# Numerične metode 2 - definicije, tr<br/>ditve in izreki

Oskar Vavtar po predavanjih profesorice Marjetke Knez2020/21

## Kazalo

1	Teo	rija aproksimacije	3
2 Enakomerna aproksimacija zveznih funkcij s polinomi		5	
3	Apı	roksimacija po metodi najmanjših kvadratov	7
4	Inte 4.1 4.2	erpolacija  Lagrangeeva oblika zapisa interpolacijskega polinoma  Newtonova oblika zapisa interpolacijskega polinoma	9 9 11
5	Nu	merično odvajanje	13
6	Numerično integriranje		<b>1</b> 4
	6.1	Sestavljena integracijska pravila	17
	6.2	Ocena napake in Richardsonova ekstrapolacija	17
	6.3	Gaussova pravila	18
7	Numerično reševanje NDE		19
	7.1	Globalna in lokalna napaka	20
	7.2	Runge-Kutta metode	20
	7.3	Sistemi DE 1. in višjega reda	22
8	Numerično računanje lastnih vrednosti		<b>2</b> 4
	8.1	Potenčna metoda	24
	8.2	Inverzna iteracija	25
	8.3	QR iteracija	26

## 1 Teorija aproksimacije

**Definicija 1.1** (Aproksimacijska shema). ZX označimo (realni) vektorski prostor, katerega elemente želimo aproksimirati,  $S \subseteq X$  označuje podprostor oz. podmnožico, v kateri iščemo aproksimant. Aproksimacijska shema je operator  $A: X \to S$ , ki vsakemu elementu  $f \in X$  priredi aproksimacijski element  $\tilde{f} = Af \in S$ .

**Definicija 1.2** (Optimalni aproksimacijski problem). Naj bo X vektorski prostor z normo  $\|\cdot\|$ ,  $S\subseteq X$ . Za  $f\in X$  iščemo  $\tilde{f}\in S$ , da je

$$||f - \tilde{f}|| = \inf_{s \in S} ||f - s|| =: \operatorname{dist}(f, S).$$

**Definicija 1.3.** Recimo, da je  $S = S_n$ , kjer je n dimenzija. Zanima nas, ali za  $f \in X$  in  $\tilde{f}_n \in S_n$  napaka  $||f - \tilde{f}_n||$  konvergira proti 0, ko gre  $n \to \infty$ . Če je to res, je aproksimacijska shema konvergentna.

Če gledamo zaporedje podprostorov  $S_n \subset X$ , mora veljati, da z večanjem svobodnih parametrov postane  $S_n$  gost v X. Za polinome to sledi iz Weierstrassovega izreka.

**Izrek 1.1** (Weierstrassov izrek). Naj bo  $f \in \mathcal{C}([a,b])$  poljubna funkcija. Potem  $\forall \varepsilon > 0$  obstaja polinom p, da je

$$||f-p||_{\infty, [a,b]} < \varepsilon.$$

Drugače povedano:

$$\operatorname{dist}_{\infty}(f, \mathbb{P}_n) \xrightarrow{n \to \infty} 0.$$

**Definicija 1.4** (Bernsteinov polinom).

$$\mathcal{B}_n f(x) = \sum_{i=0}^n f\left(\frac{i}{n}\right) \cdot B_i^n(x),$$

kjer je  $B_i^n$  Bernsteinov bazni polinom:

$$B_i^n(x) := \binom{n}{i} x^i (1-x)^{n-1}, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

Da se pokazati, da gre  $||f - \mathcal{B}_n f||_{\infty, [0,1]} \xrightarrow{n \to \infty} 0$ . Bernsteinov aproksimacijski polinom nam poda en možen način aproksimacije funkcije f (na [0,1]).

**Definicija 1.5** (Bernsteinov aproksimacijski operator).  $\mathcal{B}_n : \mathcal{C}([a,b]) \to \mathbb{P}_n, \ f \mapsto \mathcal{B}_n f$ :

$$\mathcal{B}_n f(x) = \sum_{i=0}^n f\left(a + \frac{i}{n}(b-a)\right) \cdot B_i^n\left(\frac{x-a}{b-a}\right)$$

$$||f - \mathcal{B}_n f||_{\infty, [a,b]} = \max_{x \in [a,b]} |f(x) - \mathcal{B}_n f(x)|$$

## 2 Enakomerna aproksimacija zveznih funkcij s polinomi

**Problem 2.1.** Za dano  $f \in \mathcal{C}([a,b])$  iščemo polinom  $p^* \in \mathbb{P}_n$ , za katerega velja

$$||f - p^*||_{\infty, [a,b]} = \min_{p \in \mathbb{P}_n} ||f - p||_{\infty, [a,b]} = \min_{p \in \mathbb{P}_n} \max_{x \in [a,b]} |f(x) - p(x)|.$$

Ta problem sodi pod optimalne aproksimacijske probleme. Polinom  $p^*$  imenujemo polinom najboljše enakomerne aproksimacije<sup>1</sup> za f na [a,b]. Problem je nelinearen.

