a > 0$ ist, ist das Schur-Komplement wohldefiniert und wegen

$$\mathbf{S}^\top = \mathbf{C}^\top - \frac{1}{a} (\mathbf{b} \mathbf{b}^\top)^\top = \mathbf{C} - \frac{1}{a} \mathbf{b} \mathbf{b}^\top = \mathbf{S}$$

auch symmetrisch. Betrachte nun $\mathbf{y} \in \mathbb{R}^{n-1}$ and setze $x := -\mathbf{b}^\top \mathbf{y} / a \in \mathbb{R}$. Dann folgt

$$0 \leq \begin{bmatrix} x \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}^\top \mathbf{A} \begin{bmatrix} x \\ \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} ax + \mathbf{b}^\top \mathbf{y} \\ x \mathbf{b} + \mathbf{C} \mathbf{y} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x \\ \mathbf{y} \end{bmatrix}^\top \begin{bmatrix} 0 \\ \mathbf{S} \mathbf{y} \end{bmatrix} = \mathbf{y}^\top \mathbf{S} \mathbf{y},$$

das heißt, \mathbf{S} is auch positiv semidefinit. □

Als Konsequenz dieses Lemmas können wir die Matrix \mathbf{A} zerlegen gemäß

$$\mathbf{P} \mathbf{A} \mathbf{P} = \frac{1}{a} \begin{bmatrix} a \\ \mathbf{b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a \\ \mathbf{b} \end{bmatrix}^\top + \begin{bmatrix} 0 & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{S} \end{bmatrix}. \quad (5.2)$$

Falls nun das Schur-Komplement $\mathbf{S} \neq \mathbf{0}$ erfüllt, dann können wir diese Prozedur für \mathbf{S}

wiederholen, was auf die Zerlegung

$$\mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \mathbf{A} \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 = \frac{1}{a_1} \mathbf{P}_2 \begin{bmatrix} a_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_1 \\ \mathbf{b}_1 \end{bmatrix}^\top \mathbf{P}_2 + \frac{1}{a_2} \begin{bmatrix} 0 \\ a_2 \\ \mathbf{b}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ a_2 \\ \mathbf{b}_2 \end{bmatrix}^\top + \left[\begin{array}{cc|c} 0 & 0 & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{S}_2 \end{array} \right]$$

führt. Allgemein erhalten wir demnach

$$\mathbf{P}_j \cdots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1 \mathbf{A} \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_j = \sum_{i=1}^j \widehat{\boldsymbol{\ell}}_i \widehat{\boldsymbol{\ell}}_i^\top + \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{S}_j \end{array} \right] \quad (5.3)$$

mit

$$\widehat{\boldsymbol{\ell}}_i := \frac{1}{\sqrt{a_i}} \mathbf{P}_j \mathbf{P}_{j-1} \cdots \mathbf{P}_{i+1} \left. \begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hline a_i \\ \mathbf{b}_i \end{array} \right\} (i-1)\text{-mal} \quad (5.4)$$

und

$$\mathbf{S}_i := \mathbf{S}_{i-1} - \frac{1}{a_i} \mathbf{b}_i \mathbf{b}_i^\top \quad (5.5)$$

für alle $i = 1, 2, \dots, j$. Die endgültige Zerlegung der Matrix \mathbf{A} ergibt sich durch beidseitige Multiplikation mit den Permutationsmatrizen:

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^j \boldsymbol{\ell}_i \boldsymbol{\ell}_i^\top + \mathbf{E}_j \quad \text{mit} \quad \boldsymbol{\ell}_i := \frac{1}{\sqrt{a_i}} \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_i \left. \begin{array}{c} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hline a_i \\ \mathbf{b}_i \end{array} \right\} \text{für alle } i = 1, 2, \dots, j.$$

Hierbei ist die Restmatrix \mathbf{E}_j gegeben durch

$$\mathbf{E}_j := \mathbf{P}_1 \mathbf{P}_2 \cdots \mathbf{P}_j \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \hline \mathbf{0} & \mathbf{S}_j \end{array} \right] \mathbf{P}_j \cdots \mathbf{P}_2 \mathbf{P}_1.$$

Indem wir die Matrix $\mathbf{L}_j = [\boldsymbol{\ell}_1, \boldsymbol{\ell}_2, \dots, \boldsymbol{\ell}_j]$ einführen können wir diese Zerlegung kurz schreiben als $\mathbf{A} = \mathbf{L}_j \mathbf{L}_j^\top + \mathbf{E}_j$.

Falls $\text{rank}(\mathbf{A}) = k < n$ gilt, dann bricht der obige Algorithmus nach k Schritten mit $\mathbf{E}_k = \mathbf{0}$ ab, da die Matrix $\mathbf{A}_k := \mathbf{L}_k \mathbf{L}_k^\top$ wegen $a_1, a_2, \dots, a_k > 0$ offensichtlich den Rang k besitzt. Falls der Algorithmus ohne vorzeitigen Abbruch endet und \mathbf{P}_i immer als die Identität gewählt wird, dann produziert er die übliche Cholesky-Zerlegung.

5.2 Niedrigrangapproximation

Wie wir gesehen haben, bricht die pivotsierte Cholesky-Zerlegung im Fall $\text{rank}(\mathbf{A}) = m < n$ nach m Schritten mit $\mathbf{E}_m = \mathbf{0}$ ab. Daher ergibt sich die folgende Fragestellung: Angenommen, es existiert eine Rang- m -Matrix $\mathbf{A}_m \in \mathbb{R}^{n \times n}$ derart, dass

$$\|\mathbf{A} - \mathbf{A}_m\| \leq \varepsilon$$

gilt. Kann dann die Cholesky-Zerlegung verwendet werden um diese Approximation zu finden? Mit anderen Worten, führt die Berechnung von $m < n$ Termen von (5.3)–(5.5) zu einer Rang- m -Approximation $\mathbf{A}_m = \mathbf{L}_m \mathbf{L}_m^\top$ von \mathbf{A} mit $\|\mathbf{A} - \mathbf{A}_m\| \leq \varepsilon$?

Um diese Frage zu beantworten, wählen wir die Spurnorm als Fehlermaß. Dann wird die bestmögliche Reduktion des Fehlers in (5.2) erzielt, wenn die Spurnorm des Schur-Komplements klein wird. Dies führt auf die Aufgabenstellung

$$\text{trace}(\mathbf{S}) = \text{trace}(\mathbf{A}) - \frac{1}{a_{i,i}} \|\mathbf{a}_i\|_2^2 \rightarrow \min_{i=1}^n,$$

wobei \mathbf{a}_i den i -ten Spaltenvektor und $a_{i,i}$ den i -te Diagonaleintrag von \mathbf{A} bezeichnen.

Da das obige Minimierungsproblem nur gelöst werden kann, wenn die Matrix \mathbf{A} vollständig bekannt ist, wählen wir eine andere Strategie: Wir eliminieren einfach den betragsgrößten Eintrag $a_{i,j}$ von \mathbf{A} . Mit $\mathbf{x} \in \mathbb{R}^n$ derart, dass $x_i = \sqrt{a_{j,j}/a_{i,i}}$, $x_j = \pm \sqrt{a_{i,i}/a_{j,j}}$ und $x_k = 0$ sonst folgt $0 \leq \mathbf{x}^\top \mathbf{A} \mathbf{x} = 2(\sqrt{a_{i,i}a_{j,j}} - |a_{i,j}|)$, das heißt, es gilt

$$|a_{i,j}| \leq \sqrt{a_{i,i}a_{j,j}} \leq \frac{a_{i,i} + a_{j,j}}{2} \leq \max_{k=1}^n a_{k,k}, \quad j = 1, 2, \dots, n.$$

Folglich befindet der betragsgrößte Eintrag auf der Diagonalen der Matrix \mathbf{A} . Unsere Strategie ist es daher, den betragsgrößten Diagonaleintrag als Pivotelement auszuwählen. Dabei beachte man, dass aufgrund von (5.1) die Folge der Pivotelemente monoton fallend ist bis das Schur-Komplement verschwindet oder das Verfahren beendet wird. Damit erhalten wir den folgenden Algorithmus:

Data: Matrix $\mathbf{A} = [a_{i,j}] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ und Fehlertoleranz $\varepsilon > 0$
Result: Niedrigrang-Approximation $\mathbf{A}_m = \sum_{i=1}^m \ell_i \ell_i^\top$ mit $\text{trace}(\mathbf{A} - \mathbf{A}_m) \leq \varepsilon$
begin

- setze $m := 1$;
- setze $\mathbf{d} := \text{diag}(\mathbf{A})$ and $\text{error} := \|\mathbf{d}\|_1$;
- initialisiere $\boldsymbol{\pi} := (1, 2, \dots, n)$;
- while** $\text{error} > \varepsilon$ **do**
 - bestimme $i := \arg \max\{d_{\pi_j} : j = m, m+1, \dots, n\}$;
 - vertausche π_m und π_i ;
 - setze $\ell_{m,\pi_m} := \sqrt{d_{\pi_m}}$;
 - for** $m+1 \leq i \leq n$ **do**
 - berechne $\ell_{m,\pi_i} := \left(a_{\pi_m,\pi_i} - \sum_{j=1}^{m-1} \ell_{j,\pi_m} \ell_{j,\pi_i} \right) / \ell_{m,\pi_m}$;
 - datiere $d_{\pi_i} := d_{\pi_i} - \ell_{m,\pi_i}^2$ auf;
- berechne $\text{error} := \sum_{i=m+1}^n d_{\pi_i}$;
- erhöhe $m := m + 1$;

Man beachte, dass dieser Algorithmus *nur* alle Diagonaleinträge der Matrix \mathbf{A} und die m , mit den Pivotelementen assoziierten Spalten explizit benötigt, um die Rang- m -Approximation aufzustellen. Alle weiteren Matrixeinträge gehen nirgendwo in die Berechnung ein. Diese Eigenschaft macht den Algorithmus extrem attraktiv zur effizienten Approximation von nichtlokalen Operatoren.

Satz 5.2 Sei $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ symmetrisch und positiv semidefinit. Dann benötigen m Schritte der pivotsierten Cholesky-Zerlegung den Rechenaufwand $\mathcal{O}(m^2 n)$.

Beweis. Der teuerste Teil im Algorithmus ist die Berechnung der Cholesky-Vektoren ℓ_k , $k = 1, 2, \dots, m$. Diese benötigt jeweils

$$\sum_{k=1}^m \sum_{i=k+1}^n \sum_{j=1}^{k-1} 1 \leq \sum_{k=1}^m (k-1)n \leq \frac{m^2}{2}n$$

Additionen und Multiplikationen, woraus das Behauptete folgt. \square

Klingen die Eigenwerte der Matrix \mathbf{A} hinreichend stark exponentiell ab, dann kann bewiesen werden, dass die pivotsierte Cholesky-Zerlegung eine Rang- m -Approximation liefert, welche die Matrix \mathbf{A} exponentiell approximiert.

Satz 5.3 Die Eigenwerte der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mögen unabhängig von n der Bedingung

$$4^m \lambda_m \leq a \exp(-bm)$$

für gewisse Konstanten $a, b > 0$ genügen. Dann erfüllt die pivotsierte Cholesky-Zerlegung \mathbf{A}_m mit Rang $m \geq |\log(\varepsilon/n)|/b$ die Abschätzung $\text{trace}(\mathbf{A}_m - \mathbf{A}) \leq c\varepsilon$ gleichmäßig für jedes $\varepsilon > 0$.

Beweis. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit nehmen wir an, dass die Matrix \mathbf{A} so permutiert ist, dass sich für alle $k = 1, 2, \dots, n$ das k -te Pivotelement an der (k, k) -Position befindet. Dann ist $\mathbf{L}_m \in \mathbb{R}^{n \times m}$ stets eine untere Dreiecksmatrix. Wir partitionieren die Matrizen \mathbf{A} und \mathbf{L}_m gemäß

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{1,1} & \mathbf{A}_{1,2} \\ \mathbf{A}_{2,1} & \mathbf{A}_{2,2} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{L}_m = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{1,1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{L}_{2,1} & \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

Aus

$$\mathbf{A}_m = \mathbf{L}_m \mathbf{L}_m^\top = \begin{bmatrix} \mathbf{L}_{1,1} \mathbf{L}_{1,1}^\top & \mathbf{L}_{1,1} \mathbf{L}_{2,1}^\top \\ \mathbf{L}_{2,1} \mathbf{L}_{1,1}^\top & \mathbf{L}_{2,1} \mathbf{L}_{2,1}^\top \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_{1,1} & \mathbf{A}_{1,2} \\ \mathbf{A}_{2,1} & \mathbf{L}_{2,1} \mathbf{L}_{2,1}^\top \end{bmatrix}$$

ist leicht ersichtlich, dass $\mathbf{L}_{1,1} \mathbf{L}_{1,1}^\top$ die (pivotsierte) Cholesky-Zerlegung von $\mathbf{A}_{1,1}$ ist. Es gilt folglich

$$\frac{1}{\lambda_m(\mathbf{A}_{1,1})} = \|\mathbf{A}_{1,1}^{-1}\|_2 = \|\mathbf{L}_{1,1}^{-1}\|_2^2,$$

wobei $\lambda_m(\mathbf{A}_{1,1})$ den m -tgrößten Eigenwert der Matrix $\mathbf{A}_{1,1}$ bezeichnet.

