Uvod v numerične metode

Ruslan Urazbakhtin

23. februar 2026

Kazalo

1 Uvod

Numerična metoda je postopek, ki iz danih numeričnih podatkov s končnim številom elementarnih operacij: $+, -, /, *, \sqrt{}$, izračuna numerični rezultat.

Numerična metoda je *direktna*, če s točnim računanjem izračuna točno rešitev s končnim številom osnovnih operacij. Druga možnost so *iterativne metode*, kjer je rešitev limita nekega konvergentnega zaporedja.

1.1 Absolutna in relativna napaka

Definicija 1.1. *Napaka približka* je razlika med približkom $\hat{x}$ in točno vrednostjo x.

- *Absolutna napaka* je $d_a = \hat{x} - x$.
- *Relativna napaka* je $d_r = \frac{\hat{x}-x}{x}$.

1.2 Predstavljiva števila

V računalniku so *predstavljiva* števila zapisana v premični piki kot

$$x = \pm m \cdot b^e,$$

kjer je $m = 0.c_1c_2 \dots c_t$ *mantisa* in

- b: *baza* (običajno 2 ali 10),
- t: *dolžina mantise*,
- e: *eksponent* v mejah $L \leq e \leq U$,
- c_i: *števke* v mejah od 0 do $b-1$.

Če je $c_1 \neq 0$, potem je število *normalizirano*, sicer pa *subnormalizirano*. Zahtevamo, da lahko $c_1 = 0$, samo če $e = L$. Množico vseh predstavljivih števil označimo s $P(b, t, L, U)$.

Zgled 1.2. Naj bo $x \in P(b, t, L, U)$. Tedaj

$$x = \pm(c_1 b^{-1} + c_2 b^{-2} + \cdots + c_t b^{-t}) \cdot b^e.$$

Na primer

$$0.1101_2 \cdot 2^2 = (2^{-1} + 2^{-2} + 2^{-4}) \cdot 2^2 = 3.25.$$

Standard IEEE

- *single:* $P(2, 24, -125, 128)$.
- *double:* $P(2, 53, -1021, 1023)$.

Zaokrožanje

Naj bo x pozitivno število z neskončnim zapisom

$$x = 0.d_1d_2 \dots d_t d_{t+1} \dots \cdot b^e.$$

Kandidata za predstavljiv približek, ki ga označimo s $\mathrm{fl}(x)$, sta najbližji predstavljivi števili z leve in z desne

$$\begin{aligned} x_- &= 0.d_1d_2 \dots d_t \cdot b^e, \\ x_+ &= (0.d_1d_2 \dots d_t + b^{-t}) \cdot b^e. \end{aligned}$$

Pri standardu IEEE uporabimo *zaokrožanje* in za $\mathrm{fl}(x)$ izberemo predstavljivo število, ki je najbližje x. Če pa x ravno na sredine, vzamemo tisto število, ki ima sodo zadnjo števko.

Osnovna zaokrožitvena napaka

Izrek 1.3. *Če za število x velja, da $|x|$ leži na intervalu med najmanjšim in največjim pozitivnim predstavljivim normaliziranim številom, potem velja*

$$\frac{|\,\mathrm{fl}(x) - x|}{|x|} \leq u,$$

kjer je $u = \frac{1}{2}b^{1-t}$ osnovna zaokrožitvena napaka.

Dokaz. Zapišemo število x v obliki

$$x = 0.d_1 \dots d_t + 0.0 \dots 0 d_{t+1} d_{t+2} \dots$$

in število $\mathrm{fl}(x)$ v premični piki. Ocenimo napako pri zaokroževanju navzdol in navzgor. □

Velja

$$\mathrm{fl}(x) = x(1 + \delta) \text{ za } |\delta| \leq u$$

- single: $u = 2^{-24} \approx 6 \cdot 10^{-8}$,
- double: $u = 2^{-53} \approx 1 \cdot 10^{-16}$.

Računanje po standardu IEEE

Velja *pravilo korektnega zaokroževanja*: Če na dveh predstavljivih številih izvedemo osnovno računsko operacijo in je rezultat spet v intervalu predstavljivih števil, dobimo isto, kot če bi zaokrožili točen rezultat.

Če sta x, y predstavljivi števili in je rezultat znotraj normaliziranih predstavljivih števil, potem velja:

- $\mathrm{fl}(x \oplus y) = (x \oplus y)(1 + \delta), \ |\delta| \leq u$,
- $\mathrm{fl}(\sqrt{x}) = \sqrt{x}(1 + \delta), \ |\delta| \leq u$.

Izjeme so:

- če pride do *prekoračitve* (overflow) obsega predstavljivih števil, dobimo $\pm\infty$,
- če pride do *podkoračitve* (underflow) obsega predstavljivih števil, dobimo 0,
- če dopuščamo subnormalizirana števila in je $\mathrm{fl}(x \oplus y)$ subnormalizirano število, lahko $|\delta|$ naraste v najslabšem primeru do $\frac{1}{2}$.

1.3 Vrste napak pri numeričnem računanju

Imamo tri vrste napak:

- *Neodstranljiva napaka*: ker začetni podatki niso točni.
  - Namesto z x računamo s približkom $\overline{x}$ in zato namesto $y = f(x)$ izračunamo $\overline{y} = f(\overline{x})$. Neodstranljiva napaka je

$$D_n = y - \overline{y}.$$

  - Če je funkcija f odvedljiva v točki x, potem je

$$|D_n| \approx |f'(x)||x - \overline{x}|.$$

- *Napaka metode*: ker metoda s katero računamo, ni točna.
  - Namesto f računamo vrednost funkcije g, ki jo lahko izračunamo s končnim številom operacij. Namesto $\overline{y} = f(\overline{x})$ tako izračunamo $\widetilde{y} = g(\overline{x})$. Napaka metode je

$$D_m = \overline{y} - \widetilde{y}.$$

- *Zaokrožitvena napaka*: ker pri vseh vmesnih izračunih zaokrožujemo.
  - Pri računanju $\widetilde{y} = g(\overline{x})$ se pri vsaki računski operaciji pojavi zaokrožitvena napaka, tako da namesto $\widetilde{y}$ izračunamo $\hat{y}$. Zaokrožitvena napaka je

$$D_z = \widetilde{y} - \hat{y}.$$

Celotna napaka je

$$D = D_n + D_m + D_z.$$

Velja

$$|D| \leq |D_n| + |D_m| + |D_z|.$$

Najbolje je, kadar so vse tri napake približno enakega velikostnega razreda.

1.4 Občutljivost problema

Če se rezultat pri majhni spremembi argumentov (motnji oz. perturbaciji) ne spremeni veliko, je problem *neobčutljiv*, sicer pa je *občutljiv*. Občutljivost je povezana s samim problemom in neodvisna od numerične metode.

Stopnja občutljivosti

Občutljivost merimo s supremumom razmerja med spremembo rezultata in spremembo podatkov, ko gre sprememba podatkov proti 0.

Zgled 1.4. Naj bo $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ odvedljiva funkcija. Zanima nas razlika med $f(x)$ in $f(x + \delta x)$, kjer je δx majhna motnja.
Velja (diferencial)

$$|f(x + \delta x) - f(x)| \approx |f'(x)| \cdot |\delta x|,$$

torej je $|f'(x)|$ *absolutna občutljivost* f v točki x.
Za oceno relativne napake dobimo

$$\frac{|f(x + \delta x) - f(x)|}{|f(x)|} \approx \frac{|f'(x)| \cdot |x|}{|f(x)|} \cdot \frac{|\delta x|}{|x|},$$

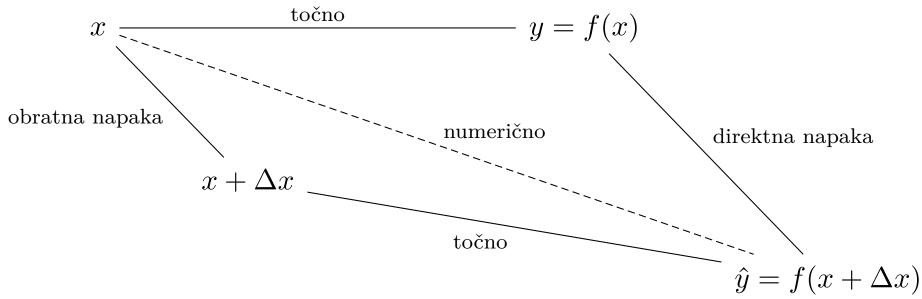
torej je $\dfrac{|f'(x)| \cdot |x|}{|f(x)|}$ *relativna občutljivost* f v točki x.

Zgled 1.5 (Wilkinson)**.** TODO

1.5 Stabilnost numerične metode

Stabilnost se navezuje na numerično metodo. Glavno orodje za preverjanje stabilnosti je *analiza zaokrožitvenih napak.*

Numerična metoda iz x namesto $y = f(x)$ izračuna $\hat{y}$.



Metoda je *natančna*, če je za vsak x direktna napaka majhna. Torej vedno dobimo bližnji odgovor.

Če za vsak x obstaja tak $\hat{x} = x + \Delta x$ blizu x (absolutno oz. relativno), da je $f(\hat{x}) = \hat{y}$, je metoda *obratno stabilna* (absolutno oz. relativno). Obratno stabilna metoda vedno vrne točen odgovor na bližnje vprašanje.

Povezava med občutljivostjo, direktno in obratno napako

Velja

$$|\text{direktna napaka}| \leq \text{občutljivost} \cdot |\text{obratna napaka}|$$

Torej, če je metoda obratno stabilna, je direktna napaka omejena s produktom občutljivosti in nekaj majhnega.

Če je za vsak x direktna napaka omejena s produktom občutljivosti in nekaj majhnega, je metoda *direktno stabilna.* Obratno stabilna metoda je tudi direktno stabilna, obratno pa ni nujno res.

Metoda je *stabilna*, če je obratno ali direktno stabilna.

1.6 Analiza zaokrožitvenih napak

TODO

2 Nelinearne enačbe

2.1 Uvod

Iščemo rešitve (ničle) enačbe $f(x) = 0$, kjer je $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ ali $f : \mathbb{C} \to \mathbb{C}$. Lahko imamo eno ničlo, več ničel, neskončno ničel ali nič ničel.

Naj bo f zvezno odvedljiva funkcija v okolici α in $f(\alpha) = 0$.

- Če je $f'(\alpha) \neq 0$, je α *enostavna ničla.*

  Opomba 2.1. Po izreku o inverzni preslikavi obstaja okolica U točke α, da v U razen α ni nobene druge ničle.