**Izrek 2.1.** Naj bo  $f \in \mathcal{C}([a,b])$ . Če je polinom  $p \in \mathbb{P}_n$  takšen, da residual r = f - p doseže svojo normo  $||r||_{\infty, [a,b]}$  alternirajoče v vsaj n+2 točkah  $x_i \in [a,b], a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_{n+1} \leq b$ , potem je p p.n.e.a. za f na [a,b].

**Natančneje:** Če obstaja n+2 točk  $x_i \in [a,b]$ , da je  $||r||_{\infty,[a,b]} = |r(x_i)|$  za  $i=0,1,\ldots,n+1$ , in  $r(x_i)\cdot r(x_{i+1})<0$  za  $i=0,1,\ldots,n$ , potem je  $p\in\mathbb{P}_n$  p.n.e.a. za f na [a,b].

**Definicija 2.1.** Naj bo  $E = \{x_i; a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_{n+1} \le b\}$ . Definirajmo minimaks za f na E:

$$M_n(f, E) = \min_{p \in \mathbb{P}_n} \max_{x \in E} |f(x) - p(x)|$$

Polinom, pri katerem je ta minimum dosežen, imenujemo p.n.e.a. za f na množici E. Dobimo ga tako, da rešimo sistem linearnih enačb:

$$f(x_i) - p(x_i) = (-1)^i m, \quad i = 0, 1, \dots, n+1$$

kjer so neznanke koeficienti polinoma p ter število m.<sup>2</sup>

<sup>&</sup>lt;sup>1</sup>Od tu naprej p.n.e.a.

<sup>&</sup>lt;sup>2</sup>Imamo n+2 enačb za n+2 neznank.

**Algoritem** (Remesov postopek). Vhodni podatki: funkcija f, interval [a,b], stopnja n, toleranca  $\varepsilon$ 

Ponavljaj k = 0, 1, 2, ...

1. Poišči polinom  ${p_k}^* \in \mathbb{P}_n,$  ki zadošča pogojem

$$f(x_i) - p_k^*(x_i) = (-1)^i m, \quad i = 0, 1, \dots, n+1$$

2. Poišči ekstrem residuala  $r_k = f - {p_k}^*,$ torej poišči  $u \in [a,b],$ da bo

$$|r_k(u)| = ||r_k||_{\infty, [a,b]}$$

3. Če je  $|r_k(u)| - |m| < \varepsilon$ , potem končaj in vrni  $p^* = p_k^*$ .

**Opomba.** Da se dokazati, da zaporedje polinomov, ki ga tvori Remesov postopek konvergira proti p.n.e.a.  $p^*$ . Hitrost konvergence je linearna.

## 3 Aproksimacija po metodi najmanjših kvadratov

**Definicija 3.1.** Naj bo X vektorski prostor nad  $\mathbb{R}$  s skalarnim produktom  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ , s kvadratno normo  $\| \cdot \|_2 = \sqrt{\langle \cdot, \cdot \rangle}$ .  $S \subseteq X$  je končnodimenzionalen podprostor v X, definiran kot

$$S = \mathcal{L}in\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}, \quad \dim S = n.$$

Za izbran  $f \in X$ iščemo  $f^* \in S,$ da velja

$$||f - f^*||_2 = \min_{s \in S} ||f - s||_2.$$

 $f^*$ imenujemo element najboljše aproksimacije po metodi najmanjših kvadratov.  $^3$ 

**Izrek 3.1.** Naj bo  $S \subseteq X$ . Element  $f^* \in S$  je element najboljše aproksimacije po MNK za  $f \in X$  natanko tedaj, ko je  $f - f^* \perp S$ .

**Posledica.** Iz izreka sledi konstrukcija. Naj bodo  $\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n$  baza podprostora S.

$$f^* = \sum_{j=1}^n \alpha_j \varphi_j,$$

 $(\alpha_j)_{j=1}^n$ so neznani koeficienti. Veljati mora  $f-f^*\perp S,$ torej  $f-f^*\perp\varphi_i$   $\forall i=1,2,\ldots,n.$  Na podlagi tega dobimo

$$\begin{bmatrix} \langle \varphi_1, \varphi_1 \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_1 \rangle \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle \varphi_1, \varphi_n \rangle & \cdots & \langle \varphi_n, \varphi_n \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle f, \varphi_1 \rangle \\ \vdots \\ \langle f, \varphi_n \rangle \end{bmatrix}.$$

Ta sistem enačb imenujemo Gramov oz. normalni sistem. Numerično ta sistem rešimo z razcepom Choleskega. Levo matriko imenujemo Gramova matrika. Gramova matrika  $G = (\langle \varphi_j, \varphi_i \rangle)_{i,j=1}^n$  je simetrična pozitivno definitna matrika.

 $<sup>^{3}</sup>e.n.a.$  po MNK

**Algoritem** (Gram-Schmidt). Vhodni podatki: baza  $\{\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_n\}$ . Izhod: Ortonormirana baza  $\{\varphi_1, \varphi_2, \dots, \varphi_n\}$ .