Ein bekanntes Resultat aus der numerischen linearen Algebra besagt nun, dass für die pivotsierte Cholesky-Zerlegung die (scharfe) Abschätzung $\|\mathbf{L}_{1,1}^{-1}\|_2 \leq \sqrt{4^m + 6m - 1}/(3\ell_{m,m})$ gilt. Damit erhalten wir

$$\frac{1}{\lambda_m(\mathbf{A}_{1,1})} \leq \frac{4^m + 6m - 1}{9\ell_{m,m}^2} \leq \frac{4^m}{\ell_{m,m}^2}. \quad (5.6)$$

Weil die Spurnorm von $\mathbf{A} - \mathbf{A}_m$ beschränkt ist durch das $(n - m)$ -fache des Pivotelements $\ell_{m,m}^2$, folgt daraus sofort

$$\text{trace}(\mathbf{A} - \mathbf{A}_m) \leq 4^m(n - m)\lambda_m(\mathbf{A}_{1,1}) \leq 4^m n \lambda_m(\mathbf{A}_{1,1}). \quad (5.7)$$

Nun bezeichne $\mathbf{\Pi}_m : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ die orthogonale Projektion auf die ersten m Koordinaten des \mathbb{R}^n . Dann liefert der Satz von Courant-Fischer die Abschätzung

$$\begin{aligned} \lambda_m(\mathbf{A}_{1,1}) &= \inf_{\substack{V \subset \mathbb{R}^m \\ \dim(V)=m-1}} \sup_{\substack{\mathbf{v} \in V^\perp \\ \|\mathbf{v}\|_2=1}} \|\mathbf{A}_{1,1}\mathbf{v}\|_2 \\ &= \inf_{\substack{V \subset \mathbb{R}^n \\ \dim(V)=m-1}} \sup_{\substack{\mathbf{v} \in V^\perp \\ \|\mathbf{v}\|_2=1}} \|\mathbf{\Pi}_m \mathbf{A} \mathbf{\Pi}_m \mathbf{v}\|_2 \\ &\leq \inf_{\substack{V \subset \mathbb{R}^n \\ \dim(V)=m-1}} \sup_{\substack{\mathbf{v} \in V^\perp \\ \|\mathbf{v}\|_2=1}} \|\mathbf{A} \mathbf{v}\|_2 \\ &= \lambda_m(\mathbf{A}). \end{aligned}$$

Setzen wir dies in (5.7) ein, dann erhalten wir schließlich

$$\text{trace}(\mathbf{A} - \mathbf{A}_m) \leq 4^m n \lambda_m(\mathbf{A}) \leq a n \exp(-bm).$$

Wählt man nun $m \geq \lceil \log(\varepsilon/n)/b \rceil$, so ergibt sich die Behauptung. \square

Bemerkungen

1. Die Schranke (5.6) ist scharf, das heißt, der Faktor 4^m kann nicht vermieden werden.
2. Im Fall exponentiell abklingender Eigenwerte $\lambda_m \leq a \exp(-bm)$ ist die Spurnorm der Matrix $\mathbf{A} \in \mathbb{R}^{n \times n}$ äquivalent zu ihrer ℓ^2 -Norm, denn es gilt einerseits

$$\|\mathbf{A}\|_2 = \max_{m=1}^n \lambda_m = a \exp(-b)$$

und andererseits

$$\text{trace}(\mathbf{A}) = \sum_{m=1}^n \lambda_m \leq a \sum_{m=1}^n \exp(-bm) \leq ca.$$

\triangle

5.3 Newton-Basis

Sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Gebiet und $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein symmetrischer und positiv definit Kern. Der Raum \mathcal{H} bezeichne den zugehörigen Native Space und

$$\mathcal{H}_X := \text{span}\{\kappa(\cdot, \mathbf{x}_1), \dots, \kappa(\cdot, \mathbf{x}_N)\} \subset \mathcal{H}$$

sei der N -dimensionaler Unterraum, der durch die Wahl einer Menge $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ von paarweise verschiedenen Punkte entsteht.

In Abschnitt 4.1 hatten wir die Lagrange-Basis $\{L_i\}_{i=1}^N$ von \mathcal{H}_X eingeführt. Diese ist durch die zwei Eigenschaften $L_i \in \mathcal{H}_X$ und $L_i(\mathbf{x}_j) = \delta_{i,j}$ eindeutig charakterisiert. Der Ansatz $L_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \alpha_{i,j} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j)$ zeigt, dass die Koeffizienten durch $\boldsymbol{\alpha}_i = \mathbf{A}_{X,X}^{-1} \mathbf{e}_i$ gegeben sind.

Wir berechnen nun eine Cholesky-Zerlegung $\mathbf{L}\mathbf{L}^\top$ der Kernmatrix $\mathbf{A}_{X,X}$ und setzen $\mathbf{L} = [\boldsymbol{\ell}_1, \dots, \boldsymbol{\ell}_N]$, Außerdem definieren die Koeffizientenvektoren

$$\boldsymbol{\beta}_i = \mathbf{L}^{-\top} \mathbf{e}_i, \quad i = 1, \dots, N.$$

Dann bilden die Funktionen $\{N_i\}_{i=1}^N \subset \mathcal{H}_X$ mit

$$N_i(\mathbf{x}) = \sum_{j=1}^N \beta_{i,j} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_j), \quad i = 1, \dots, N,$$

offenbar ebenfalls eine Basis von \mathcal{H}_X . Außerdem gilt

$$[N_i(\mathbf{x}_j)]_{j=1}^N = \mathbf{A}_{X,X} \boldsymbol{\beta}_i = \mathbf{L}\mathbf{L}^\top \mathbf{L}^{-\top} \mathbf{e}_i = \boldsymbol{\ell}_i,$$

das heißt, jede Funktion N_i besitzt die Eigenschaft

$$N_i(\mathbf{x}_j) = 0 \quad \text{für alle } j < i.$$

Daher sprechen wir von einer *Newton-Basis*.

Lemma 5.4 Es gilt

$$\sum_{i=1}^N N_i^2(\mathbf{x}) = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - [P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x})]^2.$$

Beweis. Es gilt gemäß Satz 4.5

$$[P_{\mathcal{H}_X}(\mathbf{x})]^2 = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{A}_{X,X}^{-1} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}.$$

Wir müssen daher nur die Identität

$$\sum_{i=1}^N N_i^2(\mathbf{x}) = \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{A}_{X,X}^{-1} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}$$

nachweisen. Diese folgt jedoch trivialerweise aus

$$N_i(\mathbf{x}) = \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{L}^{-\top} \mathbf{e}_i,$$

denn es ist

$$\sum_{i=1}^N N_i^2(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^N \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{L}^{-\top} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i^\top \mathbf{L}^{-1} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}} = \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}^\top \underbrace{\mathbf{L}^{-\top} \mathbf{L}^{-1}}_{=\mathbf{A}_{X,X}^{-1}} \mathbf{A}_{X,\{\mathbf{x}\}}.$$

□

Aus diesem Lemma können wir den nachfolgenden Satz schließen.

Satz 5.5 Sei $X_{n-1} = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_{n-1}\} \subset X_n = X_{n-1} \cup \{\mathbf{x}_{n-1}\} \subset \Omega$. Dann gilt

$$N_n^2(\mathbf{x}) = [P_{\mathcal{H}_{X_{n-1}}}(\mathbf{x})]^2 - [P_{\mathcal{H}_{X_n}}(\mathbf{x})]^2 \leq [P_{\mathcal{H}_{X_{n-1}}}(\mathbf{x})]^2.$$

Falls \mathbf{x}_n rekursiv gewählt wird als

$$\mathbf{x}_n = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x} \in \Omega} [P_{\mathcal{H}_{X_{n-1}}}(\mathbf{x})]^2, \quad (5.8)$$

dann gilt

$$N_n^2(\mathbf{x}) \leq N_n^2(\mathbf{x}_n) \quad \text{für alle } \mathbf{x} \in \Omega.$$

Dies bedeutet, die Newton-Basis besitzt keine parasitären Maxima.

Beweis. In Hinblick auf Lemma 5.4, müssen wir nur die letzte Aussage beweisen. Diese folgt aber sofort aus

$$N_n^2(\mathbf{x}) \leq [P_{\mathcal{H}_{X_{n-1}}}(\mathbf{x})]^2 \leq [P_{\mathcal{H}_{X_{n-1}}}(\mathbf{x}_n)]^2 = N_n^2(\mathbf{x}_n),$$

wobei wir im letzten Schritt $P_{\mathcal{H}_{X_n}}(\mathbf{x}_n) = 0$ benutzt haben. \square

Die Suche nach dem Maximum in (5.8) über alle $\mathbf{x} \in \Omega$ ist nicht praktikabel. Daher schränkt man sich auf eine Menge $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ von N Punkten ein:

$$\mathbf{x}_n = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x} \in X} [P_{\mathcal{H}_{X_{n-1}}}(\mathbf{x})]^2 = \operatorname{argmax}_{\mathbf{x} \in X} \left\{ \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) - \mathbf{A}_{X_{n-1}, \{\mathbf{x}\}}^\top \mathbf{A}_{X_{n-1}, X_{n-1}}^{-1} \mathbf{A}_{X_{n-1}, \{\mathbf{x}\}} \right\}.$$

Mit anderen Worten, man erhält genau die pivotisierten Cholesky-Zerlegung aus dem vorherigen Abschnitt.

6. Spektrale Eigenschaften

6.1 Spektralzerlegung

Es sei $\Omega \subset \mathbb{R}^d$ ein Lipschitz-Gebiet. Wir wollen uns zunächst mit Operatoren beschäftigen, die Funktionen aus $L^2(\Omega)$ in $L^2(\Omega)$ abbilden.

Definition 6.1 Ein Operator $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ wird **symmetrisch** genannt, wenn

$$(u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)} = (\mathcal{K}u, u)_{L^2(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in L^2(\Omega).$$

Ein symmetrischer Operator $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ ist **positiv semidefinit**, falls

$$(u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)} \geq 0 \quad \text{für alle } u \in L^2(\Omega).$$

Im Fall der strengen Ungleichung ist der Operator **positiv definit**.

Für symmetrische und positiv semidefinite Operatoren haben wir das folgende Lemma.

Lemma 6.2 Es sei $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ ein stetiger, symmetrisch positiv semidefiniter Operator. Dann gilt

$$\|\mathcal{K}\| = \sup_{\|u\|_{L^2(\Omega)}=1} (u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)}.$$

Beweis. Einerseits ist für jedes normierte $u \in L^2(\Omega)$

$$(u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)} \leq \|\mathcal{K}\| \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 = \|\mathcal{K}\|.$$

Andererseits haben wir für ein beliebiges $\lambda > 0$

$$\begin{aligned} 4\|\mathcal{K}v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \left(\mathcal{K} \left[\lambda v + \frac{1}{\lambda} \mathcal{K}v \right], \lambda v + \frac{1}{\lambda} \mathcal{K}v \right)_{L^2(\Omega)} - \left(\mathcal{K} \left[\lambda v - \frac{1}{\lambda} \mathcal{K}v \right], \lambda v - \frac{1}{\lambda} \mathcal{K}v \right)_{L^2(\Omega)} \\ &\leq \left\{ \left\| \lambda v + \frac{1}{\lambda} \mathcal{K}v \right\|_{L^2(\Omega)}^2 + \left\| \lambda v - \frac{1}{\lambda} \mathcal{K}v \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\} \sup_{\|u\|_{L^2(\Omega)}=1} (u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)} \\ &= 2 \left\{ \lambda^2 \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 + \frac{1}{\lambda^2} \|\mathcal{K}v\|_{L^2(\Omega)}^2 \right\} \sup_{\|u\|_{L^2(\Omega)}=1} (u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)}. \end{aligned}$$

Setzt man nun $\lambda^2 = \|\mathcal{K}v\|_{L^2(\Omega)}/\|v\|_{L^2(\Omega)}$ ein, so folgt

$$\|\mathcal{K}v\|_{L^2(\Omega)} \leq \|v\|_{L^2(\Omega)} \sup_{\|u\|_{L^2(\Omega)}=1} (u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)}.$$

Da diese Ungleichung trivialerweise auch im Fall $\|\mathcal{K}v\|_{L^2(\Omega)} = 0$ richtig ist, folgt das Behauptete. \square

Definition 6.3 Ein Operator $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ heißt **kompakt**, falls er stetig ist und das Bild jeder beschränkten Folge eine konvergente Teilfolge besitzt.

Symmetrische, positiv semidefinite, kompakte Operatoren besitzen eine Spektralzerlegung.