- Če je $f'(\alpha) = 0$, je α *večkratna ničla.*
  - Če je $f \in C^m$ v okolici α in $f'(\alpha) = \ldots = f^{(m-1)}(\alpha) = 0,\ f^{(m)}(\alpha) \neq 0$, je α *m-kratna ničla.*

Občutljivost ničel

Naj bo x približek za ničlo α in $|f(x)| \leq \varepsilon$. Naj bo α enostavna ničla funkcije $f \in C^1$. Vemo, da je $f'(\alpha) \neq 0$. Po Lagrangeovem izreku:

$$
\begin{aligned}
|f(x) - f(\alpha)| = |f'(c)||x - \alpha| &\approx |f'(\alpha)||x - \alpha| \\
\Rightarrow |x - \alpha| &\lesssim \frac{\varepsilon}{|f'(\alpha)|} \\
\Rightarrow \frac{1}{|f'(\alpha)|} &\text{ je občutljivost ničle } \alpha.
\end{aligned}
$$

Po drugi strani, vemo, da je občutljivost izračuna funkcije enaka absolutne vrednosti odvoda, tj.

$$\alpha = f^{-1}(0) \Rightarrow |(f^{-1})'(0)| = \frac{1}{|f'(\alpha)|}.$$

Naj bo zdaj α dvojna ničla, torej $f(\alpha) = f'(\alpha) = 0,\ f''(\alpha) \neq 0$. Tedaj

$$
\begin{aligned}
f(x) &= f(\alpha) + f'(\alpha)(x - \alpha) + \frac{f''(c)}{2}(x - \alpha)^2 \\
\Rightarrow |x - \alpha| &\lesssim \sqrt{\frac{2\varepsilon}{|f''(\alpha)|}} = O(\varepsilon^{1/2}).
\end{aligned}
$$

Torej potrebujemo manjši ε, da dobimo dobro aproksimacijo. Podobno m-kratno ničlo lahko izračunamo le z natančnostjo $O(\varepsilon^{1/m})$.

2.2 Bisekcija

Izrek 2.2 (o bisekciji)**.** *Naj bo $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ zvezna in $f(a) \cdot f(b) < 0$. Tedaj obstaja $c \in (a, b)$, da je $f(c) = 0$.*

Algorithm 1: Bisekcija

Data: $a, b \in \mathbb{R},\ f \in C[a,b],\ \varepsilon \in (0,\infty)$
Result: $c \in (a,b),$ da je $f(c) \approx 0$

```
e ← b − a
while e > ε                                  /* b − a > ε */
 do
    e ← e/2
    c ← a + e
    if sgn(f(a)) = sgn(f(c)) then
        a ← c
    else
        b ← c
    end
end
```

Opomba 2.3. TODO

- Ne preverjamo, če je $f(c) = 0$, saj je to zelo redek dogodek.
- Uporabljamo $e = e/2$ namesto $c = (a+b)/2$, da smo gotovi, da se postopek ustavi.

Opomba 2.4.

- S bisekcijo ne moremo računati ničel sode večkratnosti ali kompleksnih ničel.
- Bisekcijo lahko uporabimo za računanje polov lihe stopnje.

Analiza števila korakov. Program se ustavi, ko

$$(b-a) \cdot 2^{-k} < \varepsilon.$$

Sledi, da

$$k = \left\lceil \log_2 \left(\frac{b-a}{\epsilon} \right) \right\rceil.$$

Torej je število korakov odvisno le od ϵ in začetne širine intervala.

Opazimo, da se napaka v vsakem koraku razpolovi, kar je tipičen primer linearne konvergence.

2.3 Navadna iteracija

Iščemo rešitve enačbe $f(x) = 0$. Enačbo predelamo v ekvivalentno obliko $g(x) = x$, tj.

$$f(x) = 0 \ (x \text{ je ničla } f) \Leftrightarrow x = g(x) \ (x \text{ je negibna točka } g).$$

Zgled 2.5. Naj bo $f : D \subseteq \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ funkcija. Lahko definiramo

- $g(x) := f(x) - x$.
- $g(x) := x - c \cdot f(x),\ c \neq 0$.
- $g(x) := x - h(x) \cdot f(x),\ h(x) \neq 0$.

Postopek. Izberimo začetni približek x_0 in računamo

$$x_{r+1} = g(x_r),\ r = 0, 1, \dots$$

To je *navadna iteracija* in g je *iteracijska funkcija.*
Ob ustrezno izbrani iteracijske funkcije g in dobrem začetnem približku je $\lim_{r\to\infty} x_r = \alpha$, kjer je

$$\alpha = g(\alpha) \quad \text{oz.} \quad f(\alpha) = 0.$$

Da navadna iteracija deluje za ničlo α, mora biti g skrčitev na neki okolici α, tj.

$$|g(x) - g(y)| \leq m|x - y|,\ m < 1.$$

Izrek 2.6. *Naj bo $\alpha = g(\alpha)$ in naj bo α na $I = [\alpha - \delta, \alpha + \delta]$ za nek $\delta > 0$ zadošča Lipschitzovem pogoju, tj.*

$$|g(x) - g(y)| \leq m|x - y| \text{ za } 0 \leq m < 1 \text{ za vse } x, y \in I.$$

Tedaj za vsak $x_0 \in I$ zaporedje $x_{r+1} = g(x_r)$ za $r = 0, 1, \dots$ konvergira k α in velja:
1. $|x_r - \alpha| \leq m^r |x_o - \alpha|$;
2. $|x_{r+1} - \alpha| \leq \frac{m}{1-m} |x_{r+1} - x_r|$.

Dokaz. TODO □

Opomba 2.7. Ocena $|x_{r+1} - \alpha| \leq \frac{m}{1-m}|x_{r+1} - x_r|$ nam pove, kako daleč smo od negibne točke.

Posledica 2.8. *Naj bo $\alpha = g(\alpha)$. Naj bo g zvezno odvedljiva v okolici α in $|g'(\alpha)| < 1$. Tedaj obstaja $\delta > 0$, da za vsak $x_o \in I = [\alpha-\delta, \alpha+\delta]$ zaporedje $x_{r+1} = g(x_r)$ za $r = 0, 1, \dots$ konvergira k α.*

Dokaz. TODO □

Naj bo $\alpha = g(\alpha)$. Naj bo g zvezno odvedljiva v okolici α in $|g'(\alpha)| < 1$:
- Če je $|g'(\alpha)| < 1$, potem je α *privlačna* negibna točka.
- Če je $|g'(\alpha)| > 1$, potem je α *odbojna* negibna točka.

Definicija 2.9. Recimo, da je $\alpha = \lim_{r\to\infty} x_r$ in obstaja

$$\lim_{r\to\infty} \frac{|x_{r+1} - \alpha|}{|x_r - \alpha|^p} = c > 0.$$

Tedaj zaporedje x_r konvergira k α z *redom* p.
- Če je $p = 1$, konvergenca *linearna*,
- Če je $p = 2$, konvergenca *kvadratična*,
- Če je $p = 3$, konvergenca *kubična*,
- Če je $1 < p < 2$, konvergenca *superlinearna*,
- Če je $2 < p < 3$, konvergenca *superkvadratična*.

Izrek 2.10. *Naj bo $\alpha = g(\alpha)$. Naj bo g p-krat zvezno odvedljiva funkcija v okolici α in*

$$g'(\alpha) = \dots = g^{(p-1)}(\alpha) = 0 \text{ in } g^{(p)}(\alpha) \neq 0.$$

Tedaj je v bližini α red konvergence $x_{r+1} = g(x_r)$ enak p.
V primeru $p = 1$, mora veljati še, da je $|g'(\alpha)| < 1$.

Dokaz. TODO □

Praktičen način.

- Pri linearni konvergenci se število točnih decimalk povečuje linearno (ni nujno za celo število).
- Pri kvadratnični konvergenci se število točnih decimalk iz koraka v korak približno podvoji.

2.4 Tangentna metoda

Naj bo f dvakrat zvezna odvedljiva funkcija v okolici α in $f(\alpha) = 0$. Naj bo x_r približek za ničlo α. Iščemo popravek Δx_r, da bo $f(x_r + \Delta x_r) = 0$.

Ideja. Razvijemo $f(x_r + \Delta x_r)$ v Taylorjevo vrsto:

$$
\begin{aligned}
0 = f(x_r + \Delta x_r) &= f(x_r) + f'(x_r) \cdot \Delta x_r + \underbrace{\frac{f''(c_r)}{2} \cdot \Delta x_r^2}_{\text{zanemarimo}} \\
\Rightarrow \Delta x_r &\approx -\frac{f(x_r)}{f'(x_r)}.
\end{aligned}
$$

Za novi približek vzamemo

$$x_{r+1} = x_r - \frac{f(x_r)}{f'(x_r)}.$$

To je *tangentna metoda.*

Opomba 2.11. Tangentna metoda je poseben primer navadne iteracije za

$$g(x) = x - \frac{f(x)}{f'(x)}.$$

Geometrijska interpretacija

TODO

Analiza reda konvergence

TODO

Konvergenca tangentne metode

Definiramo z $e_r := x_r - \alpha$ napako i-tega približka. Naj bo $f \in C^2$ in α enostavna ničla. Tedaj

$$
\begin{aligned}
0 = f(\alpha) &= f(x_r) + f'(x_r)(\alpha - x_r) + \frac{f''(c_r)}{2}(\alpha - x_r)^2 \\
\Rightarrow 0 &= \frac{f(x_r)}{f'(x_r)} + \alpha - x_r + \frac{f''(c_r)}{2f'(x_r)}(\alpha - x_r)^2 \\
\Rightarrow e_{r+1} &= \frac{f''(c_r)}{2f'(x_r)} e_r^2.
\end{aligned}
$$

V bližini α torej velja:

$$e_{r+1} \approx Ce_r^2, \quad C = \frac{f''(\alpha)}{2f'(\alpha)}.$$

Torej za dvakrat zvezno odvedljivo funkcijo f imamo zagotovljeno lokalno konvergenco tangentne metode.

V določenih primerih imamo tudi globalno konvergenco.

Izrek 2.12. *Naj bo f na $I = [a, \infty)$ dvakrat zvezno odvedljiva funkcija, ki ima ničlo $\alpha \in I$. Naj bo f naraščajoča in konveksna. Tedaj je α edina ničla na I in za vsak $x_0 \in I$ tangentna metoda konvergira k α.*

Dokaz. TODO □

2.5 Metode brez računanja odvoda

Sekantna metoda

Namesto tangente uporabimo sekanto skozi $(x_r, f(x_r))$, $(x_{r-1}, f(x_{r-1}))$. To je ekvivalentno temu, da v tangentni metodi $f'(x_r)$ aproksimiramo z $\frac{f(x_r)-f(x_{r-1})}{x_r-x_{r-1}}$. Torej

$$x_{r+1} = x_r - \frac{f(x_r)(x_r - x_{r-1})}{f(x_r) - f(x_{r-1})}.$$

V vsakem koraku potrebujemo en nov izračun funkcije f, razen na začetku 2. Na začetku še potrebujemo dve začetni vrednosti x_0, x_1, ni pa kakšnih dodatnih omejitev, kot pri bisekciji.

Opomba 2.13. Pričakujemo, da se sekantna metoda obnaša podobno kot tangentna metoda.

Za sekantno metodo se da pokazati zvezo

$$e_{r+1} \approx Ce_r e_{r-1}.$$

Sekantna metoda ima red konvergence $p \approx 1.62$, če je α enostavna ničla in $f''(\alpha) \neq 0$.

Opomba 2.14. Sekantna metoda ni primer navadne iteracije, saj je x_{r+1} odvisen od dveh prejšnjih členov: x_r in x_{r-1}.