## 4 Interpolacija

**Problem 4.1.** Podane so vrednosti izbrane funkcije f v n+1 paroma različnih točkah  $x_0, x_1, \ldots, x_n$  na realni osi<sup>4</sup>, iščemo pa neko preprostejšo funkcijo q, ki zadošča pogojem

$$f(x_i) = g(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

**Problem 4.2** (Polinomska interpolacija). Imejmo funkcijo  $f \in \mathcal{C}([a,b])$  in zaporedje točk

 $a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$ . Iščemo polinom  $p = a_0 + a_1 x + \ldots + a_n x^n \in \mathbb{P}_n$ , ki zadošča pogojem

$$p(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \dots, n.$$

#### 4.1 Lagrangeeva oblika zapisa interpolacijskega polinoma

Definicija 4.1 (Lagrangeevi bazni polinomi).

$$\ell_{0,n}(x) = \frac{(x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)\dots(x_0-x_n)}$$

$$\ell_{1,n}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_2)\dots(x-x_n)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)\dots(x_1-x_n)}$$

$$\vdots$$

$$\ell_{n,n}(x) = \frac{(x-x_0)(x-x_1)\dots(x-x_{n-1})}{(x_n-x_0)(x_n-x_1)\dots(x_n-x_{n-1})}$$

i-ti Lagrangeev bazni polinom lahko posplošimo kot

$$\ell_{i,n}(x) = \prod_{\substack{j=0 \ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}, \quad i = 0, 1, \dots, n$$

Velja:

$$\ell_{i,n}(x_j) = \begin{cases} 1; & i = j \\ 0; & i \neq j \end{cases}$$

 $<sup>{}^4\</sup>mathrm{To}$  so interpolacijske točke.

**Lema 4.1.** Polinomi  $\ell_{i,n}$ , i = 0, 1, ..., n so baza za  $\mathbb{P}_n$ .

Trditev 4.1 (Lagrangeeva oblika zapisa interpolacijskega polinoma).

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_{i,n}(x)$$

**Lema 4.2.** Če je  $f \in \mathbb{P}_n$ , potem je

$$\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_{i,n}(x) = f(x).$$

**Posledica.** Lagrangeevi bazni polinomi tvorijo *particija* oz. *razčlenitev* enote:

$$\sum_{i=0}^{n} \ell_{i,n}(x) = 1.$$

**Izrek 4.1.** Naj bo  $a \leq x_0 < x_1 < \ldots < x_n \leq b, \ f \in \mathcal{C}^{n+1}([a,b])$  in  $p(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i)\ell_{i,n}(x) \text{ interpolacijski polinom za } f \text{ na točkah } x_0, x_1, \ldots, x_n.$  Potem  $\forall x \in [a,b]$  obstaka nek  $\xi_x \in (a,b)$ , da velja

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

$$\omega(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_n), \quad \omega \in \mathbb{P}_{n+1}.$$

**Opomba.** Za poljuben  $x \in [a, b]$  torej velja

$$||f(x) - p(x)||_{\infty, [a,b]} \le \frac{1}{(n+1)!} ||\omega(x)||_{\infty, [a,b]} \cdot ||f^{(n+1)}(x)||_{\infty, [a,b]}$$

#### 4.2 Newtonova oblika zapisa interpolacijskega polinoma

**Problem 4.3.** Za bazo v kateri bomo interpolacijski polinom izrazili, izberemo *prestavljene potence*:

1, 
$$x-x_0$$
,  $(x-x_0)(x-x_1)$ ,  $(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)$ , ...,  $(x-x_0)(x-x_1)$ ... $(x-x_{n-1})$ 

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} c_i(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{i-1})$$

Iščemo  $c_i$ , i = 0, 1, ..., n, da bo  $p(x_i) = f(x_i) \ \forall i$ .

**Definicija 4.2.** Deljiva diferenca  $[x_0, x_1, ..., x_k]f$  je vodilni koeficient interpolacijskega polinoma stopnje  $k^5$ , ki se s funkcijo f ujema v točkah  $x_0, x_1, ..., x_k$ . Sledi

$$p_l(x) = p_{k-1}(x) + [x_0, x_1, \dots, x_k] f(x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_{k-1}).$$

Trditev 4.2 (Newtonova oblika zapisa interpolacijskega polinoma).

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} [x_0, x_1, \dots, x_i] f(x - x_0) (x - x_1) \dots (x - x_{i-1})$$

**Izrek 4.2** (Rekurzivna formula za deljene diference). Naj bodo  $x_0, x_1, \ldots, x_k$  paroma različne točke na x-osi. Tedaj je

$$[x_0, x_1, \dots, x_k]f = \frac{[x_1, x_2, \dots, x_k]f - [x_0, x_1, \dots, x_{k-1}]f}{x_k - x_0}.$$

<sup>&</sup>lt;sup>5</sup>Koeficient pri potenci  $x^k$ .