Satz 6.4 (Spektralsatz für kompakte Operatoren) Ist $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ ein symmetrischer, positiv semidefiniter und kompakter Operator, so erhält man eine Orthonormalfolge $\{v_n\}$ von Eigenvektoren, indem man zunächst eine Lösung v_1 der Variationsaufgabe

$$(u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)} \stackrel{!}{=} \max \quad \text{unter der Nebenbedingung} \quad \|u\|_{L^2(\Omega)} = 1$$

und dann sukzessive für $n = 2, 3, \dots$ eine Lösung v_n der Aufgabe

$$(u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)} \stackrel{!}{=} \max \quad \text{unter den Nebenbedingungen} \quad \|u\|_{L^2(\Omega)} = 1 \\ \text{und} \quad (u, v_k)_{L^2(\Omega)} = 0, \quad k = 1, 2, \dots, n-1$$

bestimmt, solange dieses Maximum positiv ist. Der zu v_n gehörige (positive) Eigenwert λ_n ist gleich diesem Maximum. Das geschilderte Verfahren liefert jeden Eigenwert $\neq 0$ von \mathcal{K} , so oft wie es seine Vielfachheit angibt, und es gilt die Entwicklung

$$\mathcal{K}u = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n = \sum_{n=1}^{\infty} (\mathcal{K}u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n \quad \text{für alle } u \in L^2(\Omega).$$

Die Folge $\{\lambda_n\}$ bricht entweder ab oder strebt gegen 0.

Beweis. Ist $0 \neq \mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ ein symmetrischer, positiv semidefiniter und kompakter Operator, dann gilt nach Lemma 6.2

$$\|\mathcal{K}\| = \sup_{\|u\|_{L^2(\Omega)}=1} (u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)}.$$

Infolgedessen existiert eine Folge $\{u_n\}$ und eine Zahl λ mit $\lambda = \|\mathcal{K}\| > 0$, so dass

$$\|u_n\|_{L^2(\Omega)} = 1 \quad \text{und} \quad (u_n, \mathcal{K}u_n)_{L^2(\Omega)} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} \lambda.$$

Aus

$$0 \leq \|\mathcal{K}u_n - \lambda u_n\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ = \|\mathcal{K}u_n\|_{L^2(\Omega)}^2 - 2\lambda(u_n, \mathcal{K}u_n)_{L^2(\Omega)} + \lambda^2 \|u_n\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ \leq \|\mathcal{K}\|^2 - 2\lambda(u_n, \mathcal{K}u_n)_{L^2(\Omega)} + \|\mathcal{K}\|^2$$

folgt nun

$$\mathcal{K}u_n - \lambda u_n \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (6.1)$$

Wegen der Kompaktheit von \mathcal{K} besitzt $\{\mathcal{K}u_n\}$ eine konvergente Teilfolge $\{\mathcal{K}u_{n_i}\}$. Aus (6.1) folgt nun, dass dann auch $\{u_{n_i}\}$ gegen eine normierte Funktion v strebt mit $\mathcal{K}v = \lambda v$, also dass v eine Eigenlösung zum Eigenwert $\lambda = \|\mathcal{K}\|$ ist. Offenbar gilt

$$(v, \mathcal{K}v)_{L^2(\Omega)} = \sup_{\|u\|_{L^2(\Omega)}=1} (u, \mathcal{K}u)_{L^2(\Omega)}$$

und umgekehrt ist jede Funktion v , die dieser Gleichung genügt, eine Eigenlösung von \mathcal{K} zum Eigenwert $\|\mathcal{K}\|$ (man wähle $u_n \equiv v$).

Sei nun $\lambda_1 := \lambda$, $v_1 := v$ und

$$E_1 := \text{span}\{v_1\}^\perp = \{u \in L^2(\Omega) : (u, v_1)_{L^2(\Omega)} = 0\}.$$

Die Einschränkung \mathcal{K}_1 von \mathcal{K} auf E_1 ist wieder ein kompakter, positiv semidefiniter und symmetrischer Operator. Nach dem soeben Bewiesenen besitzt \mathcal{K}_1 , falls $\mathcal{K}_1 \neq 0$ ist, einen Eigenwert λ_2 mit $0 < \lambda_2 = \|\mathcal{K}_1\| \leq \|\mathcal{K}\| = \lambda_1$. Die Funktion v_2 sei eine zugehörige normierte Eigenlösung. Ist \mathcal{K}_2 die Einschränkung von \mathcal{K} auf

$$E_2 := \text{span}\{v_1, v_2\}^\perp = \{u \in L^2(\Omega) : (u, v_i)_{L^2(\Omega)} = 0, i = 1, 2\},$$

so liefern dieselben Schlüsse, falls $\mathcal{K}_2 \neq 0$ ist, einen Eigenwert λ_3 von \mathcal{K}_2 mit $0 < \lambda_3 = \|\mathcal{K}_2\| \leq \|\mathcal{K}_1\| = \lambda_2$ und eine zugehörige Eigenlösung v_3 . Trivialerweise sind v_2, v_3 auch Eigenlösungen von \mathcal{K} zu den Eigenwerten λ_2, λ_3 . Der Fortgang des Verfahrens ist nun klar. Man erhält also eine möglicherweise abbrechende Eigenwertfolge

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq 0$$

und eine Orthonormalfolge $\{v_n\}$ von zugehörigen Eigenlösungen. Die Folge $\{\lambda_n\}$ bricht genau dann mit λ_m ab, wenn \mathcal{K} auf

$$E_m := \text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_m\}^\perp = \{u \in L^2(\Omega) : (u, v_i)_{L^2(\Omega)} = 0, i = 1, 2, \dots, m\}$$

verschwindet. In diesem Fall ist $L^2(\Omega) = E_m \overset{\perp}{\oplus} \text{span}\{v_1, v_2, \dots, v_m\}$, also

$$u = \sum_{n=1}^m (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n + w \quad \text{mit } w \in E_m$$

und somit

$$\mathcal{K}u = \sum_{n=0}^m \lambda_n (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n.$$

Bricht $\{\lambda_n\}$ nicht ab, dann strebt $\lambda_n \rightarrow 0$. Andernfalls wäre nämlich die Folge $\{v_n/\lambda_n\}$ beschränkt, und ihre Bildfolge $\{\mathcal{K}v_n/\lambda_n\} = \{v_n\}$ müsste somit eine konvergente Teilfolge enthalten. Wegen $\|v_n - v_m\|_{L^2(\Omega)} = \sqrt{2}$ für $n \neq m$ ist dies aber unmöglich. Für beliebiges $u \in L^2(\Omega)$ ist

$$u_m = u - \sum_{n=1}^m (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n \in E_m,$$

infolgedessen ist $\|\mathcal{K}u_m\|_{L^2(\Omega)} \leq \|\mathcal{K}_m\| \|u_m\|_{L^2(\Omega)} = \lambda_{m+1} \|u_m\|_{L^2(\Omega)}$ und

$$\|u_m\|_{L^2(\Omega)}^2 = \|u\|_{L^2(\Omega)}^2 - \sum_{n=1}^m (u, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|u\|_{L^2(\Omega)}^2.$$

Daraus folgt $\mathcal{K}u_m \rightarrow 0$, also

$$\mathcal{K}u = \sum_{n=1}^{\infty} (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n.$$

In der Folge $\{\lambda_n\}$ tritt jeder Eigenwert $\neq 0$ von \mathcal{K} so oft auf, wie es seiner Vielfachheit entspricht. Andernfalls gäbe es eine Eigenlösung u mit $\mathcal{K}u \neq 0$ und $u \perp v_n$ für alle $n \in \mathbb{N}$, für die dann absurderweise

$$\mathcal{K}u = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n = 0$$

sein müsste. □

6.2 Hilbert-Schmidt-Operatoren

Definition 6.5 Ein Operator \mathcal{K} heißt **Integraloperator** mit der **Kernfunktion** $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})$, wenn er von der Form

$$(\mathcal{K}u)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}, \quad \mathbf{x} \in \Omega,$$

ist. Ein Kern $\kappa \in L^2(\Omega \times \Omega)$ heißt **Hilbert-Schmidt-Kern**, der zugehörige Integraloperator wird **Hilbert-Schmidt-Operator** genannt.

Wegen

$$\begin{aligned} (\mathcal{K}u, v)_{L^2(\Omega)} &= \int_{\Omega} \left(\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \right) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \\ &= \int_{\Omega} \left(\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) v(\mathbf{x}) \, d\mathbf{x} \right) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &= (u, \mathcal{K}^*v)_{L^2(\Omega)}, \end{aligned}$$

ist ein Integraloperator \mathcal{K} offensichtlich genau dann symmetrisch, wenn sein Kern symmetrisch ist:

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{x}) \quad \text{für alle } \mathbf{x}, \mathbf{y} \in \Omega.$$

Wir benötigen zunächst nachfolgendes Lemma:

Lemma 6.6 Konvergiert die Folge $\{\mathcal{K}_n\}$ von kompakten Operatoren $\mathcal{K}_n : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ gleichmäßig gegen \mathcal{K} , so ist $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ kompakt.

Beweis. Zum Beweis sei $\{u_i\}$ eine beschränkte Folge in $L^2(\Omega)$: $\|u_i\|_{L^2(\Omega)} \leq \gamma$. Dann gibt es eine Teilfolge $\{u_{1,i}\}$ von $\{u_i\}$, so dass $\{\mathcal{K}_1 u_{1,i}\}$ konvergiert, ferner eine Teilfolge $\{u_{2,i}\}$ von $\{u_{1,i}\}$, so dass $\{\mathcal{K}_2 u_{2,i}\}$ konvergiert und so weiter. Die Diagonalglieder $v_i := u_{i,i}$ bilden dann — ab einem gewissen Index — eine Teilfolge jeder der Folgen $\{u_{k,1}, u_{k,2}, \dots\}$, und deshalb konvergiert die Folge $\{\mathcal{K}_n v_i\}$ für jeden Operator \mathcal{K}_n . Es werde nun ein $\varepsilon > 0$ beliebig gewählt und dazu ein n_0 so bestimmt, dass $\|\mathcal{K}_{n_0} - \mathcal{K}\| < \varepsilon$ ist. Legt man ein i_0 so fest, dass für $i, k \geq i_0$ stets $\|\mathcal{K}_{n_0} v_i - \mathcal{K}_{n_0} v_k\|_{L^2(\Omega)} < \varepsilon$ bleibt, so ist für diese i, k

$$\begin{aligned} \|\mathcal{K}v_i - \mathcal{K}v_k\|_{L^2(\Omega)} &\leq \|\mathcal{K}v_i - \mathcal{K}_{n_0}v_i\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathcal{K}_{n_0}v_i - \mathcal{K}_{n_0}v_k\|_{L^2(\Omega)} + \|\mathcal{K}_{n_0}v_k - \mathcal{K}v_k\|_{L^2(\Omega)} \\ &< \varepsilon\|v_i\|_{L^2(\Omega)} + \varepsilon + \varepsilon\|v_k\|_{L^2(\Omega)} \leq (2\gamma + 1)\varepsilon. \end{aligned}$$

Die Folge $\{\mathcal{K}v_i\}$ ist also eine Cauchy-Folge in $L^2(\Omega)$ und somit eine konvergente Teilfolge von $\{\mathcal{K}u_i\}$. \square

Mit Hilfe dieses Lemmas können wir nun ein fundamentales Resultat beweisen:

Satz 6.7 Jeder Hilbert-Schmidt-Operator ist kompakt.

