1 Quadratische Extremalaufgaben

Wir beobachten die Welt, und uns fällt auf, daß sich die Dinge in Zuständen befinden, in denen sie sich gut beobachten lassen. Das ist z.B. der Fall, wenn die Dinge ruhen. Solche Zustände nennen wir Gleichgewichtszustände. Stationäre Zustände sind solche, indenen die Dinge ohne Bewegung verharren.

1.1 Das Minimum potentieller Energie

Ein spezieller Fall von Gleichgewicht ist, wenn die Objekte ruhen. Man stellt fest, daß die Objekte nicht irgentwo ruhen, sondern in ganz bestimmten Punkten, sogenannten stationären Punkten oder stationären Zuständen. Betrachten wir eine Landschaft, so stellen wir fest, daß sich alle Objekte mit Vorliebe in Tälern sammeln. Täler sind Minima der Erdoberfläche. Das Relief der Landschaft entspricht gerade dem Abstand vom Erdmittelpunkt und damit der Stärke des Schwerefeldes der Erde – des Gravitationspotentials. Dieses Gravitationspotential bestimmt die potentielle Energie eines Objektes. In der Landschaft ruhen die Objekte in Tälern, also dort wo ihre potentielle Energie klein ist.
Warum ruhen die Objekte in Tälern? Weil sie Energie brauchen um sich aus den Tälern fortzubewegen. Berge bilden Energiebarrieren, die erst überwunden werden muß. Das ist ein Konzept, daß sehr intuitiv ist und das wir aus vielen anderen Gebieten der Naturwissenschaft kennen. So finden chemische Reaktionen erst statt, wenn den Molekülen eine ausreichende Aktvierungsenergie zugeführt wurde.
Wir unterscheiden hier – was oft nicht gemacht wird – zwischen Potential (intensive Größe) und potentieller Energie (extensive Größe). Dieser Unterschied wird vor allem später wichtig, wenn wir wissen wollen, was für eine Triebkraft die Objekte in ihren Ruhepunkt bewegt. Diese Triebkraft ist die Differenz zweier Potentialwerte. Die Potentielle Energie kann nur genutzt werden, wenn eine Potentialdifferenz vorhanden ist. Andererseits kann eine Potentialdifferenz nur genutzt werden, wenn eine Stoffmenge vorhanden ist, die bewegt werden kann.
Am deutlichsten wird dieser Zusammenhang in der Ökonomie, da wir hier die Situation selbst schaffen und genau überblicken können. Wenn in zwei Städten eine Ware zu verschiedenen Preisen verkauft wird, dann kann ich diese Potentialdifferenz (Preise sind intensive Größen) ausnutzen, um Profit zu machen. Dazu muß mir aber eine reale Stoffmenge (nämlich Geld) zur Verfügung stehen um diese Potentialdifferenz auszunutzen. Umgekehrt, nützt mir die größte Geldmenge zum Handel treiben nichts, wenn es keine Preisunterschiede gibt.
Analog können wir in der Ebene die riesige potentielle Energie, die alle Objekte auf der Erdoberfläche haben, nicht ausnutzen.
In Anlehnung an den intuitiven Zusammenhang zwischen potentieller Energie auf der Erde und dem Bild der Landschaft, nehmen wir an, daß jedes ruhende Objekt deshalb dort ruht wo es ruht, weil dort das Minimum einer gewissen Funktion ist, die wir potentielle Energie nennen.
Aufgabe der Physik ist es, zu einem gegebenen physikalischen System eine geeignete Funktion zu finden, die sich als potentielle Energie verstehen läßt. Angenommen, wir kennen diese Funktion, dann müssen wir nur noch ihre Minima finden und kennen damit die stationären Zustände des Systems.

Damit haben wir folgendes Naturprinzip definiert:

Ein physikalisches System ruht im Minimum seiner potentiellen Energie

Mathematisch bedeutet das Problem folgendes: Gegeben sei eine Funktion $U(x)$ (eine potentielle Energie), gesucht sind ihre Minima. Hier ist $U : \mathfrak{X} \longrightarrow \mathbb{R}$ eine Abbildung des Zustandsraumes in die reellen Zahlen. So eine Funktion kann mehrere Minima haben. Jedes ist ein stationärer Zustand. Das ist eine Extremalaufgabe, ein globales Problem. Eine Möglichkeit dieses Problem zu lösen ist, an seiner Stelle ein lokales Problem zu lösen, nämlich die Gleichung $\nabla U(x) = 0$. Physikalisch ist das das Kraftkonzept. Anstelle einer potentiellen Energie wird eine Kraft $F(x) = \nabla U(x)$ betrachtet. Im stationären Zustand verschwinden die Kräfte.

Das Prinzip des Minimums der potentiellen Energie ist uns so geläufig, daß wir uns gar keine Gedanken darüber machen. Die Dinge fallen runter und bleiben unten liegen. Tatsächlich ist es anderes herum: Wir stellen fest, daß die Dinge in gewissen Zuständen ruhen und nehmen dann an, daß es eine Größe geben sollte, die wir potentielle Energie nennen und in deren Minimum die Systeme ruhen. Das entspricht unserer Vorstellung, daß es Energie benötigt um die Objekte aus ihrer Ruhe zu bringen.

Das Konzept der potentiellen Energie ist sehr intuitiv. Das Konzept der Kraft als Ursache der Bewegung ist es nicht. Das liegt daran, daß das, was wir intuitiv als Kraft wahrnehmen, nicht die physikalische Kraft ist. Z.B. spüren wir beim Stehen eine Kraft, die uns zu Boden ziehen will. Diese Kraft führt aber nicht zu einer beschleunigten Bewegung, wie es nach dem 2. Newtonschen Gesetz[1] sein müßte. Und umgekehrt: Stürzen wir ungebremst mit einem Fahrstuhl in die Tiefe, fühlen wir uns schwerelos (spüren keine Kraft), obwohl wir uns beschleunigt bewegen.

Wir werden deshalb das Konzept der potentiellen Energie in den Vordergrund stellen und uns Kräfte als räumliche Änderungen (z.B. Gradienten) ihrer entsprechenden Potentiale vorstellen. Jede potentielle Energie muß nach unten beschränkt sein und deshalb ein Minimum haben. Sonst würde die Dinge ins Bodenlose fallen. Das ist vielleicht der Fall, interessiert uns aber nicht, denn diese Objekte – die ins Bodenlose gefallen sind – nehmen wir nicht mehr wahr.

Wir werden in diesem einführenden Kapitel annehmen, daß eine potentielle Energie gegeben ist, die durch ein quadratisches Funktional dargestellt werden kann. Das ist eine vorläufige Einschränkung.

Jede glatte potentielle Energie sieht in der Nähe des Minimums aus wie eine quadratische Funktion. Wenn wir uns in geeigneter Nähe eines lokalen Minimums befinden, bekommen wir von den anderen Minima nichts mit. Es ist deshalb sinnvoll, als erstes quadratische potentielle Energien zu betrachten. Die haben genau ein Minimum, das ist global. Wenn wir uns das Verhalten eines physikalischen Systems in einer quadratischen potentiellen Energie betrachten, betrachten wir also das Verhalten eines allgemeinen physikalischen Systems in der Nähe eines lokalen Minimums.

Bevor wir den Zusammenhang von quadratischen Minimumproblemen und linearer Algebra betrachten, führen wir einige Begriffe und Definitionen ein.

1.2 Massen und Federn

(Hierher Bild 1-D, 2-D)

Wir betrachten n (punktförmige) Massen in den Punkten x_1, ..., x_n mit den Massen m_1, ..., m_n, die mit m Federn mit den inversen Federkonstanten c_1, ..., c_m (> 0) verbunden sind.

[1] Üblicherweise lautet das 2. Newtonsche Gesetz: “Kraft ist Masse mal Beschleunigung”. Newton selbst formulierte es aus gutem Grund anders: “Die zeitliche Änderung der Bewegungsmenge ist die Kraft.” Anstelle von Bewegungsmenge sagen wir heute “Impuls”. Newton sagte wörtlich “amount of motion”, worin sich der extensive Charakter der Größe deutlich zeigt.

Es seien $d_1, ..., d_m$ die Längen der Federn, $b_1, ..., b_m$ die Längen der Federn in entspanntem Zustand und $e_1, ..., e_m$ die Auslenkungen (Elongation) der Federn aus ihrer Ruhelage, also $e_j = b_j - d_j$. Wir definieren hier positive Elongationen für gestauchte (gedrückte) und negative Elongationen für gestreckte (gezogene) Federn, was unnatürlich wirkt, aber keine prinzipielle Rolle spielt. Einige der Massen oder Federn seien geeignet im Raum befestigt. Wir suchen den Gleichgewichtszustand dieses Systems.
Die gesamte potentielle Energie des Systems ist die Summe aus der potentiellen Energie der Federn und der potentiellen Energien der Massen, also

$$P(x) = \frac{1}{2} \sum\nolimits_{j=1}^{m} e_j^2 c_j^{-1} + \sum\nolimits_{i=1}^{n} x_i m_i g \ .$$

Je kleiner c_j, desto mehr Energie ist in der Feder gespeichert. Der Ausdruck $y_j = e_j c_j^{-1}$ ist die in der j-ten Feder wirkende Kraft. Dieser Zusammenhang wird Hooksches Gesetz genannt. Je größer die Federkonstante c_j^{-1} (je kleiner die inverse Federkonstante c_j) ist, desto mehr Kraft benötige ich um eine bestimmte Elongation zu erziehlen.
Die Struktur bildet einen – nicht unbedingt vollständigen – Graphen mit Knoten (Massepunkten), von denen manche durch Kanten (Federn) verbunden sind. Wir führen jetzt zur Beschreibung mathematische Räume für die Größen ein. Da wir ein endliches System betrachten, können wir endlichdimensionale Räume betrachten. Operatoren sind Matrizen. Als Norm wählen wir die euklidische, da sie uns die richtigen Längen liefert. Die Räume sind reflexiv, es sind sogar Hilberträume. Trotz der Reflexivität wollen wir Räume wie $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ und ihre dualen Räume $\mathcal{X}^*$ und $\mathcal{Y}^*$ unterscheiden. Sie lassen sich mathematisch zwar identifizieren, enthalten aber physikalische Größen verschiedenen Typs. Wir legen fest, daß $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ intensive Größen und $\mathcal{X}^*$ und $\mathcal{Y}^*$ extensive Größen enthalten sollen. Das wird im unendlichdimensonalen Fall wichtig. Dann sind Elemente aus $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ stetige Funktionen und Elemente aus $\mathcal{X}^*$ und $\mathcal{Y}^*$ Maße.
Es sei $x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}_n$ der Raum der x-Koordinaten (intensive Größen) der Massen und $e \in \mathcal{Y}^* = \mathbb{R}_m^*$ der Raum der Längen (extensive Größen) der Federn. $\mathbf{C}$ sei ein Diagonaloperator $\mathbf{C} : \mathcal{Y} \to \mathcal{Y}^*$, der Kräfte (intensive Größen) auf Längen (extensive Größen) abbildet.
Die Räume $(\mathcal{X}, \mathcal{X}^*)$ beschreiben die Welt der Knoten (Massen), die Räume $(\mathcal{Y}, \mathcal{Y}^*)$ die Welt der Kanten (Federn). Im allgemeinen haben sie verschiedene Dimensionen ($n \neq m$), so daß man nicht auf die Idee kommt, etwa $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ zu identifizieren.
Mit diesen Bezeichungen erhalten wir für die potentielle Energie des Systems

$$P(x) = \frac{1}{2} \langle e, \mathbf{C}^{-1} e \rangle + \langle x, f \rangle$$