Mullerjeva metoda

Skozi točke $(x_r, f(x_r))$, $(x_{r-1}, f(x_{r-1}))$, $(x_{r-2}, f(x_{r-2}))$ potegnemo kvadratni polinom in za naslednji približek vzamemo tisto izmed njegovih dveh ničel, ki je bližja x_r.
Potrebujemo tri začetne približke x_0, x_1, x_2. V vsakem koraku moramo izračuni eno vrednost funkcije, razen na začetku tri.

Velja zveza

$$|e_{r+1}| \approx C \cdot |e_r| \cdot |e_{r-1}| \cdot |e_{r-2}|.$$

Mullerjeva metoda ima red konvergence $p \approx 1.84$.

Inverzna interpolacija

Zamenjamo vlogi x in y in čez točki $(f(x_r), x_r)$, $(f(x_{r-1}), x_{r-1})$, $(f(x_{r-2}), x_{r-2})$ napeljemo kvadratni polinom. Ta kvadratni polinom aproksimira inverzno funkcijo. Vzamemo

$$x_{r+1} = p(0).$$

Inverzna interpolacija ima red konvergence $p \approx 1.84$.

Kombinirane metode

Kombiniramo več metod in s tem zagotovimo robustnost, kot pri bisekciji, s hitrejšo konvergenco, kot npr. pri inverzni interpolaciji.

Imamo interval $[a, b]$, kjer je $f(a) \cdot f(b) < 0$. Naslednji potencialni približek c izračunamo npr. s sekantno metodo ali inverzno interpolacijo. Če je c izven intervala $[a, b]$ namesto tega izberemo $c = \frac{a+b}{2}$. Nadaljujemo podobno kot pri bisekciji.

Primer 2.15. Brantova metoda (fzero) kombinira bisekcijo, sekantno metodo in inverzno interpolacijo.

2.6 Ničle polinomov

Imamo polinom $p(x) = a_n x^n + a_{n-1} x^{n-1} + \cdots + a_1 x + a_0$, ki ima ničle $\alpha_1, \ldots \alpha_n$. Možnosti za izračun ničel so:

1. Ničle računamo eno po eno (ali dve po dve, če imamo konjugirane pare).
   Če je α_1 enostavna ničla, je

   $$p(x) = (x - \alpha_1) q(x), \quad \operatorname{st} q(x) = n - 1.$$

   Nadaljujemo z iskanjem ničel polinoma $q(x)$.

   Primer 2.16. Laguerreova metoda, Bairstow-Hitchcode.

2. Problem prevedemo na računanje lastnih vrednosti matrike

   $$C_p = \begin{bmatrix} 0 & 1 & & & \\ & 0 & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 0 & 1 \\ -\frac{a_n}{a_0} & -\frac{a_{n-1}}{a_0} & \cdots & -\frac{a_2}{a_0} & -\frac{a_1}{a_0} \end{bmatrix}$$

   C_p je spremljevalna matrika polinoma $p(x)$. Njen karakteristični polinom je s skalarjem pomnožen $p(x)$. Lastne vrednosti C_p so ničle $p(x)$.

   Primer 2.17. Funkcija `roots` v MatLab.

3. Metode, ki vzporedno računajo vse ničle polinoma.

   Primer 2.18. Ehrlich-Abertborva metoda, Durand-Kernerjeva metoda.

Primer 2.19 (Durand-Kernerjeva metoda)**.** Naj bo p polinom stopnje n z vodilnim koeficientom 1. Potem ima p ničle $\alpha_1, \ldots, \alpha_n$ in je $p(x) = (x - \alpha_1) \cdots (x - \alpha_n)$.

Naj bo $x_1, \ldots, x_n$ paroma različni približki za $\alpha_1, \ldots \alpha_n$. Iščemo popravke $\Delta x_1, \ldots, \Delta x_n$, da bodo $x_1 + \Delta x_1, \ldots, x_n + \Delta x_n$ točne ničle p. Tedaj

$$\begin{aligned} p(x) &= (x - (x_1 + \Delta x_1)) \cdots (x - (x_n + \Delta x_n)) \\ &= \prod_{j=1}^{n} (x - x_j) - \sum_{j=1}^{n} \Delta x_j \prod_{k=1, k \neq j}^{n} (x - x_k) \\ &\underbrace{+ \sum_{j,k=1, j<k}^{n} \Delta x_j \Delta x_i \prod_{l=1, l \neq j,k}^{n} (x - x_l) + \ldots}_{\text{zanemarimo}} \end{aligned}$$

Vstavimo $x = x_i$, dobimo

$$\begin{aligned} p(x_i) &= -\Delta x_i \prod_{k=1, k \neq i}^{n} (x_i - x_k) \\ \Rightarrow \Delta x_i &= -\frac{p(x_i)}{\prod_{k=1, k \neq i}^{n} (x_i - x_k)} \end{aligned}$$

Definiramo

$$\begin{aligned} x^{(0)} &= [x_1^{(0)}, \ldots, x_n^{(0)}] \\ \Rightarrow x_i^{(r+1)} &= x_i^{(r)} - \frac{p(x_i^{(r)})}{\prod_{k=1, k \neq i}^{n} (x_i^{(r)} - x_k^{(r)})}, \ r = 0, 1, \ldots, \quad i = 1, \ldots, n. \end{aligned}$$

3 Sistemi linearnih enačb

Naj bo $\mathbb{F} \in \{\mathbb{R}, \mathbb{C}\}$.

3.1 Uvod

Rešujemo sistem linearnih enačb

$$\begin{aligned} a_{11}x_1 + \cdots + a_{1n}x_n &= b_1 \\ &\vdots \\ a_{m1}x_1 + \cdots + a_{mn}x_n &= b_n, \end{aligned}$$

ki ga pišemo v obliki

$$Ax = b,$$

kjer

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & \dots & a_{1n} \\ \vdots & & \vdots \\ a_{m1} & \dots & a_{mn} \end{bmatrix}, \quad x = \begin{bmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{bmatrix}, \quad b = \begin{bmatrix} b_1 \\ \vdots \\ b_m \end{bmatrix}.$$

Označimo z a_i i-ti stolpec matrike A in z α_j^T j-to vrstico matrike A. Naj bo

$$e_i = [0 \ \dots \ 0 \ 1_i \ 0 \ \dots \ 0]^T.$$

Tedaj velja

$$Ae_i = a_i, \quad e_j^T A = \alpha_j^T \quad \text{in} \quad e_i^T A e_k = a_{ik}.$$

Naj bo $x, y \in \mathbb{F}^n$. Standardni skalarni produkt je

$$\langle x, y \rangle = \sum_{i=1}^{n} x_i \overline{y_i} = y^H x,$$

kjer je

$$A^H = \overline{A^T}$$

hermitsko transponiranje.

Če imamo sistem $y = Ax,\ A \in \mathbb{R}^{n \times n},\ x, y \in \mathbb{R}^n$, si to lahko predstavljamo:

1. Po elementih, tj.
$$y_i = \sum_{k=1}^{n} a_{ik} x_k = \alpha_i^T X.$$
2. Kot linearno kombinacijo stolpcev, tj.
$$y = \sum_{i=1}^{n} x_i a_i \Rightarrow e_i^T y = \sum_{i=1}^{n} x_k e_i^T a_i.$$

Če imamo produkt $C = A \cdot B$, kjer so $A, B, C \in \mathbb{R}^n$, si to lahko predstavljamo:

1. Po elementih, tj.
$$c_{ik} = \sum_{l=1}^{n} a_{il} b_{lk} = \alpha_i^T b_k.$$
2. Po stolpcih, tj.
$$A \cdot [b_1 \ \dots \ b_n] = [A \cdot b_1 \ \dots \ A \cdot b_n] \Rightarrow c_i = A \cdot b_i.$$
3. Po vrsticah, tj.
$$\begin{bmatrix} \alpha_1^T \\ \vdots \\ \alpha_n^T \end{bmatrix} \cdot B = \begin{bmatrix} \alpha_1^T \cdot B \\ \vdots \\ \alpha_n^T \cdot B \end{bmatrix} \Rightarrow \gamma_i^T = \alpha_i^T \cdot B.$$
4. Kot vsoto n matrik ranga 1 (diade), tj.
$$C = \sum_{l=1}^{n} a_l \beta_l^T.$$
Vemo, da če $x, y \in \mathbb{R}^n$, $x, y \neq 0$, potem xy^T matrika ranga 1.

Spomnimo se nekaj osnovnih definicij in trditev. Naj bo $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$.

Trditev 3.1. *Naj bo $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$. NTSE:*

1. $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$ *je* nesingularna.
2. $\exists A^{-1} \,.\, A \cdot A^{-1} = A^{-1} \cdot A = I.$
3. $\det A \neq 0.$
4. $\mathit{rang}\, A = n.$
5. $\ker A = \{0\}.$
6. *Vse lastne vrednosti so neničelne.*

Definicija 3.2. Naj bo $A \in \mathbb{F}^{n \times n}$.

- $\lambda \in \mathbb{F}$ je *lastna vrednost* matrike A, če
$$\exists x \in \mathbb{F}^n \setminus \{0\} \,.\, Ax = \lambda x.$$
- Matrika A je *simetrična*, če
$$A^T = A,$$
hermitska, če
$$A^H = A.$$
- Matrika A je *simetrična pozitivno definitna*, če
$$A = A^T \quad \text{in} \quad \forall x \in \mathbb{F}^n \setminus \{0\} \,.\, x^T A x > 0,$$
simetrična pozitivno semidefinitna, če
$$A = A^T \quad \text{in} \quad \forall x \in \mathbb{F}^n \setminus \{0\} \,.\, x^T A x \geq 0,$$
hermitska pozitivno semidefinitna, če
$$A = A^H \quad \text{in} \quad \forall x \in \mathbb{F}^n \setminus \{0\} \,.\, x^H A x > 0,$$
hermitska pozitivno semidefinitna, če
$$A = A^H \quad \text{in} \quad \forall x \in \mathbb{F}^n \setminus \{0\} \,.\, x^H A x \geq 0,$$

3.2 Vektorske in matrične norme

Definicija 3.3. *Vektorska norma* je preslikava $||\cdot||:\mathbb{C}^n \to \mathbb{R}$, za katero velja:
1. Pozitivna definitnost, tj. $\forall x \in \mathbb{C}^n \,.\, ||x|| \geq 0 \wedge ||x|| = 0 \Leftrightarrow x = 0$.
2. Homogenost, tj. $\forall \lambda \in \mathbb{C} \,.\, \forall x \in \mathbb{C} \,.\, ||\lambda x|| = |\lambda| \cdot ||x||$.
3. Trikotniška neenakost, tj. $\forall x, y \in \mathbb{C}^n \,.\, ||x+y|| \leq ||x|| + ||y||$.