Beweis. Zunächst ist ein Hilbert-Schmidt-Operator stetig, denn es gilt

$$\begin{aligned} \|\mathcal{K}v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \int_{\Omega} \left(\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})v(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \right)^2 \, d\mathbf{x} \\ &\leq \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \int_{\Omega} \int_{\Omega} \kappa^2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \, d\mathbf{x} \\ &\leq \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \|\kappa\|_{L^2(\Omega \times \Omega)}^2. \end{aligned}$$

Nun sei $\{u_n\}$ eine Orthonormalbasis in $L^2(\Omega)$. Da der Kern $\kappa \in L^2(\Omega \times \Omega)$ erfüllt, folgt die Identität

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_{i,j} u_i(\mathbf{x}) u_j(\mathbf{y}) \quad \text{mit} \quad \alpha_{i,j} = \int_{\Omega} \int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) u_i(\mathbf{x}) u_j(\mathbf{y}) \, d\mathbf{x} \, d\mathbf{y}.$$

Dabei ist die Folge der Koeffizienten $\{\alpha_{i,j}\}$ aus $\ell^2(\mathbb{N} \times \mathbb{N})$, dies bedeutet,

$$\sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_{i,j}^2 < \infty.$$

Wegen

$$(\mathcal{K}u_k)(\mathbf{x}) = \int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) u_k(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = \sum_{i,j=1}^{\infty} \alpha_{i,j} u_i(\mathbf{x}) \underbrace{\int_{\Omega} u_j(\mathbf{y}) u_k(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}}_{=\delta_{j,k}} = \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_{i,k} u_i(\mathbf{x})$$

folgt daher

$$\sum_{k=1}^{\infty} \|\mathcal{K}u_k\|_{L^2(\Omega)}^2 = \sum_{j,k=1}^{\infty} \alpha_{j,k}^2 < \infty,$$

dies bedeutet,

$$\sum_{k=n}^{\infty} \|\mathcal{K}u_k\|_{L^2(\Omega)}^2 \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0. \quad (6.2)$$

Es sei nun $\mathcal{K}_n : L^2(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$ definiert durch

$$\mathcal{K}_n v = \sum_{k=1}^n (v, u_k)_{L^2(\Omega)} \mathcal{K}u_k = \sum_{k=1}^n \sum_{j=1}^{\infty} (v, u_k)_{L^2(\Omega)} \alpha_{j,k} u_j(\mathbf{x}).$$

Wegen $v = \sum_{i=1}^{\infty} (v, u_i)_{L^2(\Omega)} u_i$ ist dann

$$\begin{aligned} \|\mathcal{K}v - \mathcal{K}_n v\|_{L^2(\Omega)}^2 &= \left\| \sum_{k=1}^{\infty} (v, u_k)_{L^2(\Omega)} \mathcal{K}u_k - \sum_{k=1}^n (v, u_k)_{L^2(\Omega)} \mathcal{K}u_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &= \left\| \sum_{k=n+1}^{\infty} (v, u_k)_{L^2(\Omega)} \mathcal{K}u_k \right\|_{L^2(\Omega)}^2 \\ &\leq \left(\sum_{k=n+1}^{\infty} |(v, u_k)_{L^2(\Omega)}| \|\mathcal{K}u_k\|_{L^2(\Omega)} \right)^2 \\ &\leq \left(\sum_{k=n+1}^{\infty} (v, u_k)_{L^2(\Omega)}^2 \right) \left(\sum_{k=n+1}^{\infty} \|\mathcal{K}u_k\|_{L^2(\Omega)}^2 \right) \\ &\leq \|v\|_{L^2(\Omega)}^2 \left(\sum_{k=n+1}^{\infty} \|\mathcal{K}u_k\|_{L^2(\Omega)}^2 \right). \end{aligned}$$

Zusammen mit (6.2) gilt also

$$\|\mathcal{K} - \mathcal{K}_n\| \leq \sqrt{\sum_{k=n+1}^{\infty} \|\mathcal{K}u_k\|_{L^2(\Omega)}^2} \xrightarrow{n \rightarrow \infty} 0.$$

Aus Lemma 6.6 folgt schließlich die Behauptung. \square

6.3 Spektralabschätzungen

Da jeder Hilbert-Schmidt-Operator \mathcal{K} kompakt ist, können wir Satz 6.4 anwenden, sofern der Operator auch symmetrisch und positiv semidefinit ist. Daher schließen wir, dass sich in diesem Fall der Kern $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ von \mathcal{K} schreiben lässt gemäß

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n v_n(\mathbf{x}) v_n(\mathbf{y}),$$

wobei $\{(\lambda_n, v_n)\}_{n=1}^{\infty}$ die Eigenpaare des Operators sind. Insbesondere folgt, dass die abgeschnittene Entwicklung

$$\kappa_N^*(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=1}^N \lambda_n v_n(\mathbf{x}) v_n(\mathbf{y})$$

die bestmögliche Rang- N -Approximation in $L^2(\Omega \times \Omega)$ an die Kernfunktion ist. Mit anderen Worten, unter allen Approximationen der Form $\kappa_N(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \sum_{n=1}^N \alpha_n u_n(\mathbf{x}) w_n(\mathbf{y}) \in L^2(\Omega \times \Omega)$ minimiert κ_N^* den Fehler $\|\kappa - \kappa_N\|_{L^2(\Omega \times \Omega)}$, wobei für diesen gilt

$$\|\kappa - \kappa_N^*\|_{L^2(\Omega \times \Omega)}^2 = \sum_{n=N+1}^{\infty} \lambda_n^2.$$

Wir wollen nun annehmen, dass der Kern nicht nur $\kappa \in L^2(\Omega \times \Omega)$, sondern sogar $\kappa \in H^k(\Omega \times \Omega)$ für ein $k \in \mathbb{N}$ erfüllt.

Satz 6.8 Gilt $\kappa \in H^k(\Omega \times \Omega)$ für ein $k \in \mathbb{N}$, so folgt für den Abschneidefehler der Rang- N -Approximation

$$\sqrt{\sum_{n=N+1}^{\infty} \lambda_n^2} \leq cN^{-\frac{k}{d}} \|\kappa\|_{H^k(\Omega \times \Omega)}.$$

Beweis. Wir unterteilen das Gebiet Ω in N quasi-uniforme Finite Elemente und betrachten Ansatzräume V_h bestehend aus stückweise Polynomen vom Grad $k - 1$. Da für die zugrundeliegende Schrittweite $h \sim N^{-1/d}$ gilt, folgt für die Bestapproximation $\Pi_h f \in V_h$ einer Funktion $f \in H^k(\Omega)$ die Fehlerabschätzung

$$\|(I - \Pi_h)f\|_{L^2(\Omega)} \leq cN^{-\frac{k}{d}} \|f\|_{H^k(\Omega)}.$$

Dementsprechend gilt für die Kernfunktion $\kappa \in H^k(\Omega \times \Omega)$ die Fehlerabschätzung

$$\|((I - \Pi_h) \otimes I)\kappa\|_{L^2(\Omega \times \Omega)} \leq cN^{-\frac{k}{d}} \|\kappa\|_{H^k(\Omega \times \Omega)}.$$

Ist $\{\varphi_i\}_{i=1}^N$ eine Orthonormalbasis in V_h , so folgt

$$(\Pi_h \otimes I)\kappa = \sum_{i=1}^N \varphi_i \otimes \underbrace{\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{z}, \cdot) \varphi_i(\mathbf{z}) \, d\mathbf{z}}_{=: \psi_i \in L^2(\Omega)} = \sum_{i=1}^N \varphi_i \otimes \psi_i.$$

Wir haben also eine Rang- N -Approximation gebastelt, die gewünschte Fehlerrate $\mathcal{O}(N^{-\frac{k}{d}})$ besitzt. Die bestmögliche Rang- N -Approximation ist allerdings die abgeschnittene Spektralzerlegung, was auf die zu beweisende Aussage schließen lässt. \square

Satz 6.9 Gilt $\kappa \in H^k(\Omega \times \Omega)$ für ein $k \in \mathbb{N}$, so ergibt sich für die Eigenwerte des zugrundeliegenden Hilbert-Schmidt-Operators das Abklingen

$$\lambda_n \leq cn^{-\frac{k}{d} - \frac{1}{2}} \quad \text{für alle } n \in \mathbb{N}.$$

Beweis. Weil $\lambda_{2^{\ell+1}} \leq \lambda_n$ gilt für alle $n \leq 2^{\ell+1}$, finden wir in Anbetracht von Satz 6.8 dass

$$2^\ell \lambda_{2^{\ell+1}}^2 \leq \sum_{m=2^{\ell+1}}^{2^{\ell+1}} \lambda_m^2 \leq \sum_{m=2^{\ell+1}}^{\infty} \lambda_m^2 \leq c 2^{-\frac{\ell k}{d}}.$$

Setzen wir $\beta := \frac{k}{d} + \frac{1}{2} > 0$, so führt dies auf

$$\lambda_{2^{\ell+1}} \leq c 2^{-\ell\beta}.$$

Für alle $n \in \mathbb{N}$ mit $2^\ell < n \leq 2^{\ell+1}$ schließen wir daher

$$\lambda_n \leq \lambda_{2^\ell} \leq c 2^{-(\ell-1)\beta} = c 2^{2\beta} \left(\underbrace{2^{\ell+1}}_{\geq n} \right)^{-\beta} \leq c n^{-\beta}.$$

□

6.4 Spektrale Basen im RKHS

Wir setzen im folgenden voraus, dass das Gebiet Ω beschränkt ist. Außerdem sei der Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ symmetrisch positiv definit und stetig auf $\overline{\Omega} \times \overline{\Omega}$. Dann definiert der Kern einen Hilbert-Schmidt-Operator

$$\mathcal{K}u = \int_{\Omega} \kappa(\cdot, \mathbf{y}) u(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y}, \quad (6.3)$$

der offensichtlich symmetrisch und positiv definit ist. Wir wollen nun einen Zusammenhang zwischen den Eigenpaaren dieses Hilbert-Schmidt-Operators und dem zum Kern gehörigen RKHS $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ herstellen. Zunächst haben wir folgendes Resultat:

Lemma 6.10 Der Native Space $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ ist stetig in $L^2(\Omega)$ eingebettet. Dies bedeutet, es gibt eine Konstante $c > 0$ derart, dass

$$\|u\|_{L^2(\Omega)} \leq c \|u\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega).$$

Beweis. Es gilt

$$|u(\mathbf{x})|^2 = |(u, \kappa(\cdot, \mathbf{x}))_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}|^2 \leq \|u\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 \|\kappa(\cdot, \mathbf{x})\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 \leq \|u\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}).$$

Integration über Ω liefert in Anbetracht der Stetigkeit von κ und der Beschränktheit von Ω das Behauptete mit

$$c := \sqrt{\int_{\Omega} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}) \, d\mathbf{x}}.$$

□

Proposition 6.11 Der Hilbert-Schmidt-Operator \mathcal{K} bildet $L^2(\Omega)$ stetig auf $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ ab und es gilt

$$(u, v)_{L^2(\Omega)} = (u, \mathcal{K}v)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \quad \text{für alle } u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega) \text{ und } v \in L^2(\Omega). \quad (6.4)$$

Das Bild von \mathcal{K} ist dicht in $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$.

Beweis. Wir zeigen zunächst (6.4). Dazu betrachten wir ein beliebig gewähltes $u = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i) \in H_\kappa(\Omega) = \text{span}\{\kappa(\cdot, \mathbf{x}) : \mathbf{x} \in \Omega\}$. Wir finden aufgrund der reproduzierenden Eigenschaft des Kerns

$$\begin{aligned} (u, v)_{L^2(\Omega)} &= \sum_{i=1}^N \alpha_i \int_{\Omega} \kappa(\mathbf{y}, \mathbf{x}_i) v(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} \\ &= \sum_{i=1}^N \alpha_i (\mathcal{K}v)(\mathbf{x}_i) \\ &= \sum_{i=1}^N \alpha_i (\mathcal{K}v, \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i))_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \\ &= (u, \mathcal{K}v)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \end{aligned}$$

für alle $v \in L^2(\Omega)$. Da $H_\kappa(\Omega)$ dicht ist in $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ und $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ stetig in $L^2(\Omega)$ eingebettet ist, folgt (6.4).

Mit Hilfe (6.4) gilt nun

$$\begin{aligned} \|\mathcal{K}v\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} &= \sup_{u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \frac{(u, \mathcal{K}v)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}}{\|u\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}} \\ &= \sup_{u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \frac{(u, v)_{L^2(\Omega)}}{\|u\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}} \\ &\leq \|v\|_{L^2(\Omega)} \sup_{u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \frac{\|u\|_{L^2(\Omega)}}{\|u\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}}. \end{aligned}$$

Aus Lemma 6.10 ergibt sich die gewünschte Stetigkeit des Hilbert-Schmidt-Operators:

$$\|\mathcal{K}v\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \leq c \|v\|_{L^2(\Omega)}.$$

Schließlich entspricht der Abschluss des Bilds des Operators $\mathcal{K} : L^2(\Omega) \rightarrow \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ dem orthogonalen Komplement des Kerns des adjungierten Operators $\mathcal{K}' : \mathcal{H}_\kappa(\Omega) \rightarrow L^2(\Omega)$. Für den adjungierten Operator gilt nun aber mit Hilfe von (6.4) für alle $u \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ und $v \in L^2(\Omega)$ die Gleichung

$$(\mathcal{K}'u, v)_{L^2(\Omega)} = (u, \mathcal{K}v)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} = (u, v)_{L^2(\Omega)}.$$

Damit folgt aber $\text{kern}(\mathcal{K}') = \{0\}$ und es ist

$$(\text{kern}(\mathcal{K}'))^\perp = \mathcal{H}_\kappa(\Omega) = \overline{\mathcal{K}(L^2(\Omega))}.$$

Dies beweist die letzte Aussage. □

Satz 6.12 Sei Ω beschränkt und $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein auf $\overline{\Omega \times \Omega}$ stetiger, symmetrisch positiv definiten Kern. Bezeichnen $\{(\lambda_n, v_n)\}$ die Eigenpaare des Hilbert-Schmidt-Operators \mathcal{K} aus (6.3), so gilt für den Native Space

$$\mathcal{H}_\kappa(\Omega) = \left\{ u \in L^2(\Omega) : \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} (u, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 < \infty \right\} \quad (6.5)$$

und das Innenprodukt besitzt die Darstellung

$$(f, g)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} (f, v_n)_{L^2(\Omega)} (g, v_n)_{L^2(\Omega)} \quad \text{für alle } f, g \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega). \quad (6.6)$$