Hier wurde $f_i = g m_i$, $\mathbf{C} = \mathrm{diag}(c_1, ..., c_m)$ mit $c_i > 0$ gesetzt.[2]
Nach unserem Grundprinzip bildet das Minimum dieser potentiellen Energie den Gleichgewichtszustand des Systems. Die Bestimmung des Minimums ist so noch nicht möglich, da e und x zusammenhängen und dieser Zusammenhang berücksichtigt werden muß.
Es sei $\mathbf{D}$ eine Matrix, die die Struktur des Graphen. Sie bildet zwei Punkte x_i und x_j auf die Differenz $x_i - x_j$ ab. Jede Zeile besteht aus je einer 1 und -1 und der Rest $= 0$. Diese Matrix macht aus Punkten (also intensiven Größen, Koordinaten) Längen, also extensive Größen. Genau genommen müßte die Differenz $x_i - x_j$ noch mit einer Längeneinheit multipliziert werden. $\mathbf{D}$ heißt in der Graphentheorie **Inzidenzmatrix** und manchmal auch **Strukturmatrix**.

[2] Letztlich kommt es nur darauf an, daß die f_i gegeben äußere Kräfte sind. Eigentlich müßte man hier die Richtung dieser Kräfte berücksichtigen, was wir nicht tun werden um die Formeln nicht zu unübersichtlich zu machen. Wem das nicht gefällt, kann sich das System mit Gravitationskraft und eindimensional vorstellen.

Damit bildet die – im allgemeinen rechteckige Matrix – $\mathbf{D} : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}^*$ ab. Der Einfachheit halber nehmen wir an, daß die Federn ideale lineare Federn sind. Das bedeutet, daß ihre gespeicherte potentielle Energie quadratisch von der Auslenkung abhängen und sie sich theoretisch über den Nullpunkt hinaus stauchen lassen, was natürlich Unsinn ist. Im Fall positiver b_j und genügend kleiner Auslenkungen ist das aber eine gute Annahme. Damit erhalten wir

$$e = b - \mathbf{D}x$$

und unsere potentielle Energie ist

$$\begin{aligned} P(x) &= \frac{1}{2}\langle (b - \mathbf{D}x), \mathbf{C}^{-1}(b - \mathbf{D}x)\rangle + \langle x, f\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\langle x, \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x\rangle - \langle x, \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b\rangle + \langle x, f\rangle + \frac{1}{2}\langle b, \mathbf{C}^{-1}b\rangle \end{aligned}$$

Die Lösung x_0 dieses quadratischen Minimumproblems ist Lösung der Gleichung

$$\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b - f \tag{1}$$

Da natürlicherweise die Diagonalmatrix $\mathbf{C}^{-1}$ positiv ist, ist $\mathbf{A} = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}$ auch positiv und wir erhalten (falls $\mathbf{A}$ sogar strikt positiv ist)

$$x_0 = \mathbf{A}^{-1}(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b - f)$$

Dieser Wert, in $P(x)$ eingesetzt, ergibt das Minimum $P(x_0)$. Damit ist die Aufgabe vollständig gelöst.

Bemerkungen:

- So wie der Operator $\mathbf{D}$ definiert wurde, gilt $\mathbf{D}\mathbb{1} = 0$ (hier ist $\mathbb{1}$ ein Vektor, dessen Komponenten 1 sind). Damit gilt auch $\mathbf{A}\mathbb{1} = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbb{1} = 0$. Der Operator $\mathbf{A}$ entartet also ohne weiter Bedingungen, d.h. es existiert nicht $\mathbf{A}^{-1}$ und damit keine Lösung. Physikalisch ist das verständlich: Die Massen fallen mit den Federn in die Tiefe, wenn sie nicht an wenigesten einer Stelle fixiert werden. Das bedeutet, daß eine Koordinate x_i keine freie Variable mehr ist. Die entsprechende Zeile in der Matrix $\mathbf{A}$ enthält dann nur einen Eintrag der 1 oder -1 ist. Diese Bedingung sichert die Invertierbarkeit von $\mathbf{A}^{-1}$. Das hängt vom konkreten Problem ab und interessiert uns hier nicht, weil wir die prinzipielle Struktur der Objekte im Auge haben.

- Im kontinuierlichen, unendlich dimensionalen Fall (anstelle des Indexes i wird eine kontinuierliche Variable z betrachtet) ist häufig $\mathbf{D}$ der Gradient. Dem Operator $\mathbf{A} = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}$ entspricht dann ein Operator der Form $\mathbf{A}u = -\mathrm{div}\,\big(C(z)\mathrm{grad}\ u\big)$ mit Randbedingungen. Hier ist $C(z)$ der Diffusionskoeffizient, ein Multiplikationsoperator, der der Diagonalmatrix $\mathbf{C}^{-1}$ entspricht.

  Hier sieht man einen wichtigen Unterschied zwischen endlichdimensionalen und unendlichdimensionalen Problemen. u und grad u lassen sich im selben Raum betrachten. Man kommt deshalb nicht unbedingt – wie im endlichdimensionalen Fall – auf die Idee, verschiedene Räume für $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ einzuführen.

- Die Vorzeichen der Operatoren und Funktionale spielen oft keine prizipielle Rolle. Der Unterschied von $\mathbf{D}$ und $-\mathbf{D}$ beschreibt, in welcher Richtung die Differenz zweier Punktte x_i und x_j betrachtet wird. Im kontinuierlichen Fall entspricht das der Frage, ob der Gradient ∇u "nach oben" oder "nach unten" zeigt. Inzwischen ist "nach oben" festgelegt, obwohl die physikalische Entsprechung – die Kraft – "nach unten" zeigt. Für Differenzoperatoren $\mathbf{D}$ hat sich keine Festlegung durchgesetzt.
- Formal könnte man einen vollständigen Graphen betrachten und die Kanten, in denen sich keine Feder befindet mit einer Federkonstanten $c = 0$ belegen. Damit ließen sich alle Probleme mit einer Matrix $\mathbf{D}$ beschreiben. Dann könnte man allerdings nicht ohne weitere Bemerkungen $\mathbf{C}$ betrachten, weshalb wir hier davon absehen.

  Eine weitere Möglichkeit wäre, in einem vollständigen Graphen formal alle Federn mit strikt positiven Federkonstanten zu betrachten und nach Lösung des Problems für die nicht genutzten Federn die entsprechenden Federkonstanten gegen 0 gehen zu lassen.

1.2.1 Einführung von vier Räumen

Mit der Lösung der Gleichung (1) könnten wir uns zufrieden geben. Wir werden aber – was häufig in der Mathematik fruchtbar ist – die gefundene Lösung weiter diskutieren und versuchen, verborgene Strukturen zu entdecken.
Gleichung (1) können wir auch als

$$\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}(b - \mathbf{D}x) = f$$

schreiben. Diese Gleichung läßt sich als das folgende System

$$\begin{aligned} e &= b - \mathbf{D}x && \text{Geometrie} \\ y &= \mathbf{C}^{-1}e && \text{Materialgesetz} \\ f &= \mathbf{D}^*y && \text{Energieerhaltung, actio = reactio} \end{aligned}$$

verstehen. Hier wurde künstlich eine Variable $y \in \mathcal{Y}$ eingeführt. Sie hat einen physikalischen Sinn. y_i ist die Kraft, die die Feder mit einer Federkonstanten c_i bei Auslenkung e_i ausübt. Die Energie der Feder ist $\frac{1}{2}y_ie_i$ (Kraft mal Weg).
Diese Gleichungen lassen sich physikalisch interpretieren:

- $e = b - \mathbf{D}x$ beschreibt die Auslenkung der Feder relativ zur Ruhelänge. Das ist die für die Kraftwirkung der Feder relevante Federlänge.
- $y = \mathbf{C}^{-1}e$ macht aus der relevanten Federlänge e_j eine Kraft y_j durch Multiplikation von e_j mit der Materialkonstanten c_j^{-1}. Historisch hat sich ergeben, daß man mit c_j^{-1}, der Federkonstanten arbeitet, obwohl die Größe c_j, die inverse Federkonstante, eine kanonischere Größe wäre.

  Auch mathematisch gesehen ist die Betrachtung des Operators $\mathbf{C} : \mathcal{Y} \to \mathcal{Y}^*$ anstelle seines inversen sinnvoller, denn er bildet intensive auf extensive Größen ab. Außerdem ist er – auch im unendlich dimensionalen Raum – stets ein beschränkter Operator, wobei die Existenz von $\mathbf{C}^{-1}$ oft nicht gesichert ist.
- Der Ausdruck $\mathbf{D}^*y$ sammelt die Kräfte ein, die von den Kanten ausgehen und auf die Knoten wirken. Die Gleichung $f = \mathbf{D}^*y$ ergibt sich zwangsläufig. Sie muß gelten, wenn unsere Herleitung richtig war, d.h., sie ist eine Folge aus dem Prinzip der minimalen potentiellen

> Energie. Sie ist ein neues Naturgesetz. Es besagt, daß im Gleichgewichtsfall die Arbeit, die durch die äußeren Kräfte f verrichtet wird gleich ist der Arbeit die die Federkräfte $\mathbf{D}^*y$ verrichten. Das ist letztlich der Energieerhaltungssatz (Arbeit = Energie). Bei gleichem zurückgelegtem Weg bedeutet gleiche Arbeit gleiche Kräfte. Dieses Gleichgewicht kann man deshalb auch als Gleichgewicht der Kräfte in den Knotenpunkten bezeichnen (actio = reactio).
>
> Wir sehen, daß das Newtonsche Gesetz actio = reactio eine Folge des Prinzips der minimalen potentiellen Energie ist.