Algoritem (Hornerjev algoritem). Vhodni podatki:

- $\bullet$   $x_0, x_1, \ldots, x_n$
- $d_0, x_1, \ldots, d_n$
- 2

Izhod:  $v_0$ 

**Definicija 4.3.** Pravimo, da se polinom p z f ujema v točki  $x_i$  (k+1)-kratno, če se ujema v vrednosti in v prvih k odvodih:

$$p(x_i) = f(x_i), \quad p'(x_i) = f'(x_i), \quad \dots \quad p^{(k)}(x_i) = f^{(k)}(x_i).$$

Tak polinom p stopnje k je Taylorjev polinom:

$$p(x) = f(x_i) + f'(x_i)(x - x_i) + \frac{f''(x_i)}{2}(x - x_i)^2 + \ldots + \frac{f^{(k)}(x_i)}{k!}(x - x_i)^k.$$

Posplošitev rekurzivne formule: recimo<sup>6</sup>, da je  $x_i \le x_{i+1} \le \ldots \le x_{i+k}$ :

$$[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]f = \begin{cases} \frac{f^{(k)}(x_i)}{k!}; & x_i = x_{i+1} = \dots = x_{i+k} \\ \frac{[x_{i+1}, \dots, x_{i+k}]f - [x_i, \dots, x_i]}{x_{i+k} - x_i}, & x_i \neq x_{i+k} \end{cases}$$

 $<sup>^6\</sup>mathrm{Vrstni}$ red točk v diferenci ni pomemben.

## 5 Numerično odvajanje

**Problem 5.1.** Iščemo približek za vrednost odvoda funkcije f pri nekem izbranem x. Približek bi radi izrazili s kombinacijo vrednosti funkcije f v bližnjih točkah  $x_0, x_1, \ldots, x_n$ .

**Metoda** (Ideja za izpeljavo aproksimacijskih formul). Kot približek za odvod funkcije f v izbranem x vzamemo vrednost odvoda interpolacijskega polinoma (ki se z f ujema v točkah  $x_0, x_1, \ldots, x_n$ ) pri izbranem x. Vemo že:

$$f(x) = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_{i,n}(x)}_{p(x)} + \omega(x)[x_0, x_1, \dots, x_n, x], f$$

kjer je

$$\omega(x) = \prod_{i=0}^{n} (x - x_i).$$

Odvajamo to formulo:

$$f'(x) = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} f(x_i)(\ell_{i,n}(x))'}_{\text{aproksimacijska formula}} + \underbrace{\left(\omega(x)[x_0, x_1, \dots, x_n, x]f'\right)'}_{\text{napaka: } R(f) \text{ ali } \mathcal{R}f$$

Opomba (Odvod deljene diference).

$$\frac{d}{dx}[x_0, x_1, \dots, x_n, x]f = [x_0, x_1, \dots, x_n, x, x]f$$

**Trditev 5.1** (?).

$$f'(x_k) = p'(x_k) + \omega'(x_k)[x_0, x_1, \dots, x_n, x_k]f + \underbrace{\omega(x_k)}_{0}[x_0, x_1, \dots, x_n, x_k, x_k]f$$

$$f'(x_k) = p'(x_k) + \omega'(x_k) \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}, \quad \xi \in (x_0, x_n)$$

## 6 Numerično integriranje

Problem 6.1. Radi bi izračunal približek za integral

$$\mathcal{S}f = \int_a^b f(x) \, dx.$$

Približek bi radi izrazili s kombinacijo vrednosti funkcije f v izbranih točkah iz intervala [a, b].

$$\mathcal{S}: \mathcal{C}([a,b]) \to \mathbb{R}$$

$$f \mapsto \int_a^b f(x) \, dx$$

Funkcional S je linearen:

$$S(\alpha f + \beta g) = \alpha Sf + \beta Sg, \quad \alpha, \beta \in \mathbb{R}, f, g \in C([a, b]).$$

**Metoda** (Ideja za izpeljavo formul). Namesto funkcije f integriramo interpolacijski polinom za f na točkah  $x_0, x_1, \ldots, x_n$  iz intervala [a, b],  $a \le x_0 < x_1 < \ldots < x_n \le b$ . Vemo:

$$f(x) = p(x) + \omega(x)[x_0, x_1, \dots, x_n]f$$

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} f(x_i)\ell_{i,n}(x)$$

$$\ell_{i,n}(x) = \prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Integriramo prvo enačbo in dobimo

$$\underbrace{\int_a^b f(x) \, dx}_{\mathcal{S}f} \ = \underbrace{\int_a^b p(x) \, dx}_{\text{približek za integral } \mathcal{F}f} + \underbrace{\int_a^b \omega(x) [x_0, x_1, \dots, x_n, x] f \, dx}_{\text{napaka } \mathcal{R}f}$$

Trditev 6.1 (Kvadraturna formula oz. integracijsko pravilo).

$$Sf = \mathcal{F}f + \mathcal{R}f$$

$$\mathcal{F}f = \int_{a}^{b} \sum_{i=0}^{n} f(x_{i})\ell_{i,n}(x) dx = \underbrace{\sum_{i=0}^{n} f(x_{i}) \int_{a}^{b} \ell_{i,n}(x) dx}_{A_{i}}$$

$$\mathcal{F}f = \sum_{i=0}^{n} A_{i}f(x_{i})$$

- $A_i$  ... uteži integracijskega pravila
- $x_0, x_1, \ldots, x_n$  ... vozli integracijskega pravila