Beweis. Es bezeichne \mathcal{G} die rechte Seite von (6.5) und entsprechend $(\cdot, \cdot)_{\mathcal{G}}$ die rechte Seite von (6.6). Wir zeigen zunächst $\mathcal{G} \subset \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ und $\|f\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \leq \|f\|_{\mathcal{G}}$ für alle $f \in \mathcal{G}$. Ist ein $f \in \mathcal{G}$ gegeben, so ist f auf $\overline{\Omega}$ stetig wegen

$$\begin{aligned} |f(\mathbf{x})| &\leq \sum_{n=1}^{\infty} |(f, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n(\mathbf{x})| \\ &\leq \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} (f, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n |v_n(\mathbf{x})|^2 \right)^{1/2} \\ &= \|f\|_{\mathcal{G}} \sqrt{\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x})}. \end{aligned}$$

Ferner gilt für jedes $g = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i) \in H_\kappa(\Omega)$

$$\begin{aligned} (f, g)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} &= \sum_{n=1}^{\infty} (f, v_n)_{L^2(\Omega)} (v_n, g)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \\ &\leq \left(\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} (f, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \left(\sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (v_n, g)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 \right)^{1/2} \\ &= \|f\|_{\mathcal{G}} \left(\sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (v_n, \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i))_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} (v_n, \kappa(\cdot, \mathbf{x}_j))_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \right)^{1/2} \\ &= \|f\|_{\mathcal{G}} \left(\sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n v_n(\mathbf{x}_i) v_n(\mathbf{x}_j) \right)^{1/2} \\ &= \|f\|_{\mathcal{G}} \left(\sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) \right)^{1/2} \\ &= \|f\|_{\mathcal{G}} \|g\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}. \end{aligned}$$

Da $H_\kappa(\Omega)$ dicht in $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ ist, folgt hieraus $\|f\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \leq \|f\|_{\mathcal{G}}$ und damit das Behauptete. Es verbleibt, $\mathcal{H}_\kappa(\Omega) \subset \mathcal{G}$ und $\|f\|_{\mathcal{G}} \leq \|f\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}$ für alle $f \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ zu zeigen. Dazu betrachten wir die dichte Teilmenge $\mathcal{K}(L^2(\Omega)) \subset \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$. Für jedes $f = \mathcal{K}u$, $u \in L^2(\Omega)$, gilt $u = \sum_{n=1}^{\infty} (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n$ und damit $f = \sum_{n=1}^{\infty} \lambda_n (u, v_n)_{L^2(\Omega)} v_n$, weshalb $(f, v_n)_{L^2(\Omega)} =$

$\lambda_n(u, v_n)_{L^2(\Omega)}$ ist. Mit (6.4) erhalten wir

$$\begin{aligned} \|f\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 &= (f, \mathcal{K}u)_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} = (f, u)_{L^2(\Omega)} = \sum_{n=1}^{\infty} (u, v_n)_{L^2(\Omega)} (f, v_n)_{L^2(\Omega)} \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\lambda_n} (f, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 = \|f\|_{\mathcal{G}}^2. \end{aligned}$$

Dies bedeutet, dass $\|\cdot\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}$ und $\|\cdot\|_{\mathcal{G}}$ übereinstimmen auf $\mathcal{K}(L^2(\Omega))$. Ist nun $f \in \mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ beliebig, so existiert eine Folge $\{f_m\} \subset \mathcal{K}(L^2(\Omega))$ mit $\|f - f_m\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)} \rightarrow 0$ für $m \rightarrow \infty$. Für beliebiges N gilt die Schranke

$$\sum_{n=1}^N \frac{1}{\lambda_n} (f_m, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|f_m\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 \quad \text{für alle } m \in \mathbb{N}.$$

Weil f_m nach f konvergiert, ist diese Summe gleichmässig beschränkt in N und m . Außerdem ist der Native Space $\mathcal{H}_\kappa(\Omega)$ stetig in $L^2(\Omega)$ eingebettet, so dass der Grenzübergang $m \rightarrow \infty$ auf

$$\sum_{n=1}^N \frac{1}{\lambda_n} (f, v_n)_{L^2(\Omega)}^2 \leq \|f\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}^2 \quad \text{für alle } N \in \mathbb{N}$$

führt. Lassen wir nun auch $N \rightarrow \infty$ gehen, so folgt $f \in \mathcal{G}$ und $\|f\|_{\mathcal{G}} \leq \|f\|_{\mathcal{H}_\kappa(\Omega)}$. \square

7. \mathcal{H} -Matrixapproximation

7.1 Niedrigrangapproximation

Die Idee schneller Methoden für nichtlokale Operatoren beruht auf folgender Beobachtung. Ist der Abstand der Punkte $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^d$ hinreichend groß, dann können wir den Kern $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ durch Polynome im Raum approximieren:

$$\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \approx \kappa_p(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \sum_{|\alpha|, |\beta| \leq p} \kappa_{\alpha, \beta} \mathbf{x}^\alpha \mathbf{y}^\beta$$

mit

$$|\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) - \kappa_p(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq \varepsilon \quad \text{für alle } \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2 \geq C.$$

Sind nun die Indexmengen $\nu, \nu' \subset X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\}$ so gewählt, dass gilt

$$\|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_j\|_2 \geq C \quad \text{für alle } i \in \nu \text{ und } j \in \nu',$$

dann lässt sich der Teilblock $\mathbf{A}_{\nu, \nu'} = [\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]_{i \in \nu, j \in \nu'}$ der Kernmatrix berechnen gemäß

$$\mathbf{A}_{\nu, \nu'} \approx \left[\sum_{|\alpha|, |\beta| \leq p} \kappa_{\alpha, \beta} \mathbf{x}_i^\alpha \mathbf{x}_j^\beta \right]_{i \in \nu, j \in \nu'} = \sum_{|\alpha|, |\beta| \leq p} \kappa_{\alpha, \beta} [\mathbf{x}_i^\alpha]_{i \in \nu} [\mathbf{x}_j^\beta]_{j \in \nu'}^\top.$$

Mit der *Kopplungsmatrix*

$$\mathbf{K}_p := [\kappa_{\alpha, \beta}]_{|\alpha|, |\beta| \leq p}$$

und den *Momentenmatrizen*

$$\mathbf{M}_{\nu, p} := [\mathbf{x}_i^\alpha]_{i \in \nu, |\alpha| \leq p}, \quad \mathbf{M}_{\nu', p} := [\mathbf{x}_j^\beta]_{j \in \nu', |\beta| \leq p}$$

kann die Matrix $\mathbf{A}_{\nu, \nu'}$ approximativ geschrieben werden als

$$\mathbf{A}_{\nu, \nu'} \approx \mathbf{M}_{\nu, p} \mathbf{K}_p \mathbf{M}_{\nu', p}^\top. \quad (7.1)$$

Dabei ist der Fehler in der Frobenius-Norm beschränkt durch

$$\|\mathbf{A}_{\nu, \nu'} - \mathbf{M}_{\nu, p} \mathbf{K}_p \mathbf{M}_{\nu', p}^\top\|_F = \sqrt{\sum_{\substack{i \in \nu \\ j \in \nu'}} [\kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \kappa_p(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j)]^2} \leq \varepsilon \sqrt{|\nu| \cdot |\nu'|}.$$

Man spricht bei (7.1) auch von einer *Niedrigrangapproximation* der Matrix $\mathbf{A}_{\nu, \nu'}$, veranschaulicht durch die nachfolgende Skizze:

$$\boxed{\mathbf{A}_{\nu, \nu'}} \approx \boxed{\mathbf{M}_{\nu, p}} \boxed{\mathbf{K}_p} \boxed{\mathbf{M}_{\nu', p}^\top}$$

Die rechte Seite in (7.1) ist in $(|\nu| + |\nu'|) \cdot (p+1)^d + (p+1)^{2d}$ Operationen auswertbar, was im Fall $p \ll |\nu|, |\nu'|$ wesentlich billiger ist als die $|\nu| \cdot |\nu'|$ Operationen für das Aufstellen von $\mathbf{A}_{\nu, \nu'}$.

7.2 Clusterbaum

Um die Niedrigrangapproximation (7.1) systematisch ausnutzen zu können, benötigen wir eine geeignete Blockpartition der Kernmatrix. Diese wird mit Hilfe des Clusterbaums konstruiert werden. Dazu bezeichne $\mathcal{J}_N = \{1, \dots, N\}$ die Menge der Indizes der Punkte $\{\mathbf{x}_i\}_{i \in \mathcal{J}_N}$ aus X .

Definition 7.1 Ein **Clusterbaum** ist ein System \mathcal{C} nichtleerer Indexmengen $\nu = \{i_0, i_1, \dots, i_\ell\} \subset \mathcal{J}_N$, welches auch die Menge \mathcal{J}_N selbst enthält. Ein Element $\nu \in \mathcal{C}$ heißt **Cluster**. Es heißt **Vatercluster** von $\nu' \in \mathcal{C}$ (schreibe $\nu' \prec \nu$), falls $\nu' \subsetneq \nu$ gilt und es keinen weiteren Cluster $\nu'' \in \mathcal{C}$ gibt, so dass $\nu' \subsetneq \nu'' \subsetneq \nu$. Der Cluster ν' heißt dann **Sohn** von ν . Das **Level** eines Clusters ν ist die Zahl j , so dass Cluster $\{\nu_i\}_{i=1}^{j-1}$ mit $\nu \prec \nu_{j-1} \prec \nu_{j-2} \prec \dots \prec \nu_0 = \mathcal{J}_N$ existieren. Wir zählen die Cluster ab und bezeichnen den ℓ -ten Cluster aus Level j mit $\nu_{j, \ell}$.

Die Bezeichnung Clusterbaum wird klar, wenn man die Cluster bezüglich der Relation “ \prec ” anordnet. Für unsere Zwecke ist es notwendig, dass der Clusterbaum die folgenden Eigenschaften besitzt:

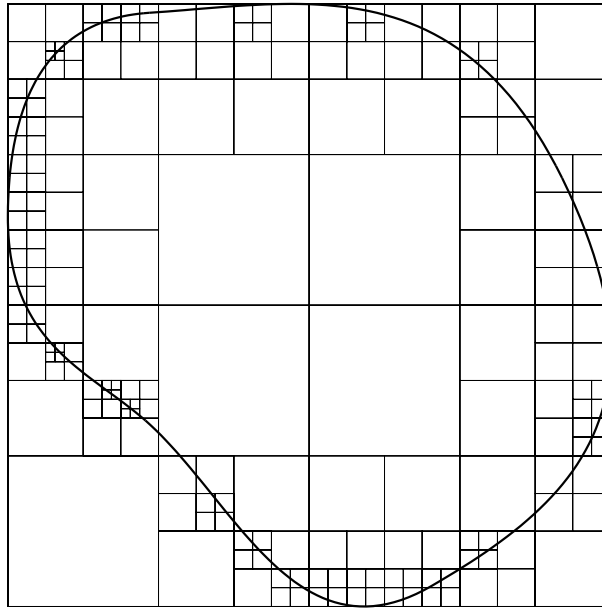
- Die Blätter sind die Freiheitsgrade $i \in \mathcal{J}_N$.
- Der Clusterbaum entspricht asymptotisch einem ausbalancierten 2^d -Baum, das heißt, die Anzahl der Söhne $\text{sons}(\nu)$ eines Nicht-Blatt-Clusters ν ist ungefähr 2^d .
- Jedes Cluster kann mittels $\Omega_\nu := \text{conv} \left\{ \bigcup_{i \in \nu} \mathbf{x}_i \right\}$ ein Teilgebiet des \mathbb{R}^d zugeordnet werden. Auf Level j verhält sich der Durchmesser $\text{diam}(\Omega_\nu)$ dieses Teilstücks ungefähr wie 2^{-j} .

Die letzten beiden Aussagen sind natürlich abhängig von dem zugrundeliegenden Gebiet Ω . Insbesondere setzen sie eine uniforme Verteilung der Punkte in der Menge $X \subset \Omega$ voraus.

Noch ist allerdings unklar, wie wir für eine gegebene Indexmenge \mathcal{J}_N einen entsprechenden Clusterbaum erzeugen können. Wir beginnen nun mit dem größten Cluster $\nu_0 := \mathcal{J}_N$ und bestimmen einen achsenparallelen Quader, der alle Punkte $\{\mathbf{x}_i\}_{i \in \mathcal{J}_N}$ enthält. Dieser Quader wird durch Halbieren in jeder Koordinatenrichtung in 2^d kongruente Unterquader zerlegt. Die zugehörigen Sohncluster enthalten dann jeweils die Indizes der in diesen

Quadern enthaltenen Punkte. Anschließend wird für jeden Untercluster, der mehr als L Punkte enthält, die gleiche Verfeinerung ausgeführt. Leere Sohncluster werden entfernt beziehungsweise gar nicht erst zum Clusterbaum hinzugefügt.

Unter der obigen Annahme, dass der Baum asymptotisch ausbalanciert ist, ist der asymptotische Aufwand des Algorithmus offensichtlich $\mathcal{O}(N \log(N))$. Dabei erzeugt der Algorithmus zum Beispiel folgende Clusterstruktur:



7.3 Partition der Kernmatrix

Mit Hilfe des Clusterbaums kann nun eine für die Niedrigrangapproximation (7.1) geeignete Blockpartition der Kernmatrix konstruiert werden.