Wir fassen jetzt die benutzten Räume zusammen. Dabei ist es wichtig, Objekte, die man unterscheiden kann, auch wirklich zu unterscheiden. Wenn man verschiedene Objekte in einen Raum legt (z.B. indem man Hilberträume benutzt), betrachtet man immer Spezialfälle. Das vereinfacht oft die Untersuchung, verbirgt aber die tatsächliche Struktur hinter den Objekten. Der Übergang zu einem Hilbertraum ist sinnvoll, wenn man tatsächlich identische Größen paart, wobei aber stets die Dualitätsabbildung, die aus der Bilinearform das Skalarprodukt erzeugt, explizit berücksichtigt werden sollte (siehe Punkt 2.1.2).

Wir betrachten folgende Räume:

$$\mathcal{X} = \mathbb{R}_n,\ \mathcal{Y} = \mathbb{R}_m$$
$$x \in \mathcal{X},\ y \in \mathcal{Y},\ f \in \mathcal{X}^*.\ b, e \in \mathcal{Y}^*$$

und Operatoren

$$\mathbf{D} : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}^*,\ \mathbf{D}^* : \mathcal{Y} \to \mathcal{X}^*$$
$$\mathbf{C}^{-1} : \mathcal{Y}^* \to \mathcal{Y},\ \mathbf{C} : \mathcal{Y} \to \mathcal{Y}^*$$

$$\begin{tikzcd}
x \in \mathcal{X} \arrow[r, "\mathbf{A} = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}"] \arrow[d, "\mathbf{D}"'] & f \in \mathcal{X}^* \\
e, b \in \mathcal{Y}^* \arrow[r, shift right, "\mathbf{C}^{-1}"'] & y \in \mathcal{Y} \arrow[l, shift right, "\mathbf{C}"'] \arrow[u, "\mathbf{D}^*"']
\end{tikzcd}$$

Das Schema entspricht den betrachteten Gleichungen

$$\begin{array}{rcll}
e & = & b - \mathbf{D}x & \text{in } \mathcal{Y}^* \\
y & = & \mathbf{C}^{-1}e & \text{in } \mathcal{Y} \\
f & = & \mathbf{D}^*y & \text{in } \mathcal{X}^*
\end{array}$$

Man kann sich das Problem als Graph vorstellen. Dann sind die x_i, f_i Größen in den n Knoten und y_i, b_i Größen in den m Kanten. Es ist offensichtlich $m \leq \binom{n}{2}$. Nicht alle Knoten müssen mit Kanten verbunden sein.

1.2.2 Universalität der Beschreibung und Bemerkungen

Wir haben die Aufgaben mit Massen und Federn als ein Beispiel betrachtet. Der Formalismus ist aber bei vielen Problemen aus den verschiedensten Gebieten immer derselbe. In Abhängigkeit von der konkreten physikalischen Aufgabe haben die Objekte x, y und f, b aus den primalen bzw. dualen Räumen verschiedene Bedeutungen. Stets bleiben die Zusammenhänge aber erhalten. Abstrakt kann man die Objekte folgendermaßen bezeichnen:

x ... Koordinate, Größe eines Potentials

$\mathbf{D}$ ... Geometrischer Zusammenhang: Welche Knoten sind durch Kanten verbunden.

y ... Kraft, Strom in einer Kante

$\mathbf{C}^{-1}$ ... Materialgesetz, das beschreibt, welchen Widerstand die Kante dem Strom/der Kraft entgegensetzt

$\mathbf{D}^*$ ... Geometrischer Zusammenhang: Welche Kanten stoßen in einen Knoten.

f ... Von außen gegebene Arbeit/Energie im Knoten

b ... Von außen gegebene Geometrie (Länge der Kante)

Als weitere Beispiele könnte man betrachten:

- **Elektrotechnik:** Ein elektrisches Netzwerk besteht aus Kontakten (Knoten) in denen elektrische Leiter (Kanten) zusammenlaufen. An zwei oder mehr Knoten liegen Spannungen (Poteniale) an. Das führt in den Kanten zu elektrischen Strömen, deren Stärke von den Widerständen über das Ohmsche Gesetz bestimmt werden. Das Naturgesetz $\mathbf{D}^*y = f$ (in den spannungslosen Knoten $\mathbf{D}^*y = 0$) heißt hier Kirchhoffsches Gesetz. Wikipedia: In einem Knotenpunkt eines elektrischen Netzwerkes ist die Summe der zufließenden Ströme gleich der Summe der abfließenden Ströme.

  Hier ist zu beachten, daß die Vorgabe der Spannung (intensive Größe) nicht eine exakte Beschreibung ist. Tatsächlich wird eine Spannung zusammen mit einer Ladungsmenge (extensive Größe) vorgegeben, also eine Energie. Näherungsweise nimmt man an, daß die Spannung durch ein derartiges Gerät (Batterie) vorgegeben wird, bei dem stets die nötige Ladungsmenge zur Verfügung gestellt wird. Betrachtet man anstelle der Batterie einen Kondensator, sieht man, daß tatsächlich die zur Verfügung stehende Ladungsmenge entscheidend ist.

  Der Gleichgewichtszustand bedeutet hier nicht, daß Ruhe herrscht. Er bedeutet, daß alle Größen, etwa die Ströme, konstant sind, sich zeitlich nicht ändern. Der Zustand sollte daher "stationär" oder "Fließgleichgewicht" genannt werden. Tatsächlich bewegen sich die Elektronen in den Leitern. In den Widerständen geht Energie verloren (wird im Wärme umgewandelt und abgeführt), die nachgeführt werden muß. Das passiert über das konstant halten der Spannung an den Kontakten.

- **Strömungsmechanik:** In den Knoten befinden sich druckdichte Wasserreservoire (Töpfe mit Deckel). Die Töpfe sind mit Schläuchen verbunden, in denen das Wasser fließen kann. Die Druckdifferenz gibt die Triebkraft vor, die das Wasser zum Fließen bringt, wieviel Wasser fließen könnte. Die Dicke der Schläuche entscheidet über die tatsächliche Menge Wasser, die fließt. Das ist das Materialgesetz, was in diesem Fall wohl keinen Namen (analog zu Hook oder Ohm) trägt. In einigen Töpfen wird ein konstanter Druck aufrechterhalten. Das wird erreicht, indem Wasser, das abgeflossen/zugeflossen ist wieder zugeführt/abgeführt wird.

  Der Gleichgewichtszustand beschreibt zeitlich konstante Wassermengen in den Töpfen und zeitlich konstante Flüsse in den Schläuchen. Er ist wieder ein "Fließgleichgewicht". Im Hintergrund gibt es den Prozeß, der Wasser zuführt und abführt und der nicht mit beschrieben wird.

- **Ökonomie:** Wir betrachten Städte (Knoten), die durch Straßen (Kanten) miteinander verbunden sind. Eine Ware wird in allen Städten verkauft, allerdings zu verschieden Preisen (intensive Größe), etwa weil sie in jeder Stadt zu verschiedenen Kosten produziert werden kann. Wir nehmen an, daß die Waren zum selben Preis in genügender Menge vorrätig sind.

Die Preisdifferenzen (Potentialdifferenzen) zwischen den Städten kann man ausnutzen um Profit zu machen. Dazu reichen die Preisdifferenzen aber nicht aus, man muß reales Geld (extensive Größe) nehmen um Waren zu kaufen und sie in eine Stadt mit höherem Preis zu verkaufen. Für den Transport fallen weitere Kosten an (Länge der Wege).

Der Gleichgewichtszustand ist wieder ein "Fließgleichgewicht". Im Hintergrund müssen fleißig Waren produziert werden, damit der Warenstrom nicht abreißt und konstant gehalten werden kann.

Ökonomische Aufgaben sind für das Verständnis der betrachteten Probleme besonders gut geeignet, da alle Prozesse bewußt zustande gebracht werden und nicht – wie bei natürlichen Prozessen – erforscht werden müssen. Alle beteiligten Faktoren sind intuitiv verständlich und können nicht übersehen werden. Bei der Untersuchung von natürlichen Prozessen ist dagegen oft nicht klar, ob tatsächlich alle Faktoren berücksichtigt wurden. Beispielsweise erkennt man bei einem elektrischen Netzwerk nicht sofort, daß eine Spannungsdifferenz allein für den Stromfluß nicht ausreicht, sondern auch Ladungen zur Verfügung gestellt werden müssen. In der Ökonomie ist klar, daß eine Preisdifferenz nicht ausreichend ist, sondern der Handel auch über genügend Kapital verfügen muß.

	Mechanik	elek. Netzwerk	Strömung	Ökonomie
Knoten	Masse	Kontakt	Topf	Stadt
Kante	Feder	Leiter	Schlauch	Straße
x	Lage der Massen	el. Potential	Füllstand	Preise
y	Kräfte in den Federn	el. Strom	Fluß	Kosten
e	Ausziehung der Federn	Spannung	Druckdiff.	Entfernung
$\mathbf{D}$,$\mathbf{D}^*$	Geometrie	Geometrie	Geometrie	Landkarte
b	Vorspannung	vorgeg. Strom	Pumpe	Maut
f	Gravit.kraft	Ladung * Spannung	Druck * Volumen	Steuer
$\mathbf{C}^{-1}$	Hooksches Gesetz	Ohmsches Gesetz	Volumen	
c_i	Federnkonst.	Widerstand	Schlauchdicke	Transp.kosten
$\mathbf{D}^*y = f$	act. = react.	Kirchhoffsches G.	Massenerhaltung	Bilanz

Bemerkungen:

- Das praktische Durchführen der Aufgabe muß man sich so vorstellen: Als erstes fixiert man die Knoten. Das erreicht man indem man in der Mechanikaufgabe tatsächlich die Knoten fixiert. In der Elektrikaufgabe baut man die Schaltung auf und legt aber noch keine Spannung an. In der Strömungsaufgabe baut man Hähne in die Schläuche, die vorerst geschlossen sind. In der Ökonomieaufgabe verbietet man den Verkauf von Waren zu freien Preisen.