Najbolj znane norme so

$$
\begin{aligned}
||x||_1 &= \sum_{i=1}^{n} |x_i| \\
||x||_2 &= (\sum_{i=1}^{n} |x_i|^2)^{1/2} \\
||x||_\infty &= \max\{|x_i| \,|\, i \in \{1, \ldots, n\}\}
\end{aligned}
$$

Vse vektorske norme so ekvivalentne, tj.

$$\forall ||\cdot||_a, ||\cdot||_b \in \mathbb{R}^{\mathbb{C}^n} \,.\, \forall x \in \mathbb{C}^n \,.\, \exists c_1, c_2 > 0 \,.\, c_1||x||_a \leq ||x||_b \leq c_2||x||_a.$$

Za $||\cdot||_1, ||\cdot||_2, ||\cdot||_\infty$ velja:

$$
\begin{aligned}
||x||_2 \leq ||x||_1 &\leq \sqrt{n} \cdot ||x||_2 \\
||x||_\infty \leq ||x||_2 &\leq \sqrt{n} \cdot ||x||_\infty \\
||x||_\infty \leq ||x||_1 &\leq n \cdot ||x||_\infty
\end{aligned}
$$

Definicija 3.4. *Matrična norma* je preslikava $||\cdot||:\mathbb{C}^{n\times n} \to \mathbb{R}$, za katero velja:
1. Pozitivna definitnost.
2. Homogenost.
3. Trikotniška neenakost.
4. Submultiplikativnost, tj. $\forall A, B \in \mathbb{C}^{n\times n} \,.\, ||A \cdot B|| \leq ||A|| \cdot ||B||$.

Definicija 3.5. *Vektorizacija* matrike $A \in \mathbb{F}^{n\times n}$ je preslikava

$$
\begin{aligned}
\text{vec: } \mathbb{C}^{n\times n} &\to C^{n^2} \\
A &\mapsto [a_{11} \ \ldots \ a_{1n} \ a_{21} \ \ldots \ a_{nn}]^T
\end{aligned}
$$

Sedaj lahko definiramo vektorske norme

$$
\begin{aligned}
N_1(A) &= ||\text{vec}(A)||_1 = \sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}| \\
N_2(A) &= ||\text{vec}(A)||_2 = (\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2)^{1/2} \\
N_\infty(A) &= ||\text{vec}(A)||_\infty = \max\{|x_i| \,|\, i \in \{1, \ldots, n\}\}
\end{aligned}
$$

Trditev 3.6. *Normi N_1 in N_2 sta matrični normi. Norma N_∞ ni matrična norma.*

Dokaz. TODO □

Definicija 3.7. Matrična norma N_2 je *Frobeniusova norma*:

$$||A||_F = \left(\sum_{i,j=1}^{n} |a_{ij}|^2 \right)^{1/2}.$$

Lema 3.8. *Naj bo $||\cdot||_v$ vektorska norma na $\mathbb{C}^n$. Tedaj je*

$$||A||_v := \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||_v}{||x||_v}$$

matrična norma. Rečemo ji operatorska norma.

Dokaz. TODO □

Sedaj lahko definiramo *operatorsko p-normo*:

$$||A||_p := \max_{x \neq 0} \frac{||Ax||_p}{||x||_p} \text{ za } p \in \{1, 2, \dots, \infty\}.$$

Lema 3.9. *Naj bo $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Tedaj*

$$||A||_1 = \max\{\sum_{i=1}^{n} |a_{ij}| \,|\, j \in \{1, \dots, n\}\} = \max\{||a_j||_1 \,|\, j \in \{1, \dots, n\}\}.$$

Dokaz. TODO □

Lema 3.10. *Naj bo $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Tedaj*

$$||A||_\infty = \max\{\sum_{j=1}^{n} |a_{ij}| \,|\, i \in \{1, \dots, n\}\} = \max\{||\alpha_i^T||_1 \,|\, i \in \{1, \dots, n\}\}.$$

Naj bo $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Matrika $B = A^H A$ je hermitska in pozitivno semidefinitna, saj

1. $B^H = (A^H A)^H = A^H (A^H)^H = A^H A = B$ in
2. $x^H B x = x^H A^H A x = (Ax)^H A x = ||Ax||_2^2 \geq 0$.

Vemo, da so torej vse njene lastne vrednosti nenegativne, zato jih lahko pišemo in uredimo kot

$$\sigma_1^2 \geq \sigma_2^2 \geq \dots \geq \sigma_n^2 \geq 0.$$

Vrednostim $\sigma_1^2, \sigma_2^2, \dots, \sigma_n^2$ pravimo *singularne vrednosti* matrike A.

Lema 3.11. *Naj bo $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$. Tedaj*

$$||A||_2 = \sigma_1(A) = \sqrt{\lambda_{\max}(A^H A)}$$

Dokaz. TODO □

Definicija 3.12. Norma $||\cdot||$ je *spektralna norma.*

Opomba 3.13. Vsako matriko $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ lahko zapišemo v obliki

$$A = U\Sigma V^T,$$

kjer sta U, V ortogonalni matriki in

$$\Sigma = \begin{bmatrix} \sigma_1 & & \\ & \ddots & \\ & & \sigma_n \end{bmatrix}.$$

To je *singularni razcep* matrike A.

Opomba 3.14. Frobeniusova norma ni operatorska norma, saj je $||I||_F = \sqrt{n}$. Za operatorske norma pa velja, da je $||I|| = 1$.

Tudi vse matrične norme so ekvivalentne. Velja:

$$\frac{1}{\sqrt{n}} \cdot ||A||_F \leq ||A||_2 \leq ||A||_F$$
$$\frac{1}{\sqrt{n}} \cdot ||A||_1 \leq ||A||_2 \leq \sqrt{n} \cdot ||A||_1$$
$$\frac{1}{\sqrt{n}} \cdot ||A||_\infty \leq ||A||_2 \leq \sqrt{n} \cdot ||A||_\infty$$

Poleg tega velja še:

$$N_\infty(A) \leq ||A||_2 \leq n \cdot N_\infty(A)$$
$$||A||_2 \leq \sqrt{||A||_1 \cdot ||A||_\infty}$$
$$\forall i \in \{1, \dots, n\} \,.\, ||a_i||_2, ||\alpha_i^T||_2 \leq ||A||_2.$$

Naj bo $|| \cdot ||_m$ operatorska norma z vektorsko normo $|| \cdot ||_v$. Tedaj

$$\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n} \,.\, \forall x \in \mathbb{C}^n \,.\, ||Ax||_v \leq ||A||_m \cdot ||x||_v.$$

Definicija 3.15. Če za matrično normo $|| \cdot ||_m$ in vektorsko normo $|| \cdot ||_v$ za vsak par $A \in C^{n\times n}$, $x \in \mathbb{C}^n$ velja:

$$||Ax||_v \leq ||A||_m \cdot ||x||_v,$$

pravimo, da sta normi *usklajeni*.

Lema 3.16. *Za vsako matrično normo $|| \cdot ||_m$ obstaja usklajena vektorska norma $|| \cdot ||_v$.*

Dokaz. TODO □

Lema 3.17. *Naj bo $\lambda \in \mathbb{C}$ lastna vrednost matrike $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. Potem za poljubno matrično normo $|| \cdot ||_m$ velja:*

$$|\lambda| \leq ||A||_m.$$

Dokaz. TODO □

Vse norme $||\cdot||_1, ||\cdot||_2, ||\cdot||_\infty, ||\cdot||_F$ se enostavno razširijo na pravokotne matrike $A \in \mathbb{C}^{m\times n}$. Če sta A, B ustreznih velikosti, da obstaja produkt $A \cdot B$, potem velja tudi submultiplikativnost. Ne veljajo pa vse prejšnje ocene za norme.
Velja pa

$$\begin{aligned} ||A||_2 &= ||A^H||_2 \\ ||A||_F &= ||A^H||_F \\ ||A||_1 &= ||A^H||_\infty \end{aligned}$$

Matrika $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ je *unitarna*, če $U \cdot U^H = U^H U = I$.

Lema 3.18. *Normi* $||\cdot||_2$ *in* $||\cdot||_F$ *sta invariantni na množenje z unitarno matriko.*

Dokaz. TODO ☐

Lema 3.19. *Naj za* X *velja* $||X|| < 1$. *Tedaj*

1. *Matrika* $I - X$ *je obrnljiva.*
2. $(I - X)^{-1} = \sum_{k=0}^{\infty} X^k$.
3. *Če je* $||I|| = 1$, *potem* $||(I - X)^{-1}|| \leq \frac{1}{1-||X||}$.

Dokaz. TODO ☐

3.3 Občutljivost sistemov linearnih enačb

Definicija 3.20. Naj bo $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$. *Občutljivost* ali *pogojnostno število* matrike A je

$$\kappa(A) := ||A|| \cdot ||A^{-1}||.$$

Opomba 3.21. Velja ocena:

$$\forall A \in \mathbb{C}^{n\times n} . \, ||I|| = ||A \cdot A^{-1}|| \leq ||A|| \cdot ||A^{-1}|| = \kappa(A).$$

Izrek 3.22. *Naj bo* $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ *nesingularna matrika in* $Ax = b$. *Če* A *zmotimo v* $A + \Delta A$ *in* b *v* $b + \Delta b$, *kjer velja*

$$||\Delta A|| \leq \frac{1}{||A^{-1}||},$$

potem za rešitev zmotenega sistema $(A + \Delta A)(x + \Delta x) = b + \Delta b$ *velja*

$$\frac{||\Delta x||}{||x||} \leq \frac{\kappa(A)}{1 - \kappa(A) \cdot \frac{||\Delta A||}{||A||}} \left(\frac{||\Delta A||}{||A||} + \frac{||\Delta b||}{||b||} \right),$$

kjer za $||\cdot||$ *velja* $||I|| = 1$.

Opomba 3.23. Velja:

$$\kappa_2(A) = \frac{\sigma_1(A)}{\sigma_n(A)}.$$

Opomba 3.24. Edine matrike z občutljivostjo 1 v $||\cdot||_2$ so s skalarjem pomnožene unitarne matrike.

Definicija 3.25. Hilbertova matrika $H \in \mathbb{R}^{n\times n}$ je matrika z elementi

$$h_{ij} = \frac{1}{i+j-1}.$$

Opomba 3.26. Hilbertove matrike so zelo občutljive.