Definition 7.2 Zu gegebenen Clustern $\nu, \nu' \in \mathcal{C}$ setzen wir

$$\Omega_\nu := \text{conv} \left(\bigcup_{i \in \nu} \mathbf{x}_i \right), \quad \Omega_{\nu'} := \text{conv} \left(\bigcup_{j \in \nu'} \mathbf{x}_j \right).$$

Dann heißen die Cluster ν und ν' **zulässig**, falls gilt

$$\text{dist}(\Omega_\nu, \Omega_{\nu'}) \geq \eta \max\{\text{diam } \Omega_\nu, \text{diam } \Omega_{\nu'}\}, \quad (7.2)$$

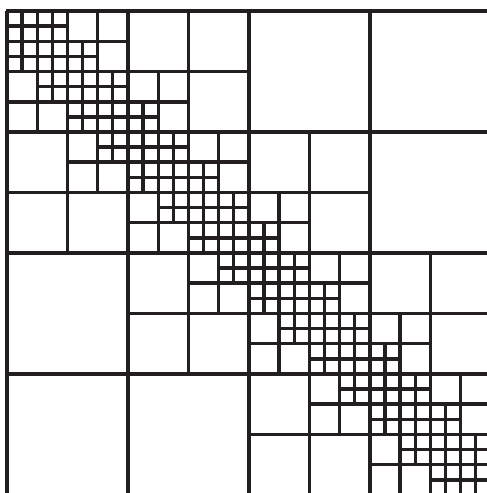
wobei $\eta > 0$ eine vorgegebene Konstante sei.

Jeder Block $\mathbf{A}_{\nu, \nu'}$ der Kernmatrix soll einem zulässigen Tupel (ν, ν') von Clustern aus dem Tensorprodukt $\mathcal{C} \times \mathcal{C}$ des Clusterbaums entsprechen. Um Eindeutigkeit zu erzielen, bestimmt man ausgehend von $\mathcal{J}_N \times \mathcal{J}_N$ alle zulässigen Tupel $(\nu_{j,k}, \nu_{j,\ell})$ nach folgender Rekursionsvorschrift: sind die Cluster $(\nu_{j,k}, \nu_{j,\ell})$ zulässig, dann bilde den Block $\mathbf{A}_{\nu_{j,k}, \nu_{j,\ell}}$, ansonsten überprüfe alle Söhne $(\nu_{j+1,k'}, \nu_{j+1,\ell'}) \in \text{sons}(\nu_{j,k}) \times \text{sons}(\nu_{j,\ell})$ auf Zulässigkeit. Die Rekursion bricht ab, wenn mindestens eines der beiden Cluster ein Blatt des Clus-

terbaums ist. Dann ist man im *Nahfeld* und muss die Einträge einzeln bilden wie bei der klassischen Kernmatrix.

Bemerkung Die so konstruierten Blöcke sind weitestgehend quadratisch, da die Cluster der Ansatz- und Testpunkte immer vom gleichen Level sind. Außerdem ist die Partition der Kernmatrix symmetrisch. \triangle

Beispiel 7.3 Im Fall von $\Omega = [0, 1]$ und äquidistanten Punkten $X = \left\{ \frac{i+1/2}{N+1} : i = 1, \dots, N \right\}$ erhalten wir beispielsweise die folgende Partition der Kernmatrix:



\triangle

Wir wollen die Zahl der Matrixblöcke abschätzen. Jeder Matrixblock entspricht einer zulässigen Cluster-Cluster-Interaktion. Für ein fixiertes Level j besitzt das Cluster $\nu_{j,k} \in \mathcal{C}$ nur $\mathcal{O}(1)$ Nachbarn $\nu_{j,\ell} \in \mathcal{C}$, welche die Zuässigkeitsbedingung (7.2) verletzen. Da insgesamt $\mathcal{O}(2^{jd})$ Cluster auf Level j vorhanden sind, werden nur $\mathcal{O}(2^{jd})$ Cluster-Cluster-Interaktionen nicht gebildet. Für diese werden nun die Interaktionen der jeweiligen Sohncluster untersucht. Da die Zahl der Söhne beschränkt ist, stellen wir fest, dass wir auf Level j $\mathcal{O}(2^{jd})$ Cluster-Cluster-Interaktionen zu untersuchen haben, von denen $\mathcal{O}(2^{jd})$ nicht zulässig sind. Also gibt es auf Level j jeweils $\mathcal{O}(2^{jd})$ Cluster-Cluster-Interaktionen, die zulässig sind und daher einem Matrixblock entsprechen. Aufsummieren über j liefert nun insgesamt $\mathcal{O}(N)$ Matrixblöcke.

Mit J bezeichnen wir das größte Level im Clusterbaum. Da der Baum ausbalanciert ist, folgt für zulässige Cluster $\nu_{j,k}$ und $\nu_{j,\ell}$ vom Level j die blockweise Fehlerabschätzung

$$\|\mathbf{A}_{\nu_{j,k}, \nu_{j,\ell}} - \tilde{\mathbf{A}}_{\nu_{j,k}, \nu_{j,\ell}}\|_F \leq c\varepsilon 2^{(J-j)d}.$$

Hieraus ergibt sich für den Gesamtfehler der Matrixapproximation

$$\begin{aligned} \|\mathbf{A} - \tilde{\mathbf{A}}\|_F &\leq \sqrt{\sum_{j=0}^J \underbrace{c2^{jd}}_{\text{Anzahl der Blöcke auf Level } j} \underbrace{(c\varepsilon 2^{(J-j)d})^2}_{\text{Fehler pro Block}}} \leq c\varepsilon \underbrace{2^{Jd}}_{\leq cN} \underbrace{\sqrt{\sum_{j=0}^J 2^{-jd}}}_{\leq c} \\ &\leq c\varepsilon N. \end{aligned}$$

Wenn man beachtet, dass sich $\|\mathbf{A}\|_F$ selbst wie N verhält, so sieht man, dass die relative Genauigkeit der Matrixapproximation durch das ε gesteuert ist.

7.4 Kernentwicklung

Wir wollen nun diskutieren, wie eine Niedrigrangapproximation (7.1) erzeugt werden kann. Es gibt die folgenden Möglichkeiten:

- *Tschebyscheff-Interpolation.* Man interpoliert den Kern in den Clustern zugeordneten räumlichen Quadern. Dies hat den Vorteil, dass man ein Black-Box-Verfahren erhält, da man keine explizit auf den Kern zugeschnittene Reihenentwicklung benötigt.
- *Taylor-Entwicklung.* Man verdrahtet die Taylor-Reihe zum gegebenen Kern hart. Diese ist jedoch abhängig vom Kern und bietet gegenüber der Interpolation keinen Vorteil.
- *Multipol-Entwicklung.* Diese Reihenentwicklung nutzt die Kugelflächenfunktionen anstatt räumlicher Polynome als Entwicklungsfunktionen. Dadurch wird inhärent eine Raumdimension eingespart, was die Entwicklung sehr effizient macht. Die Entwicklung muss jedoch für jeden neuen Kern aufgestellt und neu implementiert werden.

Je nach verwendeter Reihendarstellung erhält man einen leicht anderen Abbruchfehler. Unter der Annahme, dass sich die Ableitungen des Kerns abschätzen lassen gemäß

$$|\partial_{\mathbf{x}}^{\alpha} \partial_{\mathbf{y}}^{\beta} \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})| \leq c \frac{(|\alpha| + |\beta|)!}{(r \|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|)^{|\alpha| + |\beta|}}, \quad r > 0,$$

erhält man aber typischerweise eine Fehlerabschätzung der Form

$$\varepsilon \leq c \frac{(\text{diam } \Omega_{\nu})^p (\text{diam } \Omega_{\nu'})^p}{(r \text{ dist}(\Omega_{\nu}, \Omega_{\nu'}))^{2p}} \leq c \left(\frac{1}{r\eta} \right)^{2p}.$$

Folglich muss $\eta > 1/r$ und $p \sim |\log(\varepsilon)|$ gewählt werden.

7.5 Aufwand

Wie wir in Abschnitt 7.1 gesehen haben, ist die Komplexität zum Aufstellen der Niedrigrangapproximation (7.1) im Block $\mathbf{A}_{\nu_j, k, \nu_j, \ell}$ beschränkt durch

$$(|\nu_{j,k}| + |\nu_{j,\ell}|) \cdot (p+1)^d + (p+1)^{2d} \leq c(p+1)^d 2^{(J-j)d}.$$

Ein Vektor kann mit derselben Komplexität mit dem Block multipliziert werden. Daher ist der Aufwand zum Aufstellen der gesamten Matrixapproximation beziehungsweise für ein Matrix-Vektor-Produkt

$$\sum_{j=0}^J \underbrace{c 2^{jd}}_{\text{Anzahl der Blöcke auf Level } j} \underbrace{c(p+1)^d 2^{(J-j)d}}_{\text{Aufwand pro Block}} \leq c(p+1)^d \underbrace{2^{Jd}}_{\leq cN} \underbrace{\sum_{j=0}^J 1}_{\leq c \log(N)} \leq c(p+1)^d N \log(N).$$

In Anbetracht von $p \sim |\log \varepsilon| \sim \log(N)$ erhalten wir damit insgesamt den Aufwand $\mathcal{O}(N \log^{d+1} N)$.

Bemerkung Die Momentenmatrizen in der Niedrigrangapproximation (7.1) müssen nur für die Blätter des Clusterbaums ausgerechnet werden. Für alle andern Cluster können sie daraus dann rekursiv bestimmt werden. \triangle

8. Support Vector Machines

8.1 Lineare Support Vector Machines

Klassifizierungsverfahren teilen Objekte nach ihren Merkmalen mit Hilfe eines *Klassifikators* in vordefinierte Kategorien ein. Ein Klassifikator ist eine Funktion, die einen Input auf eine Klasse abbildet. Das Ziel besteht darin, passende Regeln zu finden, wonach sich die Daten in die jeweiligen Klassen zuordnen lassen. Ein gebräuchlicher Klassifikator ist die *Support Vector Machine*, üblicherweise mit *SVM* abgekürzt.

Gegeben seien N Punkte $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \mathbb{R}^d$ mit zugehörigen Labels $(y_1, \dots, y_N) \in \{-1, 1\}^N$. Wir ordnen diese Punkte den zwei verschiedenen Klassen

$$\begin{aligned}\Omega_+ &:= \{\mathbf{x}_i \in X : y_i = +1\}, \\ \Omega_- &:= \{\mathbf{x}_i \in X : y_i = -1\}\end{aligned}$$

zu und suchen eine Funktion $f : \mathbb{R}^d \rightarrow \mathbb{R}$, welche der Beziehung $f(\mathbf{x}) > 0$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega_+$ und $f(\mathbf{x}) < 0$ für alle $\mathbf{x} \in \Omega_-$ genügt.

Definition 8.1 Die Mengen Ω_+ und Ω_- heißen **linear separierbar**, falls eine Hyperebene $H = \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d : \mathbf{n}^\top \mathbf{x} = m\}$ existiert, so dass gilt $\mathbf{n}^\top \mathbf{x}_i > m$ falls $y_i = +1$ und $\mathbf{n}^\top \mathbf{x}_i \leq m$ falls $y_i = -1$.

Sind Ω_+ und Ω_- linear separierbar, so genügt die Bestimmung einer affinen Abbildung $f(\mathbf{x}) = \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b$ als *Separator* $\mathcal{S} := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d : f(\mathbf{x}) = 0\}$. Ziel des Support Vector Lernens ist es, eine Lösung für den Vektor $\mathbf{w} \in \mathbb{R}^d$ und die Schwelle b derart zu bestimmen, dass für die Daten \mathbf{x}_i die folgenden Separationsbedingungen gelten:

$$\begin{aligned}\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b &\geq +1, & \text{falls } y_i = +1, \\ \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b &\leq -1, & \text{falls } y_i = -1.\end{aligned}$$

Diese lassen sich in einer Ungleichung zusammenfassen:

$$y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1 \quad \text{für alle } i = 1, \dots, N.$$

Sind die zwei Klassen Ω_+ und Ω_- linear separierbar, so existieren allerdings mehrere Lösungen. Daher fordert man, dass der Separator \mathcal{S} möglichst weit von den Punkten der unterschiedlichen Klassen entfernt ist (*maximal margin*). In diesem Fall existiert offensichtlich mindestens ein Punkt $\mathbf{x}_k \in \Omega_+$ und ein Punkt $\mathbf{x}_\ell \in \Omega_-$ mit

$$\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_k + b = 1, \quad \mathbf{w}^\top \mathbf{x}_\ell + b = -1.$$

Wenn man die Schwelle b aus diesen Formeln entfernt, so erhält man

$$\mathbf{w}^\top(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\ell) = 2.$$

Damit lässt die gesuchte separierende Hyperebene \mathcal{S} wie folgt berechnen:

$$\frac{1}{\|\mathbf{w}\|_2} \mathbf{w}^\top(\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\ell) = \frac{2}{\|\mathbf{w}\|_2} \rightarrow \max.$$

Dies ist äquivalent zu

$$\frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|_2^2 = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d w_i^2 \rightarrow \min.$$

Dabei müssen aber noch die oben genannten Separationsbedingungen beachtet werden, was auf das quadratische Optimierungsproblem unter affinen Nebenbedingungen

$$\min_{(\mathbf{w}, b) \in \mathbb{R}^{d+1}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d w_i^2, \quad \text{so dass } y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, N, \quad (8.1)$$

führt. Eine Lösung (\mathbf{w}^*, b^*) des Optimierungsproblems (8.1) definiert dann den *hard margin SVM classifier* gemäß

$$c(\mathbf{x}) = \text{sign}(\mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b). \quad (8.2)$$

Satz 8.2 (Existenz und Eindeutigkeit) Gegeben seien die Punkte $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \mathbb{R}^d$ mit zugehörigen Labels $(y_1, \dots, y_N) \in \{-1, 1\}^N$, so dass Ω_+ und Ω_- nichtleer sind. Sind die Mengen Ω_+ und Ω_- linear separierbar, dann besitzt das Optimierungsproblem (8.1) eine eindeutige Lösung (\mathbf{w}^*, b^*) mit $\mathbf{w}^* \neq 0$.

