LINEÁRIS HIBA-ANALÍZIS

Alaphelyzet: $A, \delta A \in \mathrm{Mat}(N, N, \mathbb{R})$, $b, \delta b, x, \delta x \in \mathrm{Mat}(N, 1, \mathbb{R})$ adott mátrixok ill. oszlopvektorok (itt δ nem operátor, csak "hibatagra" utaló jelölés), ahol

$$Ax = b \quad \text{(az ideális egyenlet)}, \qquad (A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b \quad \text{(a számított megoldás)}.$$

Feltevés (technikai)**:** $\det(A) \neq 0$, $\|A^{-1}\delta A\| < 1$.
Megjegyzés. Ekkor $A + \delta A$ is invertálható. Nevezetesen

$$\begin{aligned}(A + \delta A)^{-1} &= \left[A(1 + A^{-1}\delta A)\right]^{-1} = (1 + A^{-1}\delta A)^{-1}A^{-1} = \\ &= \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n \left[A^{-1}\delta A\right]^n A^{-1}, \\ \|(A + \delta A)^{-1}\| &\leq \sum_{n=0}^{\infty} \left\|A^{-1}\delta A\right\|^n \|A^{-1}\| = \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\delta A\|}.\end{aligned}$$

Emlékezető: $K(A) := \|A\|\,\|A^{-1}\|$ az A mátrix *feltételi konstansa* (conditional constant).

Alaptétel (az adatérzékenységről)**.** A feltevések mellett a relatív hibákra

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \frac{K(A)}{1 - \|A^{-1}\delta A\|}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right).$$

Bizonyítás. $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$, $Ax = b$, $\Longrightarrow (\delta A)x + (A + \delta A)\delta x = \delta b$,

$$\begin{aligned}&\delta x = (A + \delta A)^{-1}\left[\delta b - (\delta A)x\right], \\ &\|\delta x\| \leq \|(A + \delta A)^{-1}\|\left[\|\delta b\| + \|\delta A\|\,\|x\|\right],\end{aligned}$$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \leq \|(A + \delta A)^{-1}\|\left[\frac{\|\delta b\|}{\|x\|} + \|\delta A\|\right].$$

Észrevétel:

$$\begin{aligned}Ax = b \Longrightarrow &\|b\| = \|Ax\|, \\ &\|b\| \leq \|A\|\,\|x\|, \\ &\frac{1}{\|x\|} \leq \frac{\|A\|}{\|b\|}.\end{aligned}$$

Vagyis

$$\begin{aligned}\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} &\leq \|(A + \delta A)^{-1}\|\left(\frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\|A\| + \|\delta A\|\right) \leq \\ &\leq \frac{\|A^{-1}\|}{1 - \|A^{-1}\delta A\|}\|A\|\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right). \quad \text{Qu.e.d.}\end{aligned}$$

Következmény. $\|A^{-1}\|\,\|\delta A\| < 1 \Longrightarrow$

$$\frac{\|\delta x\|}{\|x\|} \le \frac{K(A)}{1 - K(A)\|\delta A\|/\|A\|}\left(\frac{\|\delta A\|}{\|A\|} + \frac{\|\delta b\|}{\|b\|}\right).$$

Megjegyzés. A $\|\cdot\|$ norma tetszőleges $\mathbb{R}^N \equiv \mathrm{Mat}(N, q, , \mathbb{R})$-beli norma alapján lehet. Mi általában a $\|z\|_2 := \left[\sum_{k=1}^N z_k^z\right]^{1/2}$, $\|B\|_2 := \sup\left\{\|Bz\|_2 : \|z\|_2 = 1\right\}$ euklideszi normát használjuk. Érdekes geometriai tény:

$$\frac{1}{K_2(A)} = \min\left\{\frac{\|\delta A\|_2}{\|A\|_2} : A + \delta A \text{ nem-invertálható}\right\}.$$

Becslés komponenensenként ($\delta b = 0$ ill. $\delta A = 0$ esetén)**.**
Jelölés: $|Z| := \left[|z_{ij}|\right]_{i=1\,j=1}^{K\ \ M}$ tetsz. $K \times M$-es mátrixnál; $e^{[i]} := [i.$ egységvektor$]$.

Tétel. Tegyük fel, hogy $|\delta A| \le \gamma|A|$, $|\delta b| \le \gamma|b|$ az $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b$ adatérzékenységi egyenletnél. Ekkor az $s^{[i]} := [e^{[i]}]^{\mathrm{T}} A^{-1}$ sorvektorokkal

(1) ismert $\delta b = 0$ és ismert $\widehat{x} := x + \delta x$ esetén $\quad |\delta x_i| \le \gamma |s^{[i]}|\,|A|\,|\widehat{x}|$;

(2) $\delta A = 0$ esetén $\quad |\delta x_i| \le \gamma |s^{[i]}||b|, \quad \dfrac{|\delta x_i|}{|x_i|} \le \gamma \dfrac{|s^{[i]}||b|}{|s^{[i]}b|}$.

Bizonyítás. $(A + \delta A)(x + \delta x) = b + \delta b \quad \Rightarrow$

$$\begin{aligned} A\delta x &= -(\delta A)(x + \delta x) + \delta b, \\ \delta x &= A^{-1}[-(\delta A)(x + \delta x) + \delta b], \\ \delta x_i &= [e^{[i]}]^{\mathrm{T}}\delta x = [e^{[i]}]^{\mathrm{T}} A^{-1}[-(\delta A)(x + \delta x) + \delta b] = \\ &= s^{[i]}[-(\delta A)(x + \delta x) + \delta b]. \end{aligned}$$

(1) HA $\delta b = 0$, $\quad |\delta x_i| \le |s^{[i]}|\,|\delta A|\,|\underbrace{x + \delta x}_{\widehat{x}}| \le \gamma |s^{[i]}|\,|A|\,|\widehat{x}|$;

(2) HA $\delta A = 0$, $\quad |\delta x_i| \le |s^{[i]}|\,|\delta b| \le \gamma |s^{[i]}|\,|b|$,

$$\frac{|\delta x_i|}{|x_i|} \le \gamma \frac{|s^{[i]}||b|}{|e^{[i]}A^{-1}b|} \le \gamma \frac{|s^{[i]}||b|}{|s^{[i]}b|}.$$

ELIMINÁCIÓS MÓDSZEREK

Adottak: $A := [\alpha_{ij}]_{i=1}^{m}{}_{j=1}^{n} \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$ $(m \times n)$-es valós mátrix,
$b := [\beta_1, \dots, \beta_m]^{\mathrm{T}} \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, 1)$ m-es oszlopvektor.

Cél: Oldjuk meg az $Ax = b$ egyenletrendszert, azaz határozzuk meg azon $x := [\xi_1, \dots, \xi_n]^{\mathrm{T}} \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, n, 1)$ vektorok halmazát, amelyekre

$$\text{(E)} \qquad \begin{array}{ccccccc} \alpha_{11}\xi_1 & + & \cdots & + & \alpha_{1n}\xi_n & = & \beta_1 \ , \\ \vdots & & & & \vdots & & \vdots \\ \alpha_{m1}\xi_1 & + & \cdots & + & \alpha_{nn}\xi_n & = & \beta_m \ . \end{array}$$

Tétel. *Legyen* $T := \big[\tau_{ij}\big]_{i=1}^{m}{}_{i,j=1}^{m} \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m)$. *Ekkor a* $TAx = Tb$ *egyenletrendszer jelentése*

$$\text{(TE)} \qquad \begin{array}{l} \tau_{11}\big[\text{(E) 1. sora}\big] + \tau_{12}\big[\text{(E) 2. sora}\big] + \cdots + \tau_{1m}\big[\text{(E) } m\text{. sora}\big] \ , \\ \tau_{21}\big[\text{(E) 1. sora}\big] + \tau_{22}\big[\text{(E) 2. sora}\big] + \cdots + \tau_{2m}\big[\text{(E) } m\text{. sora}\big] \ , \\ \qquad \vdots \qquad\qquad\qquad \vdots \qquad\qquad\qquad\qquad \vdots \\ \tau_{m1}\big[\text{(E) 1. sora}\big] + \tau_{m2}\big[\text{(E) 2. sora}\big] + \cdots + \tau_{mm}\big[\text{(E) } m\text{. sora}\big] \ . \end{array}$$

A (TE) *egyenletrendszer megoldásai pontosan ugyanazok, mint az eredeti* (E) *rendszeré, ha* T *invertálható. Ha* $\det(T) = 0$, *akkor van olyan* A *mátrix, amelynél* $\{$(TE) megoldásai$\} \neq$ (TE) megoldásai$\}$. ☐

Példa. [Klasszikus Gauss-elimináció].
Tegyük fel, hogy $m = n$ és az (E) egyenlet A mátrixának minden $\big[\alpha_{ij}\big]_{i,j=1}^{k}$ $(k = 1, \dots, n)$ főminora invertálható, azaz

$$\delta_k := \det\big[\alpha_{ij}\big]_{i,j=1}^{k} \neq 0 \ .$$

Ekkor (E) megoldásait a következő (TE)-típusú lépésekben találjuk meg.

1) A 2. 3. $\cdots n$. sorokból kivonva az 1. sor alkalmas többszöröseit, eltüntetjük (*elimináljuk*) az 1. oszlpban a főátló alatti elmeket. Mátrix-alakban: az $I := \big[$egységmátrix$\big]$, $I_{pq} := \big[$1 a (p, q) helyen, 0 másutt$]$ $(n \times n)$-es mátrixokkal

$$(\mathrm{A}^{(1)}) \qquad A^{(1)}x = b^{(1)} \ , \quad \text{ahol} \quad A^{(1)} := T^{(1)}A, \ \ b^{(1)} := T^{(1)}b;$$

$$T^{(1)} := I - \frac{\alpha_{21}}{\alpha_{11}} I_{21} - \cdots - \frac{a_{n1}}{a_{11}} I_{n1} \ .$$

Ez megtehető, mivel $\alpha_{11} = \delta_1 \neq 0$. Eredmény: $A^{(1)}$ tagjaira $\alpha_{ij}^{(1)} = 0$ $(i > j = 1)$.

Ezután rendre $k = 2, \dots, n-1$ mellett a következőt tesszük.

k) Tegyük fel, hogy az 1) ... $k-1$) lépésekben mindig csak nagyobb indexű sorból vontunk ki kisebb indexű (felettük levő) sorok többszöröseit, és ezzel már megkonstruáltuk $A^{(k-1)}$-et úgy, hogy az első $(k-1)$ oszlopában a főátló alatt 0-k vannak.
Ekkor a $(k+1)$. $(k+2)$. $\cdots n$. soraiból kivonva az k. sor alkalmas többszöröseit, elimináljuk az első k oszlopban a főátló alatti elmeket:

$$(\mathrm{A}^{(k)}) \qquad A^{(k)}x = b^{(k)} \ , \quad \text{ahol} \quad A^{(k)} := T^{(k)}A^{(k-1)}, \ b^{(k)} := T^{(k)}b^{(k-1)};$$

$$T^{(k)} := I - \frac{\alpha_{k+1,k}^{(k-1)}}{\alpha_{kk}^{(k-1)}} I_{k+1,k} - \cdots - \frac{\alpha_{nk}^{(k-1)}}{\alpha_{kk}^{(k-1)}} I_{nk} \ .$$

Eredmény: $A^{(k)}$ tagjaira $\alpha_{ij}^{(k)} = 0$ $(i > j \leq k)$ áll.
Ez megtehető (azaz $\alpha_{kk}^{(k-1)} \neq 0$) a következő okból. Mint elemi lineáris algebából ismert, egy mátrix determinánsát nem váltotatja, ha egyes soraiból más sorai többszöröseit kivonjuk. Az 1) ... $k-1$) lépések sormanipulációinak hatása a főminorokon nem hoz be rajtuk kívüli sor többesének kivonását. Ezért

$$\det\big[\alpha_{ij}^{(\ell)}\big]_{i,j=1}^{\ell} = \delta_\ell \neq 0 \qquad (1 \leq \ell < k).$$

A konstrukció szerint az $\big[\alpha_{ij}^{(k-1)}\big]_{i,j=1}^{k-1}$ főminor felső trianguláris (0-k vannak a főátlója alatt). Ezért $\ell = 1, \ldots, k-1$ mellett $\delta_\ell = \det\big[\alpha_{ij}^{(\ell)}\big]_{i,j=1}^{\ell} = \prod_{i=1}^{\ell} \alpha_{ii}^{(k-1)}$. Speciálisan $\alpha_{kk}^{(k-1)} = \delta_k/\delta_{k-1} \neq 0$, ami bizonyítja, hogy az ($\mathrm{A}^{(k)}$ átalakítás jól-definiált.
Befejezés:

n) Az $(n-1)$. lépés eredménye *felső-trianguláris* $A^{(n-1)}$ mátrix, amelynek főátlójában a $\delta_1, \delta_2/\delta_1, \ldots, \delta_n/\delta_{n-1} \neq 0$ számok állnak. Az $A^{(n-1)}x = b^{(n-1)}$ egyenlet egyszerű visszahelyettesítéssel megoldható:
$\xi_n = \beta_n^{(n-1)}/\alpha_{nn}^{(n-1)}$,
$\xi_k = \big[\beta_k^{(n-1)} - \sum_{\ell:\, \ell>k} \alpha_{k\ell}^{(n-1)}\xi_\ell\big]/\alpha_{kk}^{(n-1)} \qquad (k = n-1, n-2, \ldots, 1).$

Definíció. $\Delta \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$ *indikátormátrix* (vagy *helymátrix*), ha a tagjai csupa 0, 1-ek. Az $A = \big[\alpha_{ij}\big]_{i=1}^{m}{}_{j=1}^{m}$ mátrix *indikátora* (*helymátrixa*)

$$\chi(A) := \Big[\big[1 \text{ ha } \alpha_{ij} \neq 0, \ 0 \text{ ha } \alpha_{ij} = 0\big]\Big]_{i=1}^{m}{}_{j=1}^{m} .$$

Legyen $\Delta \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$ egy indikátormátrix, és ezzel

$$\mathcal{Z}_\Delta := \big\{ Z \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n) : \ \chi(Z) \leq \Delta \big\} \ .$$

Megjegyzés. Egy $Z \in \mathcal{Z}_\Delta$ mátrix minden olyan helyén 0 áll, ahol Δ-ban 0 van. Az $A \odot B = \big[\alpha_{ij}\beta_{ij}\big]_{i=1}^{m}{}_{j=1}^{n}$ pontonkénti szorzással $\mathcal{Z}_\Delta = \{Z : \ \Delta \odot Z = Z\}$. Ez mutatja, hogy $\mathcal{Z}_\Delta$ altér $\mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$-ben.

Definíció. A $T \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m)$ mátrix Δ-*tartó*, ha $TZ \in \mathcal{Z}_\Delta$ valahányszor $Z \in \mathcal{Z}_\Delta$;

$$\mathcal{T}_\Delta := \{T \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m) : \ \det(T) \neq 0 \ \text{ és } T \ \Delta\text{-tartó}\} \ .$$

Lemma. *A* $T = [\tau_{ij}]_{i,j=1}^{m}$ *mátrix pontosan akkor* Δ*-tartó, ha*

$$\text{(T)} \qquad \forall\, i, j \qquad \tau_{ij} \neq 0 \implies [\Delta \ i.\text{sora}] \geq [\Delta \ j.\text{sora}] \ .$$

Bizonyítás. Tegyük fel, hogy $(*)$ teljesül, és legyen $Z \in \mathcal{Z}_\Delta$. Belátandó: $TZ \in \mathcal{Z}_\Delta$. Tekintsünk egy i indexet, és legyen $J := \{j : \ \tau_{ij} \neq 0\}$. Ekkor $[TZ \ i.\text{ sora}] = \sum_{j \in J} \tau_{ij} [Z \ j.\text{ sora}]$. Észrevétel: $(*)$ miatt bármely $j \in J$ indexre Z j. sorában 0 áll azokon a helyeken, ahol a Δ mátrix i. sorában 0 van. Ezért $[TZ \ i.\text{ sora}]$-ban is 0 van ott, ahol Δ i. sora]-ban 0 van. Az i index tetszőlegessége miatt ez épp azt jelenti, hogy $TZ \in \mathcal{Z}_D$.
Fordítva: tegyük fel, hogy $(*)$ nem teljesül. Ekkor valamely i, j, k-ra $\tau_{ij} \neq 0$, $d_{ik} = 0$ és $d_{jk} = 1$, ahol $d_{pq} := [\Delta \ pq.\ tagja]$. Most a $Z := I_{jk}$ választásra $[TZ \ i.\text{ sora}] = \tau_{ij} [I_{jk} \ j.\text{ sora}]$. Mivel $d_{ik} = 0$, most nem lehet $TZ = TI_{jk} \in \mathcal{Z}_\Delta$. □

Következmény. *T pontosan akkor Δ-tartó, ha* $\chi\Big(\chi(T)\Delta\Big) \leq \Delta$.

Bizonyítás. Vegyünk egy tetszőleges i indexet, és legyen $J := \{j : \ [\chi(T)]_{ij} \neq 0\} = \{j : \tau_{ij} \neq 0\}$. Ekkor $[\chi(T)\Delta \ i.\text{ sora}] = \sum_{j \in J} [\Delta \ j.\text{ sora}]$. Itt pontosan akkor áll 0 azokon a helyeken, ahol $[\Delta \ i.\text{ sora}]$-ban 0 van, ha $(*)$ teljesül. □

Definíció. Egy $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$ mátrixon végrehajtott *szigorú elimináció* (sormanipuláló elimináció) alatt olyan nem-szinguláris (nem 0-determinánsú) $T^{(1)}, \ldots, T^{(r)} \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m)$ mátrixokkal való bal-szorzás-sorozatot értünk, amelyre az

$$(**) \qquad A^{(1)} := T^{(1)}A \ , \quad A^{(2)} := T^{(2)}A^{(1)} \ , \ \ldots \ , \ A^{(r)} := T^{(r)}A^{(r-1)}$$

mátrixoknál

$$\chi(A) \ > \ \chi(A^{(1)}) \ > \ \cdots \ > \ \chi(A^{(r)}) \ .$$

Megjegyzés. Ez a fogalom túl naív. Példa: az egyszerű Gauss-eliminációt az $A := \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 0 \end{bmatrix}$ mátrixon a $T^{(1)} := \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ -1 & 1 \end{bmatrix}$ bal-szorzás adja az $A^{(1)} = T^{(1)}A = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ eredménnyel. Vagyis ez nem erős elimináció. Az jó elimináció-fogalom ennél bonyolultabb: tervet kell magába foglalnia arról, hol akarunk kinullázni.

Definíció. Legyen $[1] = \Delta_0 > \Delta_1 > \Delta_2 > \cdots > \Delta_r$ egy szigorán csökkenő ($m \times n$-es) helymátrix-sorozat, $T^{(1)}, \ldots, T^{(r-1)}$ pedig $m \times m$-es mátrixok. A $(**)$ sorozat *szabályos* (*reguláris*) eliminációja az A mátrixnak a $[\Delta_1, \ldots, \Delta_r]$ null-helyekkel, ha

$$A^{(k)} \in \mathcal{Z}_{\Delta_k} \ \text{ és } \ T^{(k)} \in \mathcal{T}_{\Delta_{k-1}} \qquad (k = 1, \ldots, r) \ .$$

Megjegyzés. A klasszikus Gauss-elimináció szabályos, ahol

$$\Delta_k = \Big[1\Big] - \sum_{j=1}^{k} \sum_{i=k+1}^{n} I_{ij} = \Delta_{k-1} - \sum_{i=k+1}^{n} I_{ik} \ , \qquad T^{(k)} = I - \sum_{i=k+1}^{n} \frac{\alpha_{ik}^{(k-1)}}{\alpha_{kk}^{(k-1)}} I_{ik} \ .$$

Definíció. Az $A, A^{(1)}, \ldots, A^{(r)}$ elimináció k. lépése *elemi Gauss-lépés*, ha vele kinullázunk (eliminálunk) egy (p,q)-indexű mátrixtagot a p. sorból kivonva a egy másik s. sor alkalmas többszörösét:

$$\Delta_k = \Delta_{k-1} - I_{pq} \ , \quad T^{(k)} = G^s_{pq} := I - \frac{\alpha_{pq}^{(k-1)}}{\alpha_{sq}^{(k-1)}} I_{ps}, \quad p \neq s \quad \text{alakú.}$$

Gyakorlat. A klasszikus Gauss-elimináció k. lépése megtehető $(n-k)$ elemi Gauss-lépéssel. Tehát a teljes klasszikus Gauss-elimináció megtehető $r := \sum_{k=1}^{n-1}(n-k) = (n-1)(n-2)/2$ elemi Gauss-lépéssel.

Példa a Gauss-elimináció numerikus instabilitáára

$$\left.\begin{aligned} x + 10001y &= 10001 \\ x + \qquad y &= 2 \end{aligned}\right\} \longrightarrow \left.\begin{aligned} x + 10001y &= 10001 \\ -10000y &= -9999 \end{aligned}\right\} \longrightarrow \begin{aligned} y &= \mathbf{0.9999} \\ x &= 10002 - 10001y = \mathbf{1.0001} \end{aligned}$$

Ha az $y \sim \mathbf{1}$ kerekítést használjuk, akkor a visszahelyettesítésnél

$$x = 10001 - 10001y \sim 10001 - 10001 \cdot 1 = \mathbf{0} \ \ll \ 1.0001.$$

Klasszikus Gauss-elim. mátrix-nyelven.

$A = [a_{ij}]_{i,j=1}^N, \quad \det(A|_k) = \det[a_{ij}]_{i,j=1}^k \neq 0 \ (k = 1, \ldots, N).$

$A_0 := A$ vételével és rendere $k = 1, 2, \ldots, (N-2)$ mellett
$\exists!\, m_k \in \mathrm{Mat}(N{-}k, 1)$ oszl.vektor $\exists!\, u_k \in \mathrm{Mat}(1, N{-}k{+}1)$ sorvektor $\exists!\, A_k \in \mathrm{Mat}(N{-}k, N{-}k)$

$$\begin{bmatrix} I_{k-1} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & -m_k & I_{N-k} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [u_1 & . & . & .] \\ 0 & [u_2 & . & .] \\ & \cdots & & \\ 0 & \cdots & 0 & [u_{k-1}] \\ 0 & \cdots & 0 & A_{k-1} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [u_1 & . & . & .] \\ 0 & [u_2 & . & .] \\ & \cdots & & \\ 0 & \cdots & 0 & [u_k] \\ 0 & \cdots & 0 & A_k \end{bmatrix}.$$

Innen jön az $A = LU$ alsó·felső-triang. felbontás az $(N{-}2)$. lépésben (ahol $u_{N-1} := A_{N-1}$):

$$A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ m_1 & I_{N-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & m_2 & I_{N-2} \end{bmatrix} \cdots \begin{bmatrix} I_{N-2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & m_{N-2} & I_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [u_1 & . & . & . & .] \\ 0 & [u_2 & . & . & .] \\ & \cdots & & & \\ 0 & \cdots & 0 & [u_{N-2} & .] \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & u_{N-1} \end{bmatrix}$$

A főminorokra $A|_k = L|kU|_k$, ahonnan $\det(A|_k) = \det(L|_k)\det(U|_k) = \prod_{i=1}^k U_{ii}$.

LU-felbontás. Legyenek rendre $k = 1, 2, \ldots, N-1$ mellett
$\ell_k \in \mathrm{Mat}(N-k, 1)$ ill. $u_k \in \mathrm{Mat}(1, N-k+1)$ sor- ill. oszlopvektorok, és velük

$$A = LU = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \lceil \ell_1 \rceil & 1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ . & \lceil \ell_2 \rceil & 1 & \ddots & 0 & 0 \\ . & . & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ . & . & . & & 1 & 0 \\ \lfloor \ell_1 \rfloor & \lfloor \ell_2 \rfloor & \lfloor \ell_3 \rfloor & \cdots & \lfloor \ell_{N-1} \rfloor & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} [u_1 & . & . & . & . & u_1] \\ 0 & [u_2 & . & . & . & u_2] \\ 0 & 0 & [u_3 & . & . & u_3] \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & [u_{N-1} & u_{N-1}] \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 0 & [u_N] \end{bmatrix}.$$

Ekkor egyszerűen

$$u_1 = \big[A \text{ 1.sora}\big], \quad \ell_1 = \frac{1}{a_{11}}\big[A \text{ 1.oszl. a 2.elemtől}\big].$$

Tegyük föl, hogy $u_1, \ell_1, \ldots, u_k, \ell_k$ ismert. Ekkor az

$$L_k := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ \lceil \ell_1 \rceil & \ddots & 0 \\ . & \ddots & 1 \\ . & & \lceil \ell_k \rceil \\ \vdots & & \vdots \\ \lfloor \ell_1 \rfloor & \cdots & \lfloor \ell_k \rfloor \end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}(N,k), \quad U_k := \begin{bmatrix} [u_1 & \cdots & & \cdots & u_1] \\ 0 & \ddots & & & \vdots \\ 0 & 0 & [u_k & \cdots & u_k] \end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}(k,N)$$

mátrixokkal

$$A - L_k U_k = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & A_k \end{bmatrix}, \quad A_k := \big[L_k \text{ utolsó } N-k \text{ sora}\big]\big[U_k \text{ ut. } N-k \text{ oszl.}\big],$$

$$u_{k+1} = \big[A_k \text{ 1. sora}\big], \quad \ell_{k+1} = \frac{1}{[A_k]_{11}}\big[A_k \text{ 1.oszl. a 2. elemtől}\big].$$

LDU-felbontás Gauss-eliminációval

Feltevés. $A = LDU$, ahol $L = \big[\ell_{ij}\big]_{1 \le j \le i \le N}$ alsó-trianguláris 1-átlójú-, $D = \big[d_{ii}\big]_{i=1}^{N}$ nem-szinguláris diagonális, $U = \big[u_{ij}\big]_{1 \le i \le j \le N}$ felső-trianguláris 1-átlójú mátrix.

Parketta-algoritmus. $A \longrightarrow (L, D, U)$ direkt kiszámítása.
Rendre (azaz egymás után) $k = 1, 2, \ldots, N$ mellett

$$\begin{aligned} d_{kk} &= a_{kk} - \sum_{i:i<k} \ell_{ki} d_{ii} u_{ik}, \\ u_{kj} &= \big[a_{kj} - \sum_{i:i<k} \ell_{ki} u_{ij}\big]/d_{kk} \quad (j = k+1, \ldots, N), \\ \ell_{ik} &= \big[a_{ik} - \sum_{j:j<k} \ell_{ij} d_{ii} u_{jk}\big]/d_{kk} \quad (i = k+1, \ldots, N), \end{aligned}$$

Trianguláris elimináció kis lépésekkel

Tétel. *Tetszőleges* $A \in \mathrm{Mat}(m,m)$ *mátrixhoz létezik olyan*

$$\big[T_{12}, T_{13}, \dots, T_{1m}\big],\ \big[T_{23}, T_{24} \dots, T_{2m}\big], \dots, \big[T_{m-2,m-1}, T_{m-2,m}\big], \big[T_{m-1,m}\big];$$
$$T_{ij} \in I + \mathbb{R}I_{ii} + \mathbb{R}I_{ij} + \mathbb{R}I_{ji} + \mathbb{R}I_{jj} \quad (1 \le i < j \le m)$$

mátrixsorozat, amely szabályos elimináció a

$$\Delta_{ij} := I - \sum_{\substack{(k,\ell)\prec(i,j) \\ k<\ell}} I_{\ell k} \qquad (k = 0, \dots, m)$$

*csökkenő felső-trianguláris nullhely-sorozattal.** *A* T_{ij} *mátrixok ehhez lehetnek ortogonális* $(*)$ $T_{ij} = I - I_{ii} - I_{jj} + \cos\varphi_{ij}(I_{ii} + I_{jj}) + \sin\varphi_{ij}(I_{ij} - I_{ji})$ *alakúak.*

Bizonyítás. Ha $1 \le i < j \le m$, akkor a $T_{ij} \in I + \mathbb{R}I_{ii} + \mathbb{R}I_{ij} + \mathbb{R}I_{ji} + \mathbb{R}I_{jj}$ alakú mátrixokkal való bal-szorzás csak az i. ill. j. sorokat változtatja meg, sőt az $(i,k), (j,k)$ helyeken is megmaradnak a 0 elemek, ha mindkettőn voltak. Ezért T_{ij} $\Delta_{k\ell}$-tartó, valahányszor $(k,\ell) \prec (i,j)$ és $(k,\ell) \ne (i,j)$. Ha $B = \big[b_{k\ell}\big]_{k,\ell=1}^m \in \mathcal{Z}_{\Delta_{ij}}$, akkor a $(*)$ alaknál a

$$\cos\varphi_{ij} := \frac{b_{ii}}{\sqrt{b_{ii}^2 + b_{ji}^2}}, \quad \sin\varphi_{ij} := \frac{b_{ji}}{\sqrt{b_{ii}^2 + b_{ji}^2}}$$

választás megfelel. Ugyanis ekkor $\big[T_{ij}B\big]_{ji} = t_{ji}b_{ii} + t_{jj}b_{ji} = -\sin\varphi_{ij}b_{ii} + \cos\varphi_{ij}b_{ji} = 0$.

Megjegyzés. Általában a megfelelő a $T_{ij} = (I - I_{ii} - I_{jj}) + \alpha I_{ii} + \beta I_{ij} + \gamma I_{ji} + \delta I_{jj}$ választás, ha $\gamma b_{ii} + \delta b_{ji} = 0$ és $\det\big[\begin{smallmatrix}\alpha & \beta \\ \gamma & \delta\end{smallmatrix}\big] \ne 0$.

* Itt $\prec$ a szokásos lexikigrafikus rendezés: $(i,j) \prec (k,\ell) \iff i < k$ vagy $i = k$ és $j \le \ell$.

Példa. Az $A := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$ mátrix *ortogonális* $\times$ *felső-trianguláris* felbontása kis lépésekkel a tételbeli algoritmust használva, és $\cos\varphi_{ij}, \sin\varphi_{ij}$ helyett c, s-et írva röviden.

$$A_{12} := T_{12}A, \text{ ahol } T_{12} = \begin{bmatrix} c & s & 0 \\ -s & c & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \begin{matrix} c = \frac{a_{11}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{12}^2}} = \frac{1}{\sqrt{2}} \\ s = \frac{a_{21}}{\sqrt{a_{11}^2 + a_{12}^2}} = -\frac{1}{\sqrt{2}}, \end{matrix} \Rightarrow A_{12} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{bmatrix} 2 & -1 & 1 \\ \underline{0} & 1 & 1 \\ 0 & \sqrt{2} & \sqrt{2} \end{bmatrix}.$$

Mivel az $[A_{12}]$ mátrix $(3,1)$ eleme is 0, egyszerűen $A_{13} = A_{12}$ (és $T_{13} = I$). Végül a $b_{ij} := \left[A_{13}\right]_{ij}$ rövidítéssel

$$A_{23} := T_{23}A_{13}, \quad T_{23} = \begin{bmatrix} 1 & s & 0 \\ 0 & c & s \\ 0 & -s & c \end{bmatrix}, \begin{matrix} c = \frac{b_{22}}{\sqrt{b_{22}^2 + b_{32}^2}} = \frac{1}{\sqrt{3}} \\ s = \frac{b_{32}}{\sqrt{b_{22}^2 + b_{32}^2}} = \frac{\sqrt{2}}{\sqrt{3}}, \end{matrix} \Rightarrow A_{23} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} 2\sqrt{3} & -\sqrt{3} & \sqrt{3} \\ \underline{0} & 3 & 3 \\ \underline{0} & \underline{0} & 0 \end{bmatrix}.$$

Ezzel magkaptuk az $A = QR$ felbontás felső-trianguláris $R = A_{23}$ komponensét. Az ortogonális komponens $A_{23} = T_{23}T_{31}T_{12}A \Rightarrow A = T_{12}^{\mathrm{T}}T_{13}^{\mathrm{T}}T_{12}^{\mathrm{T}}A_{23}$ miatt

$$Q = T_{12}^{\mathrm{T}}T_{13}^{\mathrm{T}}T_{12}^{\mathrm{T}} = \frac{1}{\sqrt{6}} \begin{bmatrix} \sqrt{3} & 1 & -\sqrt{2} \\ -\sqrt{3} & 1 & -\sqrt{2} \\ 0 & 2 & \sqrt{2} \end{bmatrix}.$$

Általános Gauss-elimináció

Tétel. *Legyenek* $N \leq M$, $A \in \mathrm{Mat}(N, M, \mathbb{R})$, *továbbá* $\pi : \{1, \ldots, N\} \leftrightarrow \{1, \ldots, N\}$ *ill.* $\varrho : \{1, \ldots, M\} \leftrightarrow \{1, \ldots, M\}$ *permutációk. Ha*

$$\det\big[A_{\pi(i),\varrho(j)}\big]_{i,j=1}^{k} \neq 0 \qquad (k = 1, \ldots, N),$$

akkor (és csak akkor) van egy egyértelmű

$$L_j := I + \sum_{i=k+1}^{N} \ell_{ki} I_{\pi(i),\rho(j)} \qquad (j = 1, \ldots, N-1)$$

alakú mátrix-sorozat, amelynél $A^{(1)} := L_1 A, \ldots, A^{(n-1)} := L_{N-1} A^{(N-1)}$ *a*

$$\Delta_k := \big[\mathbf{1}\big] - \sum_{i=k+1}^{N} I_{\pi(i),\rho(j)} \qquad (k = 1, \ldots, N-1)$$

helymátrixokkal szabályos elimiminációja A*-nak.*

Megjegyzés. Ekkor a sor-oszlopcserékkel kapott

$$\widetilde{A} := \big[A_{\pi(i),\varrho(j)}\big]_{i=1}^{N}{}_{j=1}^{M}$$

mátrixon végrehajtott klasszikus Gauss-elimináció $\widetilde{A}^{(1)}, \ldots, \widetilde{A}^{(N-1)}$ tagjaival

$$A^{(k)} = \big[\widetilde{A}^{(k)}_{\pi^{-1}(i),\varrho^{-1}(j)}\big]_{i=1}^{N}{}_{j=1}^{M} \quad (k = 1, \ldots, N-1).$$

Gauss–Jordan-elimináció

GJ-elim. $\sim$ elemi bázistranszformáció

Példa. $A := \begin{bmatrix} -2 & 4 & -11 & 11 \\ 5 & -22 & 34 & -10 \\ 0 & 8 & -3 & -12 \\ 1 & -3 & 6 & -4 \end{bmatrix}$ inverze.