  Im zweiten Schritt werden diese Zusatzbedingungen aufgehoben. Das System fängt an, sich zu bewegen und kommt nach einiger Zeit zur Ruhe – ins Gleichgewicht. Jetzt sind alle Größen zeitlich konstant und entsprechen der Lösung der Aufgabe. Das zeitabhängige Problem der Bewegung ins Gleichgewicht wird so nicht beschrieben.

  Tatsächlich kann im System trotzdem Bewegung stattfinden. Elektronen fließen in den Leitern, da die Spannung konstant gehalten wird, LKWs fahren zwischen den Städten hin und her. Zeitlich konstant sind die uns interessierenden Größen x und y. Trotzdem ist Energie im System. Das merkt man, wenn man z.B. irgendwo eine Verbindung löst.

Hier sieht man einen Unterschied zwischen den Größen x und y. Die Größen x kann man tatsächlich – z. B. auf einem Foto als Koordinaten – ablesen. Die Größen y sind wesentlich schwerer sichtbar zu machen. Man erkennt sie nicht auf einem Foto. Das Foto eines Schlauches zeigt nicht das fließende Wasser in ihm an. Natürlich kann man sich überlegen, wie man doch die Größen y sichtbar macht, etwa durch ein Strommeßgerät.

- Größen, die sich von außen vorgeben lassen sind extensive Größen. Deshalb liegen b und f in den dualen (gesternten) Räumen. Intensive Größen wie die Geschwindigkeit lassen sich nicht explizit vorgeben. Man kann sie vorgeben indem man etwa die Treibstoffmenge (extensive Größe) vorgibt. Daß sich dann tatsächlich eine gewünschte Geschwindigkeit einstellt ist ein Zusatzproblem. Damit beschäftigt sich das Gebiet der optimalen Steuerung.
- Jede glatte Funktion verhält sich in der Nähe eines Minimums wie eine quadratische Funktion. Quadratische Funktionale bedeuten also "Nähe des Gleichgewichts". Ableitungen quadratischer Funktionale sind lineare Operatoren und entsprechen einem linearen Verhalten des physikalischen Systems. Das ist typisch für das Verhalten physikalischer Systeme in der Nähe des Gleichgewichts.
- In der Mechanik-Aufgabe sind die Variablen x_i tatsächlich Positionen (Ortskoordinaten), die mit dem Wert des Gravitationspotentials identisch sind. Ansonsten ist x_i keine Position sondern der Wert des Potentials.
- Sowohl $\mathbf{C}^{-1}$ als auch $\mathbf{C}$ haben physikalische Bedeutung und werden häufig wechselseitig verwendet. So ist im elektrischen Netzwerk $\mathbf{C}^{-1}$ der Widerstand und die Gleichung $e = \mathbf{C}^{-1}y$ entspricht dem Ohmschen Gesetz in der Form $U = R \cdot I$. Der Kehrwert des Widerstandes $\mathbf{C}$ wird Leitfähigkeit, Mobilität oder Beweglichkeit genannt. Die Gleichung $y = \mathbf{C}e$ entspricht dem Ohmschen Gesetz in der Form $I = 1/R \cdot U$.
- In der Ökonomie stellt sich das Gleichgewicht etwa so ein: Transportkosten steigen $\Longrightarrow$ Preise steigen. Umgekehrt: Wenn sich die Preise ändern, dann sind auch teurere Transportvarianten rentabel.
- Wenn wir $f = \mathbf{D}^*y$ postulieren, dann liefert die Lösung der Gleichung $\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}(b - \mathbf{D}x) = f$ das Minimum der potentiellen Energie. Beide Prinzipien (actio = reactio oder das Minimum der potentiellen Energie) sind also identisch und können beliebig gewechselt werden, je nach dem, welches Prinzip für die gegebene Aufgabe intuitiver ist.
- Die Beispiele aus Ökonomie, Elektrotechnik und Strömungsmechanik beschrieben Fließgleichgewichte. Nur das Beispiel der Massen und Federn würde man als "echtes" Gleichgewicht bezeichnen, bei dem alles ruht und das System stabil ist, auch ohne das Energie zugeführt werden muß. Die Äquivalenz der Beschreibung legt nahe, doch einmal darüber nachzudenken, ob im Beispiel der Massen und Federn nicht vielleicht doch "etwas" fleißt und dem System nicht vielleicht doch ständig Energie zugeführt wird, die die Spannung in den Federn erhält.

1.2.3 Das duale Problem

Wir haben verstanden, daß man das Problem physikalisch sinnvoll in vier Räumen betrachten kann. Das Minimumproblem haben wir nur in $\mathcal{X}$ formuliert und gelöst. Aus der Graphentheorie wissen wir, daß zwischen Knoten und Kanten eine gewisse Dualität besteht. Man könnte also versuchen, das Problem aus Sicht der Kanten, also ausgehend von $\mathcal{Y}$, zu beschreiben.

Es ist klar, daß die Größen x und y von einnader abhängen und sich gegenseitig bestimmen. Mit dem Gleichgewichtspunkt x_0 ist auch ein entsprechender Gleichgewichtspunkt der Kräfte $y_0 = \mathbf{C}^{-1}(b - \mathbf{D}x_0)$ definiert. Umgekehrt könnte man bei gegebenem y_0 aus dieser Gleichung aber nicht ohne weiteres x_0 bestimmen, da $\mathbf{D}$ nicht invertierbar ist.

Man kann daher die Frage stellen, ob auch der umgekehrte Weg möglich ist, die Lösung eines Minimumproblems in $\mathcal{Y}$ mit dem selben Prinzip. Dazu müßte man wissen, wie sich die potentielle Energie als Funktion von y schreiben läßt. Für die potentielle Energie der Feder ist das klar. Es ist wegen $y = \mathbf{C}^{-1}e$

$$\frac{1}{2}\langle e, \mathbf{C}^{-1}e\rangle = \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle$$

Wir nehmen hier an, daß alle Federkonstanten positiv sind und $\mathbf{C}$ deshalb invertierbar ist. Das ist sicher noch nicht die gesamte potentielle Energie. Wie sich die potentielle Energie der Massen als Funktion der y berücksichtigen läßt, ist allerdings nicht offensichtlich. Wir versuchen deshalb als erstes das Problem zu lösen, wenn es den Freiheitsgrad x des Systems nicht gäbe. Das ist der Fall, wenn alle Koordinaten x_i gezwungen werden, gleich zu sein. Das bedeutet, daß man das ganze System aus Federn und Massen in einen Punkt zusammenpreßt. Da sich die Massen dann alle auf gleicher Höhe im Gravitationsfeld befinden, können wir annehmen, daß das der 0-Punkt der x-Achse ist.

Das ist ebenfalls ein Gleichgewichtspunkt. Das wirkt auf den ersten Blick unverständlich. Was ist das für ein Gleichgewichts, wenn alle Federn zusammengedrückt wurden. Man muß sich die Annahme, daß Federn und Massen in einen Punkt zusammenpreßt wurden so vorstellen, daß es nur diesen einen x-Punkt gibt, der natürlich ein Gleichgewichtspunkt ist. Alternativ kann man sich vorstellen, daß um den Nullpunkt starke Wände (unendlich hohe Potentiale) installiert sind.

Dieser Gleichgewichtspunkt ist leicht zu berechnen. Wenn alle Federn zusammengedrückt sind, ist jede Feder also um die Länge b_j gestaucht worden und die Kraft in ihnen ist offenbar $y = \mathbf{C}^{-1}b$ oder $\mathbf{C}y = b$. Diese Gleichgewichtslösung entspricht dem Minimum des Funktionals

$$Q(y) = \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle - \langle y, b\rangle$$

Wir benutzen hier die Umkehrung des Satzes in Punkt 2.5 auf Seite 40. Wir kennen die potentielle Energie genau, können aber auf sie schließen, weil wir das Gleichgewicht (ihr Minimum) kennen. Wir nehmen hier an, daß die potentielle Energie ein quadratisches Funktional ist.

Wir wollen nun den Fall betrachten, daß die x echte Freiheitsgrade sind. Angenommen, wir ziehen die auf einen Punkt zusammengedrückten Massen so auseinander, daß sie in definierten Punkten x_i platziert sind. Dabei hat sich die potentielle Energie $Q(y)$ verändert. In den Punkten x_i laufen jetzt Kräfte entsprechend der Geometrie also $\mathbf{D}^*y$ zusammen. Was müßten wir tun, daß die vorgegebenen Punkte x_i gerade das Gleichgewicht bilden? Wir müßten in den Punkte x_i solche Massen anbringen, genauer solche Kräfte f_i wirken lassen, daß diese Kräfte die von den Federn erzeugten Kräfte ausgleichen. Das heißt, es muß das eben erkannte "Naturgesetz" $\mathbf{D}^*y = f$ erfüllt sein.

Mit anderen Worten, müssen wir das Minimum von $Q(y)$ nicht in ganz $\mathcal{Y}$ sondern nur auf der Teilmenge $\mathbf{D}^*y = f$ suchen. Das heißt, es ist das bedingte Minimumproblem

$$Q(y_0) = \min_{y \in \mathcal{Y},\ \mathbf{D}^*y = f} Q(y) = \min_{y \in \mathcal{Y},\ \mathbf{D}^*y = f} \left(\frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle - \langle y, b\rangle\right) \tag{2}$$

zu lösen.