TODO

3.4 LU razcep

Želimo rešiti sistem linearnih enačb

$$Ax = b,\ A \in \mathbb{C}^{n\times n},\ x, b \in \mathbb{C}^n,\ \det A \neq 0.$$

Kakšni metodi so na voljo?
Naj bo

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{bmatrix}, \quad a_{11} \neq 0.$$

Definiramo

$$L_1 = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -l_{21} & 1 & & & \\ -l_{31} & & \ddots & & \\ \vdots & & & \ddots & \\ -l_{n1} & & & & 1 \end{bmatrix}, \quad l_{j1} = \frac{a_{j1}}{a_{11}},\ j \in \{2, \dots, n\}.$$

Potem

$$L_1 A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ 0 & a_{22}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ 0 & a_{32}^{(1)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 0 & a_{n2}^{(1)} & \dots & a_{nn}^{(1)} \end{bmatrix}, \quad a_{22} \neq 0.$$

Nadaljujemo in dobimo

$$L_i = \begin{bmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & -l_{i+1,i} & 1 & & \\ & & \vdots & & \ddots & \\ & & -l_{n,i} & & & 1 \end{bmatrix}, \quad l_{ji} = \frac{a_{ji}^{(i-1)}}{a_{ii}^{(i-1)}},\ j \in \{i+1, \dots, n\}$$

ter

$$A^{(i-1)} = \begin{bmatrix} 0 & & & & \\ & \ddots & & & \\ & & 0 & & \\ & & & a_{ii}^{(i-1)} & \dots \\ & & & \vdots & \\ & & & a_{ni}^{(i-1)} & \dots \end{bmatrix}$$

V končnem

$$L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} & \dots & a_{1n} \\ & a_{22}^{(1)} & a_{23}^{(1)} & \dots & a_{2n}^{(1)} \\ & & a_{33}^{(2)} & \dots & a_{3n}^{(1)} \\ & & & & a_{nn}^{(n-1)} \end{bmatrix}$$

Definiramo $L_{n-1} \cdots L_2 L_1 A =: U$. Tedaj

$$A = \underbrace{L_1^{-1} L_2^{-2} \cdots L_{n-1}^{-1}}_{L} U = LU.$$

Kako dobimo matriko L?

$$\begin{aligned} L_j &= I - l_j e_j^T \text{ je eliminacisjka matrika} \\ &\Rightarrow L_j^{-1} = I + l_j e_j^T, \text{ kjer} \\ l_j &= [0 \ \dots \ 0 \ l_{j+1,j} \ \dots \ l_{n,j}]^T \\ &\Rightarrow L = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ l_{21} & 1 & & & \\ l_{31} & l_{32} & 1 & & \\ \vdots & \vdots & & \ddots & \\ l_{n1} & l_{n2} & \dots & l_{n,n-1} & 1 \end{bmatrix} \end{aligned}$$

S tem dobimo *LU razcep brez pivotiranja*, kjer je L spodnje trikotna z 1 na diagonali in U zgornje trikotna matrika.

Algorithm 2: LU razcep

Data: $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$
Result: $L \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$
for $i = 1, \dots, n-1$ **do**
  for $j = i+1, \dots, n$ **do**
    $l_{ji} \leftarrow a_{ji}/a_{ii}$
    for $k = i+1, \dots, n$ **do**
      $a_{jk} \leftarrow a_{jk} - l_{ji} a_{ik}$
    end
  end
end
$U \leftarrow A$

Kako zdaj rešimo sistem $Ax = b$?

$$Ax = b \Leftrightarrow L\underbrace{Ux}_{y} = b.$$

Postopek.

1. $A = LU$,
2. Reši $Ly = b$,
3. Reši $Ux = y$.

Sistem $Ly = b$ rešimo s *premo substitucijo* (od zgoraj navzdol), tj.

$$l_{j1}y_1 + \ldots + l_{j,j-1}y_{j-1} + y_i = b_j.$$

Algorithm 3: Prema substitucija

Data: $L \in \mathbb{C}^{n\times n},\ b \in \mathbb{C}^n$
Result: $y \in \mathbb{C}^n$
for $j = 1, \ldots, n$ **do**
  $y_i \leftarrow b_j - \sum_{k=1}^{j-1} l_{jk}y_k$
end

Sistem $Ux = y$ rešimo s *obratno substitucijo* (od zgoraj navzdol), tj.

$$u_{jj}x_j + \ldots + u_{j,n}x_n = y_j.$$

Algorithm 4: Obratna substitucija

Data: $U \in \mathbb{C}^{n\times n},\ y \in \mathbb{C}^n$
Result: $x \in \mathbb{C}^n$
for $j = n, n-1, \ldots, 1$ **do**
  $x_j \leftarrow (1/u_{jj}) \cdot (y_j - \sum_{k=j+1}^{n} u_{jk}x_k)$
end

Elementom $a_{11}, a_{22}^{(1)}, \ldots, a_{n-1,n-1}^{(n-2)}$, s katerimi delimo, pravimo *pivotni elementi.*

Izrek 3.27. *Za $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ NTSE:*

1. *Obstaja enoličen LU razcep $A = LU$, kjer je L spodnje trikotna z 1 na diagonali in U nesingularna zgornje trikotna.*
2. $\det(A_k) \neq 0$ *za vse* $A_k = A(1:k, 1:k),\ k \in \{1, \ldots, n\}$.
3. *Vse vodilne podmatrike A so nesingularne.*

Zgled 3.28. Pri numeričnem računanju so težave lahko tudi zaradi pivotov, ki so sicer neničelni, a blizu 0. TODO

Rešitev za težave s (skoraj) ničelnimi pivoti je pivotiranje, kjer dopuščamo:

1. Menjave vrstic - *delno pivotiranje.*
2. Menjave vrstic in stolpcev - *kompletno pivotiranje.*

Delno pivotrianje

V koraku i poiščemo največjega izmed elementov $|a_{ij}|, |a_{i+1}, j|, \dots, |a_{ni}|$ in zamenjamo ustrezni vrstici.

Algorithm 5: LU razcep z delnim pivotiranjem

Data: $A \in \mathbb{C}^{n \times n}$
Result: $L \in \mathbb{C}^{n \times n}$, $U \in \mathbb{C}^{n \times n}$
for $i = 1, \dots, n$ **do**
  find $p \in \{i, \dots, n\}$, da $|a_{pi}| = \max_{l \in \{i, \dots, n\}} |a_{li}|$
  swap the i-th and j-th rows
  for $j = i + 1, \dots, n$ **do**
    $l_{ji} \leftarrow a_{ji}/a_{ii}$
    for $k = i + 1, \dots, n$ **do**
      $a_{jk} \leftarrow a_{jk} - l_{ji}a_{ik}$
    end
  end
end

Dobimo razcep $PA = LU$, kjer je P permutacijska matrika, ki ustreza zamenjavi vrstic. Kako zdaj rešimo sistem?

$$Ax = b \Rightarrow PAx = Pb \Rightarrow LUx = Pb$$

Postopek.

1. $PA = LU$,
2. Reši $Ly = Pb$,
3. Reši $Ux = y$.

Izrek 3.29. *Če je A nesingularna, potem obstaja taka permutacijska matrika P, da za PA obstaja LU razcep brez pivotiranja.*

Dokaz. TODO □

Kompletno pivotiranje

Poiščemo največji element bloka in zamenjamo ustrezni vrstici in stolpca. Dobimo sistem

$$\underbrace{PAQ}_{LU}\underbrace{Q^T x}_{\widetilde{x}} = Pb$$

Postopek.

1. $PAQ = LU$,
2. Reši $Ly = Pb$,
3. Reši $U\widetilde{x} = y$,
4. $x = Q\widetilde{x}$.

3.5 Analiza zaokrožitvenih napak pri LU razcepu

Definicija 3.30. *Pivotna rast* je

$$g(A) := \frac{\max_{i,j\in\{1,\dots,n\}} |u_{ij}|}{\max_{i,j\in\{1,\dots,n\}} |a_{ij}|}$$

TODO

3.6 Sistemi posebne oblike

Recimo, da rešujemo sistem $Ax = b$, kjer ima A posebno obliko, npr. diagonalna, trikotna itn.

Simetrična pozitivno definitna matrika

Izrek 3.31. *Naj bo $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Tedaj*

1. *Če je A s.p.d., so vse vodilne podmatrike $A_k = A(1:k, 1:k)$ tudi s.p.d.*
2. *Če je A s.p.d., obstaja enoličen LU razcep $A = LU$, kjer je $u_{ii} > 0$ za $i \in [n]$.*
3. *A je s.p.d. natanko tedaj, ko obstaja enolična spodnja trikotna matrika V, $v_{ii} > 0$ za $i \in [n]$, da je*
   $$A = V \cdot V^T.$$
   To je razcep Choleskega*. Matriko V pa imenujemo* faktor Choleskega*.*

Dokaz. TODO □

Kako rešimo sistem s pomočjo razcepa Choleskega?

Postopek.

1. $A = VV^T$,
2. $Vy = b$,
3. $V^T x = y$.

Algorithm 6: Razcep Choleskega

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$
Result: $V \in \mathbb{C}^{n\times n}$
for $i = 1, \dots, n$ **do**
    $v_{ii} \leftarrow (a_{ii} = \sum_{k=1}^{i-1} v_{ik}^2)^{1/2}$
    for $j = i+1, \dots, n$ **do**
        $v_{ji} \leftarrow (1/v_{ii}) \cdot (a_{ij} - \sum_{k=1}^{i-1} v_{ik} v_{jk})$
    end
end

4 Sistemi nelinearnih enačb

Naj bo $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ oz. $F : \mathbb{C}^n \to \mathbb{C}^n$ preslikava. Iščemo vektorji $x \in \mathbb{R}^n$, ki rešijo sistem

$$F(x) = 0.$$

Podobno kot pri $n = 1$ lahko uporabimo navadno iteracijo:

1. Prepišemo enačbo $F(x) = 0$ v obliko $x = G(x)$.
2. Izberimo $x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$.
3. Računamo rekurzivno: $x^{(r+1)} = G(x^{(r)})$.

Za konvergenco potrebujemo, da je G skrčitev na nekem zaprtem območju $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$, tj.

- $\forall x \in \Omega \,.\, G(x) \in \Omega$ in
- $\exists m \in [0, 1) \,.\, \forall x, y \in \Omega \,.\, ||G(x) - G(y)|| \leq m \cdot ||x - y||$.

Izrek 4.1. *Naj bo $G : \mathbb{R}^n \to R^n$ zvezno odvedljiva na zaprtem območju $\Omega \subseteq \mathbb{R}^n$. Recimo, da velja*

- $\forall x \in \Omega \,.\, G(x) \in \Omega$ *in*
- $\exists m \in [0, 1) \,.\, \forall x \in \Omega \,.\, \rho(J_G(x)) \leq m$,

kjer

$$J_G = \begin{bmatrix} \frac{\partial g_1}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_1}{\partial x_n} \\ \vdots & & \vdots \\ \frac{\partial g_n}{\partial x_1} & \cdots & \frac{\partial g_n}{\partial x_n} \end{bmatrix} \text{ je Jacobijeva matrika preslikave } G,$$
$$\rho(A) = \max\{|\lambda| \mid \lambda \text{ je lastna vrednost } A\} \text{ je spektralni radij.}$$

Potem za vsak $x^{(0)} \in \Omega$ zaporedje $x^{(r+1)} = G(x^{(r)})$ konvergira k negibni točki funkcije G, ki je edina negibna točka G na Ω.

Opomba 4.2. TODO Za vsak $\varepsilon > 0$ obstaja matrična norma (za dano matriko A), da je

$$\rho(A) \leq A \leq \rho(A) + \varepsilon.$$

Če je $\alpha = G(\alpha)$ in $\rho(J_G(\alpha)) < 1$, je α privlačna negibna točka. Posledično za $x^{(0)}$ dovolj blizu α bo $\lim_{r \to \infty} x^{(r)} = \alpha$ za $x^{(r+1)} = G(x^{(r)})$.