**Definicija 6.1.** Red oziroma stopnja integracijskega pravila je enaka m, če je pravilo točno za vse polinome stopnje  $\leq m$ , to je

$$\mathcal{R}p = 0 \quad \forall p \in \mathbb{P}_m \quad \text{in} \quad \mathcal{R}x^{m+1} \neq 0.$$

Glede na izbiro vozlov ločimo:

• Newton-Cotesova pravila: vozle izberemo ekvidistantno:

$$h = \frac{b-a}{n}, \quad x_0 = a$$
  
 $x_i = x_0 + ih, \quad i = 0, 1, 2 \dots, n$ 

Ločimo:

- Pravila odprtega tipa (upoštevamo krajišča):

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i}) + \mathcal{R} f$$

- Pravila zaprtega tipa (ne upoštevamo krajišč):

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{i=1}^{n-1} A_{i} f(x_{i}) + \mathcal{R} f$$

• Gaussova pravila: vozle in uteži določimo tako, da je pravilo največjega možnega reda

**Pravilo** (Trapezno pravilo). Naj velja n = 1,  $a = x_0$  in  $b = x_1 = x_0 + h$ . Potem sledi

$$\int_{x_0}^{x_1} f(x) dx = \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_1)) - \frac{h^3}{2} f''(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_1].$$

Za trapezno pravilo velja

$$\mathcal{R}1 = 0$$
,  $\mathcal{R}(x - x_0) = 0$  ter  $\mathcal{R}(x - x_0)^2 = \frac{h^3}{6} \neq 0$ ,

torej je pravilo reda 1.

**Pravilo** (Simpsonovo pravilo). Naj velja  $n=2,\ a=x_0,\ x_1=x_0+h$  ter  $x_2=x_0+2h=b,$  torej  $h=\frac{b-a}{2}.$  Potem sledi

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x) dx = \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)) - \frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in [x_0, x_2],$$

kjer je  $f \in C^4([x_0, x_2])$ . Simpsonovo pravilo je reda 3.

**Trditev 6.2** (Napaka aritmetike pri Newton-Cotesovih pravilih). Recimo, da velja  $|f(x_i) - \hat{f}(x_i)| < \varepsilon$ . Ocena za napako aritmetike:

$$D_a = \left| \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) - \sum_{i=0}^n A_i \hat{f}(x_i) \right| \le \sum_{i=0}^n |A_i| |f(x_i) - \hat{f}(x_i)| \le \varepsilon \sum_{i=0}^n |A_i|.$$

Ker so pravila točna za konstante velja

$$\int_{a}^{b} 1 \, dx = \sum_{i=0}^{n} A_{i} \cdot 1 \implies \sum_{i=0}^{n} A_{i} = b - a.$$

Če so vse uteži pozitivne, potem  $D_a \le \varepsilon(b-a)$  in ni numeričnih težav.

#### 6.1 Sestavljena integracijska pravila

**Ideja.** Interval [a, b] razdelimo na manjše podintervale in na vsakem podintervalu uporabimo integracijsko pravilo nizkega reda in rezultate seštejemo.

**Pravilo** (Sestavljeno trapezno pravilo).  $h = \frac{b-a}{m}$ 

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{2} \left( f(x_0) + 2 \sum_{i=1}^{m-1} f(x_i) + f(x_m) \right) - \frac{h^2}{12} (b - a) f''(\mu)$$

**Pravilo** (Sestavljeno Simpsonovo pravilo).  $n=2,\ h=\frac{b-a}{2m},\ x_i=a+ih,$   $i=0,1,\ldots,2m$ 

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \frac{h}{3} \left( f(x_{o}) + 4 \sum_{i=0}^{m-1} f(x_{2i+1}) + 2 \sum_{i=0}^{m-1} f(x_{2i}) + f(x_{2m}) \right) - \frac{h^{4}}{180} (b-a) f^{(4)}(\mu)$$

#### 6.2 Ocena napake in Richardsonova ekstrapolacija

**Metoda.** Označimo z $F_n$  približek za I, ki ga dobimo, o računamo s korakom h. Predpostavimo, da velja

$$I = F_n + c_0 \cdot h^p + \mathcal{O}(h^{p+1}),$$

kjer je  $c_0$  konstanta neodvisna od h. Z nekaj vragolijami dobimo

$$I = F_{\frac{h}{2}} + \underbrace{\frac{F_{\frac{h}{2}} - F_{h}}{2^{p} - 1}}_{\text{Ocena za napako približka } F_{\frac{h}{2}}} + \mathcal{O}(h^{p+1}) = F_{h} + 2^{p} \underbrace{\frac{F_{\frac{h}{2}} - F_{h}}{2^{p} - 1}}_{\text{Ocena za napako približka } F_{h}} + \mathcal{O}(h^{p+1})$$

#### 6.3 Gaussova pravila

**Ideja.** Vozle in uteži v integracijskemu pravilo izračunamo tako, da bo pravilo čim višjega reda.

$$\int_{a}^{b} f(x) dx = \sum_{i=0}^{n} A_{i} f(x_{i}) + \mathcal{R} f, \text{ neznanke}: A_{i} \text{ in vozli } x_{i}$$

Če vozle izberemo tako, da bo  $\omega \perp \mathbb{P}_n$ , potem je red pravila enak 2n+1. Velja tudi obratno.