Tatsächlich liefert die Lösung dieses Problems exakt die Lösung des ursprünglichen unbedingten Minimumproblems, wenn man wieder zur Variablen x übergeht. Intuitiv könnte man das Problem so lösen: Wir haben das Minimum von $Q(y)$ zu finden. Das sind m Freiheitsgrade. Die Zusatzbedingung $\mathbf{D}^* y = f$ sind n Gleichungen. Diese könnten wir bezüglich der Variablen $y_1, ..., y_n$ umformen und in $Q(y)$ einsetzen. Es verbleiben $(m - n)$ Freiheitsgrade. Wir haben schließlich ein $(m - n)$-dimensionales unbedingtes Minimumproblem zu lösen.
Die große Leistung von Lagrange ist es, erkannt zu haben, daß die n Zwänge, die dem System mit der Gleichung $\mathbf{D}^* y = f$ auferlegt werden, tatsächlich Freiheitsgrade sind. Er schlug deshalb vor, anstelle des Minimumproblems mit m Freiheitsgraden und n Zwängen ein Sattelproblem mit $(m+n)$ Freiheitsgraden zu lösen. Diese Methode wird in der Analysisvorlesung als Lagrangesche Multiplikatormethode zur Bestimmung bedingter Extrema gelehrt. Dabei wird das eigentliche Wesen dieser Methode als Dualität von Freiheit und Zwang aber meistens unerwähnt gelassen. Es wird auch nicht klar, warum Lagrange scheinbar völlig aus der Luft gegriffen anstelle des kanonischen und intuitiven Minimumproblems mit $(m - n)$ Freiheitsgraden ein nicht intuitives "Sattelproblem" mit $(m+n)$ Freiheitsgraden betrachtet. Üblicherweise wird auch nicht erwähnt, daß es sich hierbei um ein Sattelproblem handelt.

1.2.4 Die Lagrangemethode zur Lösung des bedingten Minimumproblems

Wir benutzen die bekannte Lagrangesche Multiplikatormethode formal zur Lösung des bedingten Minimumproblems (2). Dazu wird eine Funktion zweier Veränderlicher y und λ (die sogenannte Lagrangefunktion) gebildet. Dabei wird jede Nebenbedingung mit einem Parameter (dem Lagrangemultiplikator) multipliziert und zur zu minimierenden Funktion addiert. Das ergibt

$$L(y, \lambda) = Q(y) + \langle \lambda, \mathbf{D}^* y - f \rangle$$

Da $\mathbf{D}^* y - f \in \mathcal{X}^*$, ist offenbar $\lambda \in \mathcal{X}$. Für diese Funktion wird der Singulärpunkt gesucht, für den die Ableitungen verschwinden. Differentation ergibt das System

$$\begin{array}{rclcl} \frac{\partial}{\partial y} L & = & \mathbf{C} y + \mathbf{D} \lambda - b & = & 0 \\ \frac{\partial}{\partial \lambda} L & = & \mathbf{D}^* y - f & = & 0 \end{array}$$

(die zweite Gleichung ist wie immer die Nebenbedingung selbst) oder in Matrixform

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{D}^* & \mathbf{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ \lambda \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ f \end{pmatrix}$$

Die erste Gleichung kann man bezüglich y auflösen. Es ist

$$y = \mathbf{C}^{-1}(b - \mathbf{D}\lambda)$$

In die zweite Gleichung eingesetzt ergibt das die schon bekannte Gleichung

$$\mathbf{D}^* \mathbf{C}^{-1}(b - \mathbf{D}\lambda) = f$$

Die Gleichung kennen wir bereits, es ist Gleichung (1). Da die Lösung eindeutig ist, gilt also $\lambda = x_0$. Der scheinbar völlig willkürlich eingeführte Lagrangemultiplikator λ hat also einen physikalischen Sinn: Es ist x, die zu y duale Variable.
Das ist so fundamental, daß es sich lohnt, die Funktion $L(y, x)$ (wir schreiben jetzt x anstelle von λ) näher zu betrachten.

1.2.5 Sattelpunktprobleme

Wir haben insgesamt drei Funktionen, die mit der Aufgabe zu tun haben. Wir nennen die damit zusammenhängenden Probleme "primales Problem", "duales Problem" und "Sattelproblem". Die Bezeichnungen sind so üblich, auch wenn wir mit dem dualen Problem begonnen haben. Das bedingte Minimumproblem für $Q(y)$ formulieren wir dazu formal zu einem unbedingten Minimumproblem um.
Es sei $M = \{y : \mathbf{D}^* y = f\} \subset \mathcal{X}$ die zulässige Menge für das Minimumproblem. Wir definieren eine charakteristische "Funktion" $\chi_M(y)$, die aus der konvexen Analysis gut bekannt ist, durch $\chi_M(y) = 0$ für $y \in M$ und $\chi_M(y) = +\infty$ für $y \notin M$. Es sei weiter

$$\tilde{Q}(y) = Q(y) + \chi_M(y)$$

Diese Funktion ist für alle y definiert (wenn wir unendlich große Werte zulassen) und es gilt

$$\min_y \tilde{Q}(y) = \min_{y \in \mathcal{Y},\ \mathbf{D}^* y = f} Q(y)$$

Diese Gleichheit ist offensichtlich, da auf der Menge M beide Funktionen gleich sind $\tilde{Q}(y) = Q(y)$, außerhalb von M gilt aber $\tilde{Q}(y) = +\infty$, was bestimmt nicht das Minimum ist.
Wir betrachten jetzt drei Funktionen:

$$\begin{array}{lrcl} \text{primal} & Q(y) & = & \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle - \langle y, b\rangle,\ \mathbf{D}^* y = f \\ \text{Sattel} & L(x,y) & = & \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle + \langle x, \mathbf{D}^* y\rangle - \langle y, b\rangle - \langle x, f\rangle \\ \text{dual} & P(x) & = & \frac{1}{2}\langle \mathbf{D}x - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}x - b)\rangle + \langle x, f\rangle \end{array}$$

Die drei Funktionen stehen in einem besonderen Verhältnis zueinander. Es gelten die folgenden Ungleichungen und Gleichungen, die nicht offensichtlich sind und noch bewiesen werden müssen (wir setzen $\tilde{P}(x) = -P(x)$):

$$\begin{array}{rcl} & & \tilde{Q}(y) = \quad \max_x L(x,y) \geq \ L(x,y) \ \geq \quad \min_y L(x,y) = \quad \tilde{P}(x) \\ Q(y_0) & = & \min_y \tilde{Q}(y) = \min_y \max_x L(x,y) = L(x_0,y_0) = \max_x \min_y L(x,y) = \max_x \tilde{P}(x) = \tilde{P}(x_0) \end{array} \tag{3}$$

Die erste Ungleichungskette bedeutet insbesondere

$$\tilde{Q}(y) \geq L(x,y) \geq -P(x)$$

Die zweite Kette von Gleichheiten bedeutet ausführlicher geschrieben

$$\begin{aligned} Q(y_0) &= \min_y \tilde{Q}(y) = \min_y \max_x L(x,y) = \\ &= L(x_0,y_0) = \max_x \min_y L(x,y) = \max_x(-P(x)) = -\min_x P(x) = \\ &= -P(x_0) \end{aligned}$$

Note, that $-P(x) = \min_y L(x,y)$ but $-P(x) \neq \min_{y \in \mathcal{Y},\ \mathbf{D}^* y = f} L(x,y)$!
Beweise:
1) Wir zeigen die linke Seite, also

$$\tilde{Q}(y) = \max_x L(x,y) = \max_x \left(\frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle - \langle y, b\rangle + \langle x, \mathbf{D}^* y - f\rangle \right)$$

Offensichtlich hängt der linke Anteil nicht von x ab und die Frage ist, was $\max_x\langle x, \mathbf{D}^*y - f\rangle$ ist. Für $\mathbf{D}^*y = f$ ist $\max_x\langle x, \mathbf{D}^*y - f\rangle = 0$. Für $\mathbf{D}^*y \neq f$ betrachten wir $x_c = c \cdot \mathrm{sign}(\mathbf{D}^*y - f)$ mit einer reellen Zahl c. Für $c \to \infty$ geht $\langle x_c, \mathbf{D}^*y - f\rangle$ offensichtlich gegen $+\infty$ und damit gilt $\max_x\langle x, \mathbf{D}^*y - f\rangle = +\infty$ für $\mathbf{D}^*y \neq f$. Zusammengefaßt erhält man

$$\max_x\langle x, \mathbf{D}^*y - f\rangle = \begin{cases} 0 & \text{für } \mathbf{D}^*y = f \\ +\infty & \text{für } \mathbf{D}^*y \neq f \end{cases}$$

und damit

$$\max_x L(x,y) = \begin{cases} Q(y) & \text{für } \mathbf{D}^*y = f \\ +\infty & \text{für } \mathbf{D}^*y \neq f \end{cases} \qquad = \tilde{Q}(y)$$

2) Wir zeigen die rechte Seite, also

$$\min_y L(x,y) = -P(x) = -\frac{1}{2}\langle \mathbf{D}x - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}x - b)\rangle - \langle x, f\rangle$$

Es ist

$$\begin{aligned} L(x,y) &= \frac{1}{2}\langle y, \mathbf{C}y\rangle + \langle x, \mathbf{D}^*y\rangle - \langle y, b\rangle - \langle x, f\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\Big\langle(\mathbf{C}y + \mathbf{D}x - b), \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{C}y + \mathbf{D}x - b)\Big\rangle - \frac{1}{2}\langle \mathbf{D}x - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}x - b)\rangle - \langle x, f\rangle \geq \\ &\geq -\frac{1}{2}\langle \mathbf{D}x - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}x - b)\rangle - \langle x, f\rangle = -P(x) \end{aligned}$$

3) Wir zeigen die Gleichheit $Q(y_0) = -P(x_0)$. Es ist (analog zu Beweisschritt **2)**)

$$Q(y) + P(x)\Big|_{f=\mathbf{D}^*y} = \frac{1}{2}\Big\langle(\mathbf{C}y + \mathbf{D}x - b), \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{C}y + \mathbf{D}x - b)\Big\rangle$$

Hieraus folgt für alle x und y (das wird schwache Dualität genannt):

$$Q(y) + P(x)\Big|_{f=\mathbf{D}^*y} \geq 0$$

Für x_0 und y_0 gilt

$$\mathbf{C}y_0 + \mathbf{D}x_0 - b = 0$$

und damit

$$Q(y_0) + P(x_0) = 0\ . \tag{4}$$

4) Aus den schon bekannten Untersuchungen und dem eben Bewiesenen folgt

$$\begin{aligned} Q(y_0) &= \min_y Q(y) = \min_y \max_x L(x,y) \\ -P(x_0) &= \max_x(-P(x)) = \max_x \min_y L(x,y) \end{aligned} \qquad \square$$

Bemerkungen:

- Eine beliebige Funktion $L : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}$ erfüllt die Ungleichung (genauer: inf und sup)

  $$\max_x \min_y L(x,y) \leq \min_y \max_x L(x,y)$$

  Eine solche Ungleichung wird schwaches Dualitätsprinzip genannt.