0) $\left[\begin{array}{cccc|cccc} -2 & 4 & -11 & 11 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 5 & -22 & 34 & -10 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 8 & -3 & -12 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \underline{\mathbf{1}} & -3 & 6 & -4 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right]$

[1.sor]+2[4.sor], [2.sor]-5[4.sor]

1) $\left[\begin{array}{cccc|cccc} 0 & -2 & \underline{\mathbf{1}} & 3 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & -7 & 4 & 10 & 0 & 1 & 0 & -5 \\ 0 & 8 & -3 & -12 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ \underline{\mathbf{1}} & -3 & 6 & -4 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{array}\right]$

[2.sor]-2[1.sor], [3.sor]+3[1.sor], [4.sor]-6[1.sor]

2) $\left[\begin{array}{cccc|cccc} 0 & -2 & \underline{\mathbf{1}} & 3 & 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & \underline{\mathbf{1}} & 0 & -2 & -4 & 1 & 0 & -13 \\ 0 & 2 & 0 & 3 & 3 & 0 & 1 & 6 \\ \underline{\mathbf{1}} & 9 & 0 & -22 & -6 & 0 & 0 & -11 \end{array}\right]$

[1.sor]+2[2.sor], [3.sor]-2[2.sor], [4.sor]-9[2.sor]

3) $\left[\begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & \underline{\mathbf{1}} & -1 & -7 & 2 & 0 & -24 \\ 0 & \underline{\mathbf{1}} & 0 & -2 & -4 & 1 & 0 & -13 \\ 0 & 0 & 0 & \underline{\mathbf{1}} & 11 & -2 & 1 & 32 \\ \underline{\mathbf{1}} & 0 & 0 & -4 & 30 & -9 & 0 & 106 \end{array}\right]$

[1.sor]+[3.sor], [2.sor]+2[3.sor], [4.sor]+4[3.sor]

4) $\left[\begin{array}{cccc|cccc} 0 & 0 & \underline{\mathbf{1}} & 0 & 4 & 0 & 1 & 8 \\ 0 & \underline{\mathbf{1}} & 0 & 0 & 18 & -3 & 2 & 51 \\ 0 & 0 & 0 & \underline{\mathbf{1}} & 11 & -2 & 1 & 32 \\ \underline{\mathbf{1}} & 0 & 0 & 0 & 74 & -17 & 4 & 234 \end{array}\right] = \Big[[\mathrm{PERM}]\Big|T\Big] = \Big[TA\Big|TI\Big].$

Vagyis $\big[\mathrm{PERM}\big] = TA$, $\big[\mathrm{PERM}\big]^{-1}TA = I$, azaz $A^{-1} = \big[\mathrm{PERM}\big]^{\mathrm{T}}T$,

$$A^{-1} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} T = \begin{bmatrix} T\ 4.\mathrm{sor} \\ T\ 2.\mathrm{sor} \\ T\ 1.\mathrm{sor} \\ T\ 3.\mathrm{sor} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 74 & -17 & 4 & 234 \\ 18 & -3 & 2 & 51 \\ 4 & 0 & 1 & 8 \\ 11 & -2 & 1 & 32 \end{bmatrix}.$$

Invertálás elemi báziscsere-algoritmussal.

$$
\begin{array}{cccc|c|}
a_1 & a_2 & a_3 & a_4 & \\
-2 & 4 & -11 & 11 & \\
5 & -22 & 34 & -10 & \\
0 & 8 & -3 & -12 & \\
\underline{\mathbf{1}} & -3 & 6 & -4 & e_1
\end{array}
\begin{array}{cccc|c|}
x_4 & a_2 & a_3 & a_4 & \\
2 & -2 & \underline{\mathbf{1}} & 3 & e_3 \\
-5 & -7 & 4 & 10 & \\
0 & 8 & -3 & -12 & \\
1 & -3 & 6 & -4 & e_1
\end{array}
\begin{array}{cccc|c|}
x_4 & a_2 & x_1 & a_4 & \\
2 & -2 & 3 & 3 & e_3 \\
-13 & \underline{\mathbf{1}} & -4 & -2 & e_2 \\
6 & 2 & 0 & 3 & \\
-11 & 9 & -6 & -22 & e_1
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{cccc|c|}
x_4 & x_2 & x_1 & a_4 & \\
-24 & 2 & -7 & -1 & e_3 \\
-13 & 1 & -4 & -2 & e_2 \\
32 & -2 & 11 & \underline{\mathbf{1}} & e_4 \\
106 & -9 & 30 & -4 & e_1
\end{array}
\begin{array}{cccc|}
x_4 & x_2 & x_1 & x_3 \\
8 & 0 & 4 & 1 \\
51 & 3 & 18 & 2 \\
32 & -2 & 11 & 1 \\
234 & -17 & 74 & 4
\end{array}.
$$

$$
A^{-1} = X = \left[x_1 \middle| x_2 \middle| x_3 \middle| x_4\right] = \left[\begin{array}{c|c|c|c}
4e_3+ & 0e_3+ & 1e_3+ & 8e_3+ \\
18e_2+ & 3e_2+ & 2e_2+ & 51e_2+ \\
11e_4+ & -2e_4+ & 1e_4+ & 32e_4+ \\
74e_1 & -17e_1 & 4e_1 & 234e_1
\end{array}\right] = \begin{bmatrix}
74 & -17 & 4 & 234 \\
18 & -3 & 2 & 51 \\
4 & 0 & 1 & 8 \\
11 & -2 & 1 & 32
\end{bmatrix}
$$

Az elemi báziscsere-algoritmus szokásos felírása.

$$
\begin{array}{c|cccc|}
 & a_1 & a_2 & a_3 & a_4 \\
e_1 & -2 & 4 & -11 & 11 \\
e_2 & 5 & -22 & 34 & -10 \\
e_3 & 0 & 8 & -3 & -12 \\
e_4 & \underline{\mathbf{1}} & -3 & 6 & -4
\end{array}
\quad
\begin{array}{c|cccc|}
 & e_4 & a_2 & a_3 & a_4 \\
e_1 & 2 & -2 & \underline{\mathbf{1}} & 3 \\
e_2 & -5 & -7 & 4 & 10 \\
e_3 & 0 & 8 & -3 & -12 \\
a_1 & 1 & -3 & 6 & -4
\end{array}
\quad
\begin{array}{c|cccc|}
 & e_4 & a_2 & e_1 & a_4 \\
a_3 & 2 & -2 & 3 & 3 \\
e_2 & -13 & \underline{\mathbf{1}} & -4 & -2 \\
e_3 & 6 & 2 & 0 & 3 \\
a_1 & -11 & 9 & -6 & -22
\end{array}
$$

$$
\begin{array}{c|cccc|}
 & e_4 & e_2 & e_1 & a_4 \\
a_3 & -24 & 2 & -7 & -1 \\
a_2 & -13 & 1 & -4 & -2 \\
e_3 & 32 & -2 & 11 & \underline{\mathbf{1}} \\
a_1 & 106 & -9 & 30 & -4
\end{array}
\quad
\begin{array}{c|cccc|}
 & e_4 & e_2 & e_1 & e_3 \\
a_3 & 8 & 0 & 4 & 1 \\
a_2 & 51 & 3 & 18 & 2 \\
a_4 & 32 & -2 & 11 & 1 \\
a_1 & 234 & -17 & 74 & 4
\end{array}
\quad
A^{-1} = \left.\begin{array}{c|cccc}
 & e_1 & e_2 & e_3 & e_4 \\
a_1 & 74 & -17 & 4 & 234 \\
a_2 & 18 & -3 & 2 & 51 \\
a_3 & 4 & 0 & 1 & 8 \\
a_4 & 11 & -2 & 1 & 32
\end{array}\right]
$$

$$
\text{Pl.}\ \begin{array}{c|cccc|}
 & e_4 & a_2 & e_1 & a_4 \\
a_3 & 2 & -2 & 3 & 3 \\
e_2 & -13 & \underline{\mathbf{1}} & -4 & -2 \\
e_3 & 6 & 2 & 0 & 3 \\
a_1 & -11 & 9 & -6 & -22
\end{array}
\ \text{jelentése}\ \left[e_4 \middle| a_2 \middle| e_1 \middle| a_4\right] = \left[\begin{array}{c|c|c|c}
2a_3 & -2a_3 & 3a_3 & 3a_3 \\
-13e_2 & +e_2 & -4e_2+ & -2e_2 \\
+6e_3 & +2e_3 & +0e_3 & +3e_3 \\
-11a_1 & +9a_1 & -6a_1 & -22a_1
\end{array}\right]
$$

Frobenius–felbontás Gauss-Jordan–eliminációval

Emlékeztető. Ha $\mathbb{K}$ egy test, $A \in \mathbb{K}^{M\times N}$ és $r := \operatorname{rank}(A)$, akkor a Gauss-Jordan–elimináció mátrixokkal a következőképpen formulázható:

$\exists\, J \in \mathbb{R}^{K\times K} \quad \exists\, 1 \le j_1 < \cdots j_r \le N$

$$JA = \begin{array}{c} \begin{bmatrix} * & e_1 & * & e_2 & *\ldots* & e_r & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \} & r \\ \} & M-r \end{matrix} \\ \begin{matrix} \uparrow & & \uparrow & & \uparrow \\ j_1 & & j_2 & & j_r \end{matrix} \end{array}$$

ahol $e_1,\ldots,e_r$ a $\mathbb{K}^r$-beli (kanonikus) egységvektorok. Tovább egyszerűsíthetünk ezt egy olyan P $N\times N$-es permutáció mátrixxal, amelynek 1-ső oszlopában a j_1-ik elem az 1-es, 2-ik oszlopában a j_2-ik elem az 1-es, … r-ik o oszlopában a j_r-ik elem az 1-es. Ezzel jobbról szorozva ugyanis

$$JAP = \begin{bmatrix} I_r & C \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{matrix} \} & r \\ \} & M-r \end{matrix}, \qquad I_r := \big[r\times r\text{-es egységmátrix}\big]$$

alakot kapunk. Észrevétel: $B := JAP$ mellett

$$B^2 = B\,B = \begin{bmatrix} I_r & C \\ 0 & 0 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} I_r & C \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} I_r & C \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = B.$$

Vagyis

$$\begin{aligned} & JAP\,JAP = JAP \ \big| J^{-1}\cdot,\ \cdot P^{-1}, \\ & A = J^{-1}\big(JAP\big)P^{-1} = J^{-1}\big(JAP\,JAP\big)P^{-1} = \\ & \quad = APJA = \begin{bmatrix} [AP]_{11} & [AP]_{12} \\ [AP]_{21} & [AP]_{22} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & e_1 & * & e_2 & *\ldots* & e_r & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} = \\ & \quad = \begin{bmatrix} [AP]_{11} & 0 \\ [AP]_{21} & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & e_1 & * & e_2 & *\ldots* & e_r & * \\ 0 & 0 & \cdots & 0 & \cdots & 0 & 0 \end{bmatrix} = \\ & \quad = \begin{bmatrix} [AP]_{11} \\ [AP]_{21} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} * & e_1 & * & e_2 & *\ldots* & e_r & * \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Észrevétel:

$$\begin{bmatrix} [AP]_{11} \\ [AP]_{21} \end{bmatrix} = \Big[A\ j_1\text{-ik oszl.}\Big|\cdots\Big|A\ j_r\text{-ik oszl.}\Big].$$

A **Frobenius-felbontása**

$$\begin{aligned} A &= \begin{bmatrix} [AP]_{11} \\ [AP]_{21} \end{bmatrix} \big[JA\ \textbf{első}\ r\ \textbf{sora}\big] = \\ &= \Big[A\ j_1\textbf{-ik oszl.}\Big|\cdots\Big|A\ j_r\textbf{-ik oszl.}\Big] \begin{bmatrix} * & e_1 & * & e_2 & *\ldots* & e_r & * \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Mátrix inverze mátrixpolinommal (Leverrier tétele)

Legyen $A \in \mathrm{Mat}(N, N, \mathbb{R})$ egy tetszőlegeseb adott *invertálható* mátrix.
Legyenek $\lambda_1, \ldots, \lambda_N$ a sajátérékei (multiplicitás nélkül), azaz

$$\mathrm{charpoly}_A(\lambda) = \prod_{k=1}^{N} (\lambda - \lambda_k) = \sum_{m=0}^{N} \alpha_m \lambda^{N-m},$$
$$\alpha_m = (-1)^m \sigma_m(\lambda_1, \ldots, \lambda_N) \quad (m = 1, \ldots, N), \quad \alpha_0 = 1, \ \alpha_N = (-1)^N \det(A)$$

a $\sigma_m(\lambda_1, \ldots, \lambda_N) := \sum_{i_1 < i_2 < \cdots < i_m} \lambda_{i_1} \lambda_{i_2} \cdots \lambda_{i_m}$ elemi szimmetrikus polinomokkal.

Emléketető. A Cayley–Hamilton-tétel szerint $\mathrm{charpoly}_A(A) = 0$, azaz

$$\Big[\sum_{m=0}^{N-1} \alpha_m A^{N-m-1}\Big] A + \alpha_N I = 0, \quad A^{-1} = \frac{(-1)^{N-1}}{\det(A)} \sum_{m=0}^{N-1} \alpha_m A^{N-m-1}.$$

Tétel. (Leverrier). *A* $B_0 := I$, $B_k := \frac{1}{k} \mathrm{trace}\big(AB_{k-1}\big) I - AB_{k-1}$ $(k = 1, \ldots, N)$ *rekurzióval definiált mátrixokra*

$$B_k = p_k(A), \quad \text{ahol} \quad p_k(\lambda) := (-1)^k \Big[\alpha_0 \lambda^k + \alpha_1 \lambda^{k-1} + \cdots + \alpha_{k-1} \lambda + \alpha_k\Big].$$

Bizonyítás. Emlékeztető: $\mathrm{trace}\big(q(A)\big) = \sum_{j=1}^{N} q(\lambda_j)$ minden q polinomra. Ezért

$$B_k = \widetilde{p}_k(A), \quad \text{ahol} \quad \widetilde{p}_0(\lambda) \equiv 1, \quad \widetilde{p}_k(\lambda) = \frac{1}{k} \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \widetilde{p}_{k-1}(\lambda_j) - \lambda \widetilde{p}_{k-1}(\lambda)$$

rekurzív polinomsorozattal. Belátandó: $k = 1, \ldots, N$ -re a $p_k(\lambda)$ polinomok teljesítik a $p_k(\lambda) = k^{-1} \sum_{j=1}^{N} \lambda_j p_{k-1}(\lambda_j) - \lambda p_{k-1}(\lambda)$ azonosságokat. Mivel $p_k(\lambda) + \lambda p_{k-1}(\lambda) = (-1)^k \alpha_k = \sigma_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$, a tétel következik az alábbi önmagábai érdekes lemmából.

Lemma. $k = 1, \ldots, N$ *mellett* $\sum_{j=1}^{N} \lambda_j \, p_{k-1}(\lambda_j) = k \, \sigma_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$.

Bizonyítás. Indukció k szerint. Ha $k = 1$, valóban $\sum_{j=1}^{N} \lambda_j p_0(\lambda_j) = \sum_{j=1}^{N} \lambda_j = 1 \cdot \sigma_1(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$.
Észrevétel: a $\sigma_m := \sigma_k(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$ rövidítéssel

$$\lambda p_{k-1}(\lambda) = \lambda (-1)^{k-1} \sum_{m=0}^{k-1} \alpha_m \lambda^{k-1-m} = \sum_{m=0}^{k-1} (-1)^{k-1+m} \sigma_m \lambda^{k-m} =$$
$$= \sigma_{k-1} \lambda - \sigma_{k-2} \lambda^2 + \sigma_{k-3} \lambda^3 \mp \cdots + (-1)^k \sigma_1 \lambda^{k-1} - (-1)^k \lambda^k.$$

Tekintsük a $\sum\limits_{j=1}^{N} \lambda_j^m \sigma_r$ $(N \geq r)$ összegeket mint

$$\lambda^\nu := \lambda_1^{\nu_1} \lambda_2^{\nu_2} \cdots \lambda_N^{\nu_N}$$

alakú szorzatok lineáris kombinációját. Ha $m \in [2, N-1]$, akkor egyszerűen

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{N} \lambda_j^m \sigma_r &= \sum_{j=1}^{N} \lambda_j^m \sum \Big\{ \lambda^\nu : \ \nu\text{-ben } r \text{ db. 1-es van, a többi } 0 \Big\} = \\
&= \sum \Big\{ \lambda^\nu : \ \nu\text{-ben } r \text{ db. 1-es, 1 db. } m\text{-es van, a többi } 0 \Big\} + \\
&\quad + \sum \Big\{ \lambda^\nu : \ \nu\text{-ben } (r-1) \text{ db. 1-es, 1 db. } (m+1)\text{-es van, a többi } 0 \Big\}.
\end{aligned}$$

Az $m = 1, \ r < N$ esetben azonban

$$\begin{aligned}
\sum_{j=1}^{N} \lambda_j \sigma_r &= \sum_{j=1}^{N} \lambda_j \sum_{1 \leq i_1 < \cdots < i_r \leq N} \lambda_{i_1} \cdots \lambda_{i_r} = \\
&= \sum_{\substack{1 \leq i_1 < \cdots < i_r \leq N \\ j \notin \{i_1, \ldots, i_r\}}} \lambda_{i_1} \cdots \lambda_{i_r} + \sum_{\substack{1 \leq i_1 < \cdots < i_r \leq N \\ j \in \{i_1, \ldots, i_r\}}} \lambda_{i_1} \cdots \lambda_{i_r} = \\
&= (r+1) \sum \Big\{ \lambda^\nu : \ \nu\text{-ben } (r+1) \text{ db. 1-es van, a többi } 0 \Big\} + \\
&+ \quad \sum \Big\{ \lambda^\nu : \ \nu\text{-ben } (r-1) \text{ db. 1-es, 1 db. 2-es van, a többi } 0 \Big\} = \\
&= r\sigma_{r+1} + \sum \Big\{ \lambda^\nu : \ \nu\text{-ben } (r-1) \text{ db. 1-es, 1 db. 2-es van, a többi } 0 \Big\}.
\end{aligned}$$

Kiesnek a $\sum\limits_{j=1}^{N} \lambda_j \, p_{k-1}(\lambda_j) = \sum\limits_{m=1}^{k-1} (-1)^{m-1} \Big[\sum\limits_{j=1}^{N} \sigma_{k-m} \lambda_j^m \Big]$ összegnél a $\Big[\lambda^\nu : \nu\text{-ben } (k-m)$ db. 1-es, 1 db. m-es van, a többi $0\Big]$ alakú tagok.

Következmény. $p_N = (-1)^N \mathrm{charpoly}_A$, *és a Cayley–Hamilton-tétel miatt*

$$A^{-1} = \det(A)^{-1} B_{N-1} = \frac{(-1)^N}{\mathrm{charpoly}_A(0)} B_{N-1} = \frac{1}{\mathrm{trace}(AB_{N-1})} B_{N-1}.$$

Algoritmus A^{-1}-re (egyben $\det(A)$-ra is).
$B_0 := I$, majd $k = 1, \ldots, (N-1)$-re képezzük a $B_k := k^{-1} \mathrm{trace}(AB_{k-1}) I - AB_{k-1} \big(= p_k(A) \big)$ mátrixokat

$$T_k := AB_{k-1}, \quad \tau_k := k^{-1} \mathrm{trace}(T_k), \quad B_k := \tau_k I - T_k$$

alakban. Végül $B_{N-1} = \mathrm{cont.} A^{-1}$ Leverrier tétele szerint A konstans legegyszerűbben mint a $T_N = AB_{N-1}$ mátrix bármelyik főátlóbeli eleme (pl. $[T_N]_{11}$) számítható:

$$A^{-1} = \frac{1}{[T_N]_{11}} B_{N-1} = \frac{1}{[AB_{N-1}]_{11}} B_{N-1}.$$

Vandermode-mátrixok LU-felbontása

Tekintsük a transzponált $n \times n$-es $x_1, \ldots, x_n$ faktorú Vandermonde mátrixot:

$$V_n = V(x_1, \ldots, x_n) := \left[x_j^{i-1}\right]_{i,j=1}^n , \qquad \text{pl.:} \quad V_3 = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ x_1 & x_2 & x_3 \\ x_1^2 & x_2^2 & x_3^2 \end{bmatrix}.$$

Tudjuk: $i = n, n-1, \ldots, 2$ mellett rendre V_n i-edik sorából levonva a $(i-1)$-edik x_1-szeresét, majd a $j = 2, \ldots, n$ oszlopokat $(x_j - x_1)$-gyel osztva olyan mátrixot kapunk, amelnek 1. oszlopa az 1. egységvektor, jobb-alsó sarka pedig az $(n-1)$-es $V(x_2, \ldots, x_n)$. Az $[n.\text{sor}] - x[(n-1).\text{sor}], \ldots, [2.\text{sor}] - x[1.\text{sor}]$ művelet a

$$T_n(-x) := \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ -x & 1 & & & \\ & -x & 1 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & -x & 1 \end{bmatrix}$$

alsó-trianguláris bidiagonális Toeplitz mátrix-szal való bal-szorzás, amelynek inverze

$$T_n(-x)^{-1} = \sum_{k=0}^{n-1} T_n(x)^k = \begin{bmatrix} 1 & & & & \\ x & 1 & & & \\ x^2 & x & 1 & & \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \\ x^{n-1} & x^{n-2} & \cdots & x & 1 \end{bmatrix}.$$

Tétel. *V_n LU-felbontása*

$$V_n = L_n U_n ,$$

ahol L_n az az alsó-trianguláris $n \times n$-es mátrix, amelynek főátlója 1-eskből áll, az (i,j)-edik tagja $(i > j)$ az $x_1, \ldots, x_j$ faktorokkal képezhető összes $(i-1)$-edfokú szorzatok összege, U_n pedig azaz a felső-trianguláris mátrix, ahol az első sor csupa 1-esekből áll, és $1 < i \le j$ esetén az (i,j)-edig tag az $(x_j - x_1) \cdots (x_j - x_{i-1})$ szorzat.

Megjegyzés. Zárt formulában

$$L_n := I_n + \operatorname{altr}\Big[\sum_{k_1 + \cdots + k_j = i-j} x_1^{k_1} \cdots x_j^{k_j} \Big]_{j<i\le n} , \qquad U_n := \operatorname{feltr}\Big[\prod_{m<i} (x_j - x_m) \Big]_{i \le j}$$

(az üres szorzatot 1-nek véve), Pl.

$$V_4(a,b,c,d) = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ a & b & c & d \\ a^2 & b^2 & c^2 & d^2 \\ a^3 & b^3 & c^3 & d^3 \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ a & 1 & 0 & 0 \\ a^2 & a+b & 1 & 0 \\ a^3 & a^2+ab+b^2 & a+b+c & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & b-a & c-a & d-a \\ 0 & 0 & (c-a)(c-b) & (d-a)(d-b) \\ 0 & 0 & 0 & (d-a)(d-b)(d-c) \end{bmatrix}.$$

Bizonyítás. A $D_n := \operatorname{diag}(1, x_2 - x_1, x_3 - x_1, \ldots, x_n - x_1)$ diagonális mátrixszal

$$T_n(-x_1) V_n D_n^{-1} = \left[\begin{array}{c|c} 1 & (x_2 - x_1)^{-1} \;\; \cdots \;\; (x_n - x_1)^{-1} \\ \hline 0 & \\ \vdots & V(x_2, \ldots, x_n) \\ 0 & \end{array}\right].$$

Vagyis ha az $(n-1)$-es $V(x_2, \ldots, x_n)$-re áll a tétel, akkor

$$\begin{aligned} V_n = T_n(-x_1)^{-1} \big[I_1 \oplus L_{n-1}(x_2, \ldots, x_n)\big] \cdot \\ \cdot \Big[I_1 \oplus U_{n-1}(x_2, \ldots, x_n) + (1, 0, \ldots)^{\mathrm{T}} \big(0, (x_2 - x_1)^{-1}, \ldots, (x_n - x_1)^{-1}\big)\Big] D_n. \end{aligned}$$

Direkt behelyettesítéssel adódik, hogy

$$L_n(x_1, \ldots, x_n) = T_n(-x_1)^{-1} \big[I_1 \oplus L_{n-1}(x_2, \ldots, x_n)\big]$$

ill.

$$U_n(x_1, \ldots, x_n) = \big[I_1 \oplus U_{n-1}(x_2, \ldots, x_n) + (1, 0, \ldots)^{\mathrm{T}} \big(0, (x_2 - x_1)^{-1}, \ldots, (x_n - x_1)^{-1}\big)\big] D_n.$$

Megjegyzés. Az U_n mátrix tetszőleges (i, j)-indexű tagjára (a főátló alatti 0-kra is)

$$[U_n]_{ij} = \prod_{\ell < i} (x_j - x_\ell).$$

Ortogonális eliminációk

Lemma. *Tetszőleges* $a \in \mathrm{Mat}(m,1,\mathbb{R})$ *oszlopvektor átvihető ortogonális mátrixszal az* $e_1 := [1\,0\,\ldots\,0]^{\mathrm{T}} \in \mathrm{Mat}(m,1,\mathbb{R})$ *egységvektor pozitív többszörösébe.*

Bizonyítás. Legyen $q_1 := \|a\|^{-1}a\big(= [a^{\mathrm{T}}a]^{-1/2}a\big)$. Definíció szerint q_1 egységvektor ($\|q_1\|^2 = \langle q_1|q_1\rangle = q_1^{\mathrm{T}}q_1 = [1]$), és vele egyszerűen

$$\langle q_1|a\rangle = \big[[a^{\mathrm{T}}a]^{-1/2}a\big]^{\mathrm{T}}a = [a^{\mathrm{T}}a]^{-1/2}[a^{\mathrm{T}}a] = [a^{\mathrm{T}}a]^{1/2} = \|a\|$$

Tudjuk: q_1 kiegészíthető egy $\{q_1,q_2,\ldots,q_m\}$ teljes ortonormált rendszerré (pl. Gram–Schmidt-ortogonalizóval), amelynél tehát $q_2,\ldots,q_m \perp q_1, a$. Ennek az m oszlopvektornak a transzponáltjait egymás alá téve egy

$$Q := \begin{bmatrix} q_1^{\mathrm{T}} \\ \vdots \\ q_m^{\mathrm{T}} \end{bmatrix}$$

ortogonális $m \times m$-es mátrixot kapunk. Ezzel

$$Qa = \begin{bmatrix} q_1^{\mathrm{T}}a \\ q_2^{\mathrm{T}}a \\ \vdots \\ q_m^{\mathrm{T}}a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle q_1|a\rangle \\ \langle q_2|a\rangle \\ \vdots \\ \langle q_m|a\rangle \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \|a\| \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} = \|a\|e_1.$$

Kanonikus konstrukciók. 1) $m=2$, $a = \left[\begin{smallmatrix}\alpha\\ \beta\end{smallmatrix}\right]$ esetén $Q := \frac{1}{\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}\left[\begin{smallmatrix}\alpha & \beta\\ -\beta & \alpha\end{smallmatrix}\right]$ forgatás.

2) **Hausholder**-módszer: tükrözés az $u := q_1 - e_1$ vektorra merőleges síkra

$$Qx := x - 2\big[x \text{ merőleges vetülete } u \text{ egyenesére}\big] = x - 2\Big\langle x\Big|\frac{u}{\|u\|}\Big\rangle\frac{u}{\|u\|} =$$

$$= x - 2\|u\|^{-2}\langle x|u\rangle u = x - 2\frac{\langle x|u\rangle}{\langle u|u\rangle}u\ ,$$

$$Q = I - \frac{2}{u^{\mathrm{T}}u}uu^{\mathrm{T}}\ .$$

3) Kis lépések módszere (**Givens**-mátrixok):
Az (i,j) indexű tag az A mátrixból elimininálható úgy, hogy alkalmas a,b, $|a|^2+|b|^2=1$ együtthatókat véve,
az i. sorba $\quad a\big[A\ i.\text{ sor}\big]+b\big[A\ j.\text{ sor}\big]$,
a j. sorba $\quad -b\big[A\ i.\text{ sor}\big]+a\big[A\ j.\text{ sor}\big]$
kerül. Ez egy ortogonális T_{ij} $\big($az $I \oplus \left[\begin{smallmatrix}a & b\\ -b & a\end{smallmatrix}\right]$ mátrixhoz sor-oszlopcserékkel hasonló$\big)$

mátrixszal való bal-szorzás.
Ha $A \in \mathrm{Mat}(NmN, \mathbb{R})$ és $\det(A) \neq 0$, akkor rendre

$$\underbrace{T_{1,2}, T_{1,3}, \dots, T_{1,N}}, \underbrace{T_{2,3}, T_{2,4}, \dots, T_{2,N}}, \dots, \underbrace{T_{N-2,N-1}, T_{N-2,N}}, \underbrace{T_{N-1,N}}$$

típusú bal-szorzásokkal a *felső-trianguáris* mátrixot kapunk. Azaz egy ortogonális $Q := T_{N-1,N}(T_{N-2,N}T_{N-2,N-1}) \cdots (T_{1,N}, T_{1,N-1} \cdots T_{1,2})$ alakú mátrix mellett $R := QA$ felső-trianguláris.

QR-felbontás és Gram–Schmidt-ortogonalizáció

Emlékeztető. Ha $a_1, a_2, \dots, a_r$ lineárisan független vektorok egy $\langle .|. \rangle$ belső szorzattal ellátotott térben, akkor van *pontosan egy* olyan

$$\underbrace{t_{1,1}}, \underbrace{t_{2,1}, t_{2,2}}, \underbrace{t_{3,1}, t_{3,2}, t_{3,3}}, \dots, \underbrace{t_{r,1}, t_{r,2}, \dots, t_{r,r}}$$

együttható-sorozat, amelynél $t_{1,1}, t_{2,2}, \dots, t_{r,r} > 0$, és az

$$e_1 := t_{1,1}a_1, \quad e_2 := t_{1,2}a_1 + t_{2,2}a_2 \quad , \dots, \quad e_r := t_{1,r}a_1 + t_{2,r}a_2 + \cdots + t_{r,r}a_r$$

vektorok $\langle .|. \rangle$-ortonormált rendszert alkotnak. Itt $t_{1,1} = \|a_1\|^{-1}\big(= \langle a_1|a_1 \rangle^{-1/2}\big)$, és $k = 2, 3, \dots, r$ mellett rekurzíve

$$t_{i,k} = -\alpha_{i,k}/\alpha_{k,k} \quad (\ell = 1, \dots, k-1), \qquad t_{k,k} = 1/\alpha_{k,k}$$

az a_k vektornak az $e_1, e_2, \dots, e_{k-1}$-re való $\alpha_{i,k} := \langle a_k|e_i \rangle$ merőleges vetületi hosszaival, illetve az $\mathbb{R}e_1 + \mathbb{R}e_2 + \cdots + \mathbb{R}e_{k-1}$ altértől való $\alpha_{k,k} = \sqrt{\langle a_k|a_k \rangle - \big(\alpha_{1,k}^2 + \cdots + \alpha_{k-1,k}^2\big)}$ távolságával. Az $e_1, e_2, \dots, e_r$ vektor-sorozat az $a_1, a_2, \dots, a_r$ sorozat *Gram–Schmidt-ortogonalizált*ja.

Következmény. *Ha $A = [a_1, \dots, a_N]$ egy $N \times M$-es invertálható mátrix, akkor az oszlopainak $q_1 = t_{1,1}a_1, q_2 := t_{1,2}a_1 + t_{2,2}a_2, \dots, q_N := t_{1,N}a_1 + \cdots + t_{N,N}a_N$ Gram–Schmidt-ortogonalizáltját véve*

$$A = QR, \quad \text{ahol} \;\; Q := \big[q_1, \dots, q_N\big], \;\; R := \begin{bmatrix} t_{1,1} & \cdots & t_{1,N} \\ & \ddots & \vdots \\ & & t_{N,N} \end{bmatrix}^{-1}.$$

Speciálisan az $R = Q^{\mathrm{T}}A$ mátrix felső-trianguláris pozitív főátlóval.

Jelölés. Ha $\det(A) \neq 0$, akkor
$Q_A := \big[A \text{ oszlopainak Gram–Schmidt ortogonalizáltja}\big], \;\; R_A := Q_A^{\mathrm{A}}A.$

Propozíció. (A QR-felbontás egyértelműsége). *Tegyük fel, hogy* $\det(A) \neq 0$ *és* $A = QR$*, ahol* Q *ortogonális,* R *pedig pozitív átlójú felső-trianguláris mátrix. Ekkor szükségképpen* $Q = Q_A$*,* $R = R_A$*.*

Bizonyítás. $A = QR = Q_A R_A \iff Q_A^{\mathrm{T}} Q = R_A R^{-1}$. Itt $Q_A^{\mathrm{T}} Q$ ortogonális, $R_A R^{-1}$ pozitív átlójú felső-trianguláris mátrix. Mivel ortogonális mátrix inverze a transzponáltja, és ez ortogonális, pozitív átlójú felső-trianguláris mátrix transzponáltjának iverze pedig pozitív átlójú alsó-trianguláris mátrix, $Q_A^{\mathrm{T}} Q = \big([Q_A^{\mathrm{T}} Q]^{\mathrm{T}}\big)^{-1} = \big[$pozitív diagonális ortogonális$\big] = I$ egységmátrix.

Gram–Schmidt-ortogonalizáció stabilabban.
Adott lin.fgtl. $a_1, \ldots, a_N \in (\mathbf{H}, \langle .|. \rangle)$;
$P_u := \|u\|^{-2} u \otimes u^* : x \mapsto \langle u|u \rangle \langle x|u \rangle u$ ort. proj.
Elmélet: $u_1 := a_1$, $u_k := a_k - \sum_{j:j<k} P_{u_j} a_j$ $(k = 2, \ldots, N) \longrightarrow q_k := \|u_k\|^{-1} u_k$ ortn.
Stabil módszer: $u_1 := a_1$, $q_1 := \|a\|^{-1}$; $k = 2, \ldots, N$-re (u_k, q_k) kiszámítása:
$u_k^{(0)} := a_k$, $u_k^{(\ell)} := u_k^{(\ell-1)} - P_{q_\ell} u_k^{(\ell-1)}$ $(\ell = 1, \ldots, k-1) \longrightarrow u_k := u_k^{(k-1)}$, $q_k := \|u_k\|^{-1} u_k$.

Általános mátrix QR-felbontása

Konstrukció. Legyen $A = \big[a_1, \ldots, a_N\big]$ tetszőleges $M \times N$-es mátrix. Az $u_1, \ldots, u_M$ M-es oszlop-egységvektorokkal kiegészítve legyen $\widetilde{A} := \big[a_1, \ldots, a_N, u_1, \ldots, u_M\big] = \big[\widetilde{a}_1, \ldots, \widetilde{a}_{N+M}\big]$. Definiáljuk a következő $j_1 < j_2 < \cdots < j_M$ indexeket:

$$j_k := \min \Big\{ j : \ \dim\big(\mathbb{R}\widetilde{a}_1 + \cdots + \mathbb{R}\widetilde{a}_j\big) = k \Big\} \quad (k = 1, \ldots, M),$$

és ezekkel legyen

$$Q_A := \big[\widetilde{a}_{j_1}, \ldots, \widetilde{a}_{j_m} \text{ Gram–Schmidt-ortogonalizáltja}\big], \quad R_A := Q_A^{\mathrm{T}} A.$$

Tétel. *Az* R_A *mátrix felső-trianguláris, sőt* $r := \operatorname{rank}(A)$ *mellett* $\big[R_A\big]_{i,j} = 0$ *valahányszor* $j < j_i$ *vagy* $i > r$*, továbbá* $\big[R_A\big]_{k,j_k} > 0$ $(k = 1, \ldots, r)$*. Azaz formálisan* $j_0 := 0$*,* $j_{N+1} := M + N + 1$*-et írva*

$$\big[R_A\big]_{i,j} = 0 \quad \text{ha} \quad (i,j) \in \bigcup_{k=0}^{r} (k, M] \times [j_k, j_{k+1}).$$

Bizonyítás. A $Q_A = \big[q_1, \ldots, q_N\big]$ oszlop-felbontással adódik a következő észrevételekből.
1) Az $\widetilde{a}_{j_1}, \widetilde{a}_{j_2}, \ldots, \widetilde{a}_{j_M}$ M-es oszlopvektorok lineárisan függetlenek;
2) $j \in [j_k, j_{k+1})$ esetén mindig $\widetilde{a}_j \in \operatorname{Span}\{\widetilde{a}_{j_1}, \ldots, \widetilde{a}_{j_k}\} = \sum_{\ell=1}^{k} \mathbb{R}\widetilde{a}_{j_\ell}$.
3) Mindig $q_k \in \operatorname{Span}\{\widetilde{a}_{j_1}, \ldots, \widetilde{a}_{j_k}\}$, ahonnan $\operatorname{Span}\{q_1, \ldots, q_k\} = \operatorname{Span}\{\widetilde{a}_{j_1}, \ldots, \widetilde{a}_{j_k}\}$.
4) Q_A ortogonális mátrix, ezért mindig $\widetilde{a}_j = \sum_i \langle q_i | \widetilde{a}_j \rangle q_i$, ahol $\langle q_i | \widetilde{a}_j \rangle = [R_A]_{i,j}$.
Speciálisan 3) miatt $[R_A]_{i,j} = 0$, ha $j < j_i$.

5) A Gram-Schmidt konstrukció miatt mindig $R_{k,j_k} = \left\| \widetilde{a}_k - \mathrm{pr}_{\mathrm{Span}_{\ell<k}\widetilde{a}_\ell} \widetilde{a}_k \right\| > 0$.

Megjegyzés. Az $M = N,\ \det(A) \neq 0$ esetben $r = N$ és $j_k = k$ $(k = 1, \ldots, N)$.

QR-felbontás Cholesky-felbontással

Emlékeztető: Egy $(N \times N)$-es szimmetrikus pozitív-definit $B(\succ\!\succ 0)$ mátrix *Cholesky-felbontása*: $B = R^{\mathrm{T}}R$, ahol R pozitíıv főátlójú *felső-trianguláris* mátrix (egyértelmű). Jelölés: $R := \mathrm{Chol}(B)$. [Nagyon stabil eliminációs algoritmus ld. később].

Tétel. *Legyen $A \in \mathrm{Mat}(N, N, \mathbb{R})$ invertálható mátrix. Ekkor A QR-felbotásának trianguláris tagja az $A^*A \succ\!\succ 0$ mátrix Cholesky-felbontáával kapható meg:*

$$A = QR, \quad \text{ahol} \quad R := \mathrm{Chol}(A^*A),\ Q := AR^{-1}.$$

Bizonyítás. Tudjuk: A^*A valóban pozitív-definit és szimmetrikus. Így $R := \mathrm{Chol}(A^*A)$ jól-definiált. Elegendő látni: $Q := AR^{-1} \in \mathrm{Ort}(N, \mathbb{R})$, azaz $Q^{\mathrm{T}}Q = I$. Ez rögtön adódik:

$$Q^{\mathrm{T}}Q = \left[AR^{-1}\right]^{\mathrm{T}}\left[AR^{-1}\right] = [R^{-1}]^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}AR^{-1} = \left[R^{-1}\right]^{\mathrm{T}}R^{\mathrm{T}}RR^{-1} = I.$$

$\big[$A $QQ^{\mathrm{T}} = I$ azonosság bizonyítása is megy: $QQ^{\mathrm{T}} = \left[AR^{-1}\right]\left[AR^{-1}\right]^{\mathrm{T}} = AR^{-1}[R^{-1}]^{\mathrm{T}}A^{\mathrm{T}}$ $= A\left[R^{\mathrm{T}}R\right]^{-1}A^{\mathrm{T}} = A\left[A^{\mathrm{T}}A\right]^{-1}A^{\mathrm{T}} = AA^{-1}[A^{\mathrm{T}}]^{-1}A^{\mathrm{T}} = I\big]$.

Felső-Hessenberg alak

Definíció. A $H \in \mathrm{Mat}(N,N,\mathbb{R})$ mátrix *Felső-Hessenberg alakú*, ha a főátlója alatti ferde sor alatti tagjai 0-k:

$$H_{ij} = 0 \quad \text{ha} \quad i > j+1.$$

Legyen $A \in \mathrm{Mat}(N,N,\mathbb{R})$ tetszőleges mátrix. Ez felső-Hessenberg alakra hozható kanonikusan a következő két (különböző szabályos eliminációval.

1) Az előző lépésbeli mátrix $(j, i-1)$. helyét kinullázó, csak az $i.j.$ sorokra ható T_{ij} *kis ortogonális lépésekkel*:

$$H := T_{N-1,N}\big(T_{N-2,N}T_{N-2,N-1}\big)\cdots\big(T_{3N}\cdots T_{35}T_{34}\big)\big(T_{2,N}\cdots T_{24}T_{23}\big).$$

2) Az előző lépésbeli mátrix j. oszlopában a $(j+1)$. tag alatti elemeket kinullázó és csak a $j+1, j+2, \ldots, N$. sorokra ható S_j *ortogonális tükrözésekkel*:

$$\widetilde{H} := S_{N-2}S_{N-1}\cdots S_2S_1A.$$

Felső-Hessenberg alakú $N\times N$-es mátrix (felső)-trianguláris alakra hozható a $(i+1,i)$. tagot kinullázó és csak az $i, i+1$. sorokra ható $T_{i,i+1}$ kis ortogonális lépésekkel:

$$R := T_{N-2,N-1}T_{N-3,N-2}\cdots T_{23}T_{12}H.$$

Vagyis ekkor H-nak a QR-felbontása

$$R_H = T_{N-2,N-1}T_{N-3,N-2}\cdots T_{23}T_{12}H, \quad Q_H = T_{12}^{\mathrm{T}}T_{23}^{\mathrm{T}}\cdots T_{N-3,N-2}^{\mathrm{T}}T_{N-2,N-1}^{\mathrm{T}}.$$

Ezért a Francis-féle algoritmusban szereplő R_HQ_H mátrix szintén felső-Hessenberg alakú, mivel a $T_{j,j+1}^{\mathrm{T}}$-vel való jobboldali szorzás csak a j. oszlop főátló alatti 0-ját változtathatja meg, a többit nem minden lépésnél.

Ha H szimmetrikus tridiagonális, akkor $R_HQ_H = (TA)T^{\mathrm{T}}$ szimmetrikus így továbbra is tridiagonális marad.

Algoritmus. (pozitív-definit A mátrix sajátérékeire).

$A \longrightarrow H_A := TA$ felső-Hessenberg alak;
$H_A \longrightarrow D := H_AT^{\mathrm{T}} \sim A$ tridiagonális szimmetrikus alak;
Francis-algoritmus D-re: $D_1 := D$, $D_{n+1} := R_{D_n}Q_{D_n} \to \mathrm{diag}(\mathrm{Sp}(D)) = \mathrm{diag}(\mathrm{Sp}(D))$.

Itt D_{n+1} kiszámításakor $R_n = T_{N-1,N}\cdots T_{12}D_n$-hez csak a főátló és a fölötte levő két ferde sor elemeit kell számolni (a többi 0); majd $D_{n+1} = R_nT_{12}^{\mathrm{T}}\cdots T_{N-1,N}^{\mathrm{T}}$-hez minden $\bullet T_{j,j+1}^{\mathrm{T}}$ szorzásnál csak a főátló, ill a felette levő két fers sorból 1 ill 2 elemet elég kiszámolni (a 0-k ill. a főátló alatti rész automatikusan adottak a szimmetriából).

Példa. Az 5×5-ös tridiagonális $D := \big[1 \text{ ha } |i-j| < 2,\ 0 \text{ egyébként}\big]_{i,j=1}^{5}$ mátrix első Francis-transzformáltja: $D_1 := R_D Q_D$ kiszámítása. Minden lépés részletesen – vastagon a kiszámítandók a többi az előzőkből triviálisan adódik.

Emlékeztető: $R_D = T_{45}T_{34}T_{23}T_{12}D, \quad D_1 := R_D T_{12}^{\mathrm{T}} T_{23}^{\mathrm{T}} T_{34}^{\mathrm{T}} T_{45}^{\mathrm{T}}.$

$$D = \begin{bmatrix} 1 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \longrightarrow T_{12} := \begin{bmatrix} 2^{-1/2} & 2^{-1/2} & 0 & 0 & 0 \\ -2^{-1/2} & 2^{-1/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

$$T_{12}D = \begin{bmatrix} \boldsymbol{2^{1/2}} & \boldsymbol{2^{-1/2}} & \boldsymbol{2^{-1/2}} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{0} & \boldsymbol{2^{-1/2}} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \longrightarrow T_{23} := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

$$T_{23}T_{12}D = \begin{bmatrix} 2^{1/2} & 2^{1/2} & 2^{-1/2} & 0 & 0 \\ 0 & \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{1} & 0 \\ 0 & 0 & \boldsymbol{-2^{-1/2}} & \mathbf{0} & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \longrightarrow T_{34} := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3^{-1/2} & -(2/3)^{1/2} & 0 \\ 0 & 0 & (2/3)^{1/2} & 3^{-1/2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix};$$

$$T_{34}T_{23}T_{12}D = \begin{bmatrix} 2^{1/2} & 2^{1/2} & 2^{-1/2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & \boldsymbol{-(3/2)^{1/2}} & \boldsymbol{-(2/3)^{1/2}} & \boldsymbol{-(2/3)^{1/2}} \\ 0 & 0 & 0 & \boldsymbol{3^{-1/2}} & \boldsymbol{3^{-1/2}} \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} \longrightarrow T_{45} := \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 1/2 & 3^{1/2}/2 \\ 0 & 0 & 0 & -3^{1/2}/2 & 1/2 \end{bmatrix};$$

$$R = R_D = T_{45}T_{34}T_{23}T_{12}D = \begin{bmatrix} 2^{1/2} & 2^{1/2} & 2^{-1/2} & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -(3/2)^{1/2} & -(2/3)^{1/2} & -(2/3)^{1/2} \\ 0 & 0 & 0 & \boldsymbol{2/3^{1/2}} & \boldsymbol{2/3^{1/2}} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

$$RT_{12}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{0} & 2^{-1/2} & 0 & 0 \\ \boldsymbol{2^{-1/2}} & \boldsymbol{2^{-1/2}} & 1 & 1 & 0 \\ 0 & \mathbf{0} & -(3/2)^{1/2} & -(2/3)^{1/2} & -(2/3)^{1/2} \\ 0 & 0 & 0 & 2/3^{1/2} & 2/3^{1/2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$RT_{12}^{\mathrm{T}}T_{23}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & \boldsymbol{2^{-1/2}} & 0 & 0 & 0 \\ 2^{-1/2} & \mathbf{1} & \boldsymbol{-2^{-1/2}} & 1 & 0 \\ 0 & \boldsymbol{-(3/2)^{1/2}} & \mathbf{0} & -(2/3)^{1/2} & -(2/3)^{1/2} \\ 0 & 0 & \mathbf{0} & 2/3^{1/2} & 2/3^{1/2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$RT_{12}^{\mathrm{T}}RT_{23}^{\mathrm{T}}RT_{34}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & 2^{-1/2} & 0 & 0 & 0 \\ 2^{-1/2} & 1 & -\mathbf{(3/2)^{1/2}} & 0 & 0 \\ 0 & -(3/2)^{1/2} & \mathbf{2/3} & -\mathbf{2^{1/2}/3} & -(2/3)^{1/2} \\ 0 & 0 & -\mathbf{8^{1/2}/3} & \mathbf{2/3} & 2/3^{1/2} \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} & 0 \end{bmatrix} \longrightarrow$$

$$D_1 = RT_{12}^{\mathrm{T}}RT_{23}^{\mathrm{T}}RT_{34}^{\mathrm{T}}T_{45}^{\mathrm{T}} = \begin{bmatrix} 2 & 2^{-1/2} & 0 & 0 & 0 \\ 2^{-1/2} & 1 & -(3/2)^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & -(3/2)^{1/2} & 2/3 & -\mathbf{8^{1/2}/3} & 0 \\ 0 & 0 & -8^{1/2}/3 & \mathbf{4/3} & \mathbf{0} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{0} \end{bmatrix}.$$

Sajátértékek iterált alternáló QR-felbontással

Feltevések. $A = X\Lambda Y$, ahol $X = Q_X R_X$ QR-felbontással, $Y = X^{-1} = L_Y U_Y$ nem-degenerált LU-felbontással, $\Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_N)$ és $\lambda_1 > \cdots > \lambda_N > 0$.