**Opomba** (Drug način). Iz baze  $\{1, x, x^2, \dots, x^n, x^{n+1}\}$  izračunamo ON bazo polinomov  $p_0, p_1, \dots, p_n, p_{n+1}$ . Iz pogoja  $\omega \perp \mathbb{P}_n$  vidimo, da za vozle  $x_0, x_1, \dots, x_n$  izberemo ničle polinoma  $p_{n+1}$ .

Izrek 6.1. Naj bo  $\mathcal{F}f = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i)$  Gaussovo integracijsko pravilo reda

2n+1. Uteži

$$A_i = \int_a^b \ell_{i,n}(x) dx$$

so pozitivne. Za  $f \in \mathcal{C}^{2n+2}([a,b])$ je napaka oblike

$$\mathcal{R}f = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)!} \int_{a}^{b} \omega^{2}(x) dx, \quad \xi \in [a, b].$$

V integral, ki ga izračunamo, lahko vstavimo še pozitivno utež  $\rho(x) > 0$ .

## 7 Numerično reševanje NDE

Problem 7.1 (Začetni problem).

Začetni problem reda 1:

$$y' = f(x, y), \quad f: [a, b] \times \mathbb{R} \to \mathbb{R}$$
  
 $y(a) = y_a$ 

Začetni problem reda p:

$$y^{(p)} = f(x, y, y', \dots, y^{(p-1)})$$
  
 $y(a) = y_a, y'(a) = y_{a,1}, y^2(a) = y_{a,2}, \dots, y^{(p-1)}(a) = y_{a,p-1}$ 

Problem 7.2 (Robni primer).

$$y^{(4)} + xy = 0$$
  
 $y(a) = y_a, y'(a) = y_{a,1}$   
 $y(b) = y_b, y'(b) = y_{b,1}$ 

Metoda (Eksplicitna Eulerjeva metoda).

$$y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n), \quad x_{n+1} = x_n + h$$

 $y_{n+1} = y_n + hf(x_{n+1}, y_{n+1})$ 

Metoda (Implicitna Eulerjeva metoda).

**Metoda** (Trapezna metoda).  $x_n = a + nh$ 

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f(x_n, y_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}))$$

#### 7.1 Globalna in lokalna napaka

**Definicija 7.1.** Metoda je *konvergentna*, če za vse DE, ki zadoščajo pogojem eksistenčnega izreka, velja:

$$||y - y_n||_{\infty,[a,b]} \xrightarrow{h \to 0} 0,$$

oziroma:

$$\max_{0 \le n \le m} |y(x_n) - y_n| \xrightarrow{h \to 0 \text{ oz. } m \to \infty} 0.$$

Definicija 7.2 (Globalna napaka).

$$\max_{0 \le n \le m} |y(x_n) - y_n|$$

Globalna točka v točki  $x_n$ :

$$|y(x_n)-y_n|$$

**Definicija 7.3.** Metoda je reda r, če velja

$$\max_{0 \le n \le m} |y(x_n) - y_n| = C \cdot h^r + \mathcal{O}(h^{r+1}) = \mathcal{O}(h^r).$$

**Definicija 7.4.** Lokalna napaka v točki  $x_n$  je razlika med točno rešitvijo in njenim numeričnim približkom, ob predpostavki, da se ti dve rešitvi ujemata na vseh prejšnih korakih.

$$\mathcal{T}_n(n) = y(x_n) - y_n$$
, če  $y(x_k) = y_k \ \forall k < n$ .

#### 7.2 Runge-Kutta metode

**Metoda** (s-stopenjska Runge-Kutta metoda). Izračunamo s koeficientov:

$$k_i = h \cdot f(x_i + \alpha_i \cdot h, \ y_n = \sum_{j=1}^{s} \beta_{ij} k_j), \quad i = 1, 2, \dots, s$$

$$y_{n+1} = y_n + \sum_{i=1}^{s} \gamma_i \cdot k_i$$

Pri tem so  $\alpha_i, \beta_{ij}, \gamma_i$  koeficienti, ki jih določimo tako, da je metoda čim višjega reda.

$$\alpha_i \in [0,1]$$

$$\alpha_i = \sum_{j=1}^s \beta_{ij}$$

Da bo R-K metoda reda vsaj 1, mora biti  $\sum_{i=1}^{s} \gamma_i = 1$ . R-K metode podamo v  $Butcherjevi\ shemi$ :

$$\begin{array}{c|ccccc} \alpha_1 & \beta_{11} & \beta_{12} & \dots & \beta_{1s} \\ \alpha_2 & \beta_{21} & \beta_{22} & \dots & \beta_{2s} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \alpha_s & \beta_{s1} & \beta_{s2} & \dots & \beta_{ss} \\ \hline & \gamma_1 & \gamma_2 & \dots & \gamma_s \end{array}$$

Če so  $\beta_{ij}=0 \ \forall j\geq i$ , je metoda eksplicitna. Če so  $\beta_{ij}=0 \ \forall j>i$  in je vsaj en  $\beta_{ii}\neq 0$ , je metoda diagonalno implicitna. Sicer je implicitna.