- Eine Funktion $L : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}$ wird Sattel- oder Lagrangefunktion genannt, wenn es einen Punkt (x_0, y_0) (genannt Sattelpunkt) gibt mit

  $$L(x_0, y_0) = \max_x \min_y L(x, y) = \min_y \max_x L(x, y)$$

  Gilt für eine Funktion $L : \mathcal{X} \times \mathcal{Y} \to \mathbb{R}$ diese Gleichheit, wird gesagt, L erfüllt ein Minimax-Theorem oder ein starkes Dualitätsprinzip.

- Eine vollständige Beschreibung eines physikalischen Problems bedeutet das Finden einer Sattelfunktion. Das starke Dualitätsprinzip bedeutet dann einen Zusammenhang zwischen der $\mathcal{X}$-Welt und der $\mathcal{Y}$-Welt. In der Physik ist das Finden einer geeigneten Sattelfunktion oft nicht einfach, weil meistens eine der beiden Welten ($\mathcal{X}$-Welt oder $\mathcal{Y}$-Welt) intuitiver zu verstehn ist. Das Problem erscheint dem Beobachter nicht symmetrisch.

- Einfach ist das Dualitätsprinzip in der Ökonomie zu verstehen, da sich hier der Mensch einfach in beide Welten hineinversetzen kann:

  Einer (Käufer) will seine Kosten minimieren. Der andere (Verkäufer) will seinen Gewinn maximieren. Entweder sie einigen sich auf einen Preis, dann kommt das Geschäft zustande (starkes Dualitätsprinzip) oder nicht (schwaches Dualitätsprinzip). Im letzteren Fall ist dem Käufer der Preis zu hoch, oder der Verkäufer möchte nicht so billig verkaufen. Es gibt keine Wechselwirkung der beiden Welten, d.h., es findet kein Ware-Geld-Austausch statt.

  Den Fall, daß kein Geschäft zustande kommt, weil der Käufer nicht so billig kaufen oder der Verkäufer nicht so teuer verkaufen will, gibt es nicht.

  Bei diesem Beispiel wird deutlich, daß eine vollständige (die volkswirtschaftliche Sicht) Beschreibung des Problems beide Seiten berücksichtigen sollte. Das ist die monistische Sicht auf das Problem. Die dualistische Sicht bedeutet, daß man weiß, das es zwei Seiten gibt, man sich aber nur für die eine Seite interessiert. In der Praxis bedeutet das, daß man z.B. dem Verkäufer vorschreibt, wie teuer er zu verkaufen hat.

- Das primale Problem ohne Nebenbedingung ergibt $\mathbf{C}y = b$. Der Term $\mathbf{D}x$ in $\mathbf{C}y + \mathbf{D}x = b$ ist der Korrekturterm wegen der Nebenbedingung.

- Die Beziehung $\min_y Q(y) = \max_x(-P(x))$ oder äquivalent $\min_y Q(y) + \min_x P(x) = 0$ ist der Satz des Pythagoras (siehe nächster Punkt).

- Man kann den Punkt (x_0, y_0) durch Nullsetzen der partiellen Ableitungen ermitteln. Anschließend ist aber noch min max $L =$ max min L in (x_0, y_0) zu zeigen.

- $\mathbf{C}$ ist das Materialgesetz. $y = \mathbf{C}^{-1}e$ sagt, was für eine Kraft (Fluß) y entsteht, bei gegebener Auslenkung e. $\mathbf{C}$ ist typischerweise diagonal und im allgemeinen nichtlinear, also $e = \mathbf{C}(y)$. Wir betrachten hier der Einfachheit halber den linearen Fall.

- Das Gesetz actio = reactio lautet (wir setzen $b = 0$)

  $$\langle y, e\rangle = -\langle y, \mathbf{D}x\rangle = -\langle \mathbf{D}^* y, x\rangle = -\langle f, x\rangle$$

  In Worten: Im Gleichgewicht ist die interne Arbeit, die zum Ausziehen der Federn aufgewendet werden muß, also $\langle y, e\rangle$, gleich der externen Arbeit, die auf die Massen angewendet wird, also $-\langle f, x\rangle$.

1.2.6 Zusammenfassung

Bei der Lösung des ursprünglichen Problems sind wir folgendermaßen logisch vorgegangen:

1. Aus physikalischen Überlegungen heraus haben wir ein unbedingtes Minimumproblem (eine mathematische Aufgabe) für eine potentielle Energie $P(x)$ formuliert.

2. Das mathematische Minimumproblem stellte sich als eindeutig lösbar heraus. Das Minimum konnte durch Lösung einer Gleichung ermittelt werden.

   Dabei entstand ein Operator mit der Struktur $\mathbf{A} = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}$.

3. Alle Zwischenschritte und Zwischenergebnisse konnten physikalisch interpretiert werden. Dabei entstanden kanonisch vier mathematische Räume $\mathcal{X}$, $\mathcal{Y}$, $\mathcal{X}^*$, $\mathcal{Y}^*$, die durch zwei Dualitäten verknüpft waren:

   $(\mathcal{X}, \mathcal{X}^*)$ und $(\mathcal{Y}, \mathcal{Y}^*)$ entsprach der Dualität zwischen Knoten und Kanten bei Graphen.

   $(\mathcal{X}, \mathcal{Y})$ und $(\mathcal{X}^*, \mathcal{Y}^*)$ entsprach der Dualität zwischen Banachräumen oder physikalisch zwischen intensiven und extensiven Größen.

4. Im Laufe der Lösung erkannten wir ein neues Naturgesetz $\mathbf{D}^*y = f$ (actio = reactio), was dem Prinzip der minimalen potentiellen Energie äquivalent ist.

5. Die Struktur des Problems stellte sich als universell heraus. Viele Aufgaben aus verschiedenen Anwendungsgebieten führen auf entsprechende Räume und Operatoren.

6. Das ursprüngliche Problem war in der $(\mathcal{X}, \mathcal{X}^*)$-Welt formuliert. Der Versuch, es in der $(\mathcal{Y}, \mathcal{Y}^*)$-Welt zu formulieren, führte auf ein bedingtes Minimumproblem für ein Funktional $Q(y)$.

7. Das bedingte Minimumproblem wurde mit der Lagrangemethode behandelt. Dazu wurde eine Funktion $L(x, y)$ eingeführt. Der Lagrange-Multiplikator stellte sich als das x aus der $(\mathcal{X}, \mathcal{X}^*)$-Welt heraus.

8. Die Funktion $L(x, y)$ erwies sich als Sattelfunktion.

9. Die Funktionen $Q(y)$ und $-P(x)$ erwiesen sich als primales und duales Problem zur Sattelfunktion $L(x, y)$.

   Interessant ist herbei, daß es aus Symmetriegründen sinnvoll erscheint, anstelle von $P(x)$ die Größe $-P(x)$ zu betrachten, also ein "Prinzip der maximalen potentiellen Energie". Das ist nicht prinzipiell, deckt sich aber mit anderen "Vorzeichenfehlern" in der Mathematik. So läuft die Methode des steilsten Abstieges (ein Schreiten ins Minimum) entgegen der Richtung des Gradienten, der "nach oben" zeigt. Zum Gradient würde eher eine Methode des steilsten Aufstieges passen.

1.2.7 Prinzipielle Bemerkungen zur Modellierung (under construction)

- Der Start der mathematischen Beschreibung eines physikalischen Problems ist die Festlegung geeigneter 4 Banachräume.

- Wir überspringen alle technischen Schwierigkeiten wie Beweise von Regularitätsaussagen u.ä. und nehmen im Gegenteil die besten mathematischen Eigenschaften an, die wenigstens in einfachen Fällen gerechtfertigt sind. Das sind z.B. endlichdimensionale Fälle, lineare Materialzusammenhänge, ...
- Anschließend versuchen wir erforderlich Regularitätsaussagen wegzudiskutieren. Läßt sich durch Umformen der Lösung geringere Regularitätsvoraussetzungen erreichen?
- Am Ende versuchen wir die Regularitätsaussagen, die für unser spezielles Problem erfordelich sind, zu beweisen.
-
- Spezialfälle, die das Problem prinzipiell einschränken, sollten von Anfang an vermieden werden. Solche Spezialfälle sind z.B. quadratische oder sogar invertierbare Operatoren **D** oder kommutierenden Operatoren.
- Welche physikalischen Größen zu $\mathcal{X}$ (intensive Größen) und welche zu $\mathcal{X}^*$ (extensive Größen) gehören, sieht man im allgeinen nur im unendlich dimensionalen Fall. Es gibt aber ein paar Faustregeln. Sind die Größen aus physikalischen Gründen positiv, oder ist Additivität eine typische Eigenschaft, gehören sie eher zu $\mathcal{X}^*$.
-
-

1.3 Zusammenhänge mit anderen mathematischen Problemen

Der gefundene Zusammenhang zwischen zwei Extremal- und einem Sattelproblem ist für viele gut bekannte Aufgaben in der Mathematik typisch. Wir betrachten hier ein paar ausgewählte derartige Aufgaben.

1.3.1 Der Satz des Pythagoras

Ein typisches Hilfsmittel im Hilbertraum ist die Orthogonale Zerlegung (siehe 2.2.3 auf Seite 34).
Es sei eine orthogonale Zerlegung des Raumes $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2$ in die orthogonale Summe zweier Unterräume gegeben. Dann existiert ein Projektor $\mathbf{P} : \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, d.h. ein Operator $\mathbf{P}$ mit $\mathbf{P}^2 = \mathbf{P}$ und $\mathbf{P}^\star = \mathbf{P}$ derart, daß jedes Element $h \in \mathcal{H}$ in die orthogonale Summe zweier Projektionen

$$h = h_1 + h_2,\ h_1 = \mathbf{P}h,\ h_1 = (\mathbf{I} - \mathbf{P})h$$

zerlegt wird.
Darüber hinaus erzeugt (weitgehend) jeder Operator $\mathbf{G} : \mathcal{H} \longrightarrow \mathcal{H}$ eine Zerlegung in $\mathcal{H} = R(\mathbf{G}) \oplus K(\mathbf{G}^\star)$, wobei R das Bild und K der Kern ist. Es gilt der **Satz des Pythagoras:**

$$\|h\|^2_{\mathcal{H}} = \text{dist}\ ^2(h, R(\mathbf{G})) + \text{dist}\ ^2(h, K(\mathbf{G}^\star))\ .$$

Hierbei ist der entsprechende Projektor auf $R(\mathbf{G})$ gegeben durch $\mathbf{P} = \mathbf{G}(\mathbf{G}^\star\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^\star$.
Wir wollen untersuchen, ob wir ähnliche Strukturen in unser physikalischen Aufgabe wiederfinden. Dazu betrachten wir den Fall $f = 0$ (der allgemeinen Fall ist nur eine affine Verschiebung). In unserem Fall haben wir es mit 4 Banachräumen zu tun, von denen wir $\mathcal{X}$ und $\mathcal{Y}$ in geeignete Hilberträume legen können (siehe 2.2.4 auf Seite 34). Die Frage ist, welche Operatoren $\mathbf{Q}_\mathcal{X}$ und $\mathbf{Q}_\mathcal{Y}$ dazu die geeigneten sind.