Megjegyzés. $[\lambda_j/\lambda_k]^n = [1 - \varepsilon_{jk}]^n \to 0$ $(j > k)$ és R_X, L_Y triangulariása miatt

$$\Lambda^{-n} R_X \Lambda^n \to I, \qquad \Lambda^n L_Y \Lambda^{-n} \to I \qquad (n \to \infty).$$

Általában X^{-1} LU-felbonthatósága$\not\Rightarrow X$ LU-felbonthatósága. Pl. $X^{-1} = \left[\begin{smallmatrix} -1 & 1 \\ 1 & 0 \end{smallmatrix}\right]$, $X = \left[\begin{smallmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 1 \end{smallmatrix}\right]$.

Rekurzió*. $B_1 := A,\ B_{n+1} := R_{B_n} Q_{B_n} \quad (n = 1, 2, \ldots)$.

Lemma. $B_n = Q_{A^{n-1}}^{-1} Q_{A^n} R^{A^n} R_{A^{n-1}}^{-1}$.

Bizonyítás. $n = 1$-re $B_1 = I Q_A R_A I = A$. Ha pedig $B_n = Q_{A^{n-1}}^{-1} Q_{A^n} R^{A^n} R_{A^{n-1}}^{-1}$, azaz $Q_{B_n} = Q_{A^{n-1}}^{-1} Q_{A^n}$ és $R_{B_n} = R^{A^n} R_{A^{n-1}}^{-1}$, akkor

$$\begin{aligned} B_{n+1} &= R_{B_n} Q_{B_n} = R^{A^n} [R_{A^{n-1}}^{-1} Q_{A^{n-1}}^{-1}] Q_{A^n} = \\ &= [Q_{A^n}^{-1} A^n][A^{n-1}]^{-1}[A^n R_{A^n}^{-1}] = Q_{A^n}^{-1} A^{n+1} R_{A^n}^{-1} = Q_{A^n}^{-1} Q_{A^{n+1}} R^{A^{n+1}} R_{A^n}^{-1}. \end{aligned}$$

Tétel (Francis). $B_n \to R_X \Lambda R_X^{-1}$ *felső trianguláris limesz, speciálisan* $\mathrm{diag}(B_n) \to \Lambda$.

Bizonyítás. Először tekintjük az A^n hatványok QR-felbontását.

$$\begin{aligned} A^n &= X \Lambda^n Y = Q_X R_X \Lambda^n L_Y U_Y = \\ &= Q_X R_X \Lambda^n L_Y \Lambda^{-n} \Lambda^n U_Y = Q_X R_X [I + o(1)] \Lambda^n U_Y = \\ &= Q_X [\underbrace{I + o(1)}_{\text{QR felb.}}] R_X \Lambda^n U_Y = \underbrace{Q_X Q^{(n)}}_{\text{ort.}} \underbrace{R^{(n)} R_X \Lambda^n U_Y}_{\text{felső tr}}. \end{aligned}$$

Vagyis A^n QR-felbontása

$$A^n = Q_{A^n} R_{A^n}, \quad Q_{A^n} = Q_X Q^{(n)} \to Q_X, \quad R_{A^n} = R^{(n)} R_X \Lambda^n U_Y, \quad Q^{(n)}, R^{(n)} \to I$$

alakú. Ezért

$$\begin{aligned} Q_{B_n} &= Q_{A^{n-1}}^{-1} Q_{A^n} = [Q^{(n-1)}]^{-1} Q_X^{-1} Q_X Q^{(n)} \to I, \\ R_{B_n} &= R_{A^n} R_{A^{n-1}}^{-1} = R^{(n)} R_X \Lambda^n U_Y U_Y^{-1} \Lambda^{1-n} R_X^{-1} [R^{(n)}]^{-1} = \\ &= R^{(n)} R_X \Lambda R_X^{-1} [R^{(n)}]^{-1} \to R_X \Lambda R_X^{-1}, \quad \text{ahol } \mathrm{diag}(R_X \Lambda R_X^{-1}) = \Lambda. \quad \text{Qu.e.d.} \end{aligned}$$

* Ilyen alternáló rekurziót először Gauss csinált számtani-mértani közép párokkal.

SAJÁTVEKTOROK HATVÁNY-ITERÁCIÓVAL

Emlékeztető. Az $A \in \mathrm{Mat}(N,N,\mathbb{R})$ mátrix *félig-egyszerű*, ha van sajátvektoraiból álló bázis $\mathbb{R}^N \equiv \mathrm{Mat}(N,1,\mathbb{R})$-ben: $\exists\, u_1,\dots,u_N \in \mathbb{R}^N$ $\mathrm{Span}_k u_k = \mathbb{R}^N$, $Au_k \in \mathbb{R}u_k$. Azaz A szimmetrikus valamely $\langle .|.\rangle^\sim$ skalárszorzatnál: $\langle Ax|y\rangle^\sim = \langle x|Ay\rangle^\sim$ $(x,y\in\mathbb{R}^N)$.

Jelölés. $A \in \mathrm{Mat}(N,N,\mathbb{R})$ rögzített valós félig-egyszerű mátrix,

$$A = \textstyle\sum_\lambda \lambda P_\lambda, \quad \text{ahol} \quad P_\lambda = P_\lambda^2 : \mathbb{R}^N \to \{x : Ax = \lambda x\} \ \text{lin. projekció.}$$

Bármely $0 \neq x \in \mathbb{R}^N$ vektornál $x_\lambda := P_\lambda x$, $\nu(x) := \max\big\{|\lambda| : x_\lambda \neq 0\big\}$.

Tudjuk: $\mathrm{Sp}(A) = \big\{\mathrm{charpoly}_A \text{ gyökei}\big\}$ véges$\subset\mathbb{R}$, $P_\lambda = 0$, ha $\lambda \notin \mathrm{Sp}(A)$, azaz $A = \sum\limits_{\lambda\in\mathrm{Sp}(A)} \lambda P_\lambda$.

Továbbá $I = \sum\limits_{\lambda\in\mathrm{Sp}(A)} P_\lambda$, $P_\lambda P_\mu = 0$ $(\lambda\neq\mu)$, ahonnan $A^n = \sum\limits_{\lambda\in\mathrm{Sp}(A)} \lambda^n P_\lambda$,

$$A^n x = \sum_{\lambda\in\mathrm{Sp}(A)} \lambda^n x_\lambda = \sum_{\substack{\lambda\in\mathrm{Sp}(A)\\ |\lambda|<\nu(x)}} \lambda^n x_\lambda + \nu(x)^n x_{\nu(x)} + (-1)^n \nu(x)^n x_{-\nu(x)} \quad (n = 1,2,\dots).$$

Propozíció. *Legyen* $0 \neq x \in \mathbb{R}^N$ *tetszőleges. A* $\nu := \nu(x)$ *rövidítéssel*

$$\frac{A^n x}{\|A^n x\|} = \frac{x_\nu + (-1)^n x_{-\nu}}{\|x_\nu + (-1)^n x_{-\nu}\|} + o(1) \quad (n \to \infty).$$

Bizonyítás. Ha $|\lambda| < \nu$, akkor $\lambda^n = \nu^n [\lambda/\nu]^n = \nu^n o(1)$. Ezért $\sum_{\substack{\lambda\in\mathrm{Sp}(A)\\ |\lambda|<\nu}} \lambda^n x_\lambda = \nu^n o(1)$, ahonnan

$$\frac{A^n x}{\|A^n x\|} = \frac{\nu^n\big[x_\nu + (-1)^n x_{-\nu} + o(1)\big]}{\nu^n\big[\|x_\nu + (-1)^n x_{-\nu}\| + o(1)\big]} = \frac{x_\nu + (-1)^n x_{-\nu}}{\|x_\nu + (-1)^n x_{-\nu}\|} + o(1).$$

Algoritmus. Legyen $\|.\|$ tetszőleges norma $\mathbb{R}^N$-en (célszerű: $\|.\|_\infty$), $x \in \mathbb{R}^N$ pedig teszőleges egységvektor. Rekurzióval képezzük a következő $[x^{(n)}, y^{(n)}]$ $(n = 1,2,\dots)$ sorozatot

$$x^{(0)} := x, \quad y^{(n)} := A^2 x^{(n-1)}, \quad x^{(n)} := \frac{y^{(n)}}{\|y^{(n)}\|}.$$

Észrevétel. Mindegyik $x^{(n)}$ egységvektor és $A^{2n}x$ többszöröse. A Propozíció szerint

$$x^{(n)} = \frac{A^{2n}x}{\|A^{2n}x\|} \to \frac{x_\nu + x_{-\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|}, \quad y^{(n)} = A^2 x^{(n-1)} \to \frac{\nu^2 x_\nu + \nu^2 x_{-\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|} = \nu^2 \lim_{n\to\infty} x^{(n)}.$$

Innen $\nu^2 = \lim_{n\to\infty} \|y^{(n)}\|$. Másrészt

$$Ax^{(n)} \to A\frac{x_\nu + x_{-\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|} = \frac{\nu x_\nu - \nu x_{-\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|}.$$

Ezek alapján lineáris kombinációval kaphatunk x_ν- ill. $x_{-\nu}$-többszörösöket:

$$\frac{2\nu x_{\pm\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|} = \nu\frac{x_\nu + x_{-\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|} \pm \frac{\nu x_\nu - \nu x_{-\nu}}{\|x_\nu + x_{-\nu}\|} = \lim_{n\to\infty}\Big[\|y^{(n)}\|^{1/2} x^{(n)} \pm Ax^{(n)}\Big].$$

Tétel. *Tetszőeleges* $0 \neq x \in \mathbb{R}^N$ *vektorból kiindulva,* $\varepsilon = \pm 1$ *mellett*

$$z^{(\varepsilon,n)} := \|y^{(n)}\|^{1/2} x^{(n)} + \varepsilon A x^{(n)} \to \Big[A \text{ egy } \varepsilon\nu\text{-sajátvektora}\Big], \quad \lim_{n\to\infty} z^{(1,n)} + \lim_{n\to\infty} z^{(-1,n)} \neq 0.$$

Az általános eset

Propozíció. *Ha* $A \in \mathrm{Mat}(N,N,\mathbb{C})$ *és* $x \in \mathbb{C}^N \equiv \mathrm{Mat}(N,1,\mathbb{C})$, *akkor*

$$\exists\ \rho \in \mathbb{R}_+,\ r \in \{0,\dots,N\},\ (y_1\vartheta_1),\dots,(y_m,\vartheta_m) \in \mathbb{C}^N \times \mathbb{R}$$
$$A^n x = n^r \rho^n \sum_{k=1}^m e^{in\vartheta_k} y_k + o\big(n^r\rho^n\big) \qquad (n \to \infty).$$

Bizonyítás. Jordan-féle normálakban

$$A = \sum_{k=1}^s \lambda_k P_k + W_k,\ \text{ ahol }\ P_k\colon E \to E_k \text{ projekció, } \mathbb{C}^N = \oplus_k E_k,\ W_k = P_k W_k P_k \text{ nilpotens.}$$

Tudjuk: $W_k^{\dim(E_k)} = 0$, de $W_k^{\dim(E_k)-1} \neq 0$ minden Jordan-blokknál. Az x vektor a komponensei szerint $x = x_1 + \cdots + x_s$, ahol $x_k := P_k x$. Ekkor $n \to \infty$ esetén

$$\begin{aligned}
A^n x &= \sum_{k=1}^s P_k\big[A^n x\big] = \sum_{k=1}^s (\lambda_k + W_k)^n x_k = \sum_{k=1}^s \sum_{\ell=0}^n \binom{n}{\ell} \lambda^{n-\ell} W^\ell x_k \overset{r_k(x):=\max\{\ell: W_k^\ell x_k \neq 0\}}{=} \\
&= \sum_{k=1}^s \sum_{\ell=0}^{r_k(x)} \binom{n}{\ell} \lambda^{n-\ell} W^\ell x_k = \sum_{k=1}^s \sum_{\ell=0}^{r_k(x)} \lambda^n \frac{n^{r_k(x)}}{r_k(x)!} \left[\frac{W_k^{r_k(x)} x_k}{\lambda^{r_k(x)}} + o(1) \right] = \\
&= \sum_{k \in K(x)} \lambda_k^n n^{r(x)} \frac{W^{r(x)} x_k}{\lambda^{r(x)} r(x)!} + o\Big(\rho(x)^n n^{r(x)}\Big),
\end{aligned}$$

ahol $\rho(x) := \max\limits_{\ell: x_\ell \neq 0} |\lambda_\ell|$, $r(x) := \max\limits_{k:|\lambda_k|=\rho(x)} r_k(x)$ és $K(x) := \big\{k : |\lambda_k| = \rho(x),\ r_k(x) = r(x)\big\}$.

Következmény. $\dfrac{A^n x}{\|A^n x\|} = \displaystyle\sum_{k=1}^m e^{in\vartheta_k} y_k + o(1)$, *ahol* $y_1,\dots,y_m$ *sajátvektorai* A*-nak valamilyen közös* $r\big(= r(x)\big)$ *rendben.*

Megjegyzés. a) Ha egy $N\times N$-es komplex mátrix tagjait véletlenszerűen (a $2N^2$-dimenziós Lebesgue-mértékhez képest folytonos eloszlással) választjuk, akkor 1 valószínűséggel N különböző abszolutértékű és $\neq 0$ sajátértéke lesz. Pontosabban: $\mathrm{Vol}_{2N^2}\big(\mathcal{A}\big)=0$, ahol

$$\mathcal{A}:=\Big\{\big(a_{11},a_{12},\dots,a_{NN}\big)\in\mathbb{C}^{N^2}:\exists\ \lambda_1,\dots,\lambda_N\in\mathbb{C}$$
$$\mathrm{charpoly}_{[a_{pq}]_{p,q=1}^N}(\lambda)=\prod_{k=1}^N(\lambda-\lambda_k),\quad |\lambda_1|>\cdots|\lambda_N|>0\Big\}.$$

b) $N\times N$-es *valós* véletlen mátrixok esetén a konjugált-komplex gyökpárok lehetősége miatt $\mathrm{Vol}_{N^2}\big(\mathcal{R}\big)=0$, ahol

$$\mathcal{R}:=\Big\{\big(a_{11},\dots,a_{NN}\big)\in\mathbb{R}^{N^2}:\exists\ \lambda_1,\dots,\lambda_m\in\mathbb{R}+i\mathbb{R}_+$$
$$\mathrm{charpoly}_{[a_{pq}]_{p,q=1}^N}(\lambda)=\prod_{k:\lambda_k\in\mathbb{R}}(\lambda-\lambda_k)\prod_{\ell:\lambda_\ell\notin\mathbb{R}}(\lambda-\lambda_\ell)(\lambda-\overline{\lambda_\ell}),\quad |\lambda_1|>\cdots|\lambda_m|>0\Big\}.$$

c) Mind a generikus $A\in\mathcal{A}$ ill. $A\in\mathcal{R}$ esetekben van olyan (komplex vektorokból álló) $\big\{u_\lambda:\lambda\in\mathrm{Sp}(A)=(\{\mathrm{charpoly}_A\text{ gyökei}\})\big\}$ bázisa $\mathbb{C}^N\equiv\mathrm{Mat}(N,1,\mathbb{C})$-nek, amelynél

$$Au_\lambda=\lambda u_\lambda\qquad\big(\lambda\in\mathrm{Sp}(A)\big).$$

Az $A\in\mathrm{R}$ esetben vehető a $u_{\overline{\lambda}}=\overline{u_\lambda}$ $(\lambda\in\mathrm{Sp}(A))$ konjugáltsági reláció is. Mindkét esetben, egy generikus véletlen *komplex* vektornak egyetlen u_λ-komponense sem $=0$ és mind különböző abszolutértékű, azaz $\mathrm{Vol}_{2N}\big(\mathcal{X}_A\big)=0$,ahol

$$\mathcal{X}_A:=\Big\{\big(x_1,\dots,x_N\big)\in\mathbb{C}^N\!:\exists[\xi_\lambda:\lambda\in\mathrm{Sp}(A)]\ \ 0\neq|\xi_\lambda|\neq|\xi_\mu|\ (\lambda\neq\mu),\ x=\sum_\lambda\xi_\lambda u_\lambda\Big\}.$$

Propozíció. *Ha $A\in\mathcal{R}$ és $x\in\mathcal{X}_A$ (azaz generikus véletlen valós mátrix, x pedig generikus véletlen komplex vektor), akkor*

$$\frac{A^{2n}x}{\|A^{2n}x\|}\to\mathrm{Re}\big(\xi_{\lambda_1}u_{\lambda_1}\big)\quad(n\to\infty).$$

Bizonyítás. Észrevétel: $A^nx=\sum_\lambda\lambda^n\xi_\lambda u_\lambda$ $(n=1,2,\dots)$.
Két esetet tekintünk: 1) a legnagyobb abszolutértékű sajátérték λ_1 valós, 2) $\lambda_1\notin\mathbb{R}$.
1) $\lambda_1=\mathrm{sgn}(\lambda_1)|\lambda_1|$. Ekkor $\lambda_1\neq\lambda\in\mathrm{Sp}(A)$ esetén $|\lambda|<|\lambda_1|$ miatt $\lambda^n=\lambda_1(\lambda/\lambda_1)^n=\lambda_1^n o(1)$. Ezért $A^nx=\xi_{\lambda_1}\lambda_1^n u_{\lambda_1}+\sum_{\lambda:|\lambda|<|\lambda_1|}\xi_\lambda\lambda_1^n o(1)=\lambda_1^n[\xi_{\lambda_1}+o(1)]$. Innen

$$\frac{A^nx}{\|A^nx\|}=\frac{\mathrm{sgn}(\lambda_1)^n|\lambda_1|^n\xi_{\lambda_1}}{|\lambda_1|^n[|\xi_{\lambda_1}|+o(1)]}u_{\lambda_1}+o(1),\qquad\frac{A^{2n}x}{\|A^{2n}x\|}=\frac{\xi_{\lambda_1}}{|\xi_{\lambda_1}|+o(1)}u_{\lambda_1}+o(1).$$

2) Most $\lambda_1=|\lambda_1|e^{i\vartheta}$, $\overline{\lambda_1}=|\lambda_1|e^{-i\vartheta}\in\mathrm{Sp}(A)$. Vehető $|\xi_{\lambda_1}|>|\xi_{\overline{\lambda_1}}|$. Az előzőekhez hasonlóan

$$A^nx=|\lambda_1|^n\Big(\xi_{\lambda_1}e^{in\vartheta}u_{\lambda_1}+\xi_{\overline{\lambda_1}}e^{-in\vartheta}\overline{u_{\lambda_1}}+o(1)\Big).$$

MOORE–PENROSE-INVERZ

Lineáris egyenletrendszer normál közelítő megoldása

Az $m\times n$-es valós mátrixok halmazát $\mathrm{Mat}\big(\mathbb{R},m,n\big)$ fogja jelölni. Speciálisan $\mathrm{Mat}\big(\mathbb{R},n,1\big)$ elemei: n-es *oszlopvektorok*. Rajtuk a *skalár-szorzat*

$$\big\langle x\big|y\big\rangle := \sum_{k=1}^{n}\xi_k\eta_k, \quad \text{ha} \quad x=\begin{bmatrix}\xi_1\\ \vdots\\ \xi_n\end{bmatrix},\ y=\begin{bmatrix}\eta_1\\ \vdots\\ \eta_n\end{bmatrix}.$$

Az x vektor *hossza* $\|x\| := \langle x|x\rangle^{1/2}$. Általában is, az $A\in\mathrm{Mat}(\mathbb{R},m,n)$ mátrix *normája*

$$\|A\| := \max\big\{\|Ax\|:\ x\in\mathrm{Mat}(\mathbb{R},n,1),\ \|x\|=1\big\}.$$

Definíció. Ettől kezdve m,n rögzített, $H:=\mathrm{Mat}\big(\mathbb{R},n,1\big)$ és $K:=\mathrm{Mat}\big(\mathbb{R},m,1\big)$. Legyen $A\in\mathrm{Mat}\big(\mathbb{R},m,n\big)$, $z\in H$ és $b\in K$. Ekkor

z egy legjobb célközelítő megoldása az $Ax=b$ egyenletnek, ha $\big\|b-Az\big\|=\min\limits_{x\in H}\big\|Ax-b\big\|$.

Megjegyzés. Tudjuk: az A mátrix $\mathrm{ran}(A):=\big\{Az:\ z\in H\big\}$ *képtere* egy altér K-ban. Az pontjai közül a b vektornak a reá való $P_{\mathrm{ran}(A)}b$ *merőleges vetülete* van legközelebb b-hez. Tehát $P_{\mathrm{ran}(A)}b$ az a vektor, amelyet a legjobb célközelítéssel el lehet érni: mindig

$$\|b-Az\|\le\min_{x\in H}\big\{\|Ax-b\| = \min_{y\in\mathrm{ran}(A)}\|y-b\| = \big\|b-P_{\mathrm{ran}(A)}b\big\|.$$

A legjobb célközelítést adó vektorok halmaza tehát a

$$H_{A,b} := \big\{x\in H:\ Ax=P_{\mathrm{ran}(A)}b\big\}$$

alakzat. Ez egy párhuzamos eltoltja az A mátrix $\ker(A):=\{u\in H:\ Au=0\}$ *magterének*. Valóban, ha x_1 egy tetszőlegesen rögzített eleme $H_{A,b}$-nek, akkor $x_1+u\in H_{A,b} \iff A(x_1+u)=P_{\mathrm{ran}(A)}b \iff Au=Ax_1-P_{\mathrm{ran}(A)}b=P_{\mathrm{ran}(A)}b-P_{\mathrm{ran}(A)}b=0$. Vagyis $H_{A,b}=x_1+\ker(A)$ bármelyik $x_1\in H_{A,b}$ mellett.

Definíció. $H_{A,b}$ elemei között is van egy (metrikus szempontból) kitüntetett: az origóhoz legközelebbi, amelyet az $Ax=b$ egyenlet *normál közelítő megoldásának* nevezünk. Ez nem más, mint 0-nak a $H_{A,b}=x_1+\ker(A)$ affin altérre való merőleges vetülete, vagyis az

$$\begin{aligned}\mathbf{A}^+(b) &:= P^{\mathrm{affin}}_{H_{A,b}}(0) = \Big[x_1-P_{\ker(A)}x_1:\ x_1\in H_{A,b}\ \text{tetszőleges}\Big] = \\ &= \Big[\text{az origóhoz leközelebbi legjobb célközelítő megoldása } Ax=b\text{-nek}\Big]\end{aligned}$$

vektor H-ban.

Mátrix általánosított (Moore–Penrose-féle) inverze

Emlékeztető. Azonosítjuk $\mathbb{R}^d$-t az oszlopmátrixok $\mathrm{Mat}(d,1,\mathbb{R})$ terével, az $A\in\mathrm{Mat}(n,m,\mathbb{R})$ mátrixot pedig az $x \mapsto Ax$ lineáris $\mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ leképezéssel. A skalárszorzat $\mathbb{R}^d$-ben: $\langle x|y\rangle := y^{\mathrm{T}}x \ \big(x, y \in \mathbb{R}^d \equiv \mathrm{Mat}(d, 1, \mathbb{R})\big)$.

Tudjuk: $A : \ker(A)^\perp \leftrightarrow \mathrm{ran}(A)$, ahol $\ker(A) := \{u \in \mathbb{R}^m : \ Au = 0\}$ A-nak a *magtere*, $\mathrm{ran}(A) := A\mathbb{R}^m = \{Ax : \ x \in \mathbb{R}^m\}$ A-nak a *képtere* (a *range* angol szó alapján).
$W^\perp := \big\{u : \ u \perp W\big\} = \big\{u : \ \langle u|w\rangle \ (w \in W)\big\}$ a $W \subset \mathbb{R}^m$ tér *ortogonális komplementere.*

A transzponáltról tudjuk: $A^{\mathrm{T}} : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^m$, $\langle Ax|y| = \langle x|A^{\mathrm{T}}y\rangle \quad (x \in \mathbb{R}^m, \ y \in \mathbb{R}^n)$, továbbá $\ker(A^{\mathrm{T}}) = \mathrm{ran}(A)^\perp$, $\mathrm{ran}(A^{\mathrm{T}}) = \ker(A)^\perp$.

Tétel. *Legyen $A \in \mathrm{Mat}(n, m, \mathbb{R})$. Ekkor a az $Ax = b$ egyenletrendszer normál közelítő megoldása lineárisan függ a b célvektortól. Nevezetesen*

$$A^+(b) = \big[A|\ker(A)^\perp\big]^{-1} P_{\mathrm{ran}(A)}b \qquad (b \in \mathbb{R}^n).$$

Itt $A|\ker(A)$ az $A : \mathbb{R}^m \to \mathbb{R}^n$ leképezés megszorítottja a $\ker(A)^\perp$ altérre, ami egy lineáris $\ker(A)^\perp \leftrightarrow \mathrm{ran}(A)$ leképezés, $P_{\mathrm{ran}(A)}$ pedig a $\mathrm{ran}(A)$ altérre való merőleges vetítés.

Bizonyítás. Mivel $A^+(b)$ egy legjobb célközelítĩtésű megoldása $Ax = b$-nek,

$$A\big(A^+(b)\big) \in H_{A,b} := \big\{x \in \mathbb{R}^m : \ Ax = P_{\mathrm{ran}(A)}b\big\} \Longrightarrow A\big(A^+(b)\big) = P_{\mathrm{ran}(A)}b.$$

Másrészt, mivel $A^+(b)$ a legkisebb normájú legjobban közelítő megoldás,

$$H_{A,b} = A^+(b) + \ker(A) \Rightarrow \|A^+(b)\| \le \| \le A^+(b) + u \ \ \big(u \in \ker(A)\big) \Rightarrow A^+(b) \perp \ker(A).$$

Vagyis $A^+(b) \in \ker(A)^\perp$. Mivel pedig $A : \ker(A)^\perp \leftrightarrow \mathrm{ran}(A)$, szükségképpen

$$A^+(b) = \Big[x \in \ker(A)^\perp : \ Ax = P_{\mathrm{ran}(A)}b\Big] = \big[A|\ker(A)^\perp\big]^{-1} P_{\mathrm{ran}(A)}b.$$

Következmény. (Geometriai jellemzés). $x = A^+(b) \iff x \perp \ker(A)$ *és* $Ax - b \perp \mathrm{ran}(A)$.

Definíció. A lineáris $b \mapsto A^+(b)$ leképezés mátrixát ($\mathbb{R}^m$ ill. $\mathbb{R}^n$ kanonikus egységvektorai szerint) szintén A^+ jelöli. Elnevezés: az A^+ mátrix [lineáris leképezés] az A mátrixnak [lineáris leképezésnek] a *Moore–Penrose-inverze* vagy egyszerűen *általánosított inverze.*

Tétel. *Ha $A \in \mathrm{Mat}(n, d, \mathbb{R})$, $B \in \mathrm{Mat}(d, m, \mathbb{R})$, akkor*

$$\ker(A)^\perp = \mathrm{ran}(B) \implies \big[AB\big]^+ = B^+A^+.$$

Bizonyítás. Tudjuk a következő leképezési viszonyokat:

$$\begin{aligned} &\mathbb{R}^n \supset \mathrm{ran}(A) \xleftarrow{A} \ker(A)^\perp = \mathrm{ran}(B) \xleftarrow{B} \ker(B)^\perp \subset \mathbb{R}^m, \\ &\text{ahol} \quad A : \mathbb{R}^r \leftrightarrow \mathrm{ran}(A), \quad B : \ker(B)^\perp \leftrightarrow \mathbb{R}^n. \end{aligned}$$

Innen azonnal következik, hogy $\operatorname{ran}(AB) = A\operatorname{ran}(B) = A\ker(A)^{\perp} = \operatorname{ran}(A)$, másrészt $\ker(AB) = \ker(B)$. Ezért

$$\big[AB|\ker(AB)^{\perp}\big]^{-1} = \big[AB|\ker(B)^{\perp}\big]^{-1} = \big[B|\ker(B)^{\perp}\big]^{-1}\big[A^{-1}|\operatorname{ran}(A)\big],$$

ahonnan*

$$\begin{aligned}
\big[AB\big]^{+} &= \big[AB|\ker(AB)^{\perp}\big]^{-1}P_{\operatorname{ran}(AB)} = \\
&= \big[AB|\ker(B)^{\perp}\big]^{-1}P_{\operatorname{ran}(A)} = \\
&= \big[B|\ker(B)^{\perp}\big]^{-1}\big[A^{-1}|\operatorname{ran}(A)\big]P_{\operatorname{ran}(A)} =^{A:\ker(A)^{\perp}\leftrightarrow\operatorname{ran}(A)=\ker(B)^{\perp}} \\
&= \big[B|\ker(B)^{\perp}\big]^{-1}\underbrace{P_{\ker(B)^{\perp}}}_{P_{\operatorname{ran}(A)}}\big[A|\ker(A)^{\perp}\big]^{-1}P_{\operatorname{ran}(A)} = B^{+}A^{+}\ .
\end{aligned}$$

Példa. $A := [1\ 0]$, $B := \left[\begin{smallmatrix}1&0\\1&1\end{smallmatrix}\right]$ esetén $AB = [1\ 0]$, $A^{+} = \left[\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}\right]$, $B^{+} = B^{-1} = \left[\begin{smallmatrix}1&0\\-1&1\end{smallmatrix}\right]$. Ekkor $[AB]^{+} = [1\ 0]^{+} = \left[\begin{smallmatrix}1\\0\end{smallmatrix}\right] \neq B^{+}A^{+} = \left[\begin{smallmatrix}1\\-1\end{smallmatrix}\right]$.

Gyakorlat. Igaz-e, hogy $AB, B^{+}A^{+} \neq 0 \Longrightarrow \ker(A)^{\perp}$?

Általánosított inverz QR-felbontással

Tétel. *Ha* $0 \neq A = QR$ *az* A *mátrixnak egy* [ortogonális]·[felső-trianguláris] *felbontása, akkor*

$$\mathbf{A}^{+}(b) = \Big[R_0^{\mathrm{T}}\big[R_0R_0^{\mathrm{T}}\big]^{-1}, \underbrace{0}_{n-r}\Big]Q^{\mathrm{T}}b \qquad (b \in K),$$

ahol R_0 *az* R *mátrixnak a nem-zéró soraiból álló részmátrixa.*

Bizonyítás. Legyen $0 \neq A = QR$, ahol $Q \in \operatorname{Ort}(\mathbb{R}, m)$, $R = \left[\begin{smallmatrix}R_0\\0\end{smallmatrix}\right]$ az $R_0 \in \operatorname{Mat}(\mathbb{R}, r, n)$, $r := \operatorname{rank}(A) \leq n$ rangú lineáriasn független sorokból álló felső-trianguláris mátrixszal.**
Mivel *az ortogonális mátrixszal való szorzás nem változtatja a vektorhosszakat*, az a Q^{T}-tal beszorzott $Rx = Q^{\mathrm{T}}b$ egyenlet normál közelítő megoldása ugyanaz, mint az eredeti $Ax = b$-é.
Jegyezzük meg, hogy az $r\times r$-es $R_0R_0^{\mathrm{T}}$ mátrix valóban invertálható, mivel nem-nulla vektort nem-nulla vektorba visz. Ugyanis ha $0 \neq w \in \operatorname{Mat}(\mathbb{R}, r, 1)$, akkor a $w^{\mathrm{T}}R_0$ vektor egy R_0 soraiból alkotott nem-triviális lineáris kombináció, így $\neq 0$ e sorok lineáris függetlensége miatt. Ennek transzponáltja $R_0^{\mathrm{T}}w \neq 0$, és ezért $0 \neq \langle R_0^{\mathrm{T}}w|R_0^{\mathrm{T}}w\rangle = \langle R_0R_0^{\mathrm{T}}w|w\rangle$. Ez pedig csak úgy lehet, ha $R_0R_0^{\mathrm{T}}w \neq 0$. Ezért befejezésül elég megmutatnunk, hogy az

$$x_* := \Big[R_0^{\mathrm{T}}\big[R_0R_0^{\mathrm{T}}\big]^{-1}, 0\Big]c$$

* A levezetésben $X = A, B, AB$-re $[X|\ker(X)^{\perp}]^{-1} : \operatorname{ran}(X) \to \ker(X)^{\perp}$ lin. leképezés.
** Voltaképpen elég a gondolatmenethez, hogy R_0 sorai lineárisan függetlenek.

vektor az $Rx = c$ egyenlet normál közelítő megoldása (nemcsak $c := Q^{\mathrm{T}}b$-re). Ehhez csak azt kell verifikálnunk, hogy

1) Rx_* *a* c *vektor merőleges vetülete* $\mathrm{ran}(R)(= \{Rx :\ x \in H\})$*-ra;*

2) x_* *merőleges a* $\ker(A)(= \{u :\ Ru = 0\})$ *altérre.*

1) Belátandó: $\langle c - Rx_* | Rx\rangle = 0$ minden $x \in H$ mellet. Ezzel ekvivalens: $\langle R^{\mathrm{T}}c - R^{\mathrm{T}}Rx_* | x\rangle = 0$ $(x \in H)$, azaz $R^TRx_* = R^Tc$. Ez utóbbi igaz, mert a $c = \left[\begin{smallmatrix} c_0 \\ c_1 \end{smallmatrix}\right]$ $r \oplus (n-r)$-dimenziós felbontással

$$\begin{aligned}
R^Tc &= \left[R_0^T, 0\right]\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \left[R_0^Tc_0\right] , \\
R^TRx_* &= \left[R_0^T, 0\right]\begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix}\left[R_0^{\mathrm{T}}\left[R_0R_0^{\mathrm{T}}\right]^{-1}, 0\right]\begin{bmatrix} c_0 \\ c_1 \end{bmatrix} = \\
&= \left[R_0^T, 0\right]\begin{bmatrix} R_0 \\ 0 \end{bmatrix}\left[R_0^T\left[R_0R_0^{\mathrm{T}}\right]^{-1}c_0\right] = \\
&= \left[R_0^T, 0\right]\begin{bmatrix} R_0R_0^T\left[R_0R_0^{\mathrm{T}}\right]^{-1}c_0 \\ 0 \end{bmatrix} = \\
&= \left[R_0^T, 0\right]\begin{bmatrix} c_0 \\ 0 \end{bmatrix} = \left[R_0^Tc_0\right] .
\end{aligned}$$

2) Legyen $u \in \ker(A)$, azaz $Ru = 0$. Belátandó: $\langle x_* | u\rangle = 0$. Ez is áll, mert

$$\langle x_* | u\rangle = \left\langle R_0^{\mathrm{T}}\left[R_0R_0^{\mathrm{T}}\right]^{-1}c_0 \middle| u\right\rangle = \left\langle \left[R_0R_0^{\mathrm{T}}\right]^{-1}c_0 \middle| \underbrace{R_0u}_{0}\right\rangle = 0 \ .\square$$

Definíció. Ettől kezdve A^+ fogja jelölni az $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$ mátrixhoz asszociált fenti $b \mapsto \mathbf{A}(b)$ normál közelítő megoldási lineáris leképezés $(n \times m)$-es mátrixát. Elnevezés: A^+ A-nak az *általánosított inverze.* Konvenció: $0^+ := 0$.

Megjegyzés. Az általánosított inverz másik gyakori neve: *Moore–Penrose-inverz.*

Propozíció. $\big(AB\big)^+ = B^+A^+$, *ha* $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, r)$, $B \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, r, n)$ *és* $m, n \geq r = \mathrm{rank}(A) = \mathrm{rank}(B)$.

Bizonyítás. Legyen $K := \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, 1)$, $H := \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, n, 1)$, $F := \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, r, 1)$. Ekkor a $\mathbf{B} : x \mapsto Bx$, $\mathbf{A} : y \mapsto Ay$ leképezésekre

$$(1) \qquad H \xrightarrow{\mathbf{B}} \mathrm{ran}(B) = F \xleftrightarrow{\mathbf{A}} \mathrm{ran}(A) \subset K \ .$$

Ugyanis $r = \dim(F) = \mathrm{rank}(B) = \dim\big(\mathrm{ran}(B)\big) = \dim(\mathbf{B}H) \leq \dim(F) = r$ (mivel $\mathbf{B}H \subset F$). Vagyis $F = \mathbf{B}H = \mathrm{ran}(B)$. Másrészt az $m \geq r = \mathrm{rank}(A)$ feltevés miatt A

oszlopai lineárisan függetlenek. Ezért az $\mathbf{A}$ leképezés injektív (azaz $y_1 \neq y_2 \Rightarrow Ay_1 \neq Ay_2$). Azonnal következik (1)-ből, hogy

$$\begin{aligned}\operatorname{ran}(AB) &= \big\{\mathbf{AB}x : \ x \in H\big\} = \mathbf{A}\big(\mathbf{B}H\big) = \mathbf{A}F = \operatorname{ran}(A),\\ \ker(AB) &= \big\{u \in H : \ \mathbf{AB}u = 0\big\} = \big\{u \in H : \ \mathbf{B}u = 0\big\} = \ker(B).\end{aligned}$$

Legyen $b \in K$ egy tetszőlegesen adott vektor, és legyen z_* a legközelebbi pontja $\operatorname{ran}(A) = \operatorname{ran}(AB)$-nek b-hez. Tekintsük az $y_* := A^+b$ ill. $x_* := B^+y_*$ pontokat. Definíció szerint $Ay_* = z_*$. Mivel pedig $\operatorname{ran}(B)$ a teljes F tér, a $Bx = y_*$ egyenlet megoldható, és így $Bx_* = y_*$. Tehát $ABx_* = Ay_* = z_*$, azaz x_* a normál közelítő megoldása az $ABx = b$ egyenletnek. Mivel $x_* = B^+y_*$, fennáll $x_* \perp \ker(B)$. Mivel pedig $\ker(AB) = \ker(B)$, egyben $x_* = (AB)^+b$. Tehát $(AB)^+b = x_* = B^+y_* = B^+A^+b$. $\square$

Gyakorlatok.

1) $A^+ = A^{-1}$, ha A invertálható.

2) a) $\big(QA\big)^+ = A^+Q^{\mathrm{T}}$, ha Q ortogonális mátrix.
   b) $\big(AQ\big)^+ = Q^{\mathrm{T}}A^+$, ha Q ortogonális mátrix.