4.1 Newtonova metoda

Ideja. Naj bo $F : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ dvakrat zvezno odvedljiva v okolici α, kjer $F(\alpha) = 0$. Naj bo $x^{(r)}$ približek za α. Iščemo popravek $\Delta x^{(r)}$, da bo

$$F(x^{(r)} + \Delta x^{(r)}) = 0.$$

Računamo

$$\begin{aligned} 0 = F(x^{(r)} + \Delta x^{(r)}) &= F(x^{(r)}) + J_F(x^{(r)}) \cdot \Delta x^{(r)} + \underbrace{o(||\Delta x^{(r)}||^2)}_{\text{zanemarimo}} \\ &\Rightarrow J_F(x^{(r)}) \Delta x^{(r)} \approx -F(x^{(r)}) \\ &\Rightarrow x^{(r+1)} = x^{(r)} - J_F^{-1}(x^{(r)}) \cdot F(x^{(r)}) \end{aligned}$$

Torej iteracijska funkcija je $G(x) = x - J_F^{-1}(x^{(r)}) \cdot F(x^{(r)})$.

Opomba 4.3. Če je α enostavna ničla, je $\det(J_F(\alpha)) \neq 0$.

Algorithm 7: Newtonova metoda

Data: $F : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n,\ x_0 \in \Omega,$
Result: $c \in \Omega,\ F(c) = 0$
for $r = 1$ *to* ∞ **do**
  solve $J_F(x^{(r)}) \cdot \Delta x^{(r)} = -F(x^{(r)})$
  $x^{(r+1)} \leftarrow x^{(r)} + \Delta x^{(r)}$
end

Opomba 4.4.
- Ne množimo z inverzom, ampak rešimo sistem linearnih enačb.
- Metoda ima kvadratično konvergenco v bližini enostavnih ničel.

Težava z Newtonovo metodo je, da lahko zelo zahtevna, saj
- V vsakem korak potrebujemo $n \times n$ matriko $J_F(x^{(r)})$ in
- vsakič nov LU razcep za $J_F(x^{(r)})$.

4.2 Kvazi Newtonove metode

Ideja. Namesto matrike $J_F(x^{(r)})$ uporabimo njen približek.

Algorithm 8: Kvazi Newtonova metoda

Data: $F : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n,\ B_0 \in \mathbb{R}^{n\times n},\ x_0 \in \Omega$
Result: $c \in \Omega,\ F(c) = 0$
for $r = 1$ *to* ∞ **do**
  solve $B_r \cdot \Delta x^{(r)} = -F(x^{(r)})$
  $x^{(r+1)} \leftarrow x^{(r)} + \Delta x^{(r)}$
  update B_r to B_{r+1}
end

Broydenova metoda

Najbolj znana je *Broydenova metoda.* Pri tej metodi določimo B_{r+1} tako, da zadošča, t.i. *sekantnemu pogoju*:

$$B_{r+1}\left(x^{(r+1)} - x^{(r)}\right) = F\left(x^{(r+1)}\right) - F\left(x^{(r)}\right).$$

Pri čemer je $B_{r+1} = B_r + \Delta B_r$ in ima med vsemi možnimi ΔB_r minimalno normo $||\Delta B_r||_2$.

Opomba 4.5. Še bolj pomembno je, da ima ΔB_r minimalen rang 1.

Dobimo, da

$$\begin{aligned}(B_r + \Delta B_r)\Delta x^{(r)} = F(x^{(r+1)}) - F(x^{(r)}),\ B_r\Delta x^{(r)} = -F(x^{(r)})\\ \Rightarrow \Delta B_r \Delta x^{(r)} = F(x^{(r+1)}).\end{aligned}$$

Lema 4.6. *Za dana neničelna vektorja $u, v \in \mathbb{R}^n$ je matrika A z minimalno normo $||\cdot||_2$, za katero velja $Au = v$, enaka*

$$A = \frac{vu^T}{||u||_2^2}.$$

Dokaz. TODO □

Algorithm 9: Broydenova metoda

Data: $F : \Omega \subseteq \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n,\ x_0 \in \Omega$
Result: $c \in \Omega,\ F(c) = 0$
$B_0 \leftarrow J_F(x^{(0)})$
for $r = 1$ *to* ∞ **do**
  solve $B_r \cdot \Delta x^{(r)} = -F(x^{(r)})$
  $x^{(r+1)} \leftarrow x^{(r)} + \Delta x^{(r)}$
  $B_{r+1} = B_r + \frac{F(x^{(r+1)})\cdot(\Delta x^{(r)})^T}{||\Delta x^{(r)}||_2^2}$
end

Trditev 4.7 (Sherman-Morrisonova formula)**.** *TODO*

$$(A + uv^T)^{-1} = A^1 - \frac{(A^{-1}u)(v^T A^{-1})}{1 + v^T A^{-1} u}$$

Opomba 4.8. Sistem $B_r \cdot \Delta x^{(r)} = -F(x^{(r)})$ lahko rešimo v $O(n^2)$ z uporabo Sherman-Morrisonove formule. Sicer ta ni numerično stabilna.

5 Linearni problemi najmanjših kvadratov

5.1 Uvod

Imamo matriko $A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ m > n,\ b \in \mathbb{R}^m$. Iščemo $x \in \mathbb{R}^n$, ki minimizira $||Ax - b||_2$.

Če je $m > n$, je sistem $Ax = b$ *predoločen* (več enačb kot neznank). Razen izjemoma (če je $b \in \mathrm{im}A$) tak sistem nima rešitve.

Izrek 5.1. *Če je $A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ m \geq n,\ \mathrm{rang}A = n$, potem je $x \in \mathbb{R}^n$, ki za dani $b \in \mathbb{R}^m$ minimizira $||Ax - b||_2$, rešitev* normalnega sistema *$A^T Ax = A^T b$.*

Matrika $A^T A$ je *Grammova matrika.*
Predoločen sistem lahko rešimo:

1. $B = A^T A,\ c = A^T b$,
2. $B = V V^T$,
3. $V y = c$
4. $V^T x = y$

Matrika

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^{n-1} \\ \vdots & & & \\ 1 & x_n & \dots & x_n^{n-1} \end{bmatrix}$$

je *Vandermondova matrika.*

5.2 QR razcep

Izrek 5.2. *Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ m \geq n,\ \mathrm{rang}A = n$. Potem obstaja enoličen razcep $A = QR$, kjer je $Q \in \mathbb{R}^{m\times n}$ matrika z ortonormiranimi stolpci ($Q^T Q = I_n$) in $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$ zgornja trikotna matrika s pozitivnimi diagonalnimi elementi ($r_{ii} > 0$) za $i \in [n]$.*

Algorithm 10: QR razcep

Data: $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$
Result: $Q \in \mathbb{R}^{m\times n},\ R \in \mathbb{R}^{n\times n}$
for $k = 1 : n$ **do**
  $q_k \leftarrow a_k$
  for $i = 1 : k - 1$ **do**
    $r_{ik} \leftarrow q_i^T a_k$
    $q_k \leftarrow q_k - r_{ik} q_i$
  end
  $r_{kk} \leftarrow ||q_k||_2$
  $q_k \leftarrow q_k / r_{kk}$
end

To je *klasična Gram-Schmidtova ortogonalizacija.*

Obstaja tudi *modificirana Gram-Schmidtova ortogonalizacija*:

Algorithm 11: QR razcep (MGS)

Data: $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$
Result: $Q \in \mathbb{R}^{m\times n},\ R \in \mathbb{R}^{n\times n}$

```
for k = 1 : n do
    q_k ← a_k
    for i = 1 : k − 1 do
        r_ik ← q_i^T q_k
        q_k ← q_k − r_ik q_i
    end
    r_kk ← ||q_k||_2
    q_k ← q_k / r_kk
end
```

Preprost način reševanja:

1. $[Q, R] = \text{mgs}(A)$;
2. Reši $Rx = Q^T b$.

Boljši način reševanja:

1. Izračunamo QR razcep matrike $\begin{bmatrix} A & b \end{bmatrix}$:
$$\begin{bmatrix} A & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} Q & q_{m+1} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} R & z \\ 0 & \rho \end{bmatrix};$$
2. Reši $Rx = z$.

5.3 Givensove rotacije

Naj bo $A \in \mathbb{R}^{m\times n},\ m \geq n,\ \text{rang}A = n$. Vemo, da obstaja QR razcep $A = QR$.

Poznamo tudi razširjeni QR razcep: $A = \widetilde{Q}\widetilde{R}$, kjer je $\widetilde{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$ ortogonalna, $\widetilde{R} \in \mathbb{R}^{m\times n}$ zgornja trapezna (vsi elementi pod glavno diagonalo so enaki 0).
Prvih n stolpcev matrike $\widetilde{Q}$ in zgornji kvadrat matrike $\widetilde{R}$ tvori QR razcep matrike A. Minimum bo dosežen, ko $Rx = Q^T b$.

Navadno rotacijo v ravnini posplošimo na rotacijo v ravnini (i, k) v R^n. Označimo z $c = \cos\varphi$ in $s = \sin\varphi$. Dobimo ortogonalno matriko, ki je enaka identiteti povsod razen v i-ti in $k$ti vrstici, kjer je
$$R_{ik}^T([i\ k], [i\ k]) = \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix}.$$

Matriko R_{ik}^T imenujemo *Givensova rotacija.*

Algoritem za splošno matriko velikosti $m \times n,\ m \geq n$, je zapisan v algoritmu 12. Če QR razcep računamo zato, da bomo rešili predoločen sistem $Ax = b$, matrike Q ni potrebno izračunati. Namesto tega v vsakem koraku z rotacijo R_{jk}^T pomnožimo vektor b, na koncu iz produkta $\widetilde{Q}^T b$ poberemo prvih n elementov in rešimo sistem $Rx = Q^T b$.

Opomba 5.3. Algoritem 12 matriko A prepiše v matriko $\widetilde{R}$.

Algorithm 12: QR razcep (Givensove rotacije)

Data: $A \in \mathbb{R}^{m\times n}$
Result: $\widetilde{Q} \in \mathbb{R}^{m\times m}$, $\widetilde{R} \in \mathbb{R}^{n\times n}$

$\widetilde{Q} \leftarrow I_m$ `/* če potrebujemo matriko` $\widetilde{Q}$ `*/`
for $j = 1 : n$ **do**
  for $k = j+1 : m$ **do**
    $r \leftarrow \sqrt{a_{jj}^2 + a_{kj}^2}$
    if $r > 0$ **then**
      $c \leftarrow a_{jj}/r$
      $s \leftarrow a_{kj}/r$
      $A([j\ k], j:n) \leftarrow \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} A([j\ k], j:n)$
      $b([j\ k]) \leftarrow \begin{bmatrix} c & s \\ -s & c \end{bmatrix} b([j\ k])$ `/* če rešujemo sistem` $Ax = b$ `*/`
      $\widetilde{Q}(1:m, [j\ k]) \leftarrow \widetilde{Q}(1:m, [j\ k]) \begin{bmatrix} c & -s \\ s & c \end{bmatrix}$ `/* če potrebujemo` $\widetilde{Q}$ `*/`
    end
  end
end

5.4 Householderjeva zrcaljenja

Za neničelen vektor $w \in \mathbb{R}^n$ definiramo matriko

$$P = I - \frac{2}{w^T w} w w^T.$$

Matriko P imenujemo *Householderjevo zrcaljenje.*

Množenje vektorja x z zrcaljenjem P lahko izvedemo tako, da izračunamo

$$Px = x - \frac{1}{\mu}(w^T x) w,$$

kjer je $\mu = \frac{1}{2}||w||_2^2$.