Unser Punkt (x_0, y_0) ist dann Lösung des Gleichungssystems

$$\begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{D}^* & \mathbf{O} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y_0 \\ x_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} b \\ 0 \end{pmatrix}$$

$$\begin{tikzcd}
x \in \mathcal{X} \arrow[rrr, "\mathbf{A} = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}", "\mathbf{Q}_\mathcal{X}"'] \arrow[ddd, "\mathbf{D}"'] & & & f \in \mathcal{X}^* \\
& \hookrightarrow \mathcal{H}_\mathcal{X} \arrow[dr, "\mathbf{G}"', shift right] & & \\
& & \mathcal{H}_\mathcal{Y} \hookleftarrow \arrow[ul, "\mathbf{G}^\star"', shift right] & \\
e, b \in \mathcal{Y}^* & & & y \in \mathcal{Y} \arrow[lll, "\mathbf{C}"', "\mathbf{Q}_\mathcal{Y}"] \arrow[uuu, "\mathbf{D}^*"']
\end{tikzcd}$$

Das ist äquivalent zu den Gleichungen

$$\mathbf{C}y_0 + \mathbf{D}x_0 = b \tag{5}$$

$$\mathbf{D}^* y_0 = 0 \tag{6}$$

Damit erhalten wir

$$x_0 = (\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b$$

Wir suchen als erstes einen geeigneten Projektor

$$\mathbf{P}_\mathcal{X} : \mathcal{H}_\mathcal{X} \to \mathcal{H}_\mathcal{X}$$

als Erweiterung eines Operators

$$\mathbf{P}_\mathcal{X} : \mathcal{X} \to \mathcal{X}$$

Ausgehend von unserer Raum- und Operatorkonstellation ist der Operator

$$\mathbf{P}_\mathcal{X} = \mathbf{A}^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}$$

der einzige kanonische Operator $\mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{X}$. Aber offensichtlich ist $\mathbf{P}_\mathcal{X} = \mathbf{I}$ die Identität. Sie ist in jedem Hilbertraum ein orthogonaler Projektor, d.h. die Gleichung (siehe Gleichung (7)) $\mathbf{Q}_\mathcal{X}\mathbf{I} = \mathbf{I}^*\mathbf{Q}_\mathcal{X}$ ($\mathbf{I}^*$ ist die Identität in $\mathcal{X}^*$) ist für jeden Operator $\mathbf{Q}_\mathcal{X}$ erfüllt.
Wir suchen jetzt einen geeigneten Projektor

$$\mathbf{P}_\mathcal{Y} : \mathcal{H}_\mathcal{Y} \to \mathcal{H}_\mathcal{Y}$$

als Erweiterung eines Operators

$$\mathbf{P}_\mathcal{Y} : \mathcal{Y} \to \mathcal{Y}$$

Ausgehend von unserer Raum- und Operatorkonstellation ist der Operator

$$\mathbf{P}_\mathcal{Y} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{D}^*$$

der einzige kanonische Operator $\mathcal{X} \to \mathcal{X}$. Es gilt

$$\mathbf{P}_\mathcal{Y}^2 = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})^{-1}(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})^{-1}\mathbf{D}^* = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})^{-1}\mathbf{D}^* = \mathbf{P}_\mathcal{Y}$$

Um Orthogonalität, d.h., $\mathbf{P}_\mathcal{Y}^\star = \mathbf{P}_\mathcal{Y}$ zu testen, müssen wir einen geeigneten $\mathbf{Q}_\mathcal{Y}$ wählen. So einen, daß die Gleichung (7), also $\mathbf{Q}_\mathcal{Y}\mathbf{P}_\mathcal{Y} = \mathbf{P}_\mathcal{Y}^*\mathbf{Q}_\mathcal{Y}$ erfüllt ist. $\mathbf{P}_\mathcal{Y}$ und $\mathbf{P}_\mathcal{Y}^*$ eingesetzt, bedeutet das

$$\mathbf{Q}_\mathcal{Y}\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{D}^* = \mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{Q}_\mathcal{Y}$$

Diese Gleichung ist offenbar für $\mathbf{Q}_\mathcal{Y} = \mathbf{C}$ erfüllt. D.h., $\mathbf{P}_\mathcal{Y}$ ist ein orthogonaler Projektor in $L_2(\mathbf{C})$. Als nächstes müßte man untersuchen, für welchen Operator $\mathbf{G}$ dieser Projektor die Raumzerlegung $\mathcal{H} = R(\mathbf{G}) \oplus K(\mathbf{G}^\star)$ erzeugt. Dazu müßte die Operatorgleichung

$$\mathbf{P}_\mathcal{Y} = \mathbf{G}(\mathbf{G}^\star\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^\star$$

bezüglich des Operators $\mathbf{G}$ gelöst werden. Das ist nicht so einfach, zumal die Darstellung von $\mathbf{G}^\star$ Operatoren $\mathbf{Q}_\mathcal{X}$ und $\mathbf{Q}_\mathcal{Y}$ enthält, von denen wir $\mathbf{Q}_\mathcal{X}$ nicht kennen (bis jetzt ist er beliebig). Wir gehen deshalb einen anderen Weg: Wir untersuchen die Lösung unserer physikalischen Aufgabe auf eine mögliche Zerlegung von $\mathcal{H}_\mathcal{Y}$ (also $\mathcal{Y}$) in der Hoffung, daß am Ende alles zusammenpaßt. Gleichung (5) ist (nach Multiplikation mit $\mathbf{C}^{-1}$ von links) eine Summe von Vektoren in $\mathcal{Y}$:

$$\mathbf{C}^{-1}b = y_0 + \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x_0$$

Hierbei liegt wegen Gleichung (6) y_0 in Kern von $\mathbf{D}^*$ und $\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x_0$ liegt im Bild von $\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}$. Wir setzen deshalb

$$\mathbf{G} = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D} : \mathcal{X} \to \mathcal{Y}$$

Für seinen adjungierten (als Operator zwischen Hilberträumen $\mathcal{H}_\mathcal{X} \longrightarrow \mathcal{H}_\mathcal{Y}$) erhalten wir nach Gleichung (8)

$$\mathbf{G}^\star = \mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{G}^*\mathbf{Q}_\mathcal{Y} = \mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{C} = \mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^*$$

Der Operator $\mathbf{Q}_\mathcal{X}$ ist nach wie vor beliebig, denn $K(\mathbf{D}^*) = K(\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^*)$ falls $\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}$ existiert und stetig ist.
Tatsächlich ist

$$\begin{aligned}\mathbf{P}_\mathcal{Y} &\stackrel{?}{=} \mathbf{G}(\mathbf{G}^\star\mathbf{G})^{-1}\mathbf{G}^\star = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}(\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})^{-1}\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^* = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}(\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{A})^{-1}\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^* = \\ &= \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{Q}_\mathcal{X}\mathbf{Q}_\mathcal{X}^{-1}\mathbf{D}^* = \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{A}^{-1}\mathbf{D}^* \stackrel{!}{=} \mathbf{P}_\mathcal{Y}\end{aligned}$$

(Das Glück des Tüchtigen!)
Wir testen den Satz des Pythagoras. Dazu definieren wir die Norm in $\mathcal{H} = L_2(\mathbf{C})$ als $\|h\|^2 = \frac{1}{2}\langle h, \mathbf{C}h\rangle$. Wir erhalten

$$\begin{aligned}\operatorname{dist}^2(h, K(\mathbf{D}^*)) &= \min_{y:\mathbf{D}^*y=0} \|y-h\|^2 = \frac{1}{2}\min_{y:\mathbf{D}^*y=0}\langle y-h, \mathbf{C}(y-h)\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\min_{y:\mathbf{D}^*y=0}(\langle y, \mathbf{C}y\rangle - \langle y, \mathbf{C}h\rangle) + \|h\|^2 = Q(y_0) + \|h\|^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\operatorname{dist}^2(h, R(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})) &= \min_{z\in R(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})} \|z-h\|^2 = \frac{1}{2}\min_{z\in R(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})}\langle z-h, \mathbf{C}(z-h)\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\min_{x\in\mathcal{X}}\langle \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x - h, \mathbf{C}(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x - h)\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\min_{x\in\mathcal{X}}\langle \mathbf{D}x - \mathbf{C}^{-1}h, \mathbf{C}(\mathbf{D}x - \mathbf{C}^{-1}h)\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\min_{x\in\mathcal{X}}\langle \mathbf{D}x - b, \mathbf{C}(\mathbf{D}x - b)\rangle = P(x_0)\end{aligned}$$

Wir haben also

$$\operatorname{dist}^2(h, K(\mathbf{D}^*)) + \operatorname{dist}^2(h, R(\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})) = Q(y_0) + \|h\|^2 + P(x_0) = \|h\|^2$$

weil $Q(y_0) + P(x_0) = 0$ (siehe (4)). Damit ist der Satz des Pythagoras bewiesen.
Berücksichtigt man (3), dann kann man die letzte Gleichung auch als

$$\min_y \max_x L(x,y) - \max_x \min_y L(x,y) = \operatorname{dist}^2(h, \mathcal{H}_1) + \operatorname{dist}^2(h, \mathcal{H}_2) - \|h\|^2$$

schreiben, was man als "Dualitätsdefekt = Orthogonalitätsdefekt" interpretieren könnte.