3) a) $\big[A_0, 0\big]^+ = \left[\begin{smallmatrix}A_0^+\\ 0\end{smallmatrix}\right]$,
   b) $\left[\begin{smallmatrix}A_0\\ 0\end{smallmatrix}\right]^+ = \big[A_0^+, 0\big]$,
   c) $\left[\begin{smallmatrix}A_0 & 0\\ 0 & 0\end{smallmatrix}\right]^+ = \left[\begin{smallmatrix}A_0^+ & 0\\ 0 & 0\end{smallmatrix}\right]$.

4) a) $X^+ = X^{\mathrm{T}}\big[XX^{\mathrm{T}}\big]^{-1}$, ha X sorai lineárisan függetlenek.
   b) $Y^+ = \big[Y^{\mathrm{T}}Y\big]^{-1}Y^{\mathrm{T}}$, ha Y oszlopai lineárisan függetlenek.

5) $\big(A^{\mathrm{T}}\big)^+ = \big(A^+\big)^{\mathrm{T}}$.

6) $A^+ =?$, ha $A := \big[\xi_i\eta_j\big]_{i=1}^{m}{}_{j=1}^{n}$.

7) $A^+ =?$, ha $A := \big[\alpha_k + k\beta_\ell\big]_{k=1}^{m}{}_{\ell=1}^{n}$.

8) $P^+ = P$, ha P merőleges vetítés mátrixa.

9) Igaz-e általában is, hogy $[\text{projekció}]^+ = [\text{projekció}]$?

10) Adjunk példát az $\big(AB\big)^+ \neq B^+A^+$ esetre.

11) Ha $u, v \in \operatorname{Mat}(\mathbb{R}, m, 1)$ egységvektorok ($u^{\mathrm{T}}u = v^{\mathrm{T}}v = [1]$), akkor $[u^{\mathrm{T}}v]^+ = [u^{\mathrm{T}}v]^{-1} \in \operatorname{Mat}(\mathbb{R}, 1, 1)$. [Használjuk ezt 10)-hez!]

12) Igaz-e, hogy $\big(AB\big)^+ = B^+A^+$, ha $\mathrm{pr}_{\operatorname{ran}(A)}$ felcserélhető $\mathrm{pr}_{\ker^\perp(B)}$-vel és $\mathrm{pr}_{\operatorname{ran}(B)}$ felcserélhető $\mathrm{pr}_{\ker^\perp(A)}$-val?

Általánosított inverz Raileigh–Ritz(= SVD)-felbontással

Emlékeztető. (Raileigh–Ritz-felbontás). Ha $0 \neq A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, n)$ és $r = \mathrm{rank}(A)$, akkor $\exists\, \lambda_1 \geq \cdots \geq \lambda_r > 0 \;\; \exists\, V \in \mathrm{Ort}(\mathbb{R}, n),\; V \in \mathrm{Ort}(\mathbb{R}, m)$

$$A = V\Lambda U^{\mathrm{T}} = V \begin{bmatrix} \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} U^{\mathrm{T}} \,,$$

ahol $\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$ az az $(r\times r)$-es mátrix, amelynek főátlójában $\lambda_1, \ldots, \lambda_r$ áll, a többi tagjai pedig 0-k. Tehát U oszlopvektorait $u_1, \ldots, u_n$-el, V oszlopait $v_1, \ldots, v_m$-mel jelölve,

$$\begin{aligned} A : u_1 &\overset{U^{\mathrm{T}}}{\mapsto} e_1 \overset{\Lambda}{\mapsto} \lambda_1 e_1 \overset{V}{\mapsto} \lambda_1 v_1, \\ \vdots\;\; & \quad\;\; \vdots \qquad\;\; \vdots \qquad\;\; \vdots \\ u_r &\overset{U^{\mathrm{T}}}{\mapsto} e_r \overset{\Lambda}{\mapsto} \lambda_r e_r \overset{V}{\mapsto} \lambda_r v_r, \\ u_{r+1}&, \ldots, u_n \mapsto 0 \,, \end{aligned}$$

ahol $k=1, \ldots, n$-re $e_k := [\delta_{k1}, \delta_{2k}, \ldots, \delta_{kn}]^{\mathrm{T}}$ a k-adik n-es oszlop-egységvektor ($\delta_{k\ell} := [1$ ha $k = \ell$, 0 egyébként] a Kronecker-delta).* Mivel $\{u_1, \ldots, u_n\}, \{v_1, \ldots, v_m\}$ ortonormált rendszerek,

$$\begin{aligned} \ker(A) &= \mathbb{R}u_{r+1} + \cdots \mathbb{R}u_n, \quad & \ker^{\perp}(A) &= \mathbb{R}u_1 + \cdots \mathbb{R}u_r, \\ \mathrm{ran}(A) &= \mathbb{R}v_1 + \cdots + \mathbb{R}v_r, \quad & \mathrm{ran}^{\perp}(A) &= \mathbb{R}v_{r+1} + \cdots + \mathbb{R}v_n \,. \end{aligned}$$

Az 1,2,3) gyakorlatok állításai szerint

$$A^{+} = U\Lambda^{+}V^{\mathrm{T}} = U \begin{bmatrix} \mathrm{diag}(1/\lambda_1, \ldots, 1/\lambda_r) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} V^{\mathrm{T}} \,,$$

azaz $A^{+} : v_1 \mapsto (1/\lambda_1)u_1, \ldots, v_r \mapsto (1/\lambda_r)u_r$, és $0 = A^{+}v_{r+1} = \cdots = A^{+}v_m$, továbbá $\mathrm{ran}(A^{+}) = \ker^{\perp}(A)$, $\ker(A^{+}) = \mathrm{ran}^{\perp}(A)$.

Következmény. $AA^{+} = P_{\mathrm{ran}(A)}$, $A^{+}A = P_{\ker^{\perp}(A)}$, $AA^{+}A = A$, $A^{+}AA^{+} = A^{+}$.

Bizonyítás. Az előző jelöléseket használva,

$$\begin{aligned} AA^{+} :\; & v_1 \overset{A^{+}}{\mapsto} (1/\lambda_1)u_1 \overset{A}{\mapsto} v_1, \ldots, v_r \overset{A^{+}}{\mapsto} (1/\lambda_r)u_r \overset{A}{\mapsto} v_r,\; \{v_{r+1}, \ldots, v_m\} \overset{A^{+}}{\to} 0 \overset{A}{\to} 0, \\ A^{+}A :\; & u_1 \overset{A}{\mapsto} \lambda_1 v_1 \overset{A^{+}}{\mapsto} v_u, \ldots, u_r \overset{A}{\mapsto} \lambda_r v_r \overset{A^{+}}{\mapsto} u_r \;, \{u_{r+1}, \ldots, u_n\} \overset{A}{\to} 0 \overset{A^{+}}{\to} 0 \,. \end{aligned}$$

Vagyis $A^{+}A = P_{\ker^{\perp}(A)} = P_{\mathrm{ran}(A^{+})}$ és $AA^{+} = P_{\mathrm{ran}(A)}$. Innen $AA^{+}A = (AA^{+})A = P_{\mathrm{ran}(A)}A = A$, és $A^{+}AA^{+} = (A^{+}A)A^{+} = P_{\mathrm{ran}(A^{+})}A^{+} = A^{+}$. □

Tétel. (Az általánosított inverz algebrai jellemzése). *Az $(n\times m)$-es X mátrix pontosan akkor általánosított inverze az $(m\times n)$-es $A \neq 0$ mátrixnak, ha*

$$(*) \qquad AX = [AX]^{\mathrm{T}}, \quad XA = [XA]^{\mathrm{T}}, \quad AXA = A, \quad XAX = X \,.$$

---

* Gyakran célszerű redukált forma: $A=V_0\Lambda_0U_0^{\mathrm{T}}$, ahol $V_0=\big[v_1, \ldots, v_r\big]$, $\Lambda_0=\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$, $U_0=\big[u_1, \ldots, u_r\big]$.

Bizonyítás. Mivel a merőleges vetítések mátrixai szimmetrikusak, az $X := A^+$ választáskor teljesül $(*)$ a Következmény szerint.
Fordítva: tegyük fel, hogy az $(n \times m)$-es X mátrix teljesíti a $(*)$-beli négy egyenletet. Írjuk fel X-et az $X = UMV^{\mathrm{T}}$ alakban (az $M = U^{\mathrm{T}}XV$ mátrixszal). Ekkor $AX = V\Lambda U^{\mathrm{T}}UMV^{\mathrm{T}} = V[\Lambda M]V^{\mathrm{T}}$. Az $AX = [AX]^{\mathrm{T}}$ reáció jelentése tehát $V[\Lambda M]V^{\mathrm{T}} = V[\Lambda M]^{\mathrm{T}}V^{\mathrm{T}}$, azaz $\Lambda M = [\Lambda M]^{\mathrm{T}}$. Hasonlóan eliminálhatjuk a többi egyenletből is az U, V ortogonális mátrixokat. Vagyis $(*)$ ekvivalens az egyszerűbb

$$(**) \qquad \Lambda M = [\Lambda M]^{\mathrm{T}}, \quad M\Lambda = [M\Lambda]^{\mathrm{T}}, \quad \Lambda M \Lambda = \Lambda, \quad M\Lambda M = M$$

alakkal. Legyen $\Lambda_0 := \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$, és használjuk az $\big([r + (n-r)] \times [(r + (m-r)]\big)$-es $M = \left[\begin{smallmatrix} M_{11} M_{12} \\ M_{21} M_{22} \end{smallmatrix}\right]$, ill. $\big([r + (m-r)] \times [(r + (n-r)]\big)$-es $\Lambda = \left[\begin{smallmatrix} \Lambda_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}\right]$, felbontást. Ezzel $(**)$ nem más mint

$$\begin{bmatrix} \Lambda_0 M_{11} & \Lambda_0 M_{12} \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11}^{\mathrm{T}}\Lambda_0 & 0 \\ M_{12}^{\mathrm{T}}\Lambda_0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} M_{11}\Lambda_0 & 0 \\ M_{21}\Lambda_0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Lambda_0 M_{11}^{\mathrm{T}} & \Lambda_0 M_{21}^{\mathrm{T}} \\ 0 & 0 \end{bmatrix},$$
$$\begin{bmatrix} \Lambda_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \Lambda_0 M \Lambda_0 & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \qquad \begin{bmatrix} M_{11}\Lambda_0 M_{11} & M_{11}\Lambda_0 M_{12} \\ M_{21}\Lambda_0 M_{11} & M_{21}\Lambda_0 M_{12} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{bmatrix}.$$

Az első egyenlet alapján $\Lambda_0 M_{12} = 0$, ahonnan $M_{12} = 0$. Hasonlóan a második egyenletből $M_{21} = 0$. A harmadik egyenlet szerint $\Lambda_0 M_{11} \Lambda_0 = \Lambda_0$, ahonnan $M_{11} = \Lambda_0^{-1}$. Ezeket az utolsó egyenletbe behelyettesítve kapjuk, hogy $M_{22} = 0$. Vagyis $M = \left[\begin{smallmatrix} \Lambda_0^{-1} & 0 \\ 0 & 0 \end{smallmatrix}\right] = \Lambda^+$ és $X = UMV^{\mathrm{T}} = U\Lambda^+V^{\mathrm{T}} = A^+$. $\square$

Általánosított inverz Frobenius-felbontással

Az $A \in \mathrm{Mat}(n, m, \mathbb{R})$ mátrixnak egy *Frobenius-felbontása* a következő szorzatalak:

$$A = A_1 A_2, \quad \text{ahol} \quad A_1 \in \mathrm{Mat}(n, r, \mathbb{R}),\ A_2 \in \mathrm{Mat}(r, m, \mathbb{R}),\ r = \mathrm{rank}(A).$$

Tudjuk: minden mátrinak vannak Frobenius-felbontásai (ld. köv. alfejezet).

Lemma. *Ha $A = A_1 A_2$ egy Frobenius-felbontás, akkor $A^+ = A_2^+ A_1^+$.*

Bizonyítás. Legyen $r := \mathrm{rank}(A)$. Ekkor $X := A_1, A_2$-re $r = \mathrm{rank}(X) = \dim\big(\mathrm{ran}(X)\big) = \dim\big(\ker(X)^{\perp}\big)$. Ezért $\mathrm{ran}(A_2) = \mathbb{R}^r = \ker(A_1)^{\perp}$. Tudjuk: ez elegendő feltétele az $[A_1 A_2]^+ = A_2^+ A_1^+$ relációnak.

Propozíció. (i) $A_1 \in \mathrm{Mat}(n, r, \mathbb{R})$, $r = \mathrm{rank}(A_1) \le n \Rightarrow A_1^+ = \big[A_1^{\mathrm{T}} A_1\big]^{-1} A_1^{\mathrm{T}}$,
(ii) $A_2 \in \mathrm{Mat}(r, m, \mathbb{R})$, $r = \mathrm{rank}(A_2) \le n \Rightarrow A_2^+ = A_2^{\mathrm{T}} \big[A_2 A_2^{\mathrm{T}}\big]^{-1}$.

Bizonyítás. (i) SVD-felbontással: $A_1 = Q_1[\Lambda, 0]Q_2^{\mathrm{T}} \Rightarrow \big[A_1^{\mathrm{T}} A_1\big]^{-1} A_1^{\mathrm{T}} = Q_2[\Lambda^{-1}, 0]^{\mathrm{T}} Q_1^{\mathrm{T}}$.

Direkt: Fennáll $A_1 : \ker(A_1)^\perp \leftrightarrow \operatorname{ran}(A_1) = \mathbb{R}^r$. Ezért A_1 injektív, és a 2×2-es $A_1^{\mathrm{T}}A_1$ mátrix invertálható. Legyen $b \in \mathbb{R}^n$ tetszőlegesen adott, és legyen $x := \big[A_1^{\mathrm{T}}A_1\big]^{-1}A_1^{\mathrm{T}}b$.
Belátandó: (1) $x \perp \ker(A)$, (2) $A_1x - b \perp \operatorname{ran}(A_1)$.
(1) triviális, mert A_1 injektivitása miatt $\ker(A_1) = \{0\}$. Mivel $\operatorname{ran}(A_1)$ elemei A_1v alakúak, (2) $\Longleftrightarrow \langle A_1x{-}x|A_1v\rangle{=}0\ (v{\in}\mathbb{R}^n)$. Itt $\langle A_1x{-}b|A_1v\rangle = \langle A_1^{\mathrm{T}}A_1x{-}A_1^{\mathrm{T}}b|v\rangle = \langle A_1^{\mathrm{T}}b{-}A_1^{\mathrm{T}}b|v\rangle = 0$.
(ii) azonnal következik (i)-ből, azt A_2^{T}-ra alkalmazva:
$A_2^+ = \big([A_2^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}\big)^+ = \Big(\big[[A_2^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}A_2^{\mathrm{T}}\big]^{-1}[A_2^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}}\Big)^{\mathrm{T}} = A_2^{\mathrm{T}}\big[A_2A_2^{\mathrm{T}}\big]^{-1}$.

Frobenius-felbontás Gauss–Jordan-eliminációval

Legyen A egy $r > 0$ rangú $n \times n$-es mátrix. Alkalmazzunk a soraira Gauss–Jordan-eliminációt. Ez r lépésben A-t olyan $\widetilde{A} = \big[\widetilde{a}_{ij}\big]$ mátrixba viszi, amelynek $n-r$ sora 0. Sőt, ha pivotok indexei: $(i_1,j_1),(i_2,j_2),\dots,(i_r,j_r)$. akkor $k = 1,\dots,r$ mellett

$$\widetilde{a}_{i_k,j_k} = 1 \quad \widetilde{a}_{i,j_k} = 0 \quad (i \neq i_k), \qquad \widetilde{a}_{i,j} = 0 \quad (i \notin \{i_1,\dots,i_r\},\ j \text{ tetsz.}).$$

Legyenek

$$A_1 := \begin{bmatrix} A & & A \\ j_1. & \dots & j_r. \\ \text{osz-} & & \text{osz-} \\ \text{lopa} & & \text{lopa} \end{bmatrix}, \quad A_2 := \begin{bmatrix} [\widetilde{A}\ i_1.\ \text{sora}] \\ \vdots\ \vdots \\ [\widetilde{A}\ i_r.\ \text{sora}] \end{bmatrix}$$

Tudjuk: az $r \times m$-es A_2 mátrix sorai lineárisan függetlenek, és A sorainak a lineáris kombinációi. Mivel $\operatorname{rank}(A) = r$, bázist alkotnak az A mátrix sorai lineáris kombinációihoz. Mivel pedig A_2 j_k-adik oszlopában az i_k-adik sorban 1-es a többi helyen 0 van,

$$\big[A\ i.\ \text{sora}\big] = a_{i,j_1}\big[\widetilde{A}\ 1.\ \text{sora}\big] + \dots + a_{i,j_r}\big[\widetilde{A}\ r.\ \text{sora}\big].$$

Ez pontosan azt jelenti, hogy $A = A_1A_2$. Mivel a Gauss–Jordan-elimináció véges sok $+,-,\cdot,/$ műveletből áll, kaptuk a következőt.

Tétel. *Minden A mátrixnak van olyan Frobenius-felbontása, amelynek tagjai mind az A tagjai által generált számtestben vannak. Pl. racionális mátrixnak vannak racionális Frobenius-felbontásai. Speciálisan, A^+ tagjai az A tagjai által generált számtestben vannak.*

Megjegyzés. A Gauss–Jordan-elimnáció úgy is megtehető, hogy a pivotokra teljesüljön $i_1 < i_2 < \dots < i_r$. Ekkor egyszerűen $A_2 = \big[\widetilde{A}\text{-ből kihagyva a 0-sorok}\big]$.

Példa. $A := \begin{bmatrix} 0&1&2&3 \\ 0&2&4&6 \\ 1&2&3&4 \end{bmatrix}$. Pivotok: $(1,2),(3,1) \to \widetilde{A} = \begin{bmatrix} 0&\mathbf{1}&2&3 \\ 0&0&0&0 \\ \mathbf{1}&0&-1&-2 \end{bmatrix} \to$

$A_1 := \begin{bmatrix} 1&0 \\ 2&0 \\ 2&1 \end{bmatrix}, \quad A_2 = \begin{bmatrix} 0&\mathbf{1}&2&3 \\ \mathbf{1}&0&-1&-2 \end{bmatrix}.$

Egymás után $i = 1,2,\dots,r$ mellett,
ha $\big[i.\ \text{egységvektor}\big] = \big[A_2\ j_i.\ \text{oszlopa}\big]$,
akkor $\big[A_1\ i.\ \text{oszlopa}\big] = \big[A\ j_i.\ \text{oszlopa}\ \big]$.

$$A^+ = A_2^+A_1^+ = A_2^{\mathrm{T}}[A_2A_2^{\mathrm{T}}]^{-1}[A_1^{\mathrm{T}}A_1]^{-1}A_1^{\mathrm{T}} = \frac{1}{10}\begin{bmatrix} -2&-4&7 \\ -1&-2&4 \\ 0&0&1 \\ 1&2&-2 \end{bmatrix}.$$

SVD-felbontás algebrai módszerrel

Definíció. Az $A \in \mathrm{Mat}(M, N, \mathrm{I\!R})$ mátrixnak az

$$A = Q_1 \Lambda Q_2^{\mathrm{T}}$$

szorzat-alak egy *SVD-felbontása*, ha

$$Q_1 \in \mathrm{ORT}(M, \mathrm{I\!R}),\ Q_2 \in \mathrm{ORT}(N, \mathrm{I\!R}),\ \Lambda = \begin{bmatrix} \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_r) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathrm{Mat}(M, N, \mathrm{I\!R}),$$

ahol $r = \mathrm{rank}(A)$ és $\lambda_1, \ldots, \lambda_r > 0$.

Megjegyzés. Q_2 oszlopai az $N \times N$-es $B := A^{\mathrm{T}} A \succ 0$ mátrix páronként egymásra merőleges 1 hosszú sajátvektorai,

$$\mathrm{charpoly}_B(\lambda) = \lambda^{N-r} \prod_{k=1}^{r} (\lambda - \lambda_k^2), \quad B\big[Q_2\ k\text{.oszl.}\big] = \lambda_k^2 \big[Q_2\ k\text{.oszl.}\big] \quad (k = 1, \ldots, r).$$

Q_1 oszlopai, amelyek szintén páronként egymásra merőleges egységvektorok közül az első r kifejezhető A-val:

$$\big[Q_1\ k\text{.oszl.}\big] = \frac{1}{\lambda_r} A \big[Q_1\ k\text{.oszl.}\big] \quad (k = 1, \ldots, r).$$

Konstrukció. 1) Meghatározzuk $B := A^{\mathrm{T}} A$ sajátértékeit multiplicitással:

$$\mathrm{charpoly}_B(\lambda) = \lambda^{N-r} \prod_{j=1}^{s} (\lambda - \mu_j)^{m_j}, \quad \mu_j, m_j > 0, \quad \sum_{j=1}^{s} m_j = r.$$

2) Mindegyik μ_j sajátértékhez meghatározunk B-nek egy m_j páronként egymára merőleges μ_j-sajátértékű sajátvektoraiaból álló $v_1^{(j)}, \ldots, v_{m_j}^{(j)}$ rendszerét. Ezek adják Q_2 oszlopait.

3) Q_1 első r oszlopát az $u_k^{(j)} := (1/\sqrt{\mu_j}) A v_k^{(j)}$ $(j \le s)$ vektorok adják. A többi $(M-r)$ oszlop ennek tetszőleges ortonormált kiegészítése.

Példa. $a := \sqrt{2}$, $b := \sqrt{3}$, $\quad A := \begin{bmatrix} 0 & a & 0 & a \\ b & 0 & b & 0 \\ 0 & a & 0 & a \\ b & 0 & b & 0 \\ 0 & a & 0 & a \end{bmatrix}$ egy SVD-felbontása.

$$B := A^{\mathrm{T}} A = \begin{bmatrix} 6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6 \\ 6 & 0 & 6 & 0 \\ 0 & 6 & 0 & 6 \end{bmatrix}, \quad \mathrm{charpoly}_B(\lambda) = \lambda^2 (\lambda - 12)^2.$$

Két egymásra merőleges saját-egységvektor B-hez $\mu := 12$ sajátértékkel:
$v := \big[x, y, z, u\big]^{\mathrm{T}}, \quad Bv - 12v = 0 \iff -6x + 6z = 0, -6y + 6u = 0, 6x - 6z = 0,\ 6y - 6u = 0.$

Megfelel $\ v_1 := \big[2^{-1/2}, 0, 2^{-1/2}, 0\big]^{\mathrm{T}}, \quad v_2 := \big[0, 2^{-1/2}, 0, 2^{-1/2}\big]^{\mathrm{T}}.$

Két egymásra merőleges saját-egységvektor B-hez 0 sajátértékkel:
$Bv = 0 \iff 6x + 6z = 0, 6y + 6u = 0, 6x + 6z = 0,\ 6y + 6u = 0.$

Megfelel $\ v_3 := \big[2^{-1/2}, 0, -2^{-1/2}, 0\big]^{\mathrm{T}}, \quad v_4 := \big[0, 2^{-1/2}, 0, -2^{-1/2}\big]^{\mathrm{T}}.$ Vehető

$$Q_2 := \Big[v_1\Big|\cdots\Big|v_4\Big] = \begin{bmatrix} 2^{-1/2} & 0 & 2^{-1/2} & 0 \\ 0 & 2^{-1/2} & 0 & 2^{-1/2} \\ 2^{-1/2} & 0 & -2^{-1/2} & 0 \\ 0 & 2^{-1/2} & 0 & -2^{-1/2} \end{bmatrix}.$$

Kiszámítjuk $Q_1 = \Big[u_1\Big|\cdots\Big|u_5\Big]$ oszlopvektorait:

$$u_1 = \mu^{-1/2} A v_1 = \frac{1}{\sqrt{12}} \begin{bmatrix} 0 & 2^{1/2} & 0 & 2^{1/2} \\ 3^{1/2} & 0 & b & 0 \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & 2^{1/2} \\ 3^{1/2} & 0 & 3^{1/2} & 0 \\ 0 & 2^{1/2} & 0 & 2^{1/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2^{-1/2} \\ 0 \\ 2^{-1/2} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 2^{-1/2} \\ 0 \\ 2^{-1/2} \\ 0 \end{bmatrix} = 2^{-1/2}\big(e_2 + e_4\big).$$

Hasonlóan $\ u_2 = \mu^{-1/2} A v_2 = \Big[3^{-1/2}, 0, 3^{-1/2}, 0, 3^{-1/2}\Big]^{\mathrm{T}} = 3^{-1/2}\big(e_1 + e_3 + e_5\big).$

Ezután $\{u_3, u_4, u_5\}$ tetszőleges, $\{u_1, u_2\}$-re merőleges ortonormált rendszer.

Észrevétel: $u_3 := 2^{-1/2}\big(e_2 - e_4\big),\ u_4 := 2^{-1/2}\big(e_1 - e_5\big)$ mellett $\big\{u_1, u_2, u_3, u_4\big\}$ ortonormált.

Választhatjuk u_5-öt a szimmetrikus $\ u_5 := xe_1 + ye_3 + xe_5$ alakban. Ekkor automatikusan $u_5 \perp u_1, u_3, u_4$, és $u_5 \perp u_2 \Leftrightarrow x + y + x = 0$, ahonnan $y = -2x$. Vagyis és az $1 = \|u_5\|^2 = 2x^2 + y^2$ normálás miatt megfelel $\ u_5 := 6^{-1/2}\big(e_1 - 2e_3 + e_5\big)$. Vagyis A egy SVD-felvbontása az $\ \alpha := 2^{-1/2} = 1/\sqrt{2}$ ill. $\beta := 3^{-1/2} = 1/\sqrt{3}\ $ konstansokkal

$$A = \begin{bmatrix} 0 & \beta & 0 & \alpha & \alpha\beta \\ \alpha & 0 & \alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & 0 & -\alpha\beta \\ \alpha & 0 & -\alpha & 0 & 0 \\ 0 & \beta & 0 & -\alpha & \alpha\beta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 12^{1/2} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 12^{1/2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha & 0 & \alpha & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & \alpha \\ \alpha & 0 & -\alpha & 0 \\ 0 & \alpha & 0 & -\alpha \end{bmatrix}.$$

SZIMMETRIKUS MÁTRIX CHOLESKY-FELBONTÁSA

$A := \left[a_{ij}\right]_{i,j=1}^{N}$ valós mátrix.

$$A^{\mathrm{T}} := \left[\overline{a_{ji}}\right]_{i,j=1}^{N} \qquad \text{az } A \text{ mátrix } \textit{transzponáltja}.$$

Alapazonosságok: $A^{\mathrm{TT}} = A$, $[AB]^{\mathrm{T}} = B^{\mathrm{T}} A^{\mathrm{T}}$ sorrendfordítással.
Elnevezés: A *szimmetrikus* mátrix, ha $A = A^{\mathrm{T}}$.

Észrevételek:

1) $X\,X^{\mathrm{T}}$ mindig szimmetrikus, mert $[X\,X^{\mathrm{T}}]^{\mathrm{T}} = X^{\mathrm{TT}} X^{\mathrm{T}} = X\,X^{\mathrm{T}}$.
2) Tegyük fel, hogy $A = C\,C^{\mathrm{T}}$, ahol $C = \left[c_{ij}\right]_{i,j=1}^{N}$ alsó-trianguláris mátrix (azaz $c_{ij} = 0$ az $i < j$ indexpárokra).
Ekkor C i. sora könnyen adódik, ha tudjuk A-t és C-nek az első $i-1$ sorát: definíció szerint

$$c_{i,i+1} = c_{i,i+2} = \cdots = c_{i,N} = 0\ .$$

Ha pedig $j = 1, 2, \ldots, i$, akkor

$$\begin{aligned} a_{ij} &= [C\ i.\ \text{sora}][C^{\mathrm{T}}\ j.\ \text{oszlopa}] = \\ &= [C\ i.\ \text{sora}][C\ j.\ \text{sora}]^{\mathrm{T}} =^{\text{skalárszorzat}} \\ &= \Big\langle \left[c_{i1}, c_{i2}, \ldots\ldots c_{ii}, 0, \ldots, 0\right] \Big| \\ &\qquad \Big| \left[c_{j1}, c_{j2}, \ldots c_{jj}, 0, \ldots\ldots, 0\right] \Big\rangle = \\ &= c_{i1}c_{j1} + c_{i2}c_{j2} + \cdots + c_{ij}c_{jj}\ . \end{aligned}$$

Itt $a_{ij}, c_{i1}, c_{j1}, c_{i2}, c_{j2} \ldots, c_{i,j-1}, c_{j,j-1}$ már ismert, és

$$\begin{aligned} c_{ij} &= \frac{1}{c_{jj}}\Big[a_{ij} - \left[c_{i1}c_{j1} + c_{i2}c_{j2} + \cdots + c_{i,j-1}c_{j,j-1}\right]\Big] \qquad (j = 1, 2, \ldots, i-1)\ , \\ c_{ii}^2 &= a_{ii} - \left[c_{1i}^2 + c_{i2}^2 + \cdots + c_{i,i-1}^2\right] \quad \Big(\Rightarrow c_{ii} = \sqrt{\text{jobb oldal}}\Big). \end{aligned}$$

Algoritmus. Kezdőlépés

$$\begin{aligned} &c_{11} := \sqrt{a_{11}}\ . \\ &c_{1j} := 0 \qquad (j = 2, 3, \ldots, N)\ . \end{aligned}$$

Új i. sor $(i > 1)$ kiszámítása

$$\begin{aligned} &c_{i,i+1}, c_{i,i+2}, \ldots, c_{i,N} := 0\ ; \\ &c_{ij} := \frac{1}{c_{jj}}\left[c_{i1}c_{j1} + c_{i2}c_{j2} + \cdots + c_{i,j-1}c_{j,j-1}\right] \qquad (j = 1, 2, \ldots, i-1)\ ; \\ &c_{ii} := \sqrt{a_{ii} - \left[c_{i1}^2 + c_{i2}^2 + \cdots + c_{i,i-1}^2\right]}. \end{aligned}$$

Cholesky-felbontás és klasszikus Gauss-elimináció

$A := \left[a_{ij}\right]_{i,j=1}^{N}$ valós mátrix.

$$\begin{aligned} &A = LU \quad \text{alsó}\times\text{felső-trianguláris felbontás,} \\ &L = \left[\ell_{ij}\right]_{i,j=1}^{N}, \quad \ell_{ii} = 1,\ \ell_{ij} = 0\ \ (i > j), \\ &U = \left[u_{ij}\right]_{i,j=1}^{N}, \quad u_{ii} \neq 0,\ \ u_{ij} = 0\ \ (i < j). \end{aligned}$$

Tudjuk: 1) $\left[A\ \ i.\ \text{sora}\right] = \left[\text{Gauss-elimináció } i.\ \text{lépése eredménye}\right]$.
2) $u_{11}u_{22} \cdot u_{mm} = \det\left[a_{ij}\right]_{i,j=1}^{m} \quad (m = 1, 2, \ldots, N)$.
3) Az LU-felbontás *egyértelmű*, ha a 2)-beli determinánsok $\neq 0$.

További felbontás:

$$D := \operatorname{diag}(u_{11}, u_{22}, \ldots, u_{NN}), \qquad U = DV\ .$$

Itt

$$V = \left[v_{ij}\right]_{i,j=1}^{N}, \quad \begin{aligned} &v_{ij} = u_{ij}/d_{ii} = u_{ij}/u_{ii}\ ; \\ &v_{ii} = 1, \quad V \text{ felső-trianguláris.} \end{aligned}$$

Észrevétel. A SZIMMETRIKUS $\Longrightarrow L = V^*$, azaz $A = V^*DV$.

Bizonyítás.

$$A = A^* = [LDV]^* = V^*D^*L^* = V^*[DL^*]$$

Itt V^* alsó-trianguláris, az átlójában 1-esekkel,
$DL^* =$ [átlós$\times$felső-trianguláris] = [felső-trianguláris].
Vagyis $A = V^*[DL^*]$ is egy LU-felbontása A-nak. Ez egyértelmű, $\Rightarrow$

$$V^* = L\ , \quad DL^* = U\ , \quad U = DV\ , \quad A = LU = V^*DV\ .$$

Összehasonlítás a Cholesky-felbontással. Feltesszük: $A = R^*R$, $[R \text{ átlója}] > 0$.

$$\begin{aligned} A = R^*R = V^*DV &= [V^*\sqrt{D}]\,[\sqrt{D}V] = \\ &= [\sqrt{D}V]^* \underbrace{[\sqrt{D}V]}_{\text{felső-tr.},\ >0\ \text{átló}} \quad . \end{aligned}$$

Egyértelműség $\Rightarrow$

$$R = \sqrt{D}V = \sqrt{D}L^* = [\sqrt{D}]^{-1}U\ .$$

Példa. Az $\quad A := \begin{bmatrix} 4 & 2 & 4 & 2 \\ 2 & 5 & 6 & 7 \\ 4 & 6 & 12 & 14 \\ 2 & 7 & 14 & 20 \end{bmatrix} \quad$ mátrix Choleski-felbontása

(1) *módosított Gauss-eliminációval,* (2) *direkt* módszerrel.

(1) [1. sor]/$\sqrt{a_{11}}$ $\qquad$ elim. [1. sor]-ral $\qquad$ [2. sor]/$\sqrt{\bullet_{22}}$ $\qquad$ elim. [2. sor]-ral

$$\begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 2 & 5 & 6 & 7 \\ 4 & 6 & 12 & 14 \\ 2 & 7 & 14 & 20 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 0 & 4 & 4 & 6 \\ 0 & 4 & 8 & 12 \\ 0 & 6 & 12 & 19 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 4 & 8 & 12 \\ 0 & 6 & 12 & 19 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & 4 & 6 \\ 0 & 0 & 6 & 10 \end{bmatrix}$$

[3. sor]/$\sqrt{\bullet_{33}}$ $\qquad$ elim. [3. sor]-ral $\qquad$ [4. sor]/$\sqrt{\bullet_{44}}$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & 6 & 10 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & 3 & 1 \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{1} & \mathbf{2} & \mathbf{1} \\ 0 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & \mathbf{2} & \mathbf{3} \\ 0 & 0 & 3 & \mathbf{1} \end{bmatrix} = C_A^{\mathrm{T}}$$

(2) A alsó fele $\qquad$ C_A 1.sora: $\sqrt{a_{11}}$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{4} & & & \\ \mathbf{2} & \mathbf{5} & & \\ \mathbf{4} & \mathbf{6} & \mathbf{12} & \\ \mathbf{2} & \mathbf{7} & \mathbf{14} & \mathbf{20} \end{bmatrix} \quad \begin{bmatrix} \mathbf{2} & & & \\ & & & \\ & & & \\ & & & \end{bmatrix}$$

$C_{2\bullet} = C_A$ 2.sora

$a_{21} = \langle C_{1\bullet} | C_{2\bullet} \rangle$

$\to c_{21} = a_{21}/c_{11}$

$a_{22} = \langle C_{2\bullet} | C_{2\bullet} \rangle$

$\to c_{22} = \sqrt{a_{22} - c_{21}^2}$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{2} & & & \\ \mathbf{1} & \mathbf{2} & & \\ & & & \\ & & & \end{bmatrix}$$

$C_{3\bullet} = C_A$ 3.sora

$a_{3j} = \langle C_{j\bullet} | C_{3\bullet} \rangle$

$\to c_{3j}\ (j=1,2)$

$a_{33} = \langle C_{3\bullet} | C_{3\bullet} \rangle$

$\to c_{33}^2 \to c_{33}$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{2} & & & \\ \mathbf{1} & \mathbf{2} & & \\ \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \\ & & & \end{bmatrix}$$

$C_{4\bullet} = C_A$ 4.sora

$a_{4j} = \langle C_{j\bullet} | C_{4\bullet} \rangle$

$\to c_{4j}\ (j=1,2,3)$

$a_{44} = \langle C_{4\bullet} | C_{4\bullet} \rangle$

$\to c_{44}^2 \to c_{44}$

$$\begin{bmatrix} \mathbf{2} & & & \\ \mathbf{1} & \mathbf{2} & & \\ \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \\ \mathbf{1} & \mathbf{3} & \mathbf{3} & \mathbf{1} \end{bmatrix} = C_A$$

Sajátértékek iterált Cholesky-felbontással

Jelölés. $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m)$ pozitív-definit szimmetrikus mátrixnál a Cholesky-felbontás

$$A = C_A C_A^{\mathrm{T}} \,.$$

Azaz C_A az egyetlen olyan *pozitív átlójú alsó-trianguláris* C mátrix, amelre $CC^{\mathrm{T}} = A$. Rekurzióval képezzük a $B_1, B_2 \ldots$ mátrix-sorozatot a következőképpen:

$$A_1 := A, \quad A_{n+1} := C_{A_n}^{\mathrm{T}} C_{A_n} \quad (n = 1, 2, \ldots).$$

Tétel. $\exists\, \lambda_1, \ldots, \lambda_m > 0 \;\; A_n \to \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)$ *és* $(\lambda - \lambda_1) \cdots (\lambda - \lambda_m) = \mathrm{charpoly}(A, \lambda)$.

Bizonyítás. Tudjuk: négyzetes Y, Z mátrixokra $YZ \sim ZY$ $\big(\exists\, S \;\; ZY = S(YZ)S^{-1}\big)$, és így $\mathrm{charpoly}(XY, \cdot) = \mathrm{charpoly}(YX, \cdot)$. Ennek alapján indukcióval

$$\mathrm{charpoly}(A_n, \cdot) = \mathrm{charpoly}(A, \cdot) \qquad (n = 1, 2, \ldots).$$

Mivel ennek gyökei mind > 0, a szimmetriája miatt $A_{n+1} \succ 0$, ha $A_n \succ 0$. Vagyis az $A_1, A_2, \ldots$ sorozat jól-definiált. Elegendő beátni, hogy egy diagonális mátrixhoz tart, mert

$$A_n \to \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m) \implies \mathrm{charpoly}(A, \lambda) = \mathrm{charpoly}(A_n, \lambda) \to$$
$$\to \mathrm{charpoly}\big(\mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m)\big) = \prod_{k=1}^{m} (\lambda - \lambda_k).$$

Vegyük a $P_k := \mathrm{diag}(\underbrace{1, \ldots, 1}_{k}, \underbrace{0, \ldots, 0}_{m-k}) \;\; (k = 1, \ldots, m)$ projekciókat.

Általában is, ha $X \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m)$, akkor

$$P_k X = \left[\frac{X \text{ 1.–}k\text{. sorai}}{0}\right] \;, \qquad X P_k = \big[X \text{ 1.}-k\text{. oszlopai} \big|\; 0\;\big].$$

Lemma: C alsó-trianguláris $\Rightarrow$ $\mathrm{Trace}\big[(P_k C)(P_k C)^{\mathrm{T}}\big] = \sum_{j \le i \le k} |C_{ij}|^2$ és

$$\mathrm{Trace}\big[(P_k C^{\mathrm{T}})(P_k C^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\big] = \textstyle\sum_{j \le \min\{i,k\}} |C_{ij}|^2.$$

Bizonyítás: mivel tetszőleges X mátrixra $\mathrm{Trace}\big(XX^{\mathrm{T}}\big) = \mathrm{Trace}\big(X^{\mathrm{T}} X\big) = \sum_{i,j} \big|X_{ij}\big|^2$.