Algorithm 13: QR razcep (Householderjeva zrcaljenja)

Data: $A \in \mathbb{R}^{m \times n}$

Result: $\widetilde{Q} \in \mathbb{R}^{m \times m}$, $\widetilde{R} \in \mathbb{R}^{n \times n}$

$\widetilde{Q} \leftarrow I_m$ `/* če potrebujemo matriko` $\widetilde{Q}$ `*/`

for $i = 1 : \min(n, m-1)$ **do**

  določi $w_i \in \mathbb{R}^{m-i+1}$, ki prezrcali $A(i:m, i)$ v $\pm k e_1 \in \mathbb{R}^{m-i+1}$

  $A(i:m, i:n) \leftarrow P_i A(i:m, i:n)$

  $b(i:m) \leftarrow P_i b(i:m)$ `/* če rešujemo sistem` $Ax = b$ `*/`

  $\widetilde{Q}(1:m, i:m) = \widetilde{Q}(1:m, i:m) P_i$ `/* če potrebujemo matriko` $\widetilde{Q}$ `*/`

end

6 Problemi lastnih vrednosti

Naj bo $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$. Iščemo lastne vrednosti in lastne vektorje.

Izrek 6.1. *Za vsako matriko $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$ obstajata unitarna matrika $U \in \mathbb{C}^{n\times n}$ in zgornja trikotna $S \in \mathbb{C}^{n\times n}$, da je*

$$A = USU^H.$$

To je *Schurova forma.*

Izrek 6.2. *Če je $A \in \mathbb{R}^{n\times n}$, obstajata ortogonalna matrika $Q \in \mathbb{R}^{n\times n}$ in kvazi zgornje trikotna (na diagonali so lahko 2×2 bloki) matrika $R \in \mathbb{R}^{n\times n}$, da je $A = QRQ^T$.*

6.1 Potenčna metoda

Naj bo $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $z_0 \in \mathbb{C}^n$. Definiramo zaporedje

$$z_{k+1} = \frac{Az_k}{||Az_k||}. \tag{1}$$

Izrek 6.3. *Naj bo λ_1* dominantna *lastna vrednost matrike $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, torej*

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \geq |\lambda_3| \geq \cdots \geq |\lambda_n|.$$

Za naključno izbran normiran vektor $z_0 \in \mathbb{C}^n$ zaporedje vektorjev z_k izračunanih po predpisu 1 po smeri konvergira proti lastnemu vektorju za λ_1.

Kaj je ustrezen zaustavitveni kriterij?
Denimo, da imamo približek x za lastni vektor in iščemo lastno vrednost. Najboljši približek je $\lambda \in \mathbb{C}$, ki minimizira

$$||Ax - \lambda x||_2.$$

Rešitev je (iščemo rešitev predoločenega sistema $x\lambda = Ax$ za λ) *Rayleighov* kvocient

$$\rho(x, A) := \frac{x^H Ax}{x^H x},$$

ki je definiran za $x \neq 0$.
Primeren zaustavitveni kriterij za potenčno metodo je

$$||Az_k - \rho(z_k, A)z_k||_2 < \epsilon.$$

Denimo, da smo s potenčno metodo izračunali lastno vrednost λ_1 s pripadajočim normiranim lastnim vektorjem x_1. Za izračun drugih lastnih parov lahko uporabimo potenčno metodo na reducirani matriki. Dve možnosti redukciji sta:

1. *Householderjeva redukcija.* Z uporabo Householderjeva zrcaljenja poiščemo unitarno matriko U, da je $x_1 = Ue_1$. Potem ima matrika $B = U^H AU$ obliko

   $$B = \begin{bmatrix} \lambda_1 & b^T \\ 0 & C \end{bmatrix}.$$

   Preostale lastne vrednosti matrike A se ujemajo z lastnimi vrednostmi matrike C.

Opomba 6.4. V potenčni metodi dovolj, da znamo izračunati produkt Cw za vektor $w \in \mathbb{C}^{n-1}$. Pri tem si pomagamo z zvezo

$$U^H AU \begin{bmatrix} 0 \\ w \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b^T w \\ Cw \end{bmatrix}$$

2. *Hotellingova redukcija* v primeru simetrične matrike A. Definiramo

$$B = A - \lambda_1 x_1 x_1^T.$$

Če uporabimo potenčno metodo na matriki B, dobimo drugo dominanto lastno vrednost matrike A.

Opomba 6.5. Matriko B ni potrebno eksplicitno izračunati. Dovolj, da uporabimo zvezo

$$Bz = Az - \lambda_1 (x_1^T z) x_1.$$

Algorithm 14: Potenčna metoda

Data: $A \in \mathbb{C}^{n \times n},\ z_0 \in \mathbb{C}^n,\ |z_0| = 1,\ \varepsilon > 0$
Result: λ_1
$y_1 \leftarrow Az_0$
$\rho_0 \leftarrow z_0^H y_1$
$k \leftarrow 0$
while $||y_{k+1} - \rho_k z_k||_2 \geq \varepsilon$ **do**
    $k \leftarrow k + 1$
    $z_k \leftarrow y_k / ||y_k||_2$
    $y_{k+1} \leftarrow Az_k$
    $\rho_k \leftarrow z_k^H y_{k+1}$
end

Če iščemo po absolutni vrednosti najmanjšo lastno vrednost nesingularne matrike A, uporabimo potenčno metodo na A^{-1}. V algoritmu namesto produkta $y_{k+1} = A^{-1} z_k$ rešimo sistem $Ay_{k+1} = z_k$.

Opomba 6.6. Sistem $Ay_{k+1} = z_k$ lahko rešimo s pomočjo LU razcepa, ki ga dovolj izračunati le enkrat.

6.2 Inverzna iteracija

Denimo, da smo izračunali približek za lastno vrednost in potrebujemo še lastni vektor. Tu si lahko pomagamo z *inverzno iteracijo*:

Algorithm 15: Potenčna metoda

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, približek za lastno vrednost σ, $z_0 \in \mathbb{C}^n$, $|z_0| = 1$
Result: $z \in \mathbb{C}^n$, $Az \approx \sigma z$
for $k = 0 : \infty$ **do**
  reši sistem $(A - \sigma I)y_{k+1} = z_k$
  $z_{k+1} = y_{k+1}/||y_{k+1}||$
end

Opomba 6.7.

- Inverzna iteracija je potenčna metoda za matriko $(A - \sigma I)^{-1}$.
- V praksi potrebujemo le en do dva koraka inverzne iteracije, da iz poljubnega začetnega vektorja izračunamo pripadajoči lastni vektor.

6.3 Ortogonalna iteracija

Definicija 6.8. Podprostor $U \leq \mathbb{C}^n$ je invarianten za matriko $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, če je

$$\forall x \in U \,.\, Ax \in U.$$

Naj bo $X = \begin{bmatrix} X_1 & X_2 \end{bmatrix}$ nesingularna in $B = X^{-1}AX = \begin{bmatrix} B_{11} & B_{12} \\ B_{21} & B_{22} \end{bmatrix}$.
Stolpci X razpenjajo invariantni podprostor za $A \Leftrightarrow B_{21} = 0$. Lastne vrednosti A so unija lastnih vrednosti B_{11} in B_{22}.

Naj za lastne vrednosti A velja:

$$|\lambda_1| \geq \cdots \geq |\lambda_p| > |\lambda_{p+1}| \geq \cdots \geq |\lambda_n|. \tag{2}$$

Invariantni podprostor X_1 dimenzije p, ki ustreza lastnim vrednostim $\lambda_1, \ldots, \lambda_p$, ke potem *dominanti* invariantni podprostor dimenzije p.

Algorithm 16: Ortogonalna iteracija

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$, $Z_0 \in \mathbb{C}^{n\times p}$, $p \leq n$ z ON stolpci
Result: $Z \in \mathbb{C}^{n\times p}$
for $k = 0 : \infty$ **do**
  $Y_{k+1} \leftarrow AZ_k$
  izračunaj QR razcep $Y_{k+1} = Q_{k+1}R_{k+1}$
  $Z_{k+1} \leftarrow Q_{k+1}$
end

Z uporabo algoritma 16 na diagonali matrike Z dobimo p največjih lastnih vrednosti.

Lema 6.9. *Če velja 2, potem stolpci Z_k za naključno izbrano matriko Z_0 z ON stolpci konvergirajo proti ortogonalni bazi za dominanti invariantni podprostor dimenzije p.*

Če velja še $|\lambda_r| > |\lambda_{r+1}|$ za neka $r < p$, potem prvih r stoplcev Z_k konvergira proti ONB za dominantni invariantni podprostor dimenzije r.

Posledica 6.10. *Če za lastne vrednosti matrike $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$ velja*

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| > \cdots > |\lambda_n|,$$

potem za naključno matriko $Z_0 \in \mathbb{C}^{n\times n}$ z ON stolpci matrika $Z_k^T A Z_k$ iz ortogonalne iteracije konvergira k Schurovi formi.

6.4 QR iteracija

Algorithm 17: Osnovna verzija QR iteracije

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$
Result: Lastne vrednosti matrike A
$A_0 \leftarrow A$
for $k = 0 : \infty$ **do**
  izračunaj QR razcep $A_k = Q_k R_k$
  $A_{k+1} \leftarrow R_k Q_k$
end

Izrek 6.11. *Matrika A_k iz QR iteracije je enaka matrike $Z_k^T A Z_k$, kjer je Z_k matrika iz ortogonalne iteracije za A, kjer vzamemo $Z_0 = I$.*

Zahtevnost enega koraka zmanjšamo s predhodno redukcijo na zgornjo Hessenbergovo matriko.

6.4.1 Redukcija na Hessenbergovo obliko

Vsak korak osnovne QR iteracije zahteva $O(n^3)$ operacij. Zahtevnost zmanjšamo, če matriko na začetku preoblikujemo v zgornjo Hessenbergovo obliko.

Definicija 6.12. Matrika A je *zgornja Hessenbergova*, če je $a_{ij} = 0$ za $i > j + 1$.

Trditev 6.13. *Če je A zgornja Hessenbergova matrika, se njena oblika med QR iteracijo ohranja.*

Realno matriko A lahko z ortogonalno podobnostno transformacijo $Q^T A Q = H$ preoblikujemo v zgornjo Hessenbergovo matriko. Za splošno matriko uporabimo Householderjeva zrcaljenja.

Algorithm 18: Redukcija na zgornjo Hessenbergovo obliko z uporabo zrcaljenj

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$
Result: Ortogonalna matrika Q, Hessenbergova matrika H, da $A = Q^T HQ$

```
Q ← I                                          /* če potrebujemo matriko Q */
for i = 0 : n − 2 do
    določi w_i ∈ ℝ^{n−i} za H. zrcaljenje P_i, ki prezrcali A(i + 1 : n, i) v ±ke_1
    A(i + 1 : n, i : n) ← P_i A(i + 1 : n, i : n)
    A(1 : n, i + 1 : n) ← A(1 : n, i + 1 : n)P_i
    Q(i + 1 : n, 1 : n) ← P_i Q(i + 1 : n, 1 : n)     /* če potrebujemo matriko Q */
end
```

Definicija 6.14. Zgornja Hessenbergova matrika H velikosti $n \times n$ je *nerazcepna*, če so vsi njeni poddiagonalni elementi $h_{i+1,i}$ za $i = 1, \ldots, n-1$ neničelni.