1.3.2 Die Methode der kleinsten Quadrate

Eine typische Aufgabe in der Physik ist es, innere Parameter x eines Systems durch Messungen zu bestimmen. Hat man es mit realen Meßwerten oder Beobachtungsergebnissen zu tun, so liegen die nur mit einer gewissen Genauigkeit vor. Wir nehmen an, daß wir einen Größe $x \in \mathcal{X} = \mathbb{R}_n$ durch verschiedene indirekte Messungen bestimmen wollen, in dem wir auf x verschiedene Funktionale $a_i \in \mathcal{X}^*$ anwenden (Meßprozeß). Wir erhalten die Größen $h_i = \langle x, a_i \rangle$, die wir mit Meßwerten b_i identifizieren. Wenn die a_i linear unabhängig sind, reichen theoretisch n Messungen aus um x zu bestimmen. Wir müssen das Gleichungssystem $b_i = \langle x, a_i \rangle$, $i = 1, ..., n$ lösen. Da aber normalerweise $b_i \neq h_i$ gilt, liefert das System eine falsch Lösung für x. Eine Möglichkeit, den Fehler zu verringern ist, mehr als n Messungen durchzuführen. Dann ist das System überbestimmt und man kann nicht mehr erwarten, daß es eine Lösung hat. Ist z.B. $n = 2$ und hat man 3 Messungen, dann entspricht diese Aufgabe dem Finden eines Schnittpunktes von drei Geraden auf der Ebene, wobei sich die Geraden nicht in einem Punkt sondern in drei Punkten schneiden. Als "Schnittpunkt" der drei Geraden könnte man dann einen Punkt definieren, der den drei tatsächlichen Schnittpunkten in einem gewissen Sinne – also in einer vorgegebenen Metrik – am nächsten liegt. Das ist ein typisches Minimumproblem.

Diese Methode heißt "Methode der kleinsten Quadrate" und wurde von Gauß entwickelt und benutzt um die Bahn des Asteroiden Ceres vorherzusagen, den die Astronomen aus den Augen verloren hatten. An dieser prestrigeträchtigen Vorhersage arbeiten damals viele Wisenschaftler. Aber nur Gauß gelang es die Position richtig vorherzusagen, woraufhin der Asteroid tatsächlich wieder aufgefunden wurde. Das machte Gauß auch über den engen Kreis der Mathematiker, die seine Werke lasen und verstanden, hinaus berühmt. Der Name "Methode der kleinsten Quadrate" stammt von Legendre, der die Methode ebenfalls entwickelt hatte.

Die Rolle der Metrik ist hier folgende: Man kann jede einzelne Gleichung mit einem Faktor $c_i > 0$ wichten. Das beschreibt soviel wie die Sicherheit der Messung aus der diese Gleichung entstanden ist. Sind alle Messungen vergleichbar, sind die $c_i = 1$.

Wir betrachten einen Operator $\mathbf{C}^{-1} : \mathcal{Y} \to \mathcal{Y}^*$ (das ist der Diagonaloperator, gebildet aus den c_i) und den entsprechenden $L_2(\mathbf{C}^{-1})$ dazu. Die Funktionale bilden die Matrix $\mathbf{D}$. Gesucht ist also eine "Lösung" der Gleichung $\mathbf{D}x = b$. Dazu betrachten wir in $L_2(\mathbf{C}^{-1})$ ein Minimumproblem.

$$\begin{aligned}
\inf_{x\in\mathcal{X}} \|\mathbf{D}x - b\|^2_{L_2(\mathbf{C}^{-1})} &= \inf_{x\in\mathcal{X}} \langle \mathbf{D}x - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{D}x - b)\rangle = \\
&= \inf_{x\in\mathcal{X}} \Big(\langle \mathbf{D}x, \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x\rangle - \langle b, \mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x\rangle - \langle \mathbf{D}x, \mathbf{C}^{-1}b\rangle + \langle b, \mathbf{C}^{-1}b\rangle \Big) = \\
&= 2\inf_{x\in\mathcal{X}} \Big(\frac{1}{2}\langle x, \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x\rangle - \langle x, \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b\rangle \Big) + \langle b, \mathbf{C}^{-1}b\rangle
\end{aligned}$$

Das ist exakt das eben betrachtete Minimumproblem für den Spezialfall $f = 0$.

Wir wissen, daß wir anstelle dieses Problems auch ein Minimumproblem für $Q(y)$ lösen können wegen

$$\begin{aligned}
\min_x P(x) &= -\min_y Q(y) = -\min_{\mathbf{D}^*y=0} (\langle y, \mathbf{C}y\rangle - 2\langle y, b\rangle) = \\
&= -\min_{\mathbf{D}^*y=0} \big(\langle \mathbf{C}y - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{C}y - b)\rangle - \langle b, \mathbf{C}^{-1}b\rangle \big) = \\
&= -\min_{\mathbf{D}^*y=0} \big(\langle \mathbf{C}y - b, \mathbf{C}^{-1}(\mathbf{C}y - b)\rangle \big) + \langle b, \mathbf{C}^{-1}b\rangle
\end{aligned}$$

Es gilt also

$$\inf_{x\in\mathcal{X}} \|\mathbf{D}x - b\|^2_{L_2(\mathbf{C}^{-1})} + \inf_{y\in K(\mathbf{D}^*)} \|\mathbf{C}y - b\|^2_{L_2(\mathbf{C}^{-1})} = \|b\|^2_{L_2(\mathbf{C}^{-1})}$$

(Der Satz des Pythagoras mit allgemeiner Metrik)
Das Minimumproblem ist äquivalent zur Gleichung

$$\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}x = \mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b, \quad \text{in } \mathcal{X}^*$$

Formal ist die Lösung

$$x = \left(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\right)^{-1}\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}b$$

$(\mathbf{D}^*\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D})^{-1}$ wird Pseudoinverse genannt.

Numerisch kann man die kleinste-Elemente-Gleichung mit Singulärwerten lösen. Das sind Verallgemeinerungen von Eigenwerten. Eigenwerte haben eigentlich nur für Operatoren Sinn, die den Raum auf sich selbst abbilden, also etwa für Opertoren im Hilbertraum. Das Analogon zu Eigenwerte für Operatoren zwischen verschiedenen Räumen sind Singulärwerte.

1.3.3 Lineare Programmierung (Optimierung)

Wir betrachten die Grenzwerte $\mathbf{B} \to \mathbf{O}$ und $\mathbf{C} \to \mathbf{O}$. In diesem Fall kann man die Lagrangefunktion auf verschiedene Weisen schreiben:

$$\begin{aligned} L(x,y) &= -\langle y,b\rangle + \langle y,\mathbf{D}x\rangle - \langle x,f\rangle = \\ &= -\langle y,b\rangle + \langle x,\mathbf{D}^*y - f\rangle = \\ &= -\langle x,f\rangle + \langle y,\mathbf{D}x - b\rangle \end{aligned}$$

Die letzten beiden Zeilen sind die Lagrangefunktionen für bedingte Extremalprobleme, nämlich $\min_{y:\mathbf{D}^*y=f}(-\langle y,b\rangle)$ und $\max_{x:\mathbf{D}x=b}(-\langle x,f\rangle)$. Das sind bekannte dualen Aufgaben aus der linearen Programmierung oder linearen Optimierung. Die Gleicheit beider Aufgaben

$$\max_{y:\mathbf{D}^*y=f}\langle y,b\rangle = \min_{x:\mathbf{D}x=b}\langle x,f\rangle$$

ist ein wichtiger Trick um anstelle einer schweren eine andere, leichtere Aufgabe mit selber Lösung zu betrachten.
Eine Methode zum numerischen Lösen solcher Aufgaben ist die Simplexmethode. Die Lösung wird auf dem Rand des Gebietes angenommen. Deshalb kann man sie nicht durch Nullsetzen der Ableitungen finden.

1.4 Allgemeine quadratische Sattelpunktprobleme

Beide äquivalente Probleme (primales und duales) treten hier asymmetrisch auf. Das sieht man u.a. daran, daß die Betrachtung eines Sattelproblems für eine charakteristische Funktion anstelle eines bedingten Minimumproblems sehr künstlich erscheint. Der Grund für die Asymmetrie liegt daran, daß $L(x,y)$ in x quadratisch, in y aber nur linear ist. Der allgemeine Fall ist

$$\begin{aligned} L(x,y) &= \frac{1}{2}\langle y,\mathbf{C}y\rangle + \langle y,\mathbf{D}x\rangle - \frac{1}{2}\langle x,\mathbf{B}x\rangle - \langle x,f\rangle - \langle y,b\rangle = \\ &= \frac{1}{2}\left\langle \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{D}^* & -\mathbf{B} \end{pmatrix}\begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}\right\rangle - \left\langle \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} b \\ f \end{pmatrix}\right\rangle \end{aligned}$$

Hier wurde ein neuer Operator $\mathbf{B} : \mathcal{X} \to \mathcal{X}^*$ eingeführt, von dem wir annehmen, daß er positiv ist $\mathbf{B} > 0$. Der eben untersuchte Fall bedeutet $\mathbf{B} = \mathbf{O}$ und beschrieb die starre Nebenbedingungen

$\mathbf{D}^*y = f$. Den Fall $\mathbf{B} > 0$ kann man sich als "elastische" Nebenbedingungen vorstellen, was der Realität näherkommt als starre Nebenbedingungen. Intuitiv versteht man, daß Zwangsbedingungen nur Grenzwerte sind. Eigentlich sind es Freiheitsgrade mit ganz geringem Wertebereich. Ist dieser Wertebereich nicht exakt ein Unterraum, wie bei der Bedingung $\mathbf{D}^*y = f$, dann muß man ihn eigentlich wie einen echten Freiheitsgrad behandeln, wie einen, bei dem das entsprechende $\mathbf{B}$ fast 0 ist. Das heißt, die tatsächliche Zahl der Freiheitsgrade ist $n + m$. Nur im Extremfall $\mathbf{B} = \mathbf{O}$ könnte man auf die Idee kommen, daß die Zahl der Freiheitsgrade $n - m$ ist. Physikalisch kann man sich vorstellen, daß in x, also in den Massen ein Puffer vorhanden ist, der einen Teil der Kraft/Energie speichern kann. Analoges kann man sich für die anderen Aufgaben vorstellen.

Wir berechnen den Sattelpunkt durch Bilden der Ableitung bezüglich x und y. Das ergibt das System

$$\begin{pmatrix} \nabla_y L \\ \nabla_x L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{D}^* & -\mathbf{B} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} y \\ x \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} b \\ f \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

oder

$$\begin{aligned} \mathbf{C}y + \mathbf{D}x &= b \\ \mathbf{D}^*y - \mathbf{B}x &= f \end{aligned}$$