Beweis. Die Funktion $g(\mathbf{w}, b) := \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d w_i^2 \geq 0$ ist stetig und konvex auf ganz \mathbb{R}^{d+1} . Ferner ist die Menge

$$U_{\text{ad}} := \{(\mathbf{w}, b) \in \mathbb{R}^{d+1} : y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) \geq 1, \quad i = 1, \dots, N\}$$

offensichtlich konvex und abgeschlossen. Daher ist nur zu zeigen, dass die Lösung g^* von (8.1) tatsächlich ein Minimum und kein Infimum ist.

Sei $\{(\mathbf{w}_i, b_i)\} \subset U_{\text{ad}}$ eine Minimalfolge mit $g(\mathbf{w}_i, b_i) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}_i\|_2^2 \searrow g^*$. Die durch (\mathbf{w}_i, b_i) definierten Hyperebenen $H_i := \{\mathbf{x} \in \mathbb{R}^d : \mathbf{w}_i^\top \mathbf{x} + b_i = 0\}$ separieren Ω_+ und Ω_- , da die Nebenbedingungen erfüllt sind. Ohne Beschränkung der Allgemeinheit können wir annehmen, dass (\mathbf{w}_i, b_i) so skaliert ist, dass $\min_{j=1}^N |\mathbf{w}_i^\top \mathbf{x}_j + b_i| = 1$ ist, womit für den Abstand der Hyperebene H_i zu den Punkten aus X gilt

$$0 \leq \gamma_i = \min_{j=1}^N \frac{|\mathbf{w}_i^\top \mathbf{x}_j + b_i|}{\|\mathbf{w}_i\|_2} = \frac{1}{\|\mathbf{w}_i\|_2}.$$

Der Abstand γ_i ist aber nach oben beschränkt durch

$$\gamma_i \leq \gamma := \frac{1}{2} \min_{(\mathbf{x}_k, \mathbf{x}_\ell) \in \Omega_+ \times \Omega_-} \|\mathbf{x}_k - \mathbf{x}_\ell\|_2.$$

Es folgt

$$0 < \frac{1}{\gamma} \leq \|\mathbf{w}_i\|_2,$$

das heißt, es gilt $\|\mathbf{w}^*\|_2 > 0$ falls das Minimum existiert.

Da $g(\mathbf{w}_i, b_i) \searrow g^*$ gilt, ist die Folge $\{\mathbf{w}_i\}$ beschränkt. Aus der Skalierung der Hyperebenen H_i folgt daher, dass auch die Folge $\{b_i\}$ beschränkt ist. Deshalb existiert nach dem Satz von Bolzano-Weierstraß eine konvergente Teilfolge $\{(\mathbf{w}_{i_j}, b_{i_j})\}$ mit $(\mathbf{w}^*, b^*) = \lim_{j \rightarrow \infty} (\mathbf{w}_{i_j}, b_{i_j}) \in U_{\text{ad}}$. Weil gilt

$$\|\mathbf{w}^*\|_2 = \left\| \lim_{j \rightarrow \infty} \mathbf{w}_{i_j} \right\|_2 = \lim_{j \rightarrow \infty} \|\mathbf{w}_{i_j}\|_2 = g^*,$$

ist (\mathbf{w}^*, b^*) ein Minimum.

Es verbleibt die Eindeutigkeit zu zeigen. Sind (\mathbf{w}_1^*, b_1^*) und (\mathbf{w}_2^*, b_2^*) beides Minima, so folgt $\|\mathbf{w}_1^*\|_2 = \|\mathbf{w}_2^*\|_2 = g^*$. Ist $\mathbf{w}_1^* \neq \mathbf{w}_2^*$, dann ist auch der Vektor $(\mathbf{w}_\lambda, b_\lambda) := \lambda(\mathbf{w}_1^*, b_1^*) + (1 - \lambda)(\mathbf{w}_2^*, b_2^*) \in U_{\text{ad}}$ für alle $\lambda \in (0, 1)$ und es gilt aufgrund der strikten Konvexität der Norm

$$\|\mathbf{w}_\lambda\|_2 < \lambda\|\mathbf{w}_1^*\|_2 + (1 - \lambda)\|\mathbf{w}_2^*\|_2 = g^*.$$

Da dies ausgeschlossen ist, muss $\mathbf{w}^* := \mathbf{w}_1^* = \mathbf{w}_2^*$ gelten.

Es sei nun $b_1^* < b_2^*$ angenommen. Aus den Nebenbedingungen

$$y_i((\mathbf{w}^*)^\top \mathbf{x}_i + b_1^*) \geq 1, \quad y_i((\mathbf{w}^*)^\top \mathbf{x}_i + b_2^*) \geq 1, \quad i = 1, \dots, N,$$

schließen wir wegen $b_1^* < b_2^*$, dass

$$\begin{aligned} y_i((\mathbf{w}^*)^\top \mathbf{x}_i + b_1^*) &> 1, & \text{ falls } y_i = -1, \\ y_i((\mathbf{w}^*)^\top \mathbf{x}_i + b_2^*) &> 1, & \text{ falls } y_i = +1. \end{aligned}$$

Das Tupel $(\mathbf{w}^*, (b_1^* + b_2^*)/2)$ erfüllt allerdings

$$y_i \left((\mathbf{w}^*)^\top \mathbf{x}_i + \frac{b_1^* + b_2^*}{2} \right) > 1, \quad i = 1, \dots, N.$$

Deshalb können wir \mathbf{w}^* um $\alpha \in (0, 1)$ verkleinern, so dass $(\alpha\mathbf{w}^*, (b_1^* + b_2^*)/2)$ immer noch die Nebenbedingung für jedes $i = 1, \dots, N$ erfüllt. Wegen $\|\alpha\mathbf{w}^*\|_2 = \alpha\|\mathbf{w}^*\|_2 < \|\mathbf{w}^*\|_2$ führt dies aber auf einen Widerspruch. \square

8.2 Duale Formulierung

Wie wir gesehen haben, ist es notwendig, ein konvexes, quadratisches Optimierungsproblem mit affinen Ungleichheitsnebenbedingungen zu lösen, um die SVM zu erhalten. Durch Einführung von N nichtnegativen Lagrange-Multiplikatoren λ_i , $i = 1, \dots, N$, und des Lagrange-Funktional

$$L_\lambda(\mathbf{w}, b) := \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|_2^2 - \sum_{i=1}^N \lambda_i (y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) - 1), \quad (8.3)$$

kann das oben hergeleitete Optimierungsproblem in folgendes Optimierungsproblem ohne Nebenbedingungen überführt werden

$$\min_{(\mathbf{w}, b) \in \mathbb{R}^{d+1}} \max_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N} L_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{w}, b),$$

das jetzt bezüglich \mathbf{w} und b minimiert und bezüglich den Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N$ maximiert werden muss. Dieses Problem wird auch *primales Problem* genannt.

Da $L_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{w}, b)$ bezüglich \mathbf{w} und b minimiert werden muss, muss für die entsprechenden Ableitungen gelten

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \mathbf{w}} L_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{w}, b) &= \mathbf{w} - \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i \mathbf{x}_i = \mathbf{0}, \\ \frac{\partial}{\partial b} L_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{w}, b) &= - \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0. \end{aligned} \tag{8.4}$$

Außerdem erhalten wir die Komplementaritätsbedingungen

$$\lambda_i \geq 0, \quad y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) - 1 \geq 0, \quad \lambda_i (y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) - 1) = 0, \quad i = 1, \dots, N. \tag{8.5}$$

Die Gleichungen (8.4) und (8.5) sind die Bedingungen von Karush-Kuhn-Tucker (KKT). Sie stellen sowohl notwendige als auch hinreichende Bedingungen für eine optimale Lösung $(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\lambda})$ dar. Mit anderen Worten, das Lösen des SVM-Lernproblems (8.1) ist äquivalent zur Bestimmung von Lösungen der KKT-Bedingungen (8.4) und (8.5). Dabei impliziert Gleichung (8.5), dass $y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) = 1$ gilt, falls $\lambda_i > 0$ ist. Dann liegt der Punkt \mathbf{x}_i auf dem Rand der gesuchten Hyperebene und die zugehörige Nebenbedingung ist aktiv. Falls $y_i(\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) > 1$ ist, dann ist die Nebenbedingung nicht aktiv und die Komplementaritätsbedingungen erzwingen $\lambda_i = 0$.

Setzen wir die beiden Gleichungen aus (8.4) in (8.3) ein, so werden die Variablen (\mathbf{w}, b) eliminiert:

$$L_{\boldsymbol{\lambda}}(\mathbf{w}, b) = \sum_{i=1}^N \lambda_i - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j =: -f(\boldsymbol{\lambda}).$$

Das Problem

$$\min_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N} f(\boldsymbol{\lambda}), \quad \text{so dass} \quad \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N, \tag{8.6}$$

heißt das zu (8.1) gehörige *duale Problem*. Da wir umgekehrt von (8.6) durch Beachtung von (8.4) wieder auf das primale Problem und damit auf (8.1) schließen können, folgt:

Satz 8.3 Sei $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^N$ eine Lösung des dualen Problems. Setze

$$\mathbf{w}^* := \sum_{i=1}^N \lambda_i^* y_i \mathbf{x}_i$$

und wähle b^* derart, dass gilt $y_i((\mathbf{w}^*)^\top \mathbf{x}_i + b^*) = 1$ für ein $i \in \{1, \dots, N\}$ mit $\lambda_i \neq 0$. Dann ist (\mathbf{w}^*, b^*) die eindeutige Lösung von (8.1).

Über die Lösbarkeit des dualen Problems (8.6) haben wir die folgende Aussage.

Satz 8.4 Es gelten die Voraussetzungen von Satz 8.2. Dann existiert eine Lösung $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^N$ des dualen Problems (8.6).

Beweis. Das duale Optimierungsproblem

$$\min_{\boldsymbol{\lambda} \in U_{\text{ad}}} f(\boldsymbol{\lambda})$$

mit

$$U_{\text{ad}} := \left\{ \boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N : \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0 \text{ und } \lambda_i \geq 0 \text{ für alle } i = 1, \dots, N \right\}$$

ist ein konvexes Optimierungsproblem auf der konvexen und abgeschlossenen Menge U_{ad} . Weil zur eindeutigen Lösung (\mathbf{w}^*, b^*) von (8.1) ein nicht notwendig eindeutiger Lagrange-Multiplikator $\boldsymbol{\lambda}^*$ existiert, so dass die KKT-Bedingungen erfüllt sind, gilt $\boldsymbol{\lambda}^* \in U_{\text{ad}}$ und folglich $\boldsymbol{\lambda}^* \in U_{\text{ad}} \neq \emptyset$. Die Existenz einer Lösung folgt nun mit den gleichen Argumenten wie im Beweis von Satz 8.2 durch Betrachtung einer Minimalfolge für die konvexe und stetige Funktion $f(\boldsymbol{\lambda})$. \square

Bemerkung Da $f(\boldsymbol{\lambda})$ nicht strikt konvex ist, muss eine Lösung von (8.6) nicht eindeutig sein. In der Tat entspricht f der quadratischen Funktion

$$f(\boldsymbol{\lambda}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\lambda}^T \mathbf{Q} \boldsymbol{\lambda} - \mathbf{1}^T \boldsymbol{\lambda} \quad \text{mit} \quad \mathbf{Q} = [y_i y_j \mathbf{x}_i^T \mathbf{x}_j]_{i,j=1}^N,$$

wobei \mathbf{Q} im allgemeinen nur positiv semidefinit ist, weil die Vektoren $\{\mathbf{x}_i\}_{i=1}^N$ linear abhängig sind. Ist $N > d$, so ist dies sicherlich der Fall. \triangle

Quadratische Optimierungsprobleme mit affinen Nebenbedingungen kann man sehr effizient iterativ lösen. In der Praxis löst man das duale Problem mit einer Aktive-Menge-Strategie. Es sei an dieser Stelle auf die Fachliteratur verwiesen.