Következmény: Itt

$$\mathrm{Trace}\big[(P_k C^{\mathrm{T}})(P_k C^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\big] - \mathrm{Trace}\big[(P_k C)(P_k C)^{\mathrm{T}}\big] = \sum_{j \le k < i} |C_{ij}|^2 \ge 0.$$

Alkalmazva ezt rögzített k mellett a $C = C_{A_1}, C_{A_2}, \ldots$ mátrixokra, mivel $A_n = C_{A_n} C_{A_n}^{\mathrm{T}}$ miatt $\mathrm{Trace}(P_k A_n) = \mathrm{Trace}\big[(P_k C_{A_n}^{\mathrm{T}})(P_k C_{A_n}^{\mathrm{T}})^{\mathrm{T}}\big]$, kapjuk, hogy

$$\mathrm{Trace}(P_k A_1) \le \mathrm{Trace}(P_k A_2) \le \mathrm{Trace}(P_k A_3) \le \cdots \,.$$

Másrészt mindig

$$\mathrm{Trace}(P_k A_n) \le \mathrm{Trace}\big[(P_m A_n)\big] = \mathrm{Trace}(A_n) = \\ = \mathrm{Trace}(A) \ .$$

Mivel felülről korlátos növő sorozatnak van limesze, vannak olyan

$$0 \le \mu_1 \le \mu_2 \le \cdots \le \mu_{m-1} \le \mu_m = \mathrm{Trace}(AA^{\mathrm{T}})$$

számok, hogy

$$\mathrm{Trace}\big[(P_k A_n)\big] \nearrow \mu_k \qquad (k = 1, \ldots, m).$$

Megjegyzés: itt $\mu_k \le \mu_{k+1}$, mert mindig $\mathrm{Trace}\big[(P_k A_n)(P_k A_n)^{\mathrm{T}}\big] \le \big[(P_k A_n)(P_k A_n)^{\mathrm{T}}\big]$. A Lemma Következményét $C := C_{A_n}$-re alkalmazva kapjuk, hogy tetszőleges k mellett

$$\sum_{j \le k < i} \big|[C_{A_n}]_{ij}\big|^2 \le \mathrm{Trace}\big[A_{n+1} A_{n+1}^{\mathrm{T}}\big] - \mathrm{Trace}\big[A_n A_n^{\mathrm{T}}\big] \to \mu_k - \mu_k = 0.$$

Mivel minden $1 \le j < i \le m$ indexpárra van olyan k, hogy $j \le k < i$ (pl. $k := i$ is),

$$\big[C_{A_n}\big]_{ij} \to 0 \qquad (n \to \infty,\ 1 \le j < i \le m), \implies \quad C_{A_n} = \mathrm{diag}(C_{A_n}) + o(1).$$

Sőt innen $A_n = C_{A_n} C_{A_n}^{\mathrm{T}} = \mathrm{diag}(A_n) + o(1)$. Mivel pedig $[A_n]_{11} + \cdots + [A_n]_{kk} = \mathrm{Trace}(P_k A_n) \nearrow \mu_k$ $(k = 1, \ldots m)$, adódik végül, hogy

$$A_n \to \mathrm{diag}\big(\sqrt{\mu_1}, \sqrt{\mu_2 - \mu_1}, \ldots, \sqrt{\mu_m - \mu_{m-1}}\big).$$

Vagyis a $\lambda_k := \sqrt{\mu_k - \mu_{k-1}}$ $(k = 1, \ldots, m;\ \mu_0 := 0)$ választás megfelel. Qu.e.d.

Tétel. *Legyen* $A \in \mathrm{Mat}(\mathbb{R}, m, m)$ *pozitív-definit mátrix, ahol*

$$A = Q^{\mathrm{T}} \Lambda Q, \quad Q \in \mathrm{Ort}(\mathbb{R}, m), \quad Q = LU \ \ \text{LU-felbontható } (\mathrm{diag}(L) = I), \\ \Lambda = \mathrm{diag}(\lambda_1, \ldots, \lambda_m), \quad \lambda_1 \ge \cdots \ge \lambda_N > 0 \ .$$

Rekurzióval képezzük a $B_1, B_2 \ldots$ *mátrix-sorozatot a következőképpen:*

$$B_1 := A, \quad B_{n+1} := C_{B_n}^{\mathrm{T}} C_{B_n} \quad (n = 1, 2, \ldots).$$

Ekkor $B_n \to \Lambda$ $(n \to \infty)$.

Bizonyítás. Először az A^n hatványok Cholesky-felbontásával foglalkozunk.

$$A^n = Q^{\mathrm{T}} \Lambda^n Q = [\Lambda^{n/2} Q]^{\mathrm{T}} [\Lambda^{n/2} Q] \ , \\ \Lambda^{n/2} Q = \Lambda^{n/2} LU = [\Lambda^{n/2} L \Lambda^{-n/2}] \Lambda^{n/2} U = J_n \Lambda^{n/2} U \ , \quad J_n = E + o(1) \ ,$$

ahol E egy olyan alsó-trianguláris mátrix, amelynek nem-zéró helyei az átló körüli olyan négyzetekben helyezkednek el, amelyek azonos λ_k sajátértékekhet tartoznak. Speciálisan *E felcserélhető Λ-val.* Ezért

$$A^n = U^{\mathrm{T}}[\Lambda^{n/2} J_n^{\mathrm{T}} J_n]\Lambda^{n/2} U = \left[U^{\mathrm{T}}\Lambda^{n/2} C_{J_n^{\mathrm{T}} J_n}\right]\left[U^{\mathrm{T}}\Lambda^{n/2} C_{J_n^{\mathrm{T}} J_n}\right]^{\mathrm{T}},$$

és így

$$C_{A^n} = U^{\mathrm{T}}\Lambda^{n/2} C_{J_n^{\mathrm{T}} J_n} = U^{\mathrm{T}}\Lambda^{n/2}[E^{\mathrm{T}}E + o(1)].$$

Észrevétel: mivel $\Lambda E = E\Lambda$ és Λ diagonális, és így

$$C_{A^{n-1}}^{-1} C_{A^n} = [E^{\mathrm{T}}E + o(1)]^{-1}\Lambda^{-(n-1)/2}[U^{\mathrm{T}}]^{-1}U^{\mathrm{T}}\Lambda^{n/2}[E^{\mathrm{T}}E + o(1)] = \Lambda^{1/2} + o(1).$$

Legyen

$$\widetilde{B}_n := \left[C_{A^{n-1}}^{-1} C_{A^n}\right]\left[C_{A^{n-1}}^{-1} C_{A^n}\right]^{\mathrm{T}} .$$

Ekkor

$$\widetilde{B}_n = \Lambda + o(1) \ , \quad C_{\widetilde{B}_n} = C_{A^{n-1}}^{-1} C_{A^n} \ .$$

Másrészt $\widetilde{B}_1 = [C_I^{-1} C_A][C_I^{-1} C_A]^{\mathrm{T}} = A = B_1$, és

$$\begin{aligned}
\widetilde{B}_n &= C_{A^{n-1}}^{-1} C_{A^n} C_{A^n}^{\mathrm{T}} [C_{A^{n-1}}^{-1}]^{\mathrm{T}} = C_{A^{n-1}}^{-1} A^n [C_{A^{n-1}}^{-1}]^{\mathrm{T}},\\
C_{\widetilde{B}_n}^{\mathrm{T}} C_{\widetilde{B}_n} &= C_{A^n}^{\mathrm{T}} [C_{A^{n-1}}^{-1}]^{\mathrm{T}} C_{A^{n-1}}^{-1} C_{A^n} = C_{A^n}^{\mathrm{T}} [A^{n-1}]^{-1} C_{A^n} =\\
&= C_{A^n}^{-1} C_{A^n} C_{A^n}^{\mathrm{T}} [A^{n-1}]^{-1} C_{A^n} C_{A^n}^{\mathrm{T}} [C_{A^n}^{\mathrm{T}}]^{-1} = C_{A^n}^{-1} A^n [A^{n-1}]^{-1} A^n [C_{A^n}^{\mathrm{T}}]^{-1} =\\
&= C_{A^n}^{-1} A^{n+1} [C_{A^n}^{\mathrm{T}}]^{-1} = \widetilde{B}_{n+1}.
\end{aligned}$$

Vagyis a $[\widetilde{B}_n : \ n = 1, 2, \ldots]$ sorozat ugyanazokat a rekurziós feltételeket teljesíti, mint $[B_n : \ n = 1, 2, \ldots]$, így $\widetilde{B}_n = B_n$ minden n indexre. Qu.e.d.

KACZMARZ-STEINHAUS ITERÁCIÓ

$A := \big[a_{ij}\big]_{i,j=1}^{N}$ valós mátrix, $\quad b := \big[b_i\big]_{i=1}^{N}$ oszlopvektor.

Geometriai interpretáció. $Ax = b$ jelentése:

$$x \in S_1 \cap \cdots \cap S_N \ ,$$

ahol

$$S_i := \big\{x : \ \langle a_i|x\rangle = b_i\big\} \qquad \text{SÍK} \quad \text{az } N\text{-es vektorok terében.}$$

$a_i := \big[A \ i. \text{ sora}\big]^*$ N-es oszlopvektor, $\langle\cdot|\cdot\rangle$ skalárszorzat N-es oszlopvektorokkal.

Definíció.
$\|a_i\| := \big[a_i \text{ hossza}\big] = \sqrt{a_{i1}^2 + a_{i2}^2 + \cdots + a_{iN}^2} = \langle a_i|a_i\rangle^{1/2}$,
$e_i := \big[a_i \text{ irányú egységvektor}\big] = a_i/\|a_i\|$,

$$\begin{aligned} P_i(x) &:= \big[x \text{ merőleges vetülete } S_i\text{-re}\big] = \\ &= x - \langle x|e_i\rangle\, e_i + \frac{b_i}{\|a_i\|}\, e_i = x - \frac{\langle x|a_i\rangle - b_i}{\langle a_i|a_i\rangle}\, a_i \ . \end{aligned}$$

Megjegyzés. 1) Az i-edik síkra való vetület tehát $P_i(x) = x + ta_i$ alakú. Vagyis $\big\langle x + ta_i\big|a_i\big\rangle = b_i$. Innen is egyszerűen $t = \big[b_i - \langle x|a_i\rangle\big]/\langle a_1|a_i\rangle$.
2) Mátrix-szorzással kifejezve (majd gyökvonás nélkül a 2. sorban)

$$\begin{aligned} P_i(x) &= \big[I - e_i e_i^*\big]x + \frac{b_i}{\|a_i\|} e_i = \\ &= \Big[I - \frac{1}{\langle a_i|a_i\rangle} a_i a_i^*\Big]x + \frac{b_i}{\langle a_i|a_i\rangle} a_i = L_i x + P_i(0), \end{aligned}$$

ahol L_i az $S_i^0 := a_i^\perp = \{x : \ x \perp a_i\}$ altérre való merőleges vetítés mátrixa.
3) Mindig $P_i(x) \in x + \mathbb{R}a_i$. Ezt iterálva: $P_{i_n}\big(P_{i_{n-1}}(\cdots P_{i_1}(x)\cdots\big) \in x + \mathbb{R}a_{i_1} + \cdots + \mathbb{R}a_{i_n}$.

Tétel. *Ha az $Ax = b$ egyenletrendszernek van megoldása, akkor tetszőleges x_0 vektort és tetszőleges olyan $P_{i_1}, P_{i_2}, \ldots$ projekció-sorozatot véve, ahol az $i_1, i_2, \ldots$ indexek között $1, 2, \ldots, N$ mindegyike végtelenszer fordul elő, az*

$$x_1 := P_{i_1}(x_0),\ x_2 := P_{i_2}(x_1) = P_{i_2}P_{i_1}(x_0),\ x_3 := P_{i_3}(x_2) = P_{i_3}P_{i_2}P_{i_1}(x_0),\ \ldots$$

vektorsorozat az $Ax = b$ egyenlet egyik x_* megoldásához tart.

Megjegyzés. Geometriailag ez az x_* vektor nem más, mint x_0-nak a merőleges vetülete (azaz a legközelebbi pontja) az $S_1 \cap S_2 \cap \ldots \cap S_N$ megoldáshalmazhoz.

Bizonyítás. Tekintsük az előbbi x_* ponttól való

$$z_n := x_n - x_* \qquad (n = 0, 1, \ldots)$$

eltéréseket. Mivel $x_* = P_{i_n}(x_*)$ minden n mellett, egyszerűen mindig

$$\begin{aligned} z_{n+1} &= P_{i_{n+1}}(x_n) - x_* = P_{i_{n+1}}(x_n) - P_{i_{n+1}}(x_*) = \\ &= \big[L_{i_{n+1}}x_n - P_{i_{n+1}}(0)\big] - \big[L_{i_{n+1}}x_* - P_{i_{n+1}}(0)\big] = \\ &= L_{i_{n+1}}(x_n - x_*) = L_{i_{n+1}}z_n \ . \end{aligned}$$

A 3) megjegyzés szerint mindig $z_n \in z_0 + \mathbb{R}a_1 + \cdots \mathbb{R}a_n$, vagyis $z_n \in (S_1^0 \cap \cdots \cap S_N^0)^\perp$.
Elegendő megmutatni: $z_n = L_{i_n}L_{i_{n-1}} \cdots L_{i_1}z_0 \to 0 \ \ (n \to \infty)$.
Ez utóbbihoz pedig elegendő k-szerinti indukcióval belátni a következőt:

Tétel. *Ha $m \le N$, akkor van olyan $q = q_m < 1$ (csak m-től függő) konstans, hogy*

$$\Big\| L_{i_n} \cdots L_{i_1} \big| \mathbb{R}a_{i_1} + \cdots + \mathbb{R}a_{i_k} \Big\| \le q \quad \text{valahányszor} \quad \{i_1, \ldots, i_n\} = \{1, \ldots, m\}.$$

Bizonyítás. Az $m = 1$ esetben $q = q_1 := \big\|L_i|\mathbb{R}a_i\big\| = 0(<1)$ $(i = 1, \ldots, N)$ triviálisan.
Tegyük fel, hogy m-ig igaz az állítás, és tekintsük m helyett $m+1$ esetét.
Az általánosság megszorítása nélkül vehető, hogy

$$\begin{aligned} &\{i_1, \ldots, i_n\} = \{1, \ldots, m\}, \quad \|a_1\| = \cdots = \|a_{m+1}\| = 1, \\ &q_{m+1} = \big\|L_{m+1}L_{i_n}L_{i_{n-1}} \cdots L_{i_1}|\mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_{m+1}\big\|. \end{aligned}$$

Tudjuk: $\big\|L_{i_n}L_{i_{n-1}} \cdots L_{i_1}|\mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_m\big\| \le q_m < 1$. Legyen

$$\begin{aligned} &\alpha := \big[a_m \text{ és } \mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_m \text{ szöge}\big], \quad e, f \text{ egységvektorok, amelyekre} \\ &\cos\alpha\, f = \big[a_{m+1} \text{ merőleges vetülete } (\mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_m)\text{-re}\big], \\ &\sin\alpha\, e = \big[a_{m+1} \ (\mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_m)\text{-re merőleges komponense}\big] \ . \end{aligned}$$

Tekintsünk egy tetszőleges $(\mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_{m+1})$-beli egységvektort az

$$x = x_0 + \zeta e, \quad x_0 \in \mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_m$$

felbontásaban. Ekkor $L_{i_n} \ldots L_{i_1}x$ ill. $L_{m+1}L_{i_n} \ldots L_{i_1}x$ felbontása

$$\begin{aligned} &L_{i_n} \ldots L_{i_1}e = e, \\ &L_{i_n} \cdots L_{i_1}x_0 = y + \gamma f \in \mathbb{R}a_1 + \cdots + \mathbb{R}a_m, \text{ ahol } y \perp f (\text{és } \perp a_{m+1}), \\ &L_{m+1}L_{i_n} \cdots L_{i_1}(x_0 + \zeta e) = L_{m+1}(y + \gamma f + \zeta e) = \\ &\quad = (I - \mathrm{proj}_{\mathbb{R}[\cos\alpha f + \sin\alpha e]})(y + \gamma f + \zeta z) = \\ &\quad = y + (I - \mathrm{proj}_{\mathbb{R}[\cos\alpha f + \sin\alpha e]})(\gamma f + \zeta z) = \\ &\quad = y + \mathrm{proj}_{\mathbb{R}[\sin\alpha f - \cos\alpha e]}(\gamma f + \zeta z) = \\ &\quad = y + \Big\langle \begin{bmatrix} \sin\alpha \\ -\cos\alpha \end{bmatrix} \Big| \begin{bmatrix} \gamma \\ \zeta \end{bmatrix} \Big\rangle \big(\sin\alpha\, f - \cos\alpha\, e\big) \ . \end{aligned}$$

Tudjuk: $\|y\|^2+\gamma^2=\|L_{i_n}\cdots L_{i_1}x_0\|^2\le q_m\|x_0\|^2$, ahol $\|x_0\|^2+\zeta^2=\|x\|^2=1$.
Vagyis a $\quad q:=q_m^2,\ \ \gamma_1:=\|y_1\|\quad$ rövidítésekkel

$$\begin{aligned}&\gamma_1^2+\gamma^2\le q(1-\zeta^2)\big(=q_m^2\|x_0\|^2\big),\\ &\|L_{m+1}L_{i_n}\cdots L_{i_1}(x_0+\zeta e)\|^2\le\gamma_1^2+\Big\langle\begin{bmatrix}\sin\alpha\\-\cos\alpha\end{bmatrix}\Big|\begin{bmatrix}\gamma\\\zeta\end{bmatrix}\Big\rangle^2.\end{aligned}$$

Innen
$$\begin{aligned}&\max_{\|x\|=1}\|L_{m+1}L_{i_n}\cdots L_{i_1}x\|^2\le\\ &\le\max\big\{\gamma_2^2+(\gamma\sin\alpha-\zeta\cos\alpha)^2:\ \gamma_1^2+\gamma^2=q(1-\zeta^2)\big\}=\\ &=\max_{C=0}\phi,\quad C:=\gamma_1^2+\gamma^2-q(1-\zeta^2),\ \phi:=\gamma_1^2+(\gamma\sin\alpha-\zeta\cos\alpha)^2.\end{aligned}$$

A tételhez elegendő $\ \max\limits_{C=0}\phi<1$ (mivel ez független az $i_1,\ldots,i_n$ indexsorozattól).
Legyen $(\gamma_{1*},\gamma_*,\zeta_*)$ a ϕ függvény maximum-helye a $C=0$ feltétel mellett.
a) $\zeta_*=0$ esete. Ekkor $\max\limits_{C=0}\phi=\max_{\gamma_1^2+\gamma^2=q}\gamma_1^2+\gamma^2\sin^2\alpha\le q<1$.
b) $\zeta_*\neq 0$ esete. Ekkor $0<\zeta_*^2\le 1$, $\gamma_{1*}^2+\gamma_*^2=q(1-\zeta_*)^2$, azaz $\gamma_{1*}^2=q(1-\zeta_*^2)-\gamma_*^2$. Tehát az $\langle u|v\rangle^2\le\|u\|^2\|v\|^2)/2$ egyenlőtlenség miatt

$$\begin{aligned}\max_{C=0}\phi&=\gamma_{1*}^2+\Big\langle\begin{bmatrix}\sin\alpha\\-\cos\alpha\end{bmatrix}\Big|\begin{bmatrix}\gamma_*\\\zeta_*\end{bmatrix}\Big\rangle^2\le\\ &\le[q(1-\zeta_*^2)-\gamma_*^2]+(\gamma_*^2+\zeta_*^2)=\\ &=q+(1-q)\zeta_*^2<1.\qquad\text{Q.e.d.}\end{aligned}$$

Megjegyzés. Lagrange-multiplikátorral kiszámítható pontosan $\max\limits_{C=0}\phi$. Valamely λ-val
(1) $\frac{\partial\phi}{\partial\gamma_1}=\lambda\frac{\partial C}{\partial\gamma_1}$, $\quad$ (2) $\frac{\partial\phi}{\partial\gamma}=\lambda\frac{\partial C}{\partial\gamma}$, $\quad$ (3) $\frac{\partial\phi}{\partial\zeta}=\lambda\frac{\partial C}{\partial\zeta}$, $\quad$ (4) $\gamma_1^2+\gamma^2=q(1-\zeta^2)$
a $(\gamma_1,\gamma,\zeta)=(\gamma_{1*},\gamma_*,\zeta_*)$ min-helyen. A $\ p:=\gamma\sin\alpha-\zeta\cos\alpha\ $ kifejezéssel
(1) $2\gamma_1=2\lambda\gamma_1$, $\quad$ (2) $2p\sin\alpha=2\lambda\gamma$, $\quad$ (3) $2\lambda p\cos\alpha=-2q\zeta$, $\quad$ (4) $\gamma_1^2+\gamma^2=q(1-\zeta^2)$.
(A) $\gamma_1\neq 0$ esete: (1) $\Rightarrow\lambda=1$.
(A1) $p=0$ aleset: (2), (3) $\Rightarrow\zeta=\gamma=0$, ahonnan (4) $\Rightarrow\min\limits_{p=C=0}\phi=q(<1)$.
(A2) $p\neq 0$ aleset: (2) : (3) $\Rightarrow$ (A21) $\zeta=\gamma=0$ vagy (A22) $\cos\alpha/\sin\alpha=-q\zeta/\gamma$, $\gamma\neq 0$.
(A21)-nél (4) $\Rightarrow\gamma_1^2=q\Rightarrow\max\limits_{C=0=\zeta=\gamma}\phi=q(<1)$. (A22)-nél $\zeta=\rho\cos\alpha$, $\gamma=-\rho q\sin\alpha$ valamely $\rho\neq 0$ számmal. Visszahelyettesítve (2)-be $2\rho(-q\sin^2\alpha-\cos^2\alpha)\sin\alpha=-2\rho q\sin\alpha$, ahonnan $(1-q)\cos^2\alpha=0\Rightarrow\alpha=\pi/2$. Ekkor is (4) $\Rightarrow\max\limits_{C=0=\cos\alpha}\phi=\gamma_1^2=q$.
(B) $\gamma_1=0$ esete. (B1) $\lambda=0$ aleset. (2) $\Rightarrow p=0\Rightarrow\phi=\gamma_1^2+p^2=0$ nem max-hely.
(B2) $\lambda\neq 0$. Ez adhat csak újat q helyett $\max\limits_{C=0}\phi$-re. (B21) $q=0$. Ekkor (4) $\Rightarrow\gamma=0$, ahonnan $\phi=\zeta^2\cos^2\alpha\le\cos^2\alpha$, azaz $\max\limits_{\gamma_1,q,C=0}\phi\le\cos^2\alpha<1$.
(B22) $q\neq 0$. Ekkor mint (A22)-nél $\zeta=\rho\cos\alpha$, $\gamma=-\rho q\sin\alpha$. Most (4) $\Rightarrow\rho^2q^2\sin^2\alpha=q(1-\rho^2\cos^2\alpha)$. Innen $\rho^2=1/(q\sin^2\alpha+\cos^2\alpha)$ és $\phi=(\gamma\sin\alpha-\zeta\cos\alpha)^2=q\sin^2\alpha+\cos^2\alpha$.

Összefoglalva: $\max\limits_{C=0} \phi \in \big\{q_m^2, \cos^2\alpha, q_m^2 \sin^2\alpha + \cos^2\alpha\big\} < 1$ (mivel $q := q_m^2$).

Megjegyzés. A merőleges vetítések hosszcsökkentők, és csak a képtartományon hossztartók. Ezért

$$\|L_j z\| \le \|z\|, \quad \|L_j z\| = \|z\| \iff z \in S_j^0 \; .$$

Észrevétel: az előbbi miatt $\|L_{j_m} \dots L_{j_1} z\| = \|z\| \iff z \in S_{j_1}^0 \cap \dots \cap S_{j_m}^0$.
Speciálisan, ha az $i_1, \dots, i_N$ indexek az $1, \dots, N$ sorozat egy permutációját adják, akkor

$$\|L_{i_N} \cdots L_{i_1} x\| \ge \|x\| \iff x \in S_1^0 \cap \dots \cap S_N^0 = \{0\},$$

azaz $\|L_{i_N} \cdots L_{i_1} x\| < \|x\|$ $(x \ne 0)$. Ezért

$$\|L_{i_N} \cdots L_{i_1} x\| < 1 \quad \text{valahányszor} \quad \{i_1, \dots, i_N\} = \{1, \dots, N\}.$$

Algoritmus.
0. előkészítés) x_0 kezővektorválastása,
$\{1, \dots, N\}$-beli $i_1, i_2, \dots$ indexsorozat választása $\big(\#\{k : \; i_k = j\} = \infty \;\forall j\big)$.

$k(>0)$. lépés) $x_k := P_{i_{k-1}}(x_{k-1})$.
P_i kiszámítása $P_i(x) = x + t a_i$ alakban, ahol t az $\big\langle x + t a_i \big| a_i \big\rangle = b_i$ egyenlet megoldása.

Algoritmus N lépés összevonásával.

0. előkészítés) $e_i := a_i / \|a_i\|$, $\beta_i := b_i / \|a_i\|$ $(i = 1, \dots, N)$ kiszámítása,
$P : x \mapsto P_N P_{N-1} \cdots P_1(x)$ meghatározása mátrix-szorzással
x_0 kezővektor választása.

$k(>0)$. lépés) $x_k := P(x_{k-1})$.

Mátrix-kifejezés $P := P_N \circ P_{N-1} \circ \cdots \circ P_1(x)$-re.

$$P_k(x) = x - \langle e_k | x \rangle e_k + \beta_k e_k = x - e_k \underbrace{e_k^* x}_{\langle e_k | x \rangle} + \beta_k e_k = \big(\underbrace{I - e_k e_k^*}_{Q_k}\big) x + \underbrace{\beta_k e_k}_{q_k} =$$
$$= Q_k x + q_k, \quad \text{ahol} \quad Q_k := I - e_k e_k^*, \; q_k := \beta_k e_k.$$

$$P_2\big(P_1(x)\big) = Q_2 P_1(x) + q_2 = Q_2 \big[Q_1 x + q_1\big] + q_2$$
$$= Q_2 Q_1 x + Q_1 q_1 + q_2 = R_2 x + r_2, \quad \text{ahol} \quad R_2 := Q_2 Q_1 \text{ és } r_2 := Q_2 q_1 + q_2.$$

$$\vdots$$

$$P_N \cdots P_1(x) = P_N\big(P_{N-1}(x)\big) = Q_N P_{N-1}(x) + q_{N-1} =$$
$$= Q_{N-1}\big[R_{N-1} x + r_{N-1}\big] + q_N =$$
$$= R_N x + r_N, \quad \text{ahol} \quad R_N := Q_N R_{N-1} \text{ és } r_N := Q_N R_{N-1} + q_N.$$

Kifejtve: az S_i sík 0-ba való eltoltjára

$$\begin{aligned} P(x) = & Q_N Q_{N-1} \cdots Q_1 x + \\ & + \beta_1 Q_N Q_{N-1} \cdots Q_2 e_1 + \\ & + \beta_2 Q_N Q_{N-1} \cdots Q3 e_2 + \\ & + \cdots + \\ & + \beta_{N-1} Q_N e_{N-1} + \beta_N e_N \ . \end{aligned}$$

NULL-HELYEK KÖZELÍTÉSE NEWTON-ITERÁCIÓVAL

Ókori $\sqrt{2}$: 1.5 1.41666 1.414215

$2,\ \frac{1}{2}\left[2+\frac{2}{2}\right],\quad \frac{1}{2}\left[1.S+\frac{2}{1.5}\right],\ \frac{1}{2}\left[1.41\dot{6}+\frac{2}{1.41\dot{6}}\right]$

$x^2=2 \quad x=\frac{2}{x} \quad \left.\begin{aligned} x&=\tfrac{2}{x} \\ x&=x \end{aligned}\right\}\begin{matrix}\cdot 1/2\\ \\ \frac{\cdot 1/2}{+}\end{matrix} \quad x=\frac{1}{2}\left(x+\frac{2}{x}\right)$

$\begin{matrix}\sqrt{a}-\text{ra}-\text{is}\\ x^2=a\end{matrix} \quad \left.\begin{aligned} x&=\tfrac{a}{x} \\ x&=x \end{aligned}\right\} \quad x=\frac{1}{2}\left[x+\frac{a}{x}\right]$

Kérdés
1) Miért konvergál
2) Hogy kell mást csinálni pl. $\sqrt[3]{a}=?$

KEPLER $\left.\begin{aligned} x^3&=a \\ x&=x \end{aligned}\right\}\begin{matrix}\frac{1}{3}\\ \\ \cdot\frac{2}{3}\end{matrix} \quad x=\frac{2}{3}x+\frac{1}{3}\frac{a}{x^2}$

Sejtés $\sqrt[N]{a}$-hz $x_0:=a>1$

$x_{n+1}=\left(1-\frac{1}{N}\right)x_n+\frac{1}{N}\frac{a}{x_n^{N-1}}$

1) NEWTON válasza $f(x)=0$ [Pl. $x^2-2=0$] megoldására

ÉRINTŐ-MÓDSZER

Meredekség $=f'(x_n)$ ÁBRA

$(x_{n+1}-x_n)\cdot f'(x_n)=f(x_n)$

$$x_{n+1}=x_n-\frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

Példa. $\sqrt[N]{a}$ $\quad x^N-a=0 \quad f(x):=x^n-a \quad f'(x)=Nx^{N-1}$

$$x_{n+1}=x_n-\frac{x_n^N-a}{Nx_n^{N-1}}=\left(1-\frac{1}{N}\right)x_n+\frac{1}{N}\frac{a}{x_n^{N-1}}$$

Miért konvergál? Mindig nem megy:
$f(x):=x^3-x-1/\sqrt{3}$ ”0 eltalálása” KAOTIKUS lehet [”Newton káosz”, jegyzet 2]

TAYLOR FORMULA + LAGRANGE MARADÉKTAG

$$f(x+h) = f'(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f^{''}(x)h^2 + \ldots + \frac{1}{d!}f^{(d-1)}(x)h^{d-1} +$$
$$+ \frac{1}{d!}f^{(d)}(t_{x,h})h^d \qquad \exists\ t_{x,h} \in [x, x+h]\ ,$$

ha $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ d-szer folytonosan differenciálható.

$d = 2$: $\qquad f(x+h) = f(x) + f'(x)h + \frac{1}{2}f^{''}(t_{x,h})h^2$

NEWTON HEURISZTIKÁJA

$x_n \approx x_* \quad f(x_*) = 0$

$f(x_n + h) \approx f(x_n) + f'(x_n)h$

$0 = f(x_*) \approx f(x_n) + f'(x_n) \cdot (x_* - x_n)$
$x_* \approx x_n - f(x_n)/f'(x_n)$

BECSLÉS
(1) $\quad 0 = f(x_*) = f(x_n) + f'(x_n)(x_* - x_n) + \frac{1}{2}f^{''}(t_{x_n, x_n - x_*})(x_* - x_n)^2$

(2) $\quad 0 = [f \text{ közelítése }](x_{n+1}) = f(x_n) + f'(x_n)(x_{n+1} - x_n)$

(2) - (1) $\Rightarrow \qquad 0 = f'(x_n)(x_{n+1} - x_*) - \frac{1}{2}f^{''}(t_{x_n, x_* - x_n})(x_n - x_*)^2$

$$|x_{n+1} - x_*| = \tfrac{1}{2} \quad \underbrace{\frac{|f^{''}(t_{x_n, x_n - x_*})|}{|f'(x_n)|}}_{\leq M\ ,\quad \text{ha}\quad x_n \in (x_* - \varepsilon, x_* + \varepsilon).} \quad |x_n - x_*|^2$$

$h_n := |x_n - x_*| = \big[\ x_n \text{ távolsága a megoldástól } \big]$

$h_{n+1} \leq M h_n^2\ ,\quad$ de M lehet nagyon nagy

$$\begin{aligned} h_1 &\leq M h_0^2 \\ h_2 &\leq M h_1^2 \leq M(M h_0^2) = M^3 h_0^4 \\ h_3 &\leq M h2_2 \leq M(M^3 h_0^4) = M^7 h_0^8 \\ &\vdots \\ h_{n+1} &\leq M^{2^n - 1} h_0^{2^n} = \frac{1}{M}[M h_0]^{2^n} \end{aligned}$$

Ha $M h_0 < 1$ (x_0 "nagyon közel" van x_*-hoz), akkor $x_n \to x_*$, sőt $|x_n - x_*| \leq \text{const.}(1-\delta)^{2^n}$

TÖBBVÁLTOZÓS NEWTON-ITERÁCIÓ

$$F:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}^N,\qquad x_i:\begin{bmatrix}\xi_1\\ \vdots\\ \xi_N\end{bmatrix}\mapsto\xi_i\quad\text{koordináták},\qquad F=\begin{bmatrix}f_1\\ \vdots\\ f_N\end{bmatrix}$$

$$F'_H(A):=\lim_{\tau\to0}\frac{1}{\tau}\big[F(A+\tau H)-F(A)\big]=\frac{\partial F(A+\tau H)}{\partial\tau}\Big|_{\tau=0}\quad\textbf{irány szerinti derivált}$$

Emlékeztető

F folytonosan diff. $\Rightarrow$ $H\mapsto F'_H(A)$ lineáris $\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}^N$ leképezés

F d-szer folytonosan diff. $\Rightarrow$ $(H_1,\dots,H_d)\mapsto F'^{\cdots\,\prime}_{H_1\cdots H_d}(A)$
szimmetrikus d-lineáris $\big[\mathbb{R}^N\big]^d\to\mathbb{R}^N$ leképezés

Jelölés: $F^{(d)}(A)H_1\cdots H_d:=F'^{\cdots\,\prime}_{H_1\cdots H_d}(A),\quad F^{(d)}(A)H^d:=F^{(d)}(A)\underbrace{H\cdots H}_{d-\text{szer}}$

Tenzor-forma: $F^{(d)}\sim\left[\dfrac{\partial^d F}{\partial x_{k_1}\cdots\partial x_{k_d}}\right]^N_{k_1,\dots,k_d=1}.$

Taylor-formulák maradéktaggal

$$F^{(d)}_{[A,A+H]}:=d!\int_{t_1=0}^1\int_{t_2=0}^1\cdots\int_{t_d=0}^1F^{(d)}\big(A+t_dH\big)\,dt_d\,dt_{d-1}\cdots dt_1;$$

$$F(A+H)=\sum_{k=0}^{d-1}\frac{1}{k!}F^{(k)}(A)H^k+\frac{1}{d!}F^{(d)}_{[A,A+H]}H^d=$$

$$=\sum_{k=0}^{d-1}\frac{1}{k!}F^{(k)}(A)H^k+\frac{1}{d!}\int_{\tau=0}^1\underbrace{w_d(\tau)}_{d(1-\tau)^{d-1}}\;F^{(d)}(A+\tau H)H^d\,d\tau,\qquad\int_0^1w_d=1;$$

$$=\Big[F^{(d)}\big(A+\vartheta_1H\big),\dots,F^{(d)}\big(A+\vartheta_NH\big)\text{ konvex lin. kombinációja}\Big]=$$

$$=\sum_{k=0}^{d-1}\frac{1}{k!}F^{(k)}(A)H^k+\frac{1}{d!}\Big\langle\phi\Big|F^{(d)}\big(A+\vartheta_{A,H}H\big)H^d\Big\rangle U,\quad 1=\langle\phi|U\rangle=\|\phi\|=\|U\|.$$

Iterációs lépés

$$X_{n+1}:=X_n-\big[F'(X_n)\big]^{-1}F(X_n)$$

Azaz X_{n+1} az $\big[F$ elsőfokú Taylor polinomja X_n körül$\big]=0$ egyenlet megoldása:

$$(*)\qquad F(X_n)+F'(X_n)(X_{n+1}-X_n)=0\ .$$

Ez egyértelmű és jól-definiált, ha az $F'(X_n) : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ lineáris leképezés *invertálható.*

Konvergencia-becslés: Hasonlóan mint 1-változóban, de integrálos Taylor-formulával:

$$\begin{aligned}
&0 = F(X_n) + F'(X_n)(X_{n+1} - X_n),\\
&0 = F(X_*) =\\
&\quad = F(X_n) + F'(X_n)(X_* - X_n) + \frac{1}{2}\int_{\tau=0}^{1} w_2(\tau) F''\big(X_n + \tau(X_* - X_n)\big)(X_* - X_n)^2 \, d\tau.
\end{aligned}$$

Ezeket egymásból kivonva kapjuk, hogy

$$\begin{aligned}
0 &= F'(X_n)(X_{n+1} - X_*) - \frac{1}{2}\int_{\tau=0}^{1} w_2(\tau) F''\big(X_n + \tau(X_* - X_n)\big)(X_* - X_n)^2 \, d\tau,\\
X_{n+1} - X_* &= \frac{1}{2}\int_{\tau=0}^{1} w_2(\tau) \big[F'(X_n)\big]^{-1} F''\big(X_n + \tau(X_* - X_n)\big)(X_* - X_n)^2 \, d\tau,\\
\|X_{n+1} - X_*\| &\le \frac{1}{2} \max_{\tau\in[0,1]} \Big\| \big[F'(X_n)\big]^{-1} F''\big(X_n + \tau(X_* - X_n)\big)(X_* - X_n)^2 \Big\| \le\\
&\le \frac{1}{2}\Bigg[\max_{\substack{X,Y\in[X_n,X_*]\\ \|H\|=1}} \Big\| \big[F'(X)\big]^{-1} F''(Y) H^2 \Big\| \Bigg] \|X_* - X_n\|^2.
\end{aligned}$$

Tétel. *Tegyük fel, hogy $F : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}^N$ 2-szer folytonosan differenciálható leképezés, amelyre az $X_* \in \mathbb{R}^N$ pontban $F(X_*) = 0$. Tegyük fel továbbá, hogy K egy olyan korlátos zárt gömbi környezete X_*-nak, ahol $\det\big(F'(X)\big) \ne 0$ $(X \in K)$. Ekkor az*

$$M := \frac{1}{2} \max_{\substack{X,Y\in K\\ \|H\|=1}} \Big\| \big[F'(X)\big]^{-1} F''(Y) H^2 \Big\|$$

konstans egy jól-definiált véges szám. Ha $X_0 \in K$ olyan közel van X_*-hoz, hogy

$$\lambda := M\|X_0 - X_*\| < 1 \ ,$$

akkor a Newton iteráció $(*)$ szerinti lépéseire $X_1, X_2, \ldots \in K$, és $\|X_n - X_*\| = O\big(\lambda^{2^n}\big)$. Nevezetesen

$$\|X_n - X_*\| \le \lambda^{2^n - 1} \|X_0 - X_*\| \qquad (n = 0, 1, 2, \ldots).$$

Bizonyítás. Az M konstans jól-definiáltsága: mivel F 2-szer folytonosan differenciálható, az $(X, Y, H) \mapsto \big\| \big[F'(X)\big]^{-1} F''(Y) H^2 \big\|$ függvény folytonos, tehát felveszi a maximumát a korlátos zárt $K \times K \times \{H : \ \|H\| = 1\} \subset \big[\mathbb{R}^N\big]^3$ alakzaton.
Legyen $K = \{X : \ \|X\| \le \varepsilon\}$, $X_0 \in K$ és $\lambda = M\|X_0 - X_*\| < 1$. Ekkor már működik az 1-változónál alkalmazott gondolatmenet. Fennáll $\|X_0 - X_*\| = \lambda^{2^0 - 1}\|X_0 - X_*\| \le \varepsilon$. Indukciós lépés a konvergencia-becslés szerint:

$$\begin{aligned}
&X_n \in K \ + \ \|X_n - X_*\| \le \lambda^{2^n - 1}\|X_0 - X_*\| \implies\\
&\qquad \|X_{n+1} - X_*\| \le M\|X_n - X_*\|^2 \le M\big[\lambda^{2^n - 1}\|X_0 - X_*\|\big]^2 \overset{M\|X_0 - X_*\| = \lambda}{=}\\
&\qquad\qquad = \lambda^{2(2^n - 1) + 1}\|X_0 - X_*\| = \lambda^{2^{n+1} - 1}\|X_0 - X_*\| \le \varepsilon \ \ \big(\Rightarrow X_{n+1} \in K\big).
\end{aligned}$$

Mátrix-technikai kivitelezés

$$\nabla f_i(x) = \Big[\frac{\partial f_i}{\partial x_1}\ \frac{\partial f_i}{\partial x_2}\ \dots\ \frac{\partial f_i}{\partial x_N}\Big] \qquad \textbf{GRADIENS} \quad \textbf{(sorvektor)}$$

$$\nabla^2 f_i(x) := \Big[\frac{\partial^2 f_i}{\partial x_k \partial x_\ell}\Big]_{k,\ell=1}^{N} \qquad \textbf{HESSE MÁTRIX}$$

$$f_i(x+h) = f_i(x) + \big[\nabla f_i(x)\big]h\big\rangle + \frac{1}{2}h^*\big[\nabla^2 f_i(t_{x,h})\big]h$$

Tegyük fel: $X_n \in \mathbb{R}^N$ adott $\big[$ n-edik közelítése X_*-nak, ahol $F(X_*) = 0$ $\big]$

$$\begin{aligned} f_i(X) \approx f_i^{[n]}(X) &:= \big[\ f_i \text{ 1-rendű közelítése } X_n \text{ körül}\ \big] = \\ &= f_i(X_n) + \big[\nabla f_i(X_n)\big](X - X_n) = \\ &= f_i(x_n) + \Big\langle [\nabla f_i(x_n)]^* \Big|\ X - X_n \Big\rangle \end{aligned}$$

$F(X) = 0 \quad \approx \quad f_i^{[n]}(x_1, \dots, x_n) = 0$ $(i = 1, 2, \dots, N)$ egyenletrendszer

Példa. $N = 2, \quad X = \begin{bmatrix} x \\ y \end{bmatrix}, \quad F = \begin{bmatrix} f \\ g \end{bmatrix}, \quad X = \begin{bmatrix} x_n \\ y_n \end{bmatrix}$

$$\left.\begin{aligned} F(X_n) + \frac{\partial f(X_n)}{\partial x}(X_{n+1} - X_n) + \frac{\partial f(X_n)}{\partial y}(y_n, -y_n) = 0 \\ g(X_n) + \frac{\partial g(X_n)}{\partial x}(x_{n+1} - x_n) + \frac{\partial g(X_n)}{\partial y}(y_{n+1} - y_n) = 0 \end{aligned}\right\}$$

$$f(X_n) + \underbrace{\begin{bmatrix} \nabla f \\ \nabla g \end{bmatrix}}_{\substack{2 \times 2 \text{ mátrix} \\ F \text{ Jacobi mátrixa}}} (X_{n+1} - X_n) = 0$$

Általában is: (tetszőleges $N \geq 1$ dimenzióban)

$$F'(X) = \big[\ F \text{ Jacobi mátrixa az } X \text{ helyen}\big] := \underbrace{\begin{bmatrix} \nabla f_1(X) \\ \vdots \\ \nabla f_N(X) \end{bmatrix}}_{N \times N\text{-es mátrix}} .$$

Megoldandó X_{n+1}-re

$$F(X_n) + F'(X_n)(X_{n+1} - X_n) = 0$$

Innen

$$X_{n+1} := X_n - \underbrace{F'(X_n)}_{\text{Jacobi}}{}^{-1} F(X_n) = X_n - \begin{bmatrix} \nabla f_1(X_n) \\ \vdots \\ \nabla f_N(X_n) \end{bmatrix}^{-1} F(X_n)$$

Becslés. Mivel

$$f_i(X_n + H) = f_i(X_n) + [\nabla f_i(X_n)]H + \frac{1}{2} H^* [\nabla^2 f_i(T_i)] H \qquad \exists\, T_i \in [X_n, X_n + H],$$

fennáll $H := X_* - X_n$ mellett

$$0 = f_i(X_*) = f_i(X_n) + [\nabla f_i(X_n)](X_* - X_n) + \frac{1}{2}(X_* - X_N)^* [\nabla^2 f_i(T_i)](X_* - X_N),$$
$$0 = F(X_*) = F(X_n) + F'(X_n)(X_* - X_n) + \frac{1}{2} \begin{bmatrix} (X_* - X_N)^* [\nabla^2 f_1(T_i)](X_* - X_N) \\ \vdots \\ (X_* - X_N)^* [\nabla^2 f_1(T_i)](X_* - X_N) \end{bmatrix}$$

valamilyen $T_1, \ldots, T_N \in [X_n, X_*]$ mellett. Másrészt X_{n+1} definíciója szerint

$$0 = F(X_n) + F'(X_n)(X_{n+1} - X_n).$$

Ebből az előző egyenleteket vektorosan kivonva

$$X_{n+1} - X_* = \frac{1}{2} F'(X_n)^{-1} \begin{bmatrix} (X_n - X_*)^* \nabla^2 f_1(T_1)(X_n - X_*) \\ \vdots \\ (X_n - X_*)^* \nabla^2 f_N(T_N)(X_n - X_*) \end{bmatrix}.$$

Tétel. *Ha F 2-szer folytosan deriválható, $F(X_*) = 0$, és az $F'(X_*)$ Jacobi-mátrix invertálható, akkor az X_* null-hely valamely (kis) konvex U környezetében valamilyen (nagy) M konstanssal*

$$\|X_{n+1} - X_*\| \leq M \|X_n - X_*\|^2.$$

Ha a kiindulásra $X_0 \in U$ és $\mu := M\|X_0 - X_*\| < 1$, akkor $\|X_n - X_*\| \leq \mu^{2^n}/M \to 0$.