Metoda (Modificirana Eulerjeva metoda).

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 \\
\frac{1}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\
\hline
& 0 & 1 \\
\end{array}$$

Lokalna napaka je reda 3, oz. metoda je reda 2.

Metoda (Heunova metoda).

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 \\
1 & 1 & 0 \\
\hline
& \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}$$

Lokalna napaka je reda 3.

Metoda.

$$\begin{array}{c|cccc}
0 & 0 & 0 \\
1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \\
\hline
& \frac{1}{2} & \frac{1}{2}
\end{array}$$

Lokalna napaka je reda 3. Metoda je diagonalno implicitna.

Metoda (4-stopenjska R-K metoda).

#### 7.3 Sistemi DE 1. in višjega reda

#### Problem 7.3.

$$\begin{array}{ll} \overline{\underline{Y}} \; := \; \begin{bmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_d \end{bmatrix}, \quad \text{vektorska funkcija} \quad \overline{\underline{Y}} : [a,b] \to \mathbb{R}^d \\ \\ F \; := \; \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_d \end{bmatrix}, \quad \text{preslikava} \quad F : [a,b] \times \mathbb{R}^d \to \mathbb{R}^d \\ \\ \Longrightarrow \overline{\underline{Y}}' \; = \; F(x,\overline{\underline{Y}}), \quad \overline{\underline{Y}}(a) \; = \; \overline{\underline{Y}}_a = \begin{bmatrix} y_{1,a} \\ \vdots \\ y_{d,a} \end{bmatrix} \end{array}$$

Vse metode, ki smo jih spoznali, lahko direktno uporabimo za sisteme DE 1. reda.

Euler:

$$\overline{\underline{Y}}_{n+1} = \overline{\underline{Y}}_n + h \cdot F(x_n, \overline{\underline{Y}}_n)$$

**Metoda** (Reševanje DE višjega reda). Začetni problem reda p:

$$y^{(p)} = f(x, y, y', \dots, y^{(p-1)})$$
$$y(a) = y_{a,0}, y'(a) = y_{a,1}, \dots, y^{(p-1)}(a) = y_{a,p-1}$$

Preko novih neznanih funkcij  $z_1, z_2, \dots, z_{p-1}$  prevedemo na sistem DE 1. reda:

$$z_{1} = y'$$

$$z_{2} = z'_{1} = y''$$

$$z_{3} = z'_{2} = y'''$$

$$\vdots$$

$$z_{p-1} = z'_{p-2} = y^{(p-1)}$$

$$z'_{p-1} = y^{(p)} = f(x, y, z_{1}, z_{2}, \dots, z_{p-1})$$

Dobimo:

$$\Rightarrow \begin{bmatrix} y \\ z_1 \\ z_2 \\ \vdots \\ z_{p-2} \\ z_{p-1} \end{bmatrix}' = \begin{bmatrix} z_1 \\ z_2 \\ z_3 \\ \vdots \\ z_{p-1} \\ f(x, y, z_1, \dots, z_{p-1}) \end{bmatrix}$$

$$\overline{\underline{Y}}' = F(x, \overline{\underline{Y}}) = \begin{bmatrix} \underline{\underline{Y}}(2) \\ \underline{\overline{Y}}(3) \\ \vdots \\ \underline{\underline{Y}}(p) \\ f(x, \overline{\underline{Y}}(1), \dots, \underline{\overline{Y}}(p)) \end{bmatrix}$$

$$\overline{\underline{Y}}(a) = \begin{bmatrix} y_{a,0} \\ y_{a,1} \\ \vdots \\ y_{a,p-1} \end{bmatrix}$$

## 8 Numerično računanje lastnih vrednosti

#### 8.1 Potenčna metoda

**Problem 8.1.** Za dano matriko  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  iščemo dominantno lastno vrednost<sup>7</sup> in pripradajoč (dominantni) lastni vektor.

#### Algoritem.

$$\begin{array}{rcl} z_0 &=& \frac{z_0}{\|z_0\|} \\ \text{for } k &=& 0 \text{,1,2,...} \\ z_{k+1} &=& \frac{\text{A} \, z_k}{\|\text{A} \, z_k\|} \end{array}$$

Dobimo zaporedje vektorjev  $z_0, z_1, z_2, \dots$ 

Izrek 8.1. Naj bo  $\lambda_1$  dominantna lastna vrednost A,

$$|\lambda_1| > |\lambda_2| \ge |\lambda_3| \ge \ldots \ge |\lambda_n|.$$

Potem za poljuben začetni vektor  $z_0$ ,  $||z_0|| = 1$ , zaporedje vektorjev  $(z_k)_k$ , ki jih tvori potenčna metoda, konvergira proti dominantnemu lastnemu vektorju.