Če je H razcepna, potem problem lastnih vrednosti razpade na dva ali več ločenih problemov. Zato lahko predpostavimo, da je H nerazcepna.
V praksi proglasimo $h_{i+1,i}$ za dovolj majhnega, ko je

$$|h_{i,i-1}| < \varepsilon(|h_{i-1,i-1}| + |h_{ii}|).$$

6.4.2 Premiki

Konvergenco lahko pospešimo z vpeljavo premikov, kot predstavljeno v algoritmu 19

Algorithm 19: QR iteracija s premiki

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$
Result: Premaknjena matrika A

```
A_0 ← A
for k = 0 : ∞ do
    izberi premik σ_k
    izračunaj QR razcep A_k − σ_k I ← Q_k R_k
    A_{k+1} ← R_k Q_k + σ_k I
end
```

Lema 6.15. *Matriki A_k in A_{k+1} pri QR iteraciji s premiki sta ortogonalno podobni.*

Za hitro konvergenco moramo za premik σ_k izbrati čim boljši prebližek za lastno vrednost. Kaj če izberemo točno lastno vrednost?

Lema 6.16. *Naj bo σ lastna vrednost nerazcepne zgornje Hessenbegove matrike A. Če je QR razcep $A - \sigma I = QR$ in $B = RQ + \sigma I$, potem je $b_{n,n-1} = 0$ in $b_{nn} = \sigma$.*

Za premik izberemo čim boljši približek za lastno vrednost matrike A. Uporabljata se naslednji izbiri:

1. *Enojni premik:* za σ_k izberemo $a_{nn}^(k) = \rho(e_n, A_k)$. Primeren le za matrike z realnimi lastnimi vrednostmi.

2. *Dvojni* oz. *Francisov premik*: vzamemo podmatriko

$$A_k(n-1:n, n-1:n) = \begin{bmatrix} a_{n-1,n-1}^{(k)} & a_{n-1,n}^{(k)} \\ a_{n,n-1}^{(k)} & a_{nn}^{(k)} \end{bmatrix},$$

ki ima lastni vrednosti $\sigma_1^{(k)}$ in $\sigma_2^{(k)}$. Sedaj naredimo dva premika v enem koraku:

Algorithm 20: QR iteracija z dvojni premiki

Data: $A \in \mathbb{C}^{n\times n}$

Result: Premaknjena matrika A

$A_0 \leftarrow A$

for $k = 0 : \infty$ **do**

  izračunaj QR razcep $A_k - \sigma_1^{(k)} I \leftarrow Q_k R_k$

  $A_k' \leftarrow R_k Q_k + \sigma_1^{(k)} I$

  izračunaj QR razcep $A_k' - \sigma_2^{(k)} I = Q_k' R_k'$

  $A_{k+1} = R_k' Q_k' + \sigma_2^{(k)} I$

end

7 Polinomska interpolacija

7.1 Uvod

Dane so točke $(x_0, y_0), \ldots, (x_n, y_n)$, kjer so $x_0, \ldots, x_n$ paroma različne. Iščemo funkcijo f, ki *interpolira* te točke, torej

$$\forall i \in \{0, 1, \ldots, n\} \,.\, f(x_i) = y_i.$$

7.2 Lagrangeva interpolacija

Pri polinomski interpolaciji iščemo polinom stopnje največ n, za katerega velja $p(x_i) = y_i$ za vse $i \in \{0, 1, \ldots, n\}$. Tak polinom je *interpolacijski polinom* v točkah (x_i, y_i). Točke $x_0, x_1, \ldots, x_n$ so imenujemo *vozli*.

Če tak polinom iščemo v standardni bazi $1, x, x^2, \ldots, x^n$, potem iščemo koeficiente kot rešitve sistema:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & x_0^2 & \ldots & x_0^n \\ 1 & x_1 & x_1^2 & \ldots & x_1^n \\ \vdots & & & & \\ 1 & x_0 n & x_n^2 & \ldots & x_n^n \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

To je *Vandermondova matrika*, ki je nesingularna za paroma različne točke $x_0, x_1, \ldots, x_n$. Njena determinanta je $\prod_{0 \leq i < j \leq n}(x_j - x_i)$. Torej obstaja enolična rešitev, torej je interpolacijski polinom enoličen.

Izrek 7.1. *Za paroma različne točke $x_0, x_1, \ldots, x_n$ in vrednosti $y_0, y_1, \ldots, y_n$ obstaja natanko en polinom p stopnje največ n, za katerega velja $p(x_i) = y_i$ za vse $i \in \{0, 1, \ldots, n\}$.*

Lagrangeevi bazni polinomi so polinomi:

$$l_{n,i} = \prod_{j=0, i \neq j}^{n} \frac{x - x_j}{x_i = x_j}.$$

Te polinomi tvorijo razčlenitev enote in bazo za vse polinome stopnje n ali manj. Ker velja

$$l_{n,i}(x_j) = \delta_{ij},$$

interpolacijski polinom lahko definiramo na naslednji način:

$$p_n(x) := \sum_{k=0}^{n} y_k l_{n,k}(x).$$

Izrek 7.2. *Naj bo f $n+1$-krat zvezno odvedljiva. Če so $x_0, \ldots, x_n$ paroma različne točke in je p interpolacijski polinom za f na $x_0, x_1, \ldots, x_n$, potem velja:*

$$f(x) = p(x) + \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \omega(x),$$

kjer je

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n) \quad \textit{in} \quad \min\{x_0, x_1, \ldots, x_n\} < \xi < \max\{x_0, x_1, \ldots, x_n\}$$

7.3 Deljene diference

Definicija 7.3. Za paroma različne točke $x_0, x_1, \ldots, x_k$ in funkcijo f je *delna diferenca* $[x_0, x_1, \ldots, x_n]f$ vodilni koeficient mx^k interpolacijskega polinoma za f na točkah $x_0, x_1, \ldots, x_k$.

Izrek 7.4. *Za paroma različne točke $x_0, x_1, \ldots, x_n$ lahko interpolacijski polinom za f zapišemo v obliki:*

$$p(x) = [x_0]f + (x - x_0)[x_0, x_1]f + (x - x_0)(x - x_1)[x_0, x_1, x_2]f + \\ + \cdots + (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})[x_0, x_1, \ldots, x_n]$$

Uporabimo bazo $1, (x - x_0), (x - x_0)(x - x_1), \ldots, (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{n-1})$. Tej obliki pravimo *Newtonova oblika interpolacijskega polinoma.*

Lema 7.5. *Naj bodo $x_0, x_1, \ldots, x_n$ paroma različne točke. potem velja:*

1. *$[x_0, x_1, \ldots, x_n]f$ je simetrična funkcija glede na točke $x_0, x_1, \ldots, x_n$, tj. vrstni red $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ni pomemben.*
2. *Deljena diferenca je linearni funkcional, tj.*

$$[x_0, x_1, \ldots, x_n](\alpha f + \beta g) = \alpha[x_0, x_1, \ldots, x_n]f + \beta[x_0, x_1, \ldots, x_n]g.$$

3. $[x_0, x_1, \ldots, x_k]f = \frac{[x_0, x_1, \ldots, x_k]f - [x_0, x_1, \ldots, x_{k-1}]f}{x_k - x_0}$ *za* $k > 0$, $[x_0]f = f(x_0)$.

Zdaj lahko izračunamo deljene diference po trikotni shemi:

x_i	$[x_i]f$	$[\cdot,\cdot]f$	$[\cdot,\cdot,\cdot]f$
x_0	$F(x_0)$		
		$[x_0, x_1]f$	
x_1	$F(x_1)$		$[x_0, x_1, x_2]f$
		$[x_0, x_2]f$	
x_2	$F(x_2)$		

Opomba 7.6. Velja:

- $[x_0]f = f(x_0)$;
- $[x_0, x_1]f = \frac{[x_1]f - [x_0]f}{x_1 - x_0} = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$. To je smerni koeficient premice skozi $(x_0, f(x_0))$ in $x_1, f(x_1)$.

Opazimo, če je f zvezno odvedljiva, je

$$\lim_{x_1 \to x_0} [x_0, x_1]f = f'(x_0).$$

Interpolacijski polinom $F(x_0) + \frac{F(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}(x - x_0)$ (sekanta) v limiti $x_1 \to x_0$ postane tangenta $f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0)$.

Z uporabo limit lahko definicijo interpolacijskega polinoma razširimo na primere z večkratnimi točkami. Če se točka x_i pojavi m-krat, potem se moreta polinom in f ujemati v x_i in še v prvih $m - 1$ odvodih:

$$p(x_i) = f(x_i),\ p'(x_i) = f'(x_i), \ldots, p^{(m-1)}(x_i) = f^{(m-1)}(x_i).$$

Če dopuščamo tudi ponavljanje točk, za deljene diference velja rekurzivna zveza:

$$[x_0, x_1, \ldots, x_k]f = \begin{cases} \frac{f^{(k)}(x_0)}{k!}, & x_0 = x_1 = \cdots = x_k, \\ \frac{[x_0,x_1,\ldots,x_k]f - [x_0,x_1,\ldots,x_{k-1}]f}{x_k - x_0}, & \text{sicer.} \end{cases}$$

Izrek 7.7. *Za k-krat zvezno odvedljivo funkcijo f velja:*

$$[x_0, x_1, \ldots, x_k]f = \int_0^1 dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \cdots \int_0^{t_{k+1}} f^{(k)}(\xi_k)\, dt_k,$$

kjer je

$$\xi_k = t_k(x_k - x_{k-1}) + t_{k-1}(x_{k-1} - x_{k-2}) + \cdots + t_1(x_1 - x_0) + x_0.$$

Posledica 7.8. *Za k-krat zvezno odvedljivo funkcijo f velja:*

$$[x_0, x_1, \ldots, x_k]f = \frac{f^{(k)}(\xi)}{k!},$$

ze nek $\min\{x_0, x_1, \ldots, x_k\} \leq \xi \leq \max\{x_0, x_1, \ldots, x_k\}$.

Lema 7.9. *Za funkcijo f in točke $x_0, x_1, \ldots, x_n$ in interpolacijski polinom p za f na teh točkah velja:*

$$f(x) = p(x) + [x_0, \ldots, x_n, x]f \cdot (x - x_0) \cdots (x - x_n).$$

Posledica 7.10. *Če p interpolira $(n+1)$-krat zvezno odvedljivo funkcijo f na točkah $x_0, x_1, \ldots, x_n$, potem velja:*

$$f(x) = p(x) = \frac{f^{(n+1)}\xi}{(n+1)!} \cdot \omega(x),$$

za neki $\min\{x_0, x_1, \ldots, x_k\} \leq \xi \leq \max\{x_0, x_1, \ldots, x_k\}$. *Pri tem je ξ odvisen od x.*