Példa: 2D GPS-feladat. *$S_1, S_2, S_3 \in \mathbb{R}^2$ adott három pont. Keressük egy olyan $P \in \mathbb{R}^2$ pont koordinátáit, amelyre csak a*

$$\delta_k := d(P, S_k) - d(P, S_{k+1})) = \|P - S_k\| - \|P - S_k\| \qquad (k = 1, 2)$$

távolságkülönbségek ismertek.

Newton-iteráció az $F(P) = 0$ egyenlet megoldására, ahol

$$F(X) := \begin{bmatrix} d(X, S_1) - d(X, S_2) - \delta_1 \\ d(X, S_2) - d(X, S_3) - \delta_2 \end{bmatrix} \qquad (X \in \mathbb{R}^2).$$

A kanonikus koordinátákkal $X \equiv (x, y)$, $S_k \equiv (p_k, q_k)$ mellett

$$F(X) = \begin{bmatrix} \sqrt{(x-p_1)^2 + (y-q_1)^2} - \sqrt{(x-p_2)^2 + (y-q_2)^2} - \delta_1 \\ \sqrt{(x-p_2)^2 + (y-q_2)^2} - \sqrt{(x-p_3)^2 + (y-q_3)^2} - \delta_2 \end{bmatrix}.$$

Itt F elsőrendű Taylor-közelítése az iteráció $X_n \equiv (x_n, y_n)$ pontja körül

$$F(X_n + V) \approx^{(1)} F(X_n) + F'(X_n)V = F(X) + \frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} F(X_n + \tau V) =$$
$$= F(x_n, y_n) + \frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} F(x_n + \tau v_n, y_n + \tau w_n).$$

Általában is

$$\frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} F(x + \tau v, y + \tau w) = \begin{bmatrix} \frac{(x-p_1)v + (y-q_1)w}{\sqrt{(x-p_1)^2+(y-q_1)^2}} - \frac{(x-p_2)v + (y-q_2)w}{\sqrt{(x-p_2)^2+(y-q_2)^2}} \\ \frac{(x-p_2)v + (y-q_2)w}{\sqrt{(x-p_2)^2+(y-q_2)^2}} - \frac{(x-p_3)v + (y-q_3)w}{\sqrt{(x-p_3)^2+(y-q_3)^2}} \end{bmatrix}.$$

Ha X_n ismert, akkor

$$X_{n+1} = X_n + V, \quad \text{ahol } V \text{ az } F(X_n) + F'(X_n)V = 0 \text{ lineáris egyenlet megoldása.}$$

Adatokkal: $S_1 \equiv (0, 10), S_2 \equiv (8, 6), S_3 \equiv (10, 0)$; P az $X_0 \equiv (\mathbf{4.8}, \mathbf{6.4})$ pont közelében van (amelynek távolságai S_1, S_2, S_3-tól rendre $6, 3.225, 8.246$), de $\delta_1 = d(P, S_1) - d(P, S_2) = 3$, $\delta_2 = d(P, S_2) - d(P, S_3) = -5$. Ekkor

$$X_1 \equiv (4.8 + v, 6.4 + w), \quad \text{ahol } F(4.8, 6.4) + \frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} F(4.8 + \tau u, 6 - 4 + \tau w) = 0,$$

Itt $F(4.8, 6.4) = \begin{bmatrix} \sqrt{4.8^2 + (6.4-10)^2} - \sqrt{(4.8-8)^2 + (6.4-6)^2} - 3 \\ \sqrt{(4.8-8)^2 + (6.4-6)^2} - \sqrt{(4.8-10)^2 + 6.4^2} + 5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -0.225 \\ -0.021 \end{bmatrix}$,

$\frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} F(4.8 + \tau u, 6.4 + \tau w) = \begin{bmatrix} \frac{4.8v + (6.4-10)w}{6} - \frac{(4.8-8)v + (6.4-6)w}{3.225} \\ \frac{(4.8-8)v + (6.4-6)w}{3.225} - \frac{(4.8-10)v + 6.4w}{8.246} \end{bmatrix}.$

Innen $v = 0.092$, $w = -0.083$, $X_1 \equiv (\mathbf{4.892}, \mathbf{6.317})$.

Ekkor $d(X_1, S_1) = 6.123$, $d(X_1, S_2) = 3.124$, $d(X_1, S_3) = 8.124$,

Jobbak lettek a távolságkülönbségek: $\overline{\delta}_1 = 2.999$, $\overline{\delta}_2 = -5.124$.

NUMERIKUS DIFFERENCIÁLÁS

Emlékeztető. Ha $f:(\alpha,\beta)\to\mathbb{R}$ egy differenciálható függvény, akkor $x_n\to x_0\in(\alpha,\beta)$ esetén $\dfrac{f(x_n)-f(x_0)}{x_n-x_0}\to f'(x_0)$. Heurisztikusan:

$$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0)}{h}\ ,\qquad \text{ha } |h| \text{ elegendően kicsi.}$$

Lagrange középérték-tétele szerint, ha $h,k>0$, akkor

$$\frac{f(x_0+h)-f(x_0-k)}{h+k}=f'(t_{x_0,k,h})\qquad \exists\ t_{x_0,k,h}\in(x_0-k,x_0+h)\ .$$

Heurisztika: $t_{x_0,k,h}$ az (x_0-k,x_0+h) intervallum közepe felé esik.

Célszerű közelítés h pontosságnál: $f'(x_0)\approx\dfrac{f(x_0+h/2)-f(x_0-h/2)}{h}$.

Több változóban: ha $f:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}$, akkor $\dfrac{\partial f}{\partial x_k}=\lim\limits_{h\to0}\dfrac{f(x+he_k)-f(x)}{h}$,

vagyis az egyváltozós $h\mapsto f(x+he_k)$ függvény deriváltja (adott $x\in\mathbb{R}^N$-nél).

Definíció. Az $f:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}$ függvénynek a $V\in\mathbb{R}^N$ vektor szerinti szimmetrikus differenciája az $X\in\mathbb{R}^N$ helyen

$$\Delta_V f(X):=f\Big(X+\frac12V\Big)-f\Big(X-\frac12V\Big).$$

Jelölés. $E_i:=\big[\ i\text{-edik egységvektor}\ \big]=\big[0,\dots,0,\underbrace{1}_{i.\ \text{hely}},0,\dots,0\big]^*$ oszlopvektor.

Megjegyzés. 1) 1-változós eset: $\frac1h[f(x+h/2)-f(x-h/2)]=\frac1h\Delta_{he_1}f(x)$.

2) Több változónál $\partial f/\partial x_k$ célszerű közelítése $x\mapsto\frac1h\Delta_{hE_k}X(X)$ (kis h mellet).

Tétel. *Ha $f:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}$, n-szer folytonosan differenciálható, akkor*

$$\frac{1}{h^n}\Delta_{hE_{i_1}}\Delta_{hE_{i_2}}\cdots\Delta_{hE_{i_n}}f(X)=\frac{\partial^n f}{\partial x_{i_1}\partial x_{i_2}\cdots\partial x_{i_n}}\big(T_{X,h}\big)$$

valamely

$$T_{X,h}\in X+\Big[-\frac h2E_{i_1},\frac h2E_{i_1}\Big]+\cdots+\Big[-\frac h2E_{i_n},\frac h2E_{i_n}\Big]$$

helyen. Az $i_1, \ldots, i_N$ *indexek sorrendjétől függetlenül*

$$\Delta_{hE_{i_1}} \Delta_{hE_{i_2}} \cdots \Delta_{hE_{i_n}} f(X) = \sum_{\sigma_1,\ldots,\sigma_n=\pm 1} \sigma_1 \cdots \sigma_n \; f\Big(X + \sigma_1 \frac{h}{2} E_{i_1} + \cdots + \sigma_n \frac{h}{2} E_{i_n}\Big).$$

Megjegyzés. 1)$\mathcal{T}_{X,h} := X + \sum_{k=1}^{n} \Big[-\frac{h}{2} E_{i_k}, \frac{h}{2} E_{i_k} \Big]$ egy többdimenziós téglatest, amelynek középpontja az X pont, és az oldalai párhuzamosak az $x_1, \ldots, x_N$ tengelyekkel (vagyis az $E_1, \ldots, E_N$ vektorokkal). Az E_j-irányú oldalai $\mathcal{T}_{X,h}$-nak annyiszor h hosszúak, ahányszor az E_j vektor előfordul $E_{i_1}, \ldots, E_{i_n}$ között, azaz

$$\ell_j := h\#\{k : \; i_k = j\}$$

hosszúak. Az X középpont távolsága a csúcsoktól $\frac{h}{2}\sqrt{E_{i_1} + \cdots + E_{i_n}}$.

2) Emlékeztető: $\varphi(A) - \varphi(B) = [\nabla\varphi(Z)](A - B) \quad \exists\ T \in [A, B]$, ha $\varphi : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ folytonosan differenciálható. Ezért $\big|\varphi(A) - \varphi(B)\big| \le M\|A - B\|$, ha $\big\|[\nabla\varphi]^*\big\| \le M$ egy olyan tartományon, amely tartalmazza az $[A, B]$ szakaszt.

Ezt alkalmazzuk a $\varphi := \dfrac{\partial^n f}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_n}}$ függvényre.

Tétel. *Ha az* $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ *függvény* $(n+1)$*-szer folytonosan differenciálható, akkor*

$$\Big| \underbrace{\frac{\partial^n f(X)}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_n}}}_{\text{igazi}} - \underbrace{\frac{1}{h^n} \Delta_{hE_{i_1}} \Delta_{hE_{i_2}} \cdots \Delta_{hE_{i_n}} f(X) \Big|}_{\text{numerikus}} \le$$

$$\le \max_{T \in \mathcal{T}_{X,h}} \Big\| \Big[\nabla \frac{\partial^n f(T)}{\partial x_{i_1} \cdots \partial x_{i_n}} \Big] \Big\| \frac{h}{2} \sqrt{E_{i_1} + \cdots + E_{i_n}} \le$$

$$\le Mh \qquad X \text{ közelében.}$$

STURM-SOROZATOK GYÖKSZÉTVÁLSZTÁSRA

Definíció. Legyenek $f_0, \ldots, f_r : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ folytonos függvények. Ekkor $F := [f_0, \ldots, f_r]$ *Sturm-sorozat*, ha

1) mindegyik f_k-nak véges sok gyöke (0-helye) van,
2) f_0 előjelváltó a 0-helyei körül,
3) f_r-nek nincs gyöke,
4) $f_k(\alpha) = 0$ esetén mindig $f_{k\pm1}(\alpha) \neq 0$ különböző előjelűek $\big[f_{k-1}(\alpha)f_{k+1}(\alpha) < 0\big]$.

Megjegyzés. Tudjuk: ha P egy valós polinom egyszeres gyökökkel, akkor az

$$f_0 := P \ f_1 := P', \ \ f_{k+1} := -\big[f_{k-1} : f_{k-2} \text{ maradéka}\big]$$

előjelezett euklideszi osztás tagjai Sturm sorozatozot alkotnak.

Észrevétel. Ha $F := [f_0, \ldots, f_r]$ Sturm sorozat, és $0 < \delta \leq \rho(F)/2$, ahol

$$\rho(F) := \Big[\text{min. távolság } F \text{ gyökei közt}\Big] = \min\Big\{\big|\alpha - \beta\big| : \alpha \neq \beta, \ \exists\, k, \ell \ \ f_k(\alpha) = f_k(\beta) = 0\Big\},$$

akkor $\widetilde{F} := \big[f_k(x + \delta/2) \ F\text{-ben } f_k \text{ helyett}\big]$ is Sturm-sorozat, amelynél $f_k(x+\delta/2)$ gyökei különböznek az F-bel függvények gyökeitől, és $\rho(\widetilde{F}) \geq \delta/2$.

Következmény. *Ha* $F := [f_0, \ldots, f_r]$ *Sturm sorozat, és* $0 < \delta \leq \rho(F)/2$, *akkor*

$$F^{(\delta)} := \big[f_k\big(x + (\delta/2)^k\big) : k = 0, \ldots, r\big]$$

olyan Sturm-sorozat, amely függvényeinek gyökei mind különbözők $\big($*és* $\rho\big(F^{(\delta)}\big) \leq (\delta/2)^r\big)$.

Megjegyzés. Ha F Sturm-sorozat, és a függvényeinek gyökei mind különbözők, akkor triviális, hogy egy f_0-beli gyök körül 1-et csökken (balról jobbra) a jelváltások száma, míg bármely másik f_k $(k > 0)$ függvény gyökein áthaladva nem változik a jelváltások száma.

GRADIENS- ÉS KONJUGÁLT GRADIENS MINIMALIZÁLÁS

Emlékeztető. Ha az $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ függvény folytonosan differenciálható az $a \in \mathbb{R}^N$ pont egy környezetében, akkor van olyan $\delta > 0$, hogy f grafikonjának az összes

$$S_e := \big\{\big(a + \tau e, f(a + \tau e)\big) :\ -\delta < \tau < \delta\big\} \qquad (e \in \mathbb{R}^N \text{ egységvektor})$$

metszetei síma görbék. Nevezetesen S_e *meredeksége az a pont fölött*

$$\begin{aligned} f'_e(a) &:= \frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} f(a + \tau e) = \nabla f(a) e = \\ &= \Big\langle [\nabla f(a)]^* \Big|\, e \Big\rangle = \\ &= \big\|\nabla f(a)^*\big\| \ \cos\big((e, \nabla f(a)^*) \text{ szöge}\big) \ . \end{aligned}$$

Paradigma. Ha $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, akkor a grafikonja felfogható egy táj képének, ahol $f(x) = [$ a térképen x pontnak megfelelő hely tengerszint feletti magassága. A a térképen a pontnál a $-\nabla f(a)$ vektor irányában van a legnagyobb lejtés, $\big\|\nabla f(a)^*\big\|$ meredekséggel. A $\nabla f(a)^*$ *gradiensvektorral* α szöget bezáró irányban a táj meredeksége (a fölött) $\big\|\nabla f(a)^*\big\| \cos\alpha$. Másrészt, ha a térképen az x pontból az e egységvektor irányában megyünk egyenes vonalban és egységnyi sebességgel, akkor a felette a táj $\varphi : t \mapsto f(x + te)$ grafikonján $\varphi''(0) = e^* \nabla^2 f(x) e$ a táj "görbülése" az x pont felett.

Definíció. Az f függvény *koercív*, ha valamelyik $f^{-1}(-\infty, \lambda]\big(= \{x :\ f(x) \le \lambda\}\big)$ alsó szinthalmaza kompakt (korlátos zárt).
$\big[$Tudjuk: folytonos koercív függvény alulról korlátos és felveszi minimumát.$\big]$
Az x_* pont *stacionárius pont*ja az f függvénynek, ha $\nabla f(x_*) = 0$.
Jelölés: $\mathrm{Stac}(f) := \big\{f \text{ stacionárius pontjai}\big\}$.

Algoritmus. (Legmeredekebb lejtő módszer minimalizálásra).

Adottak: $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ *C^1-síma koercív függvény,*
$x_0 \in \mathbb{R}^N$ *kindulópont egy kompakt alsó szinthalmazból.*

Tentatív minimalizáló sorozat:

$$\begin{aligned} x_{n+1} &:= \big[f \textit{ első 1-dim. stacionárius helye az } x_n + \mathbb{R}_+[-\nabla f(x_n)] \textit{ félegyenesen}\big] \\ &= x_n - t_n \nabla f(x_n), \quad \textit{ahol } t_n := \min\{t \ge 0 :\ \tfrac{d}{dt} f\big(x_n - t\nabla f(x_n)\big) = 0. \end{aligned}$$

Propozíció. *Az x_{n+1} pont jól-definiált.*

Bizonyítás. Legyen $\varphi(t) := f\big(x_n - t\nabla f(x_n)\big)$. Ha $\nabla f(x_n) = 0$, triviálisan $x_{n+1} = x_n$. Legyen $\nabla f(x_n) \ne 0$. Ekkor $\varphi'(0) < 0$. Mivel f koercív, van $T_n > 0$, amelyre $\varphi(t) \ge \varphi(0)$ $(t \ge T_n)$. A $[0, t_0]$ intervallumon a folytonos φ felveszi a minimát, vagyis $S := \{t > 0 :\ \varphi'(t) = 0\} \ne \emptyset$. Mivel φ' folytonos $t_n := \min S$ jól-definiált, és $\varphi'(t) < 0$ minden $0 \le t < t_n$ esetén. Ezzel $x_{n+1} = x_n - t_n \nabla f(x_n)$.

Lemma. *Ha $\varphi : [0,T] \to \mathbb{R}$ 2-szer folytonosan differenciálható, és $m \le \varphi'' \le M$, akkor*

$$\begin{matrix} \varphi(0)+\varphi'(0)t+\frac{m}{2}t^2 \le \varphi(t) \le \varphi(0)+\varphi'(0)t+\frac{M}{2}t^2 \\ \varphi'(0)+mt \le \varphi'(t) \le \varphi'(0)+Mt \end{matrix} \qquad (0 \le t \le T).$$

Bizonyítás. A Lagrange maradéktagos 2-rendű Taylor-formula szerint mindig

$$\varphi(t) = \varphi(0)+\varphi'(0)t+\frac{1}{2}\varphi''(x_t)t^2, \quad \varphi'(t) = \varphi'(0)+\varphi''(z_t)$$

valamely $x_t, z_t \in [0,t]$ mellett. Itt $m \le \varphi''(x_t), \varphi''(z_t) \le M$.

Következmény. *Ha $f \in C^2(\mathbb{R}^N)$ és $mI \prec \nabla^2 f \prec MI$ egy $[a,b] \subset \mathbb{R}^N$ szakaszon, akkor az $e := (b-a)/\|b-a\|$ egységvektorral az $x \in [a,b]$ pontokra*

$$f(x) \in \|x-a\|\langle \nabla f(a)|\ e\rangle + \frac{1}{2}\big[m,M\big]\|x-a\|^2,$$
$$f'_e(x) = \langle \nabla f(x)|\ e\rangle \in \langle \nabla f(a)|\ e\rangle + \big[m,M\big]\|x-a\|.$$

Konvex eset. *Legyen $\in C^2(\mathbb{R}^N)$ konvex, ahol $f(x_*) = \min f = 0$, és legyen $x_0, x_1, \ldots$ egy legmeredekebb lejtő szerinti sorozat f-hez. Ha $0 \prec mI \prec \nabla^2 f \prec MI$ az $(f \le f(x_0))$ konvex halmazon, akkor a $\delta_n := \|x_n - x_*\|$ ill. $\varepsilon_n := f(x_n)$ jelölésekkel*

$$\delta_n \le \sqrt{2\varepsilon_n/m}, \quad \varepsilon_n \le \Big(1-\frac{m}{4M}\Big)^n \delta_0 \searrow 0.$$

Bizonyítás. A Lemma szerint ($a := x_n, b := x_{n+1}$ ill. $a := x_*, b := x_n$ mellett)

$$1)\ \varepsilon_{n+1} \le \varepsilon_n - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x_n)\|^2, \quad 2)\ \frac{m}{2}\delta_n^2 \le \varepsilon_n \le \frac{M}{2}\delta_n^2, \quad 3)\ \|\nabla f(x_n)\| \ge f'_{e_n}(x_n) \ge \frac{\varepsilon_n}{\delta_n},$$

továbbá 3)-hoz f grafikonján az $\{(x_*,0),(x_n,0),(x_n,\varepsilon_n)\}$ háromszöget tekintjük az $e_n := (x_n - x_*)/\delta_n$ egységvektorral. 2)-ből azonnal következik $\delta_n \le \sqrt{2\varepsilon_n/m}$ (azaz $x_{\to} x_*$-hoz elegendő $\varepsilon_n \searrow 0$). 1) szerint

$$\varepsilon_{n+1} \le \varepsilon_n - \frac{\|\nabla f(x_n)\|^2}{2M} \le^{3)} \le \varepsilon_n - \frac{(\varepsilon_n/\delta_n)^2}{2M} \le^{2)} \le \varepsilon_n - \frac{\varepsilon_n^2/(2\varepsilon_n/m)}{2M} = \varepsilon_n\Big(1-\frac{m}{4M}\Big).$$

Innen indukcióval adódik $\varepsilon_n \le \Big(1-\dfrac{m}{4M}\Big)^n \delta_0$ $(n = 0,1,2,\ldots)$.

Propozíció. *Legyen $S_\lambda := \{x :\ f(x) \le \lambda\}$ és $M_\lambda := \max_{x \in S_\lambda} \|\nabla^2 f\|$. Ekkor*

$$f(x_{n+1}) \le f(x_n) - \frac{1}{2M_\lambda}\|\nabla f(x_n)\|^2 \qquad \textit{ha} \quad x_n \in S_\lambda$$

Bizonyítás. Vegyük az $u_n := \nabla f(x_x)/\|\nabla f(x_n)\|$ egységvektort és a $\varphi(t) := f(x_n - tu_n)$ függvényt. A Lemma szerint

$$f(x_n + tu_n) = \varphi(t) \leq \varphi(0) + \varphi'(0)t + \frac{1}{2}M_\lambda t^2 =$$
$$= f(x_n) - \|\nabla f(x_n)\|t + \frac{1}{2}M_\lambda t^2.$$

A jobb-oldali függvény a minimumát a $t_n := (2M_\lambda)^{-1}\|\nabla f(x_n)\|$ helyen veszi fel. Sőt

$$0 \leq t \leq t_n \Longrightarrow \varphi'(t) \leq \varphi'(0) + M_\lambda t \leq 0$$

Ezért

$$f(x_{n+1}) \leq \varphi(t_n) \leq \min_t \big[f(x_n) - \|\nabla f(x_n)\|t + \frac{1}{2}M_\lambda t^2\big] = f(x_n) - \frac{1}{2M_\lambda}\|\nabla f(x_n)\|^2$$

Következmény. $\nabla f(x_n) \to 0$ $(n \to \infty)$.

Bizonyítás. Mivel f alulról korlátos, és az $[f(x_n)]$ sorozat csökkenő, $f(x_{n+1}) - f(x_n) \to 0$. Ezért $\|\nabla f(x_n)\|^2 \leq 2M_\lambda[f(x_n) - f(x_{n+1})] \to 0$. Qu.e.d.

Tétel. *Ha az* : $\mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ *függvény* C^2*-síma és koercív, akkor az* $[x_n]$ *sorozat minden torlódási pontja stacionárious pontja* f*-nek. Ha* f *injektív* $\mathrm{Stac}(f)$*-en, akkor* $x_n \to x_*$ *valamely* $x_* \in \mathrm{Stac}(f)$ *helyhez.*

Bizonyítás. Legyen $x_{n_i} \to x_*$. Ekkor $\nabla f(x_{n_i}) \to \nabla f(x_*)$, mivel f C^1-síma. Mivel $\nabla f(x_n) \to 0$, fennáll $\nabla f(x_*) = 0$, azaz $x_* \in \mathrm{Stac}(f)$. Mivel $f(x_{n_i}) \to f(x_*)$ és $f(x_n) \searrow \inf_k f(x_k)$, fennáll $f(x_*) = \inf_k f(x_k)$. Ha f $\mathrm{Stac}(f)$ különböző pontjaiban különböző értékeket vesz fel, akkor ezért a korlátos $[x_n]$ sorozatnak csak egy torlódási pontja lehet, azaz konvergens. Qu.e.d.

Következmény. *Ha* f *szigorúan konvex,* C^2*-síma és koercív, akkor* $x_n \to [f$ *min.-helye*$]$, *mivel* $\mathrm{Stac}(f) = \{[f$ *min.-helye*$]\}$.

Megjegyzés. Konvex f függvényre $\quad f$ koercív $\iff$ $f(x) \to \infty$ $\big(\|x\| \to \infty\big)$.

Példa. Lehetséges $f : \mathbb{R}^3 \to \mathbb{R}$ C^1-síma, koercív, $\mathrm{Stac}(f) = \{(\pm 1, \pm 1, 0) \cup \{\text{VÉGES}\}$ olyan $x_0, x_1, \ldots$ minimalizáló sorozattal, amelynél

$$x_{4k} \to (1,1,0), \quad x_{4k+1} \to (1,-1,0), \quad x_{4k+2} \to (-1,-1,0), \quad x_{4k+3} \to (-1,1,0).$$

Konstrukció: Az $U(r) := K\big([r-10]_+\big)^1 0$ végtelenben korrigáló fggvény mellett

$$f := \Phi(x,y) + z\Psi(x,y) + U(\sqrt{x^2+y^2+z^2}), \quad x_0 := (2,5,0).$$

Ha $\Phi, \Psi = O\big((x^2+y^2)^2\big)$, akkor $\|(x,y,z)\| < 10$ esetén az $f(\mathbf{x}) \to \infty$ ($\|\mathbf{x}\| \to \infty$), és a koercivitást biztosító U függvény $\equiv 0$, és így az ilyen helyeken $\partial f/\partial z = \Psi(x,y)$ ill. $\nabla_2 f = \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}\right) = \nabla\Phi + z\nabla\Psi$. Speciálisan $\nabla f = (\nabla\Phi, 0)$ az $(x,y,0)$ helyeken, ahol $x^2+y^2 < 100$ és $\Psi(x,y) = 0$. Elegendő tehát olyan Φ, Ψ megadása, amelynél $x^2+y^2 < 100$ mellett (1) a $(2,5)$ pontból indított, Φ-t minimalizáló ($\mathbb{R}^2$-beli) sorozat ($4k$)-indexű tagjai $(1,1)$-hez, a ($4k+1$)-esek $(1,-1)$-hez, a ($4k+2$)-esek $(-1,-1)$-hez, a ($4k+3$)-asok $(-1,1)$-hez konvergálnak, (2) Ψ e pontokban eltűnik, de $\neq 0$ gradiesű, és (3) f-nek csak véges sok stacionárius helye legyen. Az (1),(2) feltétételek biztosítják, hogy a $(2,5,0)$-ból induló minimalizáló sorozat pontjai nem mások, mint a Φ-t $(2,5)$-ből monimalizáló sorozat pontjai 0-val kiegészítva a 3. koordinátában.

Csak az (1),(2) feltételek teljesítésével foglalkozunk vázlatosan. [Ezek után (3) az U függvény K konstansa alkalmas választásával egyszerű, de hosszabb munkával teljesíthető].

Válasszuk Φ-t úgy, hogy $\lambda > 0$ esetén a $\Phi^{-1}(-\infty, \lambda]$ szinthalmaz a $(\pm 1, \pm 1)$ pontok körüli

$$\begin{aligned} &E_0 := \{(x,y):\ \rho(x-1, y-1) = \lambda\}, \quad E_1 := \{(x,y):\ \rho(y+1, x-1) = \lambda\}, \\ &E_2 := \{(x,y):\ \rho(x+1, y+1) = \lambda\}, \quad E_3 := \{(x,y):\ \rho(y-1, x+1) = \lambda\}, \\ &\rho(a,b) := 2a^2 + b^2 - ab \end{aligned}$$

négy egybevágó ellipszis uniója konvex burkának a határa, továbbá $\Phi^{-1}\{0\} = Q := \{(x,y):\ \max(|x|,|y|) = 1\}$, a Q négyzeten belül pedig $\Phi < 0$, és $\mathrm{Stac}(\Phi) = Q \cup \{\mathbf{0}\}$. Ekkor az $L_0 := \{(x,y):\ x,y > 1,\ \partial\rho(x-1, y-1)/\partial x = 0\} = \{(x, 4x-3):\ x > 1\}$ félegyenes pontjaiban (speciálisan az x_0 pontban is) Φ gradiense x-irányú. Hasonlóan Φ gradiense y-irányú az $L_1 := \{(4y+5, y):\ y < -1\}$ félegyenesen, x-irányú az $L_2 := \{(x, 4x+3):\ x < -1\}$ félegyenesen, és y-irányú az $L_3 := \{(4y-5, y):\ y > 1\}$ félegyenesen.
Ekkor Ψ választása: legyen $\Psi := \widetilde{x}\widetilde{y}$ két új $\mathbb{R}^2$-beli C^1-síma *korlátos, nem-0-gradiensű* koordinátafüggvény szorzata, amelyekre $\widetilde{x}(L_0) = \widetilde{x}(L_2) = 0$, $\widetilde{y}(L_1) = \widetilde{y}(L_3) = 0$, és amelyek origója nem a $(0,0)$ pont.

Kis lépések algoritmusa.

Adott: f C^2-síma, $x_0 \in \mathbb{R}^N$ úgy, hogy
$K := \{x:\ f(x) \le f(x_0)\}$ kompakt és $\|\nabla^2 f(x)\| \le M$ $(x \in K)$.
Ezzel

$$\widetilde{x}_0 := x_0, \quad \widetilde{x}_{n+1} := \widetilde{x}_n - \frac{1}{2M}\nabla f(\widetilde{x}_n)$$

Megjegyzés. $\quad f(\widetilde{x}_{n+1}) \le f(\widetilde{x}_n) - \dfrac{1}{2M}\|\nabla f(\widetilde{x}_n)\|^2.$

Tétel. *Ha f-nek véges sok stacionárius helye van akkor a $[\widetilde{x}_n]$ sorozat ezek egyikéhez tart.*

Bizonyítás. Mivel f alulról korlátos, a Megjegyzés alapján áll $\widetilde{x}_n$-nel is, hogy $\nabla f(\widetilde{x}_n) \to 0$ (hasonlóan, mint az előző Tétel bizonyításakor). Feltevés szerint $\mathrm{Stac}(f) = \{s_1, \ldots, s_r\}$

írható. Vehető tehát olyan $\delta > 0$, hogy az $U_k := \{x :\ \|x - s_k\| < \delta\}$ gömbök egymástól legalább δ távolságra vannak. Elegendő belátni: valamely k, ν indexekre $\{\widetilde{x}_n :\ n \geq \nu\} \subset U_k$. Ugyanis ekkor $[\widetilde{x}_{\nu+i}]$ összes torlódási pontjai $\overline{U_k}$-ban vannak, azaz $\widetilde{x}_n \to s_k$.
Legyen $\varepsilon := \min\left\{\|\nabla f(x)\| :\ x \in K \setminus \bigcup_k U_k\right\}$. Észrevétel: ε jól-definiált mint kompakt halmazon folytonos függvény minimuma, sőt $\varepsilon > 0$, mivel $\|\nabla f(x)\| = 0$ esetén szükséképpen $x = s_\ell (\in U_\ell)$ alakú stacionárius pont. Mivel $\nabla f(\widetilde{x}_n) \to 0$, van olyan ν index, amelytől kezdve $\|\nabla f(\widetilde{x}_n)\|, \|\widetilde{x}_{n+1} - \widetilde{x}_n\|\left(= \frac{1}{2M}\|\nabla f(\widetilde{x}_n)\|\right) < \min\{\delta, \varepsilon\}$ $(n \geq \nu)$. Vagyis $\widetilde{x}_\nu, \widetilde{x}_{\nu+1}, \ldots \in U_1 \cup \cdots \cup U_r$. Legyen $x_\nu \in U_k$. Észrevétel: ezzel (és csak ezzel) a k indexszel $\widetilde{x}_\nu, \widetilde{x}_{\nu+1}, \ldots \in U_k$, mivel az $[\widetilde{x}_{\nu+i}]_{i=0}^\infty$ sorozat $\|\widetilde{x}_{n+1} - \widetilde{x}_n\| < \delta$ $(n \geq \nu)$ miatt nem léphet át egy másik U_ℓ gömbbe. Qu.e.d.

Tétel. *Legyen $f : K \to \mathbb{R}$ konvex függvény konvex halmazon, amelyre $mI \leq \nabla^2 f \leq MI$, ahol $m > 0$ és $x_* := [x :\ f(x) = \min f] \in K^o$. Vegyünk a tetszőlegesen adott $x_0 \in K$ kezdőpontból egy olyan minimalizáló algoritmust, amelynél*

$$x_{n+1} := \left[f \text{ minimum-helye } x_n + \mathbb{R}_+ u_n\right]\text{-en},$$

ahol u_n egységvektor, $\left[(u_n, \nabla f(x_n)) \text{ szöge}\right] < \alpha < 90°$. Ekkor $x_n \to x_*$ $(n \to \infty)$ geometriai nagyságrendben.

Bizonyítás. $mI \leq \nabla^2 f \leq MI$ és $\nabla f(x_*) = 0$ miatt

$$\frac{1}{2}m\|x - x_*\|^2 \leq f(x) \leq \frac{1}{2}M\|x - x_*\|^2.$$

Ha $f(x) - f(x_*) = \varepsilon$, akkor $\|x - x_*\| \leq \sqrt{2\,\varepsilon/m}$, azaz

$$\|x_n - x_*\|^2 \leq 2[f(x_n) - f(x_*)]/m.$$

Elég látni: $f(x_n) \searrow f(x_*)$. Mennyit csökken $f(x_{n+1})$ $f(x_n)$-hez képest?