**Opomba.** Predpostavka  $\alpha_1 \neq 0$  je v praksi izpolnjena zaradi zaokrožitvenih napak aritmetike.

**Metoda** (Od lastnega vektorja do lastne vrednosti). Označimo Reyleighov kvocient:

$$\rho(x,A) = \frac{x^T A x}{x^T x}$$

Ko izračunamo  $z_k$ , moramo izračunati še  $\rho_k = \rho(z_k, A) = z_k^T A z_k$ . Zaustavitveni kriterij:  $||Az_k - \rho_k z_k||_2 < tol$ .

<sup>&</sup>lt;sup>7</sup>Največjo po absolutni vrednosti.

Vhodni podatki: A, toleranca  $\varepsilon$ 

$$\begin{array}{l} z_0 \\ k \; = \; 0 \\ y_1 \; = \; A \; z_0 \\ s_0 \; = \; z_0^T \; y_1 \\ \text{while } ( \| y_{k+1} \; - \; \rho_k \; z_k \| \; > \; \varepsilon ) \;\; \& \;\; (k \; \leq \; \text{max\_koraki}) \\ k \; = \; k+1 \\ z_k \; = \; \frac{y_k}{\| y_k \|} \\ y_{k+1} \; = \; A \; z_k \\ \rho_k \; = \; z_k^T \; y_{k+1} \\ \text{end} \end{array}$$

Konvergenca je linearno, hitrost je odvisna od razmerja  $\left| \frac{\lambda_2}{\lambda_1} \right|$ .

#### 8.2 Inverzna iteracija

**Problem 8.2.** Iz danega približka za lastno vrednost bi radi izračunali "točno" lastno vrednost in pripadajoč lastni vektor. Naj bo  $\sigma$  približek za  $\lambda_i$ :

$$\frac{|\sigma - \lambda_i|}{|\sigma - \lambda_i|} < \frac{|\sigma - \lambda_j|}{|\sigma - \lambda_i|} \quad \forall j \neq i$$

Naj bo  $A = X\Lambda Y^{-1}$ ,  $\Lambda = \operatorname{diag}(\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n)$ ,  $X = [x_1, x_2, \dots, x_n]$ 

$$(A - \sigma I)^{-1} = (X\Lambda X^{-1} - \sigma X X^{-1})^{-1} = (X(\Lambda - \sigma I)X^{-1})^{-1} =$$

$$= (X^{-1})^{-1}(\Lambda - \sigma I)^{-1}X^{-1} = X \begin{bmatrix} \frac{1}{\lambda_1 - \sigma} & & \\ & \ddots & \\ & & \frac{1}{\lambda_2 - \sigma} \end{bmatrix} X^{-1}$$

 $\frac{1}{\lambda_i-\sigma}$ je dominantna lastna vrednost matrike  $(A-\sigma I)^{-1},$  pripadajoč lastni vektor pa je kar $x_i.$ 

**Algoritem.** Vhodni podatki: A, približek  $\sigma$ 

$$\begin{array}{lll} z_0 &=& \frac{z_0}{\|z_0\|} \\ \text{for } k &=& 0\;, 1\;, 2\;, \dots \\ & \text{resi sistem } (A \;-\; \sigma I)\; y_{k+1} \;=\; z_k \\ z_{k+1} &=& \frac{y_{k+1}}{\|y_{k+1}\|} \end{array}$$

#### 8.3 QR iteracija

**Algoritem** (Osnovna verzija). Vhodni podatek: A

$$A_0$$
 = A for k = 0,1,2,... izracunaj QR razcep matrike  $A_k$  =  $Q_k\,R_k$   $A_{k+1}$  =  $R_k\,Q_k$  end

Dobimo zaporedje matrik  $A_0, A_1, A_2, \ldots$ 

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k = \dots = Q_k^T Q_{k-1}^T \dots Q_0^T A_0 Q_0 Q_1 \dots Q_k$$

Izrek 8.2. Naj za lastne vrednosti  $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$  velja  $|\lambda_1| > \ldots > |\lambda_n|$ . Potem zaporedje matrik, ki ga tvori QR iteracija konvergira proti zgornje trikotni matriki iz Schurovega razcepa. Zaustavitveni kriterij:

$$\max_{1 \le i \le i \le n} |A_k(i,j)| < \varepsilon.$$

Algoritem (Premiki). Vhodni podatki: zgornje Hessova matrika H

$${\rm A_0}$$
 = H for k = 0,1,2,... izberi premik  $\sigma_{\rm k}$  izracunaj QR razcep matrike  ${\rm A_k}$  -  $\sigma_{\rm k}\,{\rm I}$  = Q\_k R\_k  ${\rm A_{k+1}}$  = R\_k Q\_k +  $\sigma_{\rm k}\,{\rm I}$  end

$$A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I = Q_k^T (A_k - \sigma_k I) Q_k + \sigma_k I = Q_k^T A_k Q_k$$