8.3 Nicht linear-separierbarer Fall

Sind die Mengen Ω_+ und Ω_- nicht linear separierbar, so muss man Fehler bei der Klassifikation zulassen. Um dennoch eine möglichst gute Generalisierungsleistung zu erzielen, muss die Anzahl der Klassifikationsfehler minimiert werden. Dazu führt man Schlupfvariablen $\xi_i \geq 0$, $i = 1, \dots, N$, ein und verlangt die Separationsbedingungen

$$\begin{aligned} \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b &\geq +1 - \xi_i, & \text{falls } y_i = +1, \\ \mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b &\leq -1 + \xi_i, & \text{falls } y_i = -1. \end{aligned}$$

Damit der Fehler nicht zu groß wird, wird die Summe $\sum_{i=1}^N \xi_i$ als Strafterm zum Funktional addiert, so dass man das Optimierungsproblem

$$\min_{(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}) \in \mathbb{R}^{d+1+N}} \frac{1}{2} \sum_{i=1}^d w_i^2 + \alpha \sum_{i=1}^N \xi_i, \quad \text{so dass} \quad y_i (\mathbf{w}^T \mathbf{x}_i + b) \geq 1 - \xi_i, \quad \xi_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

erhält. Der zugehörige Klassifikator (8.2) heißt dann *soft margin SVM classifier*.

Das Einführen von nichtnegativen Lagrange-Multiplikatoren $\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\mu} \in \mathbb{R}^N$ liefert das neue Lagrange-Funktional

$$L_{(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\xi})}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}) := \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|_2^2 + \alpha \sum_{i=1}^N \xi_i - \sum_{i=1}^N \lambda_i (y_i (\mathbf{w}^\top \mathbf{x}_i + b) - 1 + \xi_i) - \sum_{i=1}^N \mu_i \xi_i$$

mithilfe der KKT-Bedingungen das gleiche duale Problem (8.6), wobei aus der Bedingung

$$\frac{\partial}{\partial \xi_i} L_{(\boldsymbol{\lambda}, \boldsymbol{\xi})}(\mathbf{w}, b, \boldsymbol{\xi}) = \alpha - \lambda_i - \mu_i = 0, \quad i = 1, \dots, N,$$

folgt, dass zusätzlich $0 \leq \lambda_i \leq \alpha$ für alle $i = 1, \dots, N$ gelten muss. Der einzige Unterschied zum vorhergehenden Abschnitt ist demnach die obere Schranke an die gesuchten Lagrange-Multiplikatoren:

$$\min_{\boldsymbol{\lambda} \in \mathbb{R}^N} f(\boldsymbol{\lambda}), \quad \text{so dass} \quad \sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0, \quad \alpha \geq \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N.$$

Auch dies ist wieder ein quadratisches Optimierungsprobleme mit affinen Nebenbedingungen, das sich mit Standardmethoden effizient lösen lässt. Aus einer Lösung $\boldsymbol{\lambda}^*$ dieses Problems ergibt sich die optimale Lösung (\mathbf{w}^*, b^*) des zugehörigen primalen Problems wie in Satz 8.3, außer dass man zur Bestimmung von b^* einen Index i nehmen muss, für den $\alpha > \lambda_i > 0$ gilt.

8.4 Feature Maps

Wenn zwei Mengen nicht linear separierbar sind, dann kann man versuchen, diese in einen höherdimensionalen Raum einzubetten, da dort die Wahrscheinlichkeit der linearen Separierbarkeit erheblich größer ist. Dies erreicht man durch eine stetige Abbildung $\phi : \Omega \rightarrow \mathcal{H}$ in einen Hilbert-Raum \mathcal{H} , welche *Feature Map* genannt wird. Der Raum \mathcal{H} heißt entsprechend *Feature Space*. Innenprodukte im \mathbb{R}^d zwischen den Datenpunkten $\mathbf{x}_i^\top \mathbf{x}_j$ sind dann durch die Innenprodukte $(\phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j))_{\mathcal{H}}$ in \mathcal{H} zu ersetzen.

Satz 8.5 Sei $\Omega \in \mathbb{R}^d$ ein Gebiet, \mathcal{H} ein Hilbert-Raum und $\phi : \Omega \rightarrow \mathcal{H}$ eine Feature Map. Dann bildet die Funktion $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, gegeben durch $\kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}))_{\mathcal{H}}$, einen symmetrischen und positiv semidefiniten Kern.

Beweis. Die Symmetrie von κ folgt aus der Symmetrie des Innenprodukts in \mathcal{H} . Weiter gilt für beliebiges $X = \{\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N\} \subset \Omega$ und $\boldsymbol{\alpha} \in \mathbb{R}^N$

$$\begin{aligned} \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) &= \sum_{i,j=1}^N \alpha_i \alpha_j (\phi(\mathbf{x}_i), \phi(\mathbf{x}_j))_{\mathcal{H}} \\ &= \left(\sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(\mathbf{x}_i), \sum_{j=1}^N \alpha_j \phi(\mathbf{x}_j) \right)_{\mathcal{H}} \\ &= \left\| \sum_{i=1}^N \alpha_i \phi(\mathbf{x}_i) \right\|_{\mathcal{H}}^2, \end{aligned}$$

woraus die positive Semidefinitheit folgt. \square

Wir sehen, dass die Feature Map $\phi : \Omega \rightarrow \mathcal{H}$ auf kanonische Art und Weise einen positiv semidefiniten Kern erzeugt. Umgekehrt erzeugt jeder Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ eines RKHS \mathcal{H} eine Feature Map.

Proposition 8.6 Sei $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ ein reproduzierender Kern im RKHS \mathcal{H} . Dann ist der Kern definiert durch die Feature Map

$$\phi : \Omega \rightarrow \mathcal{H}, \quad \phi(\mathbf{x}) := \kappa(\cdot, \mathbf{x}). \quad (8.7)$$

Beweis. Die Behauptung ergibt sich aus der Identität

$$(\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}))_{\mathcal{H}} = (\kappa(\cdot, \mathbf{x}), \kappa(\cdot, \mathbf{y}))_{\mathcal{H}} = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y}).$$

\square

Bemerkung Die Abbildung (8.7) wird *Kernel Feature Map* genannt. \triangle

8.5 Nichtlineare Support Vector Machines

Mithilfe der Kernel Feature Map $\phi(\mathbf{x}) = \kappa(\cdot, \mathbf{x})$ können wir das Optimierungsproblem zur Bestimmung der Support Vector Machine modifizieren, indem wir die Innenprodukte $\mathbf{x}^T \mathbf{y}$ ersetzen durch $(\phi(\mathbf{x}), \phi(\mathbf{y}))_{\mathcal{H}} = \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{y})$ für alle $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in X$.

Wir wollen annehmen, dass die Daten $\{(\phi(\mathbf{x}_i), y_i)\}_{i=1}^N$ in $\mathcal{H}_X = \text{span}\{\phi(\mathbf{x}_1), \dots, \phi(\mathbf{x}_N)\} \subset \mathcal{H}$ linear separierbar sind. In der Tat ist dies der Fall, falls der Kern positiv definit ist, siehe die Bemerkung am Ende des Abschnitts. Daher existieren $w \in \mathcal{H}_X$ und $b \in \mathbb{R}$ derart, dass

$$y_i \left((w, \phi(\mathbf{x}_i))_{\mathcal{H}} + b \right) \geq 1 \quad \text{für alle } 1 \leq i \leq N. \quad (8.8)$$

Die gesuchte Support Vector Machine ergibt sich nun wieder aus dem Optimierungsproblem

$$\min_{(w,b) \in \mathcal{H}_X \times \mathbb{R}} \frac{1}{2} \|w\|_{\mathcal{H}}^2 \quad (8.9)$$

unter Beachtung der Nebenbedingungen (8.8). Analog zu Satz 8.2 besitzt dieses Problem eine eindeutige Lösung (w^*, b^*) .

Der Übergang zum dualen Problem führt auf das quadratische Optimierungsproblem

$$\min_{\lambda \in \mathbb{R}^N} \left\{ \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \lambda_i \lambda_j y_i y_j \kappa(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_j) - \sum_{i=1}^N \lambda_i \right\}$$

mit den Nebenbedingungen

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0, \quad \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N$$

im Fall des hard margin SVM classifiers und mit den Nebenbedingungen

$$\sum_{i=1}^N \lambda_i y_i = 0, \quad \alpha \geq \lambda_i \geq 0, \quad i = 1, \dots, N.$$

im Fall des soft margin SVM classifiers. Hat man eine Lösung $\boldsymbol{\lambda}^* \in \mathbb{R}^N$ dieses Problems bestimmt, so setzt man

$$w^* = \sum_{i=1}^N \lambda_i^* y_i \phi(\mathbf{x}_i) = \sum_{i=1}^N \lambda_i^* y_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i)$$

und wählt b^* derart, dass

$$y_i \left((w^*, \phi(\mathbf{x}_i))_{\mathcal{H}} + b^* \right) = 1$$

für ein $i \in \{1, \dots, N\}$ mit $\lambda_i \neq 0$ im Fall des hard margin SVM classifiers beziehungsweise $\alpha > \lambda_i > 0$ im Fall des soft margin SVM classifiers. Dies führt auf die Lösung des primalen Problems (8.8) und (8.9) und damit auf den gesuchten Klassifikator:

$$c(\mathbf{x}) = \text{sign} \left(\sum_{i=1}^N \lambda_i^* y_i \kappa(\mathbf{x}, \mathbf{x}_i) + b^* \right).$$

Bemerkung Die Daten $\{(\phi(\mathbf{x}_i), y_i)\}_{i=1}^N$ sind in einem RKHS \mathcal{H} mit positiv definitem Kern $\kappa : \Omega \times \Omega \rightarrow \mathbb{R}$ immer linear separierbar. Denn die Kerninterpolante

$$w = \sum_{i=1}^N \alpha_i \kappa(\cdot, \mathbf{x}_i) \in \mathcal{H}_X$$

zu den Daten $w(\mathbf{x}_i) = y_i$ erfüllt die Nebenbedingungen (8.8) mit $b = 0$. △

Index

- $C^\infty(\Omega)$, 9
- $C^k(\Omega)$, 9
- $C^{k,\alpha}(\Omega)$, 9
- $C_0^\infty(\Omega)$, 9
- $H^s(\Omega)$, 18
- $H^s(\mathbb{R}^d)$, 18
- $L^\infty(\Omega)$, 11
- $L^p(\Omega)$, 10
- $L_{loc}^1(\Omega)$, 11
- $W^{k,p}(\Omega)$, 13
- $W_0^{k,p}(\Omega)$, 13
- $\mathcal{D}(\mathbb{R}^d)$, 14
- $\mathcal{S}(\mathbb{R}^d)$, 15
- $\tilde{H}^s(\Omega)$, 18

- Ableitung
 - distributionelle Ableitung, 15
 - schwache Ableitung, 12

- Bessel-Potential, 18

- Cluster, 52
 - Level, 52
 - Sohn, 52
 - Vater, 52
 - zulässige Cluster, 53
- Clusterbaum, 52

- $\tilde{\text{Dirac}}$ -Distribution, 15
- Distribution, 14
 - Dirac-Distribution, 15
 - reguläre Distribution, 14
 - singuläre Distribution, 14
 - temperierte Distribution, 15
- Dualitätsprodukt, 11

- Feature Map, 61
- Feature Space, 61
- Fill Distance, 30
- Fourier-Transformierte, 15

- Gauß-Kern, 5

- Hölder-Ungleichung, 11
- Hilbert-Schmidt-Kern, 43
- Hilbert-Schmidt-Operator, 43

- Integraloperator, 43

- Kern
 - Gauß-Kern, 5
 - Matérn-Kern, 5
 - reproduzierender Kern, 5
- Kernel Feature Map, 62
- Kernfunktion, 43
- Kerninterpolation, 7
- KKT-Bedingungen, 59
- Klassifikator, 56
 - hard margin SVM classifier, 57
 - soft margin SVM classifier, 61
- Kopplungsmatrix, 51

- Lagrange-Basis, 28
- Lebesgue-Konstante, 30
- linear separierbare Mengen, 56
- Lipschitz-Gebiet, 10

- Matérn-Kern, 5
- Momentenmatrix, 51
- Multiindex, 9
 - Betrag eines Multiindex, 9
 - Fakultät eines Multiindex, 9

- Nahfeld, 54
- Native Space, 23
- Newton-Basis, 38
- Niedrigrangapproximation, 35, 51

- Operator
 - Integraloperator, 43
 - kompakter Operator, 41
 - positiv (semi-) definiten Operator, 40
 - symmetrischer Operator, 40

- pivotisierte Cholesky-Zerlegung, 35

Power Function, 27

Prä-Hilbert-Raum, 22

Reproducing Kernel Hilbert Space, 5

Satz

 Sobolevscher Einbettungssatz, 14

 Spektralsatz für kompakte Operato-
 ren, 41

Separator, 56

Sobolev-Raum, 13, 18

Sobolev-Slobodeckii-Norm, 13

Spurnorm, 35

Support Vector Machine, 56