$\left[u_n \text{ szöge } \nabla f(x_n)\text{-től}\right] < \alpha$

$$\lambda_n := \left[f \text{ érintőjének meredeksége } x_n\text{-nél } u_n \text{ irányban}\right] \leq$$
$$\leq -\|\nabla f(x_n)\| \cos\alpha \ (< 0)$$

$\varphi_n(t) := f(x_n + tu_n)$ mellett

$\varphi'(0) = \langle \nabla f(x_n) | u_n \rangle \leq -\|\nabla f(x_n) \cos\alpha\|, \qquad \varphi''(t) = \langle \nabla^2 f(x_n + tu_n) u_n | u_n \rangle \leq M.$

A Lemma szerint $f(x_n + tu_n) = \varphi(t) \leq f(x_n) - \|\nabla f(x_n)\| \cos\alpha + \frac{1}{2}Mt^2$

$$\begin{aligned} f(x_{n+1}) &= \min_{t \in \mathbb{R}} f(x_n + tu_n) \leq \\ &\leq \min_{t \in \mathbb{R}} f(x_n) - \|\nabla f(x_n)\| \cos\alpha \ t + \frac{1}{2}Mt^2 = \\ &= f(x_n) - \frac{1}{2M}\|\nabla f(x_n)\|^2 \cos^2\alpha \end{aligned}$$

Csakhogy $\nabla f(x_n)$ a legmeredelkebb lejtése f-nek az x_n pontban. Itt f az x_* felé mutató irányban meredekebb az $(x_*, f(x_*))$-ot $(x_n, f(x_n))$-nel összekötő egyenesnél. Vagyis

$$\|\nabla f(x_n)\| \geq \frac{f(x_n) - f(x_*)}{\|x_n - x_*\|}$$

Innen

$$\begin{aligned} f(x_n) - f(x_{n+1}) &\geq \frac{1}{2M} \frac{[f(x_n) - f(x_*)]^2}{\|x_n - x_*\|^2} \cos^2 \alpha \geq \\ &\geq \frac{1}{2M} \frac{[f(x_n) - f(x_*)]^2}{2[f(x_n) - f(x_*)]/m} \cos^2 \alpha = \\ &= \frac{1}{4} \frac{m}{M} [f(x_n) - f(x_*)] \cos^2 \alpha \end{aligned}$$

Tehát $f(x_{n+1}) \leq f(x_n) - \frac{1}{4} \frac{m}{M} \big[f(x_n) - f(x_*)\big] \cos^2 \alpha$. Azaz

$$f(x_{n+1}) - f(x_*) \leq \Big(1 - \frac{1}{4} \frac{m}{M} \cos^2 \alpha\Big) \big[f(x_n) - f(x_*)\big]$$

Indukcióval

$$f(x_n) - f(x_*) \leq \Big(1 - \frac{1}{4} \frac{m}{M} [f(x_n) - f(x_*)] \cos^2 \alpha\Big)^n \big[f(x_0) - f(x_*)\big]$$

$$\|x_n - x_*\| \leq \frac{2}{m} \Big(1 - \frac{1}{4} \frac{m}{M} [f(x_n) - f(x_*)] \cos^2 \alpha\Big)^{n/2} \big[f(x_0) - f(x_*)\big]^{1/2}. \quad \text{Qu.ed.}$$

Megjegyzés. Még x_{n+1} helyét az $x_n + \mathbb{R}_+ u_n$ félegyenesen sem kell pontosan kijelölni. Legyen $x^*_{n+1} := \big[\ f$ minimumhelye $x_n + \mathbb{R}_+ u_n$-en $\big]$ (– ez volt eddig x_{n+1}). Elég, ha egy adott $\lambda \in (0, 1)$ szám mellett mindig

$$x_{n+1} \in [x_n, x^*_{n+1}], \quad \|x_{n+1} - x_n\| \geq \lambda \|x^*_{n+1} - x_n\|,$$

azaz ha $x_{n+1} \in \big[(1 - \lambda x_n + \lambda x^*_{n+1}\big]$. Ekkor is

$$\begin{aligned} \varepsilon_n &\leq \Big(1 - \frac{m}{2M} \lambda^2 \cos^2 \alpha\Big)^n \varepsilon_0 \qquad (n = 1, 2, \ldots), \\ \|x_n - x_*\| &= \delta_n \leq \sqrt{\frac{2\varepsilon_n}{m}} \leq \sqrt{\frac{2\varepsilon_0}{m}} \Big(1 - \frac{m}{2M} \lambda^2 \cos^2 \alpha\Big)^{n/2}. \end{aligned}$$

Tétel. *Ha $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ 2-szer folytonosan differenciálható és egyenletesen konvex ($\nabla^2 f > m \ \ \exists\, m > 0$), akkor bármely $x_0 \in \mathbb{R}^N$ pontból kiindulva bármely olyan pontatlan eljárást alkalmazva is, ahol*

$$\begin{aligned} x_{n+1} = x_n + \tau_n u_n, \quad \|u_n\| = 1\ , \quad &\big[-\nabla f(x_n), u_n \text{ szöge}\big] \leq \alpha\ , \\ &\tau_n \geq \lambda \Big[[\tau \mapsto f(x_n + \tau u_n)] \text{ első min.-helye } \Big] \end{aligned}$$

valamilyen $\alpha < 90^o$, $\lambda \in (0,1)$ konstansokkal, a kapott $x_1, x_2, \ldots$ sorozatra

$$x_n \to x_* = \big[\ f \text{ min.-helye }\big], \quad \|x_n - x_*\| \le \mathrm{Const}\big(1-\rho\big)^n \quad \exists\, \rho \in (0,1).$$

Megjegyzés. A bizonyítás egy részét általánosabb függvényekre is lehet alkalmazni. Tegyük fel, hogy az $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ függvény 2-szer folytonosan differenciálható, $x_0 \in \mathbb{R}^N$ és a $K_0 := \{x :\ f(x) \le f(x_0)\}$ halmazon $\|\nabla f\| \le M$. Ekkor is

$$\big[\ f \text{ csökkenése } x_n \text{ és } x^*_{n+1} \text{ között }\big] \ge$$
$$\ge \Big[\ \big[t \mapsto f(x_n) - \underbrace{\lambda_n}_{\ge \|\nabla f(x_n)\| \cos\alpha} t + Mt^2\big] \text{ csökkenése } t=0 \text{ és a minimuma közt }\Big] = \sqrt{\frac{2\lambda_n}{M}}.$$

A jobboldali mennyiség egyébként egy λ_n sebességről M lassítással leálló mozgás *fékútja*. Itt is elég, ha mindig csak az $[x_n, x^*_{n+1}]$ szakasz legalább $\lambda \in (0,1)$ szereséig megyünk x_{n+1}-hez (azaz $x_{n+1} \in [(1-\lambda)x_n + \lambda x^*_{n+1}]$). Ekkor

$$\big[\ f \text{ csökkenése } x_n \text{ és } x_{n+1} \text{ között }\big] \ge$$
$$\ge \Big[\ \big[t \mapsto f(x_n) - \lambda_n t + Mt^2\big] \text{ csökkenése } t=0\text{-tól a minimumig tartó út } \lambda\text{-ad részén}\Big] =$$
$$= \Big(1-(1-\lambda)^2\Big)\sqrt{\frac{2\lambda_n}{M}} \ge \lambda\ \sqrt{\frac{2\lambda_n}{M}}.$$

Innen $\|\nabla f(x_n)\| \cos\alpha \le \lambda_n \le [f(x_n) - f(x_{n+1})]^2 M^2/(2\lambda)$.
Ha f *alulról korlátos*, akkor $f(x_n) - f(x_{n+1}) \to 0$, így $\|\nabla f(x_n)\| \to 0$.

Tétel. *Tegyük fel, hogy $\mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ 2-szer folytonosan differenciálható, és x_0 olyan hely, hogy az $\{x :\ f(x) \le f(x_0)\}$ alsó szinthalmaz korlátos. Ekkor egy olyan pontatlan eljárást alkalmazva is, ahol*

$$x_{n+1} = x_n + \tau_n u_n, \quad \|u_n\| = 1\ , \quad \big[-\nabla f(x_n), u_n \text{ szöge}\big] \le \alpha\ ,$$
$$\tau_n \ge \lambda\Big[[\tau \mapsto f(x_n + \tau u_n)] \text{ első min.-helye }\Big]$$

valamilyen $\alpha < 90^o$, $\lambda \in (0,1)$ konstansokkal, olyan $x_0, x_1, x_2, \ldots$ sorozatot kapunk, amely $\mathrm{Stac}(f)$*-beli pontokhoz konvergáló részsorozatokból áll.*

Infiniteziális lépések módszere (minimalizálásra).

Adottak: $f \in \mathcal{C}^1(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$ koercív, $x_0 \in \mathbb{R}^N$.

$$x_t :\ \ dx_t/dt = -\nabla f(x_t) \ \text{ megoldása } x_0 \text{ kiindulással } t=0\text{-nál.}$$

Tétel. *Az $[x_t :\ t \in \mathbb{R}_+]$ függvény jól-definiált és korlátos. A torlódási pontjai $t \to \infty$ esetén mind stacionárius pontjai f-nek.*

Bizonyítás. Észrevétel: $t \mapsto f(x_t)$ csökken, mivel

$$\frac{d}{dt} f(x_t) = \big\langle \nabla f(x_t) \big| dx_t/dt \big\rangle = -\|\nabla f(x_t)\|^2 \le 0.$$

Így a $dx_t/dt = -\nabla f(x_t)$ diffrenciál-egyenlet x_t megoldásai jól-definiáltak minden $t \ge 0$-ra, és az $S := \{x : \ f(x) \le f(x_0)\}$ tartományban maradnak. Mivel f alulról korlátos (lévén koercív), ahonnan $f(x_t) - f(x_s) \to 0$ $(s,t \to \infty)$.
Tegyük fel, hogy $t_n \to \infty$ és $x_{t_n} \to x_*$, de $\nabla f(x_*) \ne 0$. Ekkor van olyan $\delta > 0$, hogy $\|\nabla f(x)\| \in [\delta, 1/\delta]$ valahányszor $\|x - x_*\| < \delta$, azaz ha $x \in \mathrm{Ball}(x_*, \delta)$. Legyen $M := \sup\big\{\|\nabla f(x)\| : \ x \in S\big\}$. Tudjuk: $M < \infty$ (mivel S kompakt és f C^1-síma). Mivel $x_t \in S \Rightarrow \|\nabla f(x_t)\| \le M$, fennáll

$$\|x_{t+h} - x_t\| = \Big\| \int_{\tau=0}^{h} \frac{dx_\tau}{d\tau} d\tau \Big\| = \Big\| \int_{\tau=0}^{h} \big[-\nabla f(x_\tau)\big] d\tau \Big\| \le Mh \qquad (t, h \ge 0).$$

Valamilyen n_0 indextől kezdve $x_{t_n} \in \mathrm{Ball}(x_*, \delta/2)$. Vagyis $0 \le h \le \delta/(2M)$ és $n \ge n_0$ esetén már $x_{t_n+h} \in \mathrm{Ball}(x_*, \delta)$, és így

$$\frac{d}{dh} f(x_{t_n+h}) = -\|\nabla f(x_{t_n+h}\|^2 \le -\delta^2 \qquad \big(n \ge n_0,\ 0 \le h < \delta/(2M)\big).$$

Innen $\varepsilon := \delta/(2M)$ mellett a $-\varepsilon\delta^2 \ge f(x_{t_n+\varepsilon}) - f(x_{t_n}) \to 0$ $(n \to \infty)$ ellentmondásra jutunk.

Gyakorlat. "Bob–pálya-spirál" függvény: $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, $f := f_0 + F$, ahol *polárkoordiátákkal*

$$\begin{aligned} &f_0 := \big[r^2 - (\pi/2)^2\big]^2 && \text{(a "hegy" az } [r < \pi/2] \text{ kör fölött)} \\ &F := f_0(r,\varphi) F_0(\operatorname{tg} r^2, \varphi), \quad F_0(r,\varphi) := \sin^4(r+\varphi) && (F_0 \text{ spirál, } F \text{ spirális árok a hegyen}) \end{aligned}$$

Konjugált-gradiens (Fletcher–Lánczos) módszer

Módszer. Legyen $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ C^2-sima konvex függvény, $0 \prec mI \prec \nabla^2 f$.
Keressük f min-helyét

$$G(x) := \nabla f(x) = 0 \quad \text{Newton-iterációs megoldásával.}$$

Az iterációs lépés

$$\begin{aligned} X_{n+1} &= X_n - G'(X_n)^{-1} G(X_n) \\ X_{n+1} &= X_n + V_n, \quad \text{ahol} \quad G(X_n) + G'(X_n) V_n = 0. \end{aligned}$$

Koordinátákkal:

$$\underbrace{\begin{bmatrix} \partial f/\partial x_1\big|_{x=X_n} \\ \vdots \\ \partial f/\partial x_N\big|_{x=X_n} \end{bmatrix}}_{G(X_n)} + \underbrace{\begin{bmatrix} \dfrac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}\Big|_{x=X_n} \end{bmatrix}}_{G'(X_n)} \underbrace{\begin{bmatrix} v_1 \\ \vdots \\ v_N \end{bmatrix}}_{V_n} = 0.$$

Ezzel visszavezettük a feladatot *pozitív-definit* A mátrix melletti $AX+b=0$ alakú lineáris egyenletrendszerek megoldására. Ezt pedig algebrai módszer helyett a

$$\Phi(X)=\Phi_{A,b}(X):=\frac{1}{2}\langle X|AX\rangle+\langle b|X\rangle\to\mathrm{MIN}$$

kvadratikus függvény-minimalizálással oldjuk meg. Valóban:

$$\nabla\Phi(X)=AX+b,$$

mivel a gradiens-vektor definíciója szerint $\nabla\Phi(X)=\big[W:\langle W|V\rangle=\Phi'(X)V\ (\forall V)\big]$, és itt $\Phi'(X)V=\Phi'_V(X)=d\Phi(X+\tau V)/d\tau\big|_{\tau=0}=\frac{1}{2}\langle V|AX\rangle+\frac{1}{2}\langle AX|V\rangle+\langle b|Y\rangle=\langle AX+b|V\rangle$.

Megjegyzés. A "fizikusok" (kissé felszínes) megközelítése: f X_* min-helye körül

$$f\approx\Phi_{A,b},\quad \text{ahol } A=\nabla^2 f(Z),\ b=\nabla f(Z), \text{ ha } Z \text{ "közel" van } X_*\text{-hoz.}$$

Módszer 2. Gyakran csak a $\Phi_{A,b}=\frac{1}{2}\langle X|AX\rangle+\langle b|X\rangle$ $(A\succ 0)$ függvény alább ismertetedő minimalizálását (amely egyben az $AX=-b$ lineáris egyenlet egy numerikusan nagyon stabil megoldása) nevezik konjugált gradiens módszernek. Az elnevezés eredete: az alább definiált $e_1,\dots,e_n$ vektorok gradiensek, a $v_1,\dots v_N$ vektorok pedig a konjugáltjaik.

Jelölés: $\Phi:=\Phi_{A,b}$, $x_0\in\mathbb{R}^N$ tetszőleges kiindulás, $S_0:=\{x_0\}$.
Ha az $x_0,x_1,\dots,x_k$ pontok és a rendre $0,1,\dots,k$-dimenziós $S_0\subset S_1\subset\cdots\subset S_k$ (affin) altereket már megadtuk úgy, hogy $x_j=\big[\Phi \text{ min-helye } S_{k+1}\text{-en}\big]$ $(j=0,\dots,k)$, akkor

$$e_{k+1}:=-\nabla\Phi(x_k),\quad S_{k+1}:=S_k+\mathbb{R}e_k,\quad x_{k+1}:=\big[\Phi \text{ min-helye } S_j\text{-n}\big],\quad v_{k+1}:=x_{k+1}-x_k.$$

Észrevétel. (1) $S_k=x_0+\mathbb{R}e_1+\cdots+\mathbb{R}e_k=x_0+\mathbb{R}v_1+\cdots+\mathbb{R}v_k$;
(2) ha $e_{k+1}=0$, akkor rögtön $x_k=\big[\Phi \text{ min-helye}\big]$; vehető $e_1,\dots,e_N\neq 0$;
(3) $\nabla\Phi(x_k)=e_{k+1}\perp\big[\ S_k \text{ érintősíkja}\ \big]=\mathrm{Span}\{e_1,\dots,e_k\}=\mathrm{Span}\{v_1,\dots,v_k\}$;

$\Longrightarrow$ $\{e_1,\dots,e_N\}$ TON rsz $\subset\mathbb{R}^N$ (ha $e_1,\dots,e_N\neq 0$

$$\begin{aligned}
e_{k+2}&=-\nabla\Phi(x_{k+1})\perp e_1,\dots,e_{k+1}\\
&=-Ax_{k+1}-b\\
e_{k+1}&=-\nabla\Phi(x_k)\perp e_1,\dots,e_k\\
&=-Ax_k-b\\
e_{k+1}-e_{k+2}&=A(x_{k+2}-x_{k+1})\perp e_1,\dots,e_k\\
&=Av_{k+1}\\
\mathrm{Span}\{e_1,\dots,e_k\}&=\mathrm{Span}\{v_1,\dots,v_k\}\Longrightarrow Av_{k+1}\perp v_1,\dots,v_k.
\end{aligned}$$

Új skalárszorzat: $\langle x|\,y\rangle_A:=\langle Ax|\,y\rangle$. Ezzel tehát $v_{k+1}\perp^A v_1,\dots,v_k$, azaz kaptuk:

Propozíció. *A konjugált gradiensek rendszere* $v_1,\dots,v_N$ $\langle\cdot|\cdot\rangle_A$-TON rsz $\subset\mathbb{R}^N$.

Jelölés. Az $\langle\cdot|\cdot\rangle_A$-szerinti merőleges vetítés az S altérre $P_S^{(A)}$.
Mivel $\{v_1,\dots,v_N\}$ $\langle\cdot|\cdot\rangle_A$-ortogonális rendszer,

$$P^{(A)}_{S_k-x_0}x = P^{(A)}_{\mathrm{Span}\{v_1,\dots,v_k\}}x = \sum_{j=1}^{k} P^{(A)}_{\mathbb{R}v_j}x = \sum_{j=1}^{k}\frac{\langle x|v_j\rangle_A}{\langle v_j|v_j\rangle_A}v_j.$$

Következmény. *A Propozíció szerint* $v_{k+1}\in\mathbb{R}\left[e_{k+1}-P^{(A)}_{\mathrm{Span}\{v_1,\dots,v_k\}}e_{k+1}\right]$, *azaz mindig* $v_{k+1}=\alpha_{k+1}e_{k+1}+\sum\limits_{j=1}^{n}\alpha_j^{(k+1)}v_j$ *alakú.*

Algoritmus v_{k+1} (és így $x_{k+1}=x_k+v_{k+1}$) kiszámítására. Vegyük a

$$\widetilde{v}_{k+1}:=e_{k+1}-P^{(A)}_{\mathrm{Span}\{v_1,\dots,v_k\}}e_{k+1}=e_{k+1}-\sum_{j=1}^{k}\frac{\langle e_{k+1}|v_j\rangle_A}{\langle v_j|v_j\rangle_A}v_j,\quad e_{k+1}=-Ax_k-b$$

vektort. Az x_k ponttól ennek az irányában van x_{k+1}, amely egyben a min-helye Φ-nek az $x+\mathbb{R}\widetilde{v}_{k+1}$ egyenesen (hiszen még a nagyobb S_{k+1}-en is min-hely). Azaz

$$v_{k+1}=t_{k+1}\widetilde{v}_{k+1},\quad \text{ahol}\ \ t_{k+1}:=\left[t\mapsto\Phi(x_k+t\widetilde{v}_{k+1})\ \text{min-helye}\right].$$

Mivel $\Phi(x_k+t\widetilde{v}_{k+1})=\frac{1}{2}\langle x_k+t\widetilde{v}_{k+1}|A(x_k+t\widetilde{v}_{k+1})\rangle+\langle b|x_k+t\widetilde{v}_{k+1}\rangle$, egyszerűen

$$\begin{aligned} t_{n+1}&=\left[t:\frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=t}\Phi(x_k+\tau\widetilde{v}_{k+1})=0\right]=\left[t:t\langle\widetilde{v}_{k+1}|A\widetilde{v}_{k+1}\rangle+\langle Ax_k+b|\widetilde{v}_{k+1}\rangle=0\right],\\ v_{k+1}&=-\frac{\langle Ax_k+b|\widetilde{v}_{k+1}\rangle}{\langle\widetilde{v}_{k+1}|A\widetilde{v}_{k+1}\rangle}\widetilde{v}_{k+1}.\end{aligned}$$

Másik megközelítés. (Új koordinátarendszerből szemlélve).
$A\succ 0$ (szigorúan pozitív-definit) mátrix, $\Phi(x):=\frac{1}{2}x^{\mathrm{T}}Ax+b^{\mathrm{T}}x+c$ $(x\in\mathbb{R}^N)$, $\Phi\to\mathrm{MIN}$.
Az A-szerinti $\langle x|y\rangle_A:=\langle Ax|y\rangle$ skalár-szorzattal

$$\begin{aligned}&\Phi(x)=\frac{1}{2}\big\langle x-\widetilde{b}\big|x-\widetilde{b}\big\rangle_A+\frac{1}{2}\big\langle\widetilde{b}\big|\widetilde{b}\big\rangle_A+c,\quad \text{ahol}\ \widetilde{b}:=-A^{-1}b;\\ &\Phi\to\mathrm{MIN}\iff\langle x-\widetilde{b}|x-\widetilde{b}\rangle_A\to\mathrm{MIN}.\end{aligned}$$

Csakhogy itt b ismeretlen.

Emlékeztető. Ha $f:\mathbb{R}^N\to\mathbb{R}$ C^1-síma, és az $S:=a+\sum_{k=1}^{r}\mathbb{R}u_k$ affin altéren az a pont f min-helye, akkor $\nabla f(a)\perp u_1,\dots u_r$.

Lemma. *Legyen* $g(x):=(x-o|x-o)$ $(x\in\mathbb{R}^N)$, *ahol* $(.|.)$ *egy skalár-szorzat* $\mathbb{R}^N$*-en és* $o\in\mathbb{R}^N$. *Ha* $u_1,\dots,u_N$ *egy* $(.|.)$*-ortogonális rendszer, akkor tetszőleges* $x_0\in\mathbb{R}^N$ *kiindulópontból az*

$$x_{k+1}:=\left[g\ \text{min.-helye az}\ \ x_k+\mathbb{R}u_{n+1}\ \ \text{egyenesen}\right]$$

algoritmus mallett $x_k = [g \text{ min.-helye } x_0 + \sum_{j=1}^k \mathrm{I\!R} u_j \text{ felett}] \in o + \sum_{j=1}^k \mathrm{I\!R} u_j$.

Bizonyítás. $x_0 = o + \xi_1 u_1 + \cdots + \xi_N u_N$. Észrevétel (egyszerű koordinátageometria): $x_k = o + \xi_{k+1} u_{k+1} + \cdots + \xi_N u_N \quad (k = 1, \ldots, N)$. Qu.e.d.

Következmény. *Legyen* $\Phi(x) := \frac{1}{2}\big(x\big|x\big) + \big(b\big|x\big)$, *az* $\mathrm{I\!R}^N$ *téren,* $x_0 \in \mathrm{I\!R}^N$, *továbbá legyenek* $e_1, \ldots, e_N \in \mathrm{I\!R}^N$ *tetszőleges lineárisan független vektorok. Ekkor* $k = 1, \ldots, N$ *mellett* x_k*-val jelölve* Φ *min-helyét az* $S_k := x_0 + \sum_{j=1}^k \mathrm{I\!R} e_j$ *affin altéren, az* $x_k - x_{k-1}$ $(k = 1, \ldots, N)$ *vektorok* $(.|.)$*-ortogonális rendszert alkotnak.*

Bizonyítás. Észrevétel: A Φ polinom $x \mapsto \big(x - o\big|x - o\big) + \text{const.}$ alakú. Legyenek $u_1, \ldots, u_N$ az $e_1, \ldots, e_N$ sorozatból $(.|.)$ szerinti Gram-Schmidt ortogonalizálással kapott vektorok. A Lemma alapján $x_k \in o + \sum_{k<j\leq N} \mathrm{I\!R} u_j \quad (k = 1, \ldots, N)$.

Megjegyzés. Fletcher módszerénél $\quad (.|.) = \langle .|. \rangle_A$,

$$
\begin{aligned}
u_{n+1} &= \nabla f(x_n) - \big[\nabla f(x_n)\ \langle .|. \rangle_A\text{-merőleges vetülete } \mathrm{I\!R} u_1 + \cdots + \mathrm{I\!R} u_n\text{-re}\big] = \\
&= \nabla f(x_n) - \big[\nabla f(x_n)\ \langle .|. \rangle_A\text{-merőleges vetülete } \mathrm{I\!R}\nabla f(x_0) + \cdots + \mathrm{I\!R}\nabla f(x_{n-1})\text{-re}\big].
\end{aligned}
$$

Megjegyzés. Gyakorlati alkalmazás: f egy kvantumkémiai rendszer Born-Oppenheimer energia-függvénye, amelyet egy hosszú *fekete doboz*ként kezelendő algoritmus számol ki. Egy lokális minimum-hely olyan környezetében használjuk a konjugált gradiens módszeert, ahol f első két derváltja már konstansnak tekinthető. Túl költséges a 2-odik derivált mátrix kiszámítása. Ehelyett $\langle x|y \rangle_A$ számítható irány szerinti deriválással:

$$
\begin{aligned}
f_y'(x) &= \big\langle \nabla f(x)\big|y \big\rangle = \big\langle \nabla Ax + b\big|y \big\rangle, \\
\langle x|y \rangle_A &= \langle \nabla Ax|y \rangle = f_y'(x + o) - f_y'(0) = \frac{d}{d\tau}\Big|_{\tau=0} \big[f(x + o + \tau y) - f(o + \tau y)\big]
\end{aligned}
$$

tetszőleges o mellett.

Megjegyzés. A konjugált gradiens mószer egy nagyon stabil megoldás $A \ggcurly 0$ esetén az $Ax = b$ egyenletre, mivel $\frac{1}{2}\nabla\big[\langle Ax|x \rangle + \langle b|x \rangle\big] = Ax + b$. Azaz a Flecher-módszer általános $f : \mathrm{I\!R}^N \to \mathrm{I\!R}$ függvény minimalizálái lépéseként nem más, mint egy Newton-iterációs lépés a $\nabla f(x) = 0$ egyenlet megoldására. [Ugyanis ennél $x_{n+1} = x_n - A^{-1}\nabla f(x_n)$ az $A := \nabla^2 f(x_n)$ mátrixszal].

Megjegyzés. A számítások során a gradiens ill. konjugált gradiens vektorok többszöröseit is lehet használni. Ez a numerikus stabilitát javíthatja, vagy pedig a kézi ill. szimbolikus számítást egyszerűsítheti. Az alábbi példában vektorokkal használjuk a következő jelölést: $U \sim V :\iff \exists\, \lambda \neq 0 \ \ V = \lambda U$.

Példa. Az $X_0 := [0, 0, 0]$ origóból indulva mimimalizáljuk az

$$
f(x, y, z) := 4x^2 + 2xy + 2y^2 + 2yz + z^2 + 2z
$$

másodfokú $\mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$ polinomot konjugált-gradiens módszerrel. Mátrix-alak:

$$f := \frac{1}{2}\langle XA|X\rangle - \langle b|X\rangle, \quad \text{ahol} \quad A := \nabla^2 f \equiv \begin{bmatrix} 8 & 2 & 0 \\ 2 & 4 & 2 \\ 0 & 2 & 2 \end{bmatrix}, \quad b := \nabla f(0) = [0, 0, -2],$$

továbbá $\quad \nabla f(X) = XA - b \quad$ az $\quad X := [x, y, z] \quad$ sorvektorral,

$$\nabla f(X) = [8x + 2y, 2x + 4y + 2z, 2y + 2z + 2].$$

<u>1. lépés</u>: $E_1 \sim \nabla f(X_0) = -b = [0, 0, 2], \qquad F_1 := E_1 := [0, 0, 1]$ célszerűen.

$$\begin{aligned} &X_1 := X_0 + t_1 F_1, \quad \text{ahol} \quad t_1 := [f_1 \text{ MIN-helye}], \text{ ahol} \\ &f_1(t) := f(X_0 + tF_1) = f(0, 0, t) = t^2 + 2t, \qquad t_1 = -1, \\ &X_1 = X_0 - F_1 = [0, 0, -1] = -e_1. \end{aligned}$$

<u>2. lépés</u>: $E_2 \sim \nabla f(X_1) = [0, -2, 0], \quad$ célszerűen $E_2 := [0, 1, 0] = e_2$.
$F_2 \sim E_2 - \{E_2\ A\text{-merőleges vetülete } \mathbb{R}F_1\text{-re}\}$.

$$\begin{aligned} F_2 &\sim E_2 - \mathrm{pr}^A_{\mathbb{R}F_1}(E_2) = E_2 - \frac{\langle E_2|F_1\rangle_A}{\langle F_1|F_1\rangle_A} F_1 = E_2 - \frac{E_2 A F_1^{\mathrm{T}}}{F_1 A F_1^{\mathrm{T}}} F_1 = \\ &= e_2 - \frac{e_2 A e_3^{\mathrm{T}}}{e_2 A e_3^{\mathrm{T}}} e_3 = e_2 - \frac{A_{23}}{A_{33}} e_3 = e_2 - \frac{2}{2} e_3, \text{ célszerűen } F_2 := [0, 1, -1]; \\ X_2 &:= X_1 + t_2 F_2, \quad \text{ahol} \quad t_2 := [f_2 \text{ MIN-helye}], \text{ ahol} \\ f_2(t) &:= f(X_1 + tF_2) = f(0, t, -1 - t) = t^2 - 2t - 1, \qquad t_2 = 1, \\ X_2 &= X_1 + F_2 = -e_3 + (e_2 - e_3) = [0, 1, -2]. \end{aligned}$$

<u>3. lépés</u>: $E_3 \sim \nabla f(X_2) = [2, 0, 0], \quad$ célszerűen $E_3 := [1, 0, 0] = e_1$.
$F_3 \sim E_3 - \{E_3\ A\text{-merőleges vetülete } (\mathbb{R}F_1 + \mathbb{R}F_2)\text{-re}\}$.

$$\begin{aligned} F_3 &\sim E_3 - \mathrm{pr}^A_{\mathbb{R}F_1}(E_3) - \mathrm{pr}^A_{\mathbb{R}F_2}(E_3) = E_3 - \frac{E_3 A F_1^{\mathrm{T}}}{F_1 A F_1^{\mathrm{T}}} F_1 - \frac{E_3 A F_2^{\mathrm{T}}}{F_2 A F_2^{\mathrm{T}}} F_2 = \\ &= e_1 - \frac{e_1 A e_3^{\mathrm{T}}}{e_3 A e_3^{\mathrm{T}}} e_3 - \frac{e_1 A (e_2 - e_3)^{\mathrm{T}}}{(e_2 - e_3) A (e_2 - e_3)^{\mathrm{T}}} (e_2 - e_3) = \\ &= e_1 - \frac{A_{13}}{A_{33}} e_3 - \frac{A_{12} - A_{13}}{A_{22} - 2A_{23} + A_{33}} (e_2 - e_3) = [1, -1, 1], \text{ célszerűen } F_3 := [1, -1, 1]; \\ X_3 &:= X_2 + t_3 F_3, \quad \text{ahol} \quad t_3 := [f_3 \text{ MIN-helye}], \text{ ahol} \\ f_3(t) &:= f(X_2 + tF_3) = f(t, 1 - t, -2 + t) = 3t^2 + 2t - 2, \qquad t_3 = -\frac{1}{3}, \\ X_3 &= X_2 - \frac{1}{3} F_3 = [0, 1, -2] - \frac{1}{3}[1, -1, 1] = \left[-\frac{1}{3}, \frac{4}{3}, -\frac{7}{3}\right]. \end{aligned}$$

ELLENŐRZÉS: $X_3 A = b$ valóban.

1-DIM UNIMODULÁRIS MIN-KERESÉS

Definíció. Az $I \subset \mathbb{R}$ zárt intervallum, $f : I \to \mathbb{R}$. Az f függvény *unimoduláris*, ha folytonos és pontosan egy minimimum-helye van, amely előtt csökken, utána pedig nő.

$f : I \to \mathbb{R}$ *kvázikonvex* ha $f(x) \le \max\{f(a), f(b)\}\ \ (a \le x \le b,\ a, b \in I)$.

Lemma. *f unimoduláris $\Rightarrow$ kvázikonvex.*

Bizonyítás. Legyen f unimoduláris, $f(x_*) = \min f$, és $a < x < b$. Ha $x_* \in [a, x]$, akkor f nő x után, és így $f(x) \le f(b)$. Ha $x_* \in [x, b]$, akkor f csökken x előtt, és így $f(x) \le f(a)$. Vagyis mindig $f(x) \le \big[f(a), f(b) \text{ valamelyike}\big] \le \max\{f(a), f(b)\}$.

Lemma. *Legyen $f \in B(I, RR)$ kvázikonvex. Ekkor a minimumhelyei egy intervallumot alkotnak. Ha ez az intervallum egyetlen pont, akkor f unimoduláris.*

Bizonyítás. Legyen $f(x) = f(y) = \min f$ és $x < a < y$. Ekkor $f(a) \le \max\{f(x), f(y)\} = \min f$, ahonnan $f(a) = \min f$. Ha $\{a\} = \{x \in I : f(x) = \min f\}$, akkor $x_1 < x_2 < a$ esetén $f(x_2) \le \max\{f(x_1)f(a)\} = f(x_1)$, vagyis f csökken az $I \cap (-\infty, a]$ intervallumon. Mivel $x \mapsto f(-x)$ is kvázikonvex, f nő az $I \cap [a, \infty)$ intervallumon.

Propozíció. *Legyen $\in C(I, \mathbb{R})$ kvázikonvex $J := \{x : f(x) = \min f\}$. Tegyük fel, hogy $[a, b] \subset I$ és $J \cap [a, b] \ne \emptyset$. Ha $a < a_1 < b_1 < b$ és $f(a_1) \le f(b_1)$ akkor $J \cap [a, b_1] \ne \emptyset$. Ha pedig $f(a_1) \ge f(b_1)$ akkor $J \cap [a_1, b] \ne \emptyset$.*

Bizonyítás. Tekintsük az $x > b_1$ pontokat. Ezekkel $f(b_1) \le \max\{f(a_1), f(x)\}$. Mivel pedig $f(a_1) \le f(b_1)$, innen $f(x) \ge f(b_1)$. Tehát f min-helyei balra lehetnek b_1-től: $J \le b_1$. Mivel $J \cap [a, b] \ne \emptyset$, szükségképpen $J \cap [a, b_1] \ne \emptyset$ is.
$f(a_1) \ge f(b_1)$ esetén az állítás $\big[-I \ni x \mapsto f(-x)\big]$-re alkalmazva jön.

LAGRANGE- ÉS HERMITE INTERPOLÁCIÓK

Lagrange interpoláció

Példa. Gép: $1 \mapsto 1, 2 \mapsto 2, \ldots, 100 \mapsto 100$, azonban $101 \mapsto 33$. Van-e egyszerű képlet, amely ezt megvalósítja?

Motiváció. Függvényt egyszerű közelítő képlet kevés adott érték alapján.

Tétel (Lagrange).*Legyenek* $x_0 < x_1 < \cdots < x_r$ *és* $y_0, y_1 \ldots, y_r \in \mathbb{R}$ *tetszőlegesen adottak. Ekkor*

$$\exists!\ P \in \mathrm{Pol}_r(\mathbb{R}) \qquad P(x_k) = y_k \quad (k = 0, \ldots, r).$$

Bizonyítás. $$P := \sum_{k=1}^{r} y_k \prod_{j: j\neq k} \underbrace{\frac{x - x_j}{x_k - x_j}}_{\substack{= 1, \text{ ha } x = x_k \\ = 0 \text{ a többi } x_j\text{-re}}} \qquad \text{megfelel.}$$

Tegyük fel, hogy $P, \widetilde{P} \in \mathrm{Pol}_{r-1}$ és $P, \widetilde{P} : x_1 \mapsto y_1, \ldots, x_r \mapsto y_r$. Ekkor

$Q := P - \widetilde{P} : \{x_1, \ldots, x_r\} \mapsto 0.$ Mivel $Q \in \mathrm{Pol}_{r-1}$, $\Longrightarrow Q \equiv 0$.

Következmény. Az $\alpha_0, \ldots, \alpha_r$ ismeretlenű

$$\alpha_0 + \alpha_1 x_k + \ldots + \alpha_r x_k^r = y_k \quad (k = 0, \ldots, r)$$

egyenletrendszer $\det \neq 0$.

Megjegyzés. Van der Monde: $\det\big[x_k^\ell\big]_{k,\ell=0}^r = \prod_{0\leq j<k\leq r}(x_j - x_k)$.

Definíció. Itt $P = P^\Phi$ a $\Phi := \{x_0 \mapsto y_0, \ldots, x_r \mapsto y_r\}$ függvénycsíra *Lagrange-féle interpolációs polinom*ja,

$$\delta_k(x) := \prod_{j\in[0,r]:\ j\neq k} \frac{x - x_j}{x_k - x_j} \qquad (k = 0, \ldots, r)$$

a Φ csíra *iterpolációs alappolinomjai.*

Megjegyzés. 1) Az $x_0 < \cdots < x_r$ feltétel helyett elegendő csak $x_i \neq x_j$ $(i \neq j)$.
2) A konstrukció alkalmazható $\mathbb{R}$ helyett tetszőleges $\mathbb{K}$ test esetén is.
3) A δ_k alappolinomokkal jelenik meg a *Dirac-δ* alapgondolata.
4) Definíció szerint $\mathrm{Pol}(\mathbb{R}) := \big\{[\mathbb{R} \ni x \mapsto a_0 + a_1 x + \cdots + a_r x^r] :\ a_0, \ldots, a_r \in \mathbb{R}\big\}$. Amikor *$r$-edfokú* polinomról beszélünk, röviden $(\leq r)$-edfokú polinomot értünk.
5) Általános $\mathbb{K}$ testnél a $\mathrm{Pol}(\mathbb{K})$ túl kevés függvényből állhat (pl. $\#\mathrm{Pol}(\{0,1\} = 4)$. Itt a formális x változójú $\mathbb{K}[x] := \bigcup_{r=0}^\infty \{\sum_{k=0}^r a_k x^k \ :\ a_0, \ldots, a_r \in \mathbb{K}\}$ polinomgyűrűt használjuk.

Newton-differenciák

Definíció. Legyenek $x_0, \ldots, x_r$ különböző számok, $\{x_0, \ldots, x_r\} \subset X \subset \mathbb{R}$ és $f : X \to \mathbb{R}$. Ekkor az x változószimbólummal

$$f\big(x_0, x_1 \ldots, x_r \big| x\big) = \Big[\{x_0 \mapsto f(x_0), \ldots, x_r \mapsto f(x_r)\} \text{ interpol. polinomja}\Big].$$

Polinomfejlesztés. $f(x_0|x), f(x_0, x_1|x), \ldots, f(x_0, \ldots, x_r|x)$ rendre $0, 1, \ldots, r$-edfokú polinomok,

$$f(x_0, \ldots, x_k|x_0) = f(x_0),\ f(x_0, \ldots, x_k|x_1) = f(x_1), \ldots, f_k(x_0, \ldots, x_k|x_k) = f(x_k).$$

Speciálisan $f(x_0|x) \equiv f(x_0)$. Ha pedig $f(x_0, \ldots, x_{k-1}|x)$ ismert, akkor

$$f(x_0, \ldots, x_k|x) = f(x_0, \ldots, x_{k-1}|x) + A_k(x - x_0) \cdots (x - x_{k-1}),$$

ahol A_k az $f(x_0, \ldots, x_{k-1}|x_{k+1}) + A_k \prod_{j=0}^{k-1} (x_k - x_j) = f(x_k)$ egyenlet megoldása.

Definíció. A fenti A_k együtthatók jelölése: $f(x_x, \ldots, x_k)$. Azaz

$$f\big(x_0, \ldots, x_r \big| x\big) = f(x_0) + \sum_{k=1}^{r} f(x_0, \ldots, x_k) \prod_{j=0}^{k-1} (x - x_j).$$

Elnevezés: $f(x_0, \ldots, x_k)$ f-nek az $[x_0, x_1 \ldots]$ sorozat szerinti k-adik *Newton-differenciája.*

Megjegyzés. 1) Tetszőleges π permutációra $f(x_0, \ldots, x_n|x) \equiv f(x_{\pi(0)}, \ldots, x_{\pi(n)}|x)$. Ezért $f(x_0, \ldots, x_n|x) = f(x_{\pi(0)}, \ldots, x_{\pi(n)}|x)$ is.
2) $f(x_0, \ldots, x_n) = \big[f(x_0, \ldots, x_n|x)\text{-ben } x^n \text{ együtthatója}\big] = \dfrac{1}{n!} \dfrac{d^n}{dx^n} f(x_0, \ldots, x_n|x).$

Tétel. (Newton-típusú rekurzív osztott differencia formula).

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

Bizonyítás. Ennek hátterében:

$$(*) \qquad f\big(x_k, \ldots, x_{r+1} \big| x\big) = \frac{(x - x_k) f\big(x_{k+1}, \ldots, x_{r+1} \big| x\big) - (x - x_{r+1}) f\big(x_k, \ldots, x_r \big| x\big)}{x_{r+1} - x_k}.$$

Bizonyítás: Az $x := x_j$ $(k \le j \le r+1)$ helyeken a [jobb oldali tört számlálója]$=$ $(x_j - x_k) f(x_j) - (x_j - x_{r+1}) f(x_j) = (x_{r+1} - x_k) f(x_j)$, még $j = k, r+1$ esetén is. Vagyis [jobb oldal]$(x_j) = f(x_j)$ $(j = k, \ldots, r+1)$. Másrészt a [jobb oldal] egy $(r-k)$-adfokú polinom, ezért $=$ éppen az f függvény $x_k, \ldots, x_{r+1}$ feletti Lagrange-féle interpolációs polinomjával.

A tétel állítása $(*)$ alapján azonnal adódik a következő észrevételből: Mindig

$$f(x_p,\dots,x_q)=\Big[f\big(x_p,\dots,x_q\big|x\big)\ \text{főegyütthatója}\Big].$$

Algoritmus. [Newton-féle osztott–differencia-háromszög].

$$f\big(\big(x_0,\dots,x_n\big|x\big)=\sum_{k=0}^{n}a_{kk}(x-x_0)\cdots(x-x_{k-1})$$

az $A:=\big[a_{ij}\big]_{0\le i\le j\le n}$ felső-trianguláris mátrix segítségével, ahol

$a_{00}:=f(x_0),\ a_{01}:=f(x_0),\ \dots\ ,\ a_{0n}:=f(x_n);$
rendre az $i=1,2,\dots,n$ indexű sorok kialakítása:

$$a_{i,i+s}:=\frac{a_{i-1,i+s}-a_{i-1,i+s-1}}{x_{i+s}-x_s}\qquad(s=0,\dots,n-i).$$

Példa. $\cos\big(-\frac{\pi}{2},-\frac{\pi}{3},0,\frac{\pi}{3},\frac{\pi}{2}\big|x\big)=?$

A nevezők mátrixa: $\begin{bmatrix}-\pi/2 & -\pi/3 & 0 & \pi/3 & \pi/2\\ & \pi/6 & \pi/3 & \pi/3 & \pi/6\\ & & \pi/2 & 2\pi/3 & \pi/2\\ & & & 5\pi/6 & 5\pi/6\\ & & & & \pi\end{bmatrix}.$

$$A=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & 1/2 & 1 & 1/2 & 0\\ & \frac{1/2}{\pi/6} & \frac{1/2}{\pi/3} & -\frac{1/2}{\pi/3} & -\frac{1/2}{\pi/6}\\ & & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{2\pi/3} & \frac{*}{\pi/2}\\ & & & \frac{*}{5\pi/6} & \frac{*}{5\pi/6}\\ & & & & \frac{*}{\pi}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & 1/2 & 1 & 1/2 & 0\\ & \mathbf{3}/\pi & 3/(2\pi) & -3/(2\pi) & -3/\pi\\ & & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{2\pi/3} & \frac{*}{\pi/2}\\ & & & \frac{*}{5\pi/6} & \frac{*}{5\pi/6}\\ & & & & \frac{*}{\pi}\end{bmatrix}=$$

$$=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & 1/2 & 1 & 1/2 & 0\\ & \mathbf{3}/\pi & 3/(2\pi) & -3/(2\pi) & -3/\pi\\ & & \frac{-3/(2\pi)}{\pi/2} & \frac{-3/\pi}{2\pi/3} & \frac{-3/(2\pi)}{\pi/2}\\ & & & \frac{*}{5\pi/6} & \frac{*}{5\pi/6}\\ & & & & \frac{*}{\pi}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & 1/2 & 1 & 1/2 & 0\\ & \mathbf{3}/\pi & 3/(2\pi) & -3/(2\pi) & -3/\pi\\ & & -\mathbf{3}/\pi^{\mathbf{2}} & -9/(2\pi^2) & -3/\pi^2\\ & & & \frac{*}{5\pi/6} & \frac{*}{5\pi/6}\\ & & & & \frac{*}{\pi}\end{bmatrix}=$$

$$=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & 1/2 & 1 & 1/2 & 0\\ & \mathbf{3}/\pi & 3/(2\pi) & -3/(2\pi) & -3/\pi\\ & & -\mathbf{3}/\pi^{\mathbf{2}} & -9/(2\pi^2) & -3/\pi^2\\ & & & \frac{-3/(2\pi^2)}{5\pi/6} & \frac{3/(2\pi^2)}{5\pi/6}\\ & & & & \frac{*}{\pi}\end{bmatrix}=\begin{bmatrix}\mathbf{0} & 1/2 & 1 & 1/2 & 0\\ & \mathbf{3}/\pi & 3/(2\pi) & -3/(2\pi) & -3/\pi\\ & & -\mathbf{3}/\pi^{\mathbf{2}} & -9/(2\pi^2) & -3/\pi^2\\ & & & -\mathbf{9}/(\mathbf{5}\pi^{\mathbf{3}}) & 9/(5\pi^3)\\ & & & & \mathbf{18}/(\mathbf{5}\pi^{\mathbf{4}})\end{bmatrix}.$$

$$\begin{aligned}\cos\Big(-\frac{\pi}{2},-\frac{\pi}{3},0,-\frac{\pi}{3},-\frac{\pi}{2}\Big|x\Big)&=0+\frac{3}{\pi}\Big(x+\frac{\pi}{2}\Big)-\frac{3}{\pi^2}\Big(x+\frac{\pi}{2}\Big)\Big(x+\frac{\pi}{3}\Big)-\\&\quad-\frac{9}{5\pi^3}\Big(x+\frac{\pi}{2}\Big)\Big(x+\frac{\pi}{3}\Big)x+\frac{18}{5\pi^4}\Big(x+\frac{\pi}{2}\Big)\Big(x+\frac{\pi}{3}\Big)x\Big(x-\frac{\pi}{3}\Big)=\\&=\frac{36}{10}\Big(\frac{x}{\pi}\Big)^4-\frac{49}{10}\Big(\frac{x}{\pi}\Big)^2+1\end{aligned}$$

Példa. Az előbbi a cos függvény $\cos x = g(x^2)$, $g(x) := \cos\sqrt{x}$ szimmetriája alapján:

$\cos\big(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{3}, 0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\big|x\big) = g\big(0, \frac{\pi^2}{9}, \frac{\pi^2}{4}\big|x^2\big)$. Ennek számítása

A nevezők mátrixa: $\begin{bmatrix} 0 & \pi^2/9 & \pi^2/4 \\ & \pi^2/9 & 5\pi^2/36 \\ & & \pi^2/4 \end{bmatrix}$. Az osztott differenciák mátrixai:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1/2 & 0 \\ & \frac{-1/2}{\pi^2/9} & \frac{-1/2}{\pi^2/4} \\ & & \frac{*}{\pi^2/4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1/2 & 0 \\ & -\mathbf{9}/(\mathbf{2}\pi^{\mathbf{2}}) & -2/\pi^2 \\ & & \frac{5/2\pi^2}{\pi^2/4} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1/2 & 0 \\ & -\mathbf{9}/(\mathbf{2}\pi^{\mathbf{2}}) & -2/\pi^2 \\ & & \mathbf{10}/\pi^{\mathbf{4}} \end{bmatrix}.$$

Innen $\cos\Big(-\frac{\pi}{2}, -\frac{\pi}{3}, 0, \frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{2}\Big|x\Big) = g\Big(0, \frac{\pi^2}{9}, \frac{\pi^2}{4}\Big|x^2\Big) =$

$$= 1 - \frac{9}{2\pi^2}\Big(x^2 - \frac{\pi^2}{9}\Big) + \frac{10}{2\pi^4}\Big(x^2 - \frac{\pi^2}{9}\Big)\Big(x^2 - \frac{\pi^2}{4}\Big) =$$

$$= \frac{36}{10}\Big(\frac{x}{\pi}\Big)^4 - \frac{49}{10}\Big(\frac{x}{\pi}\Big)^2 + 1 \ .$$

Általános Rolle-tétel

Definíció. Az m-szer folytonosan differenciálható $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ függvénynek az $a \in \mathbb{R}$ hely $m+1$*-szeres gyöke*, ha a itt derváltjaira $f^{(\ell)}(a) = 0$ $(\ell = 0, \ldots, m)$.
[0-szor folytonosan differenciálható $\equiv$ folytonos; a 0. derivált $f^{(0)} \equiv f$.]

Tétel. *Ha $m_0, \ldots, m_r \in \mathbb{Z}_0$, és $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ egy $(m_0 + \ldots + m_r - 1)$-szer folytonosan differenciálható függvény, amelynek az $x_0 < \cdots < x_r$ pontok rendre $m_0, \ldots, m_r$-szeres gyökhelyei, akkor*

$$\exists\ x_* \in [x_0, x_r] \qquad f^{(m_0 + \cdots + m_r - 1)}(x_*) = 0 \ .$$

Következmény. *Ha a $g : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ függvény n-szer folytonosan differenciálható, és $g(x_0) = \cdots = g(x_n) = 0$ (ahol $x_0 < \cdots < x_n$), akkor $\exists\ x_* \in [x_0, x_n]$ $g^{(n)}(x_*) = 0$.*

Newton-differenciák deriváltként, a Lagrange-interpoláció képlethibája

Alkalmazzuk az előbbieket az $f(x_0, \ldots, x_n|x)$ interpolációs polinomok

$$\mathbf{E}f(x_0, \ldots, x_n|x) := f(x) - f(x_0, \ldots, x_n|x) \qquad (x \in \mathbb{R})$$

*hibafüggvény*eire, amelyek az eredetitől való eltérést mutatják.

Észrevétel: $\mathbf{E}f(x_0, \ldots, x_n|x_k) = 0$ $(k = 1, \ldots, n)$. Ha tehát f n-szer folytonosan differenciálható, akkor valamely $x_* \in [x_0, x_n]$ helynél $\frac{d^n}{dx^n}\Big|_{x=x_*}\mathbf{E}f(x_0, \ldots, x_n|x) = 0$. Azaz itt

$$f^{(n)}(x_*) = \frac{d^n}{dx^n}\Big|_{x=x_*} f(x_0, \ldots, x_n|x) = n!f(x_0, \ldots, x_n),$$

mivel $f(x_0,\dots,x_n|x)$-ben az $f(x_0,\dots,x_n)$ együtthatójú x^n-es főtag n-edik deriváltja $\equiv n!f(x_0,\dots,x_n)$, az alacsonyabb fokszámú többi tagok n-edik deriváltja pedig $\equiv 0$. Innen azonnal következik az alábbi két fontos állítás.

Tétel. *Tegyük fel, hogy az $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ függvény n-szer folytonosan differenciálható. Ekkor*

1) *az n-edik Newton-differenciák* $f(x_0,\dots,x_n)=\dfrac{1}{n!}f^{(n)}(\underbrace{\vartheta_{x_0,\dots,x_n}}_{\in[x_0,x_n]})$ *alakúak,*

2) *a képlethiba bármely $x\in\mathbb{R}$ helyen feírható mint*

$$\mathbf{E}f(x_0,\dots,x_{n-1}|z)=\frac{1}{n!}f^{(n)}(\underbrace{\vartheta_{x_0,\dots,x_{n-1},z}}_{\in[\min\{x_0,z\},\max\{x_n,z\}]})\big(z-x_0\big)\cdots\big(z-x_{n-1}\big),$$

3) *bármely véges zárt I intervallumon, $x_0,\dots,x_{n-1}\in I$ esetén, a $\|\phi\|_I:=\max_{x\in I}|\phi(x)|$ $\big(\phi\in\mathcal{C}(\mathbb{R})\big)$ függvény-normával*

$$\big\|\mathbf{E}f(x_0,\dots,x_{n-1}|\cdot)\big\|_I\le\frac{1}{n!}\big\|f^{(n)}\big\|_I\max_{x\in I}\prod_{k=0}^{n-1}\big|x-x_k\big|\ .$$

Bizonyítás. 1) Láttuk. 3) azonnal jön 2)-ből. 2) A $z:=x_n$ helyen

$$\begin{aligned}&\mathbf{E}f(x_0,\dots,x_{n-1}|z)=f(z)-f(x_0,\dots,x_{n-1}|z)=\\&=f(x_0,\dots,x_{n-1},x_n|z)-f(x_0,\dots,x_{n-1}|z)=f(x_0,\dots,x_n)(z-x_0)\cdots(z-x_{n-1})=\\&=f(x_0,\dots,x_{n-1},z)\prod_{k=0}^{n-1}(z-x_k)\overset{1)}{=}\frac{1}{n!}f(x_0,\dots,x_{n-1},z)\prod_{k=0}^{n-1}(z-x_k).\end{aligned}$$

Példa. Mennyire közelíti a cos függvényt a $\big[-\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2}\big]$ intervallumon a $-\frac{\pi}{2},-\frac{\pi}{3},0,\frac{\pi}{3},\frac{\pi}{2}$ pontokkal vett Lagrange-interpolációs polinomja? Jobban, mint **0.01**: ugyanis 3) szerint

$$\max_{|x|\le\pi/2}\Big|\mathbf{E}\cos\Big(-\frac{\pi}{2},-\frac{\pi}{3},0,\frac{\pi}{3},\frac{\pi}{2}\Big|x\Big)\Big|\le\frac{1}{5!}\max_{|x|\le\pi/2}\Big|\underbrace{\cos^{(5)}x}_{-\sin x}\Big|=\frac{1}{120},$$

ugyanis $\max_{|x|\le\pi/2}\big|(x+\pi/2)(x+\pi/3)x(x-\pi/3)(x-\pi/2)\big|=0.98\ldots<1.$

Hermite interpoláció $\mathbb{R}$-en Lagrange-interpoláció limeszeként

Definíció. Legyen $f:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ egy valós függvény, $x_,\dots,x_n\in\mathbb{R}$ páronként különböző pontok, $m_0,\dots,m_n\in\mathbb{N}$ pedig pozitív egész számok. Ezekkel

$$\begin{aligned}&f\big(x_0^{[m_0]},x_1^{[m_1]},\dots,x_r^{[m_r]}\big|x\big):=\\&\qquad:=\lim_{t\searrow 0}f\Big(\underbrace{x_0,x_0{+}t,\dots,x_0{+}(m_0{-}1)t}_{m_0},\dots,\underbrace{x_n,x_n{+}t,\dots,x_n{+}(m_n{-}1)t}_{m_n}\Big|x\Big).\end{aligned}$$

Tétel. *Ha rendre $k = 1, \ldots, n$ esetén az f függvény $(m_k - 1)$-szer folytonosan differenciálható valamely x_k körüli I_k intervallumon, akkor $f\big(x_0^{[m_0]}, x_1^{[m_1]}, \ldots, x_r^{[m_r]} \big| x\big)$ minden $x \in \mathbb{R}$ helyen jól-definiált, és pontosan az az egyedüli $(m-1)$-edfokú polinom, amelynek d-edik deriváltja az x_k helyen megegyezik f-ével $\big(k = 0, \ldots, n$ és $d = 0, \ldots, m_k - 1$ mellett$\big)$.*

Bizonyítás. Vezessük be a következő jelöléseket: $m := m_0 + \cdots + m_n$,

$$\Big(y_0^t, \ldots, y_m^t\Big) := \Big(\underbrace{x_0, x_0+t, \ldots, x_0+(m_0-1)t}_{m_0}, \ldots, \underbrace{x_n, x_n+t, \ldots, x_n+(m_n-1)t}_{m_n}\Big).$$

Vehető olyan $\varepsilon > 0$, hogy $t \in (0, \varepsilon)$ esetén az $y_0^t, \ldots, y_m^t$ pontok páronként különbözők, és $x_k, x_k + t, \ldots, x_k + (m_k - 1)t \in I_k$ $(k = 0, \ldots, n)$. Tudjuk: ekkor

$$f\big(y_0^t, \ldots, y_m^t \big| x\big) = f(y_0^t) + \sum_{i=1}^{m-1} a_{ii}^t \prod_{k=0}^{i-1} (x - x_k),$$

ahol az a_{ii}^t együtthatók a felső-trianguláris

$$A^t := \Big[a_{ij}^t\Big]_{0 \le i \le j \le m}, \qquad a_{0,j}^t := f(y_j^t), \quad a_{i,j}^t := \frac{a_{i-1,j}^t - a_{i-1,j-1}^t +}{y_j^t - y_{j-i}^t}$$

Newton-differencia mártix átlóbeli elemei. Ráadásul mindig

$$a_{i,j}^t = f(y_{j-i}^t, \ldots, y_j^t) = \frac{f^{(i)}\big(\vartheta_{y_{j-i}^t, \ldots, y_j^t}\big)}{i!}.$$

Mivel f $(m_k - 1)$-szer folytonosan differenciálható az x_k pont körül, $t \searrow 0$ esetén

$$y_{j-i}^0 = y_{j-i+1}^0 = \cdots = y_j^t = x_k \;\Rightarrow\; y_{j-i}^0, y_{j-i+1}^0, \ldots, y_j^t \to x_k \;\Rightarrow\; a_{i,j}^t \to f^{(i)}(x_k).$$

Innen i-szerinti indukcióval azonnal következik az $a_{i,j}^t := \frac{a_{i-1,j}^t - a_{i-1,j-1}^t +}{y_j^t - y_{j-i}^t}$ rekurzió miatt az összes $a_{i,j}^t$ $0 \le i \le j \le m$ együtthatók konvergenciája alkalmas $a_{i.j}$ értékekhez:

$$a_{i,j}^t \to a_{i,j} \quad (t \searrow 0), \quad \text{ahol } a_{i,j} := \begin{cases} f^{(i)}(x_k) & \text{ha } y_{j-i}^0 = y_j^0 = x_k, \\ \dfrac{a_{i-1,j} - a_{i-1,j-1}}{y_j^0 - y_{j-i}^0}, & \text{ha } y_{j-1}^0 \ne y_j^0. \end{cases}$$

Definíció. Összhangban a Lagrange-esettel, a fenti $a_{i,j}$ együttható jelölése

$$f\big(x_k^{[d]}, x_{k+1}^{[m_{k+1}]}, \ldots, x_{\ell-1}^{[m_{\ell-1}]}, x_\ell^{[s]}\big) := a_{i,j}, \quad \text{ha} \quad y_{j-i}^t = x_k + (m_k - d)t,\ y_j^t = x_\ell + st.$$

Elnevezés: $f(x_0^{[m_0]}, \ldots, x_0^{[m_0]} | x)$ az f függvény *Hermite-interpolációs polinom*ja m_0-szoros x_0, $\ldots$, m_n-szeres x_n *csomópont*okkal.

Algoritmus. Newton-differencia mátrixszal. Kiindulás: kitöltjük $f^{(i)}(x_k)/i!$ értékekkel az $y_j^0 = y_i^0$ $(i \le j)$ indexpárú helyeket.

Példa. $\cos\big(0^{[3]}, \big(\frac{\pi}{2}\big)^{[2]}\big|x\big) = 1 + [?]x + [?]x^2 + [?]x^2\big(x - \frac{\pi}{2}\big) + [?]x^2\big(x - \frac{\pi}{2}\big)^2.$

$$\text{Nevezők:}\ \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \pi/2 & \pi/2 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \pi/2 & \mathbf{0} \\ & & \mathbf{0} & \pi/2 & \pi/2 \\ & & & \pi/2 & \pi/2 \\ & & & & \pi/2 \end{bmatrix}. \quad \text{Kiindulás:}\ \begin{array}{r} \cos \longrightarrow \\ \cos' \longrightarrow \\ \cos''/2! \rightarrow \\ [\cos^{(3)}/3!] \\ [\cos^{(4)}/4!] \end{array} \begin{bmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{1} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \frac{*}{\pi/2} & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{\pi/2} \\ & & & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{\pi/2} \\ & & & & \frac{*}{\pi/2} \end{bmatrix}$$

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \frac{-1}{\pi/2} & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{\pi/2} \\ & & & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{\pi/2} \\ & & & & \frac{*}{\pi/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -2/\pi & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & \frac{-2/\pi}{\pi/2} & \frac{-1+2/\pi}{\pi/2} \\ & & & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{\pi/2} \\ & & & & \frac{*}{\pi/2} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -2/\pi & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & -4/\pi^2 & (4-2\pi)/\pi^2 \\ & & & \frac{*}{\pi/2} & \frac{*}{\pi/2} \\ & & & & \frac{*}{\pi/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -2/\pi & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & -4/\pi^2 & (4-2\pi)/\pi^2 \\ & & & \frac{-4/\pi^2+1/2}{\pi/2} & \frac{4-2\pi+4}{\pi^3/2} \\ & & & & \frac{*}{\pi/2} \end{bmatrix} =$$

$$= \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -2/\pi & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & -4/\pi^2 & (4-2\pi)/\pi^2 \\ & & & \frac{\pi^2-8}{\pi^3} & \frac{2-2\pi}{\pi^3/2} \\ & & & & \frac{*}{\pi/2} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{1} & 1 & 1 & 0 & 0 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & -2/\pi & \mathbf{-1} \\ & & \mathbf{-1/2} & -4/\pi^2 & (4-2\pi)/\pi^2 \\ & & & (\boldsymbol{\pi^2} - \mathbf{8})/\boldsymbol{\pi^3} & \frac{2-2\pi}{\pi^3/2} \\ & & & & (\boldsymbol{\pi^3} - \mathbf{32})/\boldsymbol{\pi^4} \end{bmatrix}.$$

$$\cos\left(0^{[3]}, \left(\frac{\pi}{2}\right)^{[2]} \middle| x\right) = 1 - \frac{1}{2}x^2 + \frac{\pi^2-8}{\pi^3}x^2\left(x - \frac{\pi}{2}\right) + \frac{\pi^3-32}{\pi^4}x^2\left(x - \frac{\pi}{2}\right)^2 =$$
$$= \frac{\pi^3-32}{\pi^4}x^4 + \frac{\pi^2+24}{\pi^3}x^3 + \frac{\pi^3-4\pi^2-16}{\pi^2}x^2 + 1\ .$$

Megjegyzés. 1) $f(a^{[m]}|x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{f^{(k)}(a)}{k!}(x-a)^k$ f m-edfokú Taylor-polinomja a körül.
2) Tetszőleges $v_k^{(0)}, \dots, v_k^{(m_k-1)}$ $(k = 0, \dots, n)$ számokhoz van olyan $p \in \mathrm{Pol}_{m_0+\dots+m_n}(\mathbb{R})$ Hermite-polinom, amelyre $p^{(d)}(x_k) = v_k^{(d)}$ $(\forall\, k, d)$. Megfelel $p(x) := f(x_0^{[m_0]}, \dots, x_n^{[m_n]}|x)$, ahol $f(x) := \sum_{d=0}^{m_k-1}(x-x_k)^d/d!$ az I_k intervallumokon.
3) A hibabecslés azonnal adódik az $f\big(x_0^{[m_0]}, \dots, x_n^{[m_n]}\big|x\big) = \lim_{t\searrow 0} f(y_0^t, \dots, y_m^t|x)$ relációból:
Ha I véges zárt intervallum, $f \in \mathcal{C}^{m_0+\dots+m_m}(I)$ és $x_0, \dots, x_n \in I$, akkor

$$\Big|f(z) - f\big(x_0^{[m_0]}, \dots, x_n^{[m_n]}\big|z\big)\Big| \le \frac{1}{(m_0 + \cdots m_n)!}\big\|f^{(m_0+\dots+m_n)}\big\|_I \prod_{k=0}^{n} \big|z - x_k\big|^{m_k} \qquad (z \in I).$$

Gyakorlat. $\big[0, \frac{\pi}{2}\big]$ fölött $\cos\big(0^{[3]}, \big(\frac{\pi}{2}\big)^{[2]}\big|x\big)$ a $\cos x$ függvényt **0.005**-nél jobban közelíti.

Hermite-interpolációs sorozatok általános test fölött

Definíció. Az egész alfejezet során $\mathbb{K}$ tetszőleges χ karakterisztikájú *kommutatív test*, és

$$\mathbb{K}[x] := \bigcup_{n=0}^{\infty} \Big\{ \text{ formális } p(x) = \sum_{k=0}^{n} c_k x^k \ (c_0, c_1, \ldots, c_n \in \mathbb{K};\ n \in \mathbb{Z}_+) \text{ kifejezések} \Big\} \,.$$

Egy $p \in \mathbb{K}[x]$ polinom *Taylor-sor*a az $a \in \mathbb{K}$ pontoknál $p = p(x) = \sum_{k=0}^{n} p|_a^k \, (x-a)^k$, ahol

$$p|_a^k := \Big[\ x^k \text{ együtthatója } p(x+a) := \sum_{\ell=0}^{n} c_\ell (x+a)^\ell\text{-ben}\Big] = \sum_{\ell=k}^{n} \binom{\ell}{k} c_\ell \, a^{\ell-k}.$$

Ha $\chi \neq 0$, itt $\binom{\ell}{k} := \mathrm{mod}_\chi \# \Big\{ \{1, \ldots, \ell\}\ k\text{-elemű részhalmazai} \Big\}$ $\mathbb{K}$-ban.

Példa. $\mathbb{K} := \mathbb{Z}_2 = \{0,1\}$-nél $\chi = 2$, és $1 + x^3$ 1-körüli Taylor-sora $\sum_{k=0}^{3} (x-1)^k$.

Megjegyzés. 1) $\sum_{k=0}^{n} c_k x^k$ *nem azonos a* $\mathbb{K} \ni \xi \mapsto \sum_{k=0}^{n} c_k \xi^k$ *függvénnyel.*
Motiváció: Szemben a valós esettel, pl. a $\mathbb{K} := \mathbb{Z}_2 = \{0,1\}$ 2-elemű testnél mindössze 4 függvény van: $\{0 \mapsto 0, 1 \mapsto 0\}, \{0 \mapsto 0, 1 \mapsto 1\}, \{0 \mapsto 1, 1 \mapsto 0\}, \{0 \mapsto 1, 1 \mapsto 1\}$.

2) Bár a formális $p^{(m)}(x) = \sum_{k=m}^{n} k(k-1)\cdots(k-m+1) c_k x^{k-m}$ deriváltak jól-definiáltak, a $\chi := \mathrm{char}(\mathbb{K}) \neq 0$ karakterisztikájú testeknél (pl. ha $\mathbb{K}$ véges), $\big[x^k\big]^{(m)} = 0$ ha $m \geq \chi$. Ugyanis ilyenkor $\mathbb{K}$-ban $k(k-1)\cdots(k-m+1) = \mathrm{mod}_\chi\big(k(k-1)\cdots(k-m+1)\big)$.

3) Pontosan megfelel $p|_a^k$ az $\mathbb{R}$-beli $p^{(k)}(a)/k!$ Taylor-együtthatónak. Ezért ekvivalens módon, a Hermite-interpolációs polinomokat egyérteműen definiáló $p \in \mathrm{Pol}_{m_0 + \cdots + m_n - 1}$, $p^{(d)}(x_k) = v^{(d)}$ $(0 \leq k \leq n,\ 0 \leq d < m_n)$ feltételeket átfogalmazhatjuk a $p|_a^k$ együtthatókra.

Definíció. Ettől kezdve $X := (x_0, x_1, x_2, \ldots)$, $Y := (y_0, y_1, y_2, \ldots)$ tetszőlegesen rögzített $\mathbb{K}$-beli sorozatok. Az általuk meghatározott *n-edrenű Hermite-interpolációs feltételeket* teljesítő polinomok halmaza

$$\mathcal{H}_n^{X,Y} \equiv \mathcal{H}_{x_0, x_1, \ldots, x_n}^{y_0, y_1, \ldots, y_n} := \Big\{ p \in \mathbb{K}[x] : \ p|_{x_i}^{\#\{j<i:\ x_j = x_i\}} = y_i \ \ (i = 0, \ldots, n) \Big\} \,.$$

Példa. $X = (1, 1, 0, 1, 1, 1, 0, \ldots)$. Ekkor
$\mathcal{H}_6^{X,Y} := \big\{ p :\ p(1) = y_0,\, p|_1^1 = y_1,\, p(0) = y_2,\, p|_1^2 = y_3,\, p|_1^3 = y_4,\, p|_1^4 = y_5,\, p|_0^1 = y_6 \big\}$.

Narratíva. A 0 ill. 1 helyeken mérik egy polinom Taylor-együtthatóit, és küldik nekünk egymás után a $0, 1, 2, 3, \ldots$-ik együttható mért értékét. Az i-edikként kapott küldemény az y_i szám, amely x_i-ből jött. Ekkor y_i az x_i helyen mért $\#\{j < i :\ x_j = x_i\}$-edik együttható.

Definíció. Az X sorozat *alappolinom*jai, ill. azok *gyök-multiplicitás*ai

$$\omega_n^X := \prod_{j:\ j<n} (x - x_j), \qquad \nu^X(n,i) := \#\{j:\ j<n,\ x_j = x_i\}.$$

Észrevétel.* Bármely $n, i = 0, 1, \ldots$ esetén

$$\begin{aligned}\omega_n^X &= (x-x_i)^{\nu^X(n,i)} \prod_{\substack{j:j<n,\\ x_j\neq x_i}} \big(\underbrace{x-x_j}_{(x-x_i)+(x_i-x_j)}\big) = \\ &= \big(x-x_i\big)^{\nu^X(n,i)} \Big[\prod_{\substack{j:j<n,\\ x_j\neq x_i}} (x_i-x_j)\Big]\Big[1+(x-x_i)\,\mathrm{pol}(x)\Big].\end{aligned}$$

Speciálisan az x_i pont $\nu^X(n,i)$-szeres gyöke az n-edfokú ω_n^X polinomnak, és így ω_n^X az egyetlen olyan $\leq n$ fokú polinom, amelyre

$$\omega_n^X\Big|_{x_i}^{\nu^X(i,i)} = 0 \quad (i<n), \qquad \omega_n^X\Big|_{x_n}^{\nu^X(n,n)} = \prod_{\substack{j:j<n,\\ x_j\neq x_n}} (x_n - x_j)$$

Polinomfejlesztés. Rekurzióval definiáljuk a következő $h_n^{X,Y} \equiv h_{x_0,\ldots,x_n}^{y_0,\ldots,y_n}$ $(n = 0, 1, \ldots)$ polinom-sorozatot:

$$h_0^{X,Y} := y_0 x^0, \quad h_n^{X,Y} := h_{n-1}^{X,Y} + \gamma_n^{X,Y}\omega_n^X\ , \quad \text{ahol} \quad \gamma_n^{X,Y} := \frac{y_n - h_{n-1}^{X,Y}\Big|_{x_n}^{\nu^X(n,n)}}{\prod_{\substack{j:j<n,\\ x_j\neq x_n}} (x_n - x_j)}\ .$$

Propozíció. *Minden n-re, $h_n^{X,Y}$ az egyetlen $\leq n$ fokú polinom $\mathcal{H}_n^{X,Y}$-ban.*

Bizonyítás. Triviálisan $\{h_0^{X,Y}\} = \{p \in \mathcal{H}_0^{X,Y}\ :\ \deg(p) = 0\}$. Tegyük fel, hogy $\mathcal{H}_n^{X,Y} \neq \emptyset$. Mivel $i < n \leq n$ esetén az x_i pont bármely két $\mathcal{H}_n^{X,Y}$-beli polinom különbségének $\nu^X(n,i)$-szeres gyökhelye,

$$\mathcal{H}_n^{X,Y} = h_n^{X,Y} + \omega_{n+1}^X \mathbb{K}[x].$$

A bizonyítás befejezéseként indukcióval belátjuk, hogy $\mathcal{H}_n^{X,Y} \neq \emptyset$ $(n \in \mathbb{Z}_+)$. Triviálisan $y_0x^0 + (x-x_0)\mathbb{K}[x] = \mathcal{H}_0^{X,Y}$. Tegyük fel, hogy $\mathcal{H}_{n-1}^{X,Y} \neq \emptyset$. Ekkor egy p polinom pontosan akkor tartozik $\mathcal{H}_n^{X,Y}$-ba, ha $p = h_{n-1}^{X,Y} + \omega_n^X q$ valamely $q \in \mathbb{K}[x]$ mellett, és $p|_{x_n}^{\nu^X(n,n)} = y_n$. Itt a $q := \gamma_n^{X,Y} = \gamma_n^{X,Y} x^0$ választással azt kapjuk, hogy $p = h_{n-1}^{X,Y} + \gamma_n^{X,Y}\omega_n^X$, és $p|_{x_n}^{\nu(n,n)} = h_{n-1}^{X,Y}\Big|_{x_n}^{\nu(n,n)} + \gamma_n^{X,Y}\ \omega_n^X\big|_{x_n}^{\nu(n,n)} = h_{n-1}^{X,Y}\Big|_{x_n}^{\nu(n,n)} + \gamma_n^{X,Y} \prod_{\substack{j:j<n,\\ x_j\neq x_n}} (x_n - x_j) = y_n$.

Elnevezés. $h_n^{X,Y}$ $(n = 0, 1, \ldots)$ az (X, Y) adatsorozatok *Hermite-interpolációs* sorozata.

---

* A továbbiakban $\mathrm{pol}(x)$ olyan $\mathbb{K}[x]$-beli polinomot jelöl, amelynek nem kell további tulajdonságait figyelembe vennünk. Konvenció: $\omega_0^X := \prod_\emptyset = 1 = x^0$.

A klasszikus eset algebrai változata

Megjegyzés. A $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ esetben $f(a_1^{[m_1]}, \ldots, a_n^{[m_n]}|x) = h^{X,Y}_{m_1+\cdots+m_n-1}(x)$, ahol $X = \Big(\underbrace{a_1, \ldots, a_1}_{m_1}, \ldots, \underbrace{a_n, \ldots, a_n}_{m_n}, \ldots\Big)$ és $Y = \Big(\frac{f(a_1)}{0!}, \ldots, \frac{f^{(m_1-1)}(a_1)}{(m_0-1)!}, \ldots, \frac{f(a_n)}{0!}, \ldots, \frac{f^{(m_n-1)}}{(m_n-1)!}, \ldots\Big)$.
Itt a $\gamma_i^{X,Y}$ együtthatókat egy Newton-differencia mátrix átló-elemeiként is megkaphatjuk. Ezt a tényt határérték használatával bizonyítottuk. Tiszta algebrai bizonyítás a célunk.

Lemma. *Tegyük fel, hogy* $a \neq \overline{a} \in \mathbb{K}$, $f = \sum_{k=0}^{m} b^{(k)}(x-a)^k + (x-a)^{m+1}\mathrm{pol}(x) \in \mathbb{K}[x]$ *ill.* $\overline{f} = \sum_{k=0}^{m-1} b^{(k)}(x-a)^k + (x-a)^m \mathrm{pol}(x) \in \mathbb{K}[x]$. *Ekkor* $\dfrac{(x-a)\overline{f} - (x-\overline{a})f}{\overline{a}-a} = \sum_{k=0}^{m} b^{(k)}(x-a)^k$.

Bizonyítás. Mivel $\overline{f} = \sum_{k=0}^{m-1} b^{(k)}(x-a)^k + c(x-a)^m + (x-a)^{m+1}\mathrm{pol}(x)$ alakú, fennáll

$$\begin{aligned}
&(x-a)\overline{f} - (x-\overline{a})f = \\
&\quad = (x-a)\overline{f} - (x-a)f + (\overline{a}-a)f = (x-a)(\overline{f}-f) + (\overline{a}-a)f = \\
&\quad = (x-a)\big[(c-b^{(m)})(x-a)^m + (x-a)^{m+1}\mathrm{pol}(x)\big] + \\
&\quad\quad + (\overline{a}-a)\big[b^{(0)} + b^{(1)}(x-a) + \cdots + b^{(m)}(x-a)^m\big] + (x-a)^{m+1}\mathrm{pol}(x) = \\
&\quad = (\overline{a}-a)\big[b^{(0)} + b^{(1)}(x-a) + \cdots + b^{(m)}(x-a)^m\big] + (x-a)^{m+1}\mathrm{pol}(x)\ .
\end{aligned}$$

Tétel. *Legyenek* $a_1, \ldots, a_n$ *különböző elemek* $\mathbb{K}$*-ban. Ekkor az* $A := \big(a_1^{[m_1]}, \ldots, a_n^{[m_n]}\big) \equiv \Big(\underbrace{a_1, \ldots, a_1}_{m_1}, \ldots, \underbrace{a_n, \ldots, a_n}_{m_n}\Big)$ *ill.* $B = \Big(b_0^{(0)}, \ldots, b_0^{(m_0-1)}, \ldots, b_n^{(0)}, \ldots, b_n^{(m_n-1)}\Big)$ *sorozatok* $h_\ell^{A,B} = \sum_{k=0}^{\ell} \gamma_k^{A,B}\omega_k^A$, $\ell = 0, \ldots, m := m_0 + \cdots + m_n - 1$ *Hermite-polinomjainak* $\gamma_k^{A,B}$ *együtthatói a következő* $\Gamma = \big[\Gamma_{i,j}\big]_{i,j=0}^{m}$ *Newton-differencia mátrix főátlóbeli elemei:*

$$\begin{aligned}
\Gamma_{i,j} &:= 0\ , && \text{ha } i > j, \\
\Gamma_{i,j} &:= b_k^{(j-i)}\ , && \text{ha } i \leq j,\ A_{j-i} = A_j = a_k, \\
\Gamma_{i,j} &:= \frac{\Gamma_{i-1,j} - \Gamma_{i-1,j-1}}{A_j - A_{j-i}}\ , && \text{ha } i \leq j,\ A_{j-i} \neq A_j\ .
\end{aligned}$$

Bizonyítás. A $j \geq i$ indexpárok mellett tekintsük az $A|[j-i,j] := (A_{j-i}, \ldots, A_j)$, $B|[j-i,j] := (B_{j-i}, \ldots, A_B)$ adatokhoz tartozó

$$h_{i,j} := h^{B|[j-i,j]}_{A|[j-i,j]} \quad \Big(\equiv h_i^{A|[j-i,j],B|[j-i,j]}\Big)$$

Hermite-polinomokat. Ezel alappolinomjai ill. főegyütthatói legyenek

$$\Omega_{i,j} := \omega_{j-i}^{A|[i,k]} = \prod_{i \leq k < j} (x - A_k), \qquad \Gamma_{i,j} := \big[h_{i,j} \text{ főegyütthatója}\big] = h_{i,j}|_0^{j-i}\ .$$

Sőt tetszőleges $a \in \mathbb{K}$ helynél is $h_{i,j}|_0^{j-i} = \Gamma_{i,j}$. Tudjuk:

$$h_{i,j} = \sum_{k=i}^{j} \Gamma_{i,k} \Omega_{i,k} \qquad (0 \le i \le j \le m).$$

Másrészt a Lemma szerint, valahányszor $A_{j-i} \neq A_j$,

$$h_{i,j} = \frac{(x - A_{j-i})h_{i-1,j} - (x - A_j)h_{i-1,j-1}}{A_j - A_{j-i}} \ .$$

Innen azonnal következik, hogy $\Gamma_{i,j} = \big(\Gamma_{i-1,j} - \Gamma_{i-1,j-1}\big)/(A_j - A_{j-i})$ ilyenkor. A bizonyítás befejezéséhez még csak azt kell észrevenni, hogy

$$A_{j-i} = A_j = a_k \Rightarrow h_{i,j} = \sum_{\ell=0}^{i} b_k^{(\ell)} (x - a_k)^\ell \ .$$

Példa. A $\mathbb{K} := \mathbb{Z}_3 \equiv \{0, 1, 2\}$ testben Newton-differencia mátrixszal megszerkesztjük a $h_6^{A,B}$ hermite-polinomot az $A := (2, 2, 1, 1, 0, 0, 0, \ldots)$, $B := (2, 1, 2, 2, 2, 1, 1, \ldots)$ párhoz. [Műveletek: $\mathbb{Z}_3$-ban: $2 + 2 = 0 - 2 = 2 \cdot 2 = 1$, $1/2 = 0 - 1 = 1 - 2 = 2$].

$$\text{Nevezők:} \begin{bmatrix} . & . & . & . & . & . & . \\ & 0 & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ & & 2 & 0 & 2 & 0 & 0 \\ & & & 2 & 1 & 2 & 0 \\ & & & & 1 & 1 & 2 \\ & & & & & 1 & 1 \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix}. \quad \text{Kiindulás:} \begin{bmatrix} 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ & 1 & . & 2 & . & 1 & 1 \\ & & . & . & . & . & 1 \\ & & & . & . & . & . \\ & & & & . & . & . \\ & & & & & . & . \\ & & & & & & . \end{bmatrix}.$$

$$\text{Newton-diff:} \begin{bmatrix} \mathbf{2} & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 & 2 \\ & \mathbf{1} & 0 & 2 & 0 & 1 & 1 \\ & & \mathbf{1} & 1 & 2 & 2 & 1 \\ & & & \mathbf{0} & 1 & 0 & 1 \\ & & & & \mathbf{1} & 2 & 2 \\ & & & & & \mathbf{1} & 0 \\ & & & & & & \mathbf{2} \end{bmatrix}. \quad \begin{aligned} h_6^{A,B} &= 2 + (x-2) + (x-2)^2 + (x-2)^2(x-1)^2 + \\ &+ (x-2)^2(x-1)^2 x + 2(x-2)^2(x-1)^2 x^2 = \\ &= \mathrm{mod}_3[8 - 11x + 10x^2 - 17x^3 + \\ &\quad +21x^4 - 11x^5 + 2x^6] = \\ &= \mathbf{2 + x + x^2 + x^3 + x^5 + 2x^6}. \end{aligned}$$

Megjegyzés. Valójában matematikai logikai eszközökkel adódik, hogy *a Tétel $\mathbb{R}$-beli érvényessége automatikusan maga után vonja az általános $\mathbb{K}$ testbeli érvényességét.* Vázlat: Számítsuk ki h_A^B-t polinomfejlesztéssel ill. Newton-differencia mátrix alapján. A két eljárást műveletenként pontosan rögzítve kapjuk: bármely x^k terminus együtthatója $R_k\big(a_1, \ldots, a_n, b_1^{(0)}, \ldots, b_n^{(m_n-1)}\big)$ ill. $S_k\big(a_1, \ldots, a_n, b_1^{(0)}, \ldots, b_n^{(m_n-1)}\big)$ alakú, ahol R_k, S_k véges sok $\pm, \cdot, /$ művelettel felépített kifejezések, ahol az osztások nevezője mindig $a_i - a_j$, $i \neq j$ alakú. Vagyis R_k ill. S_k átírható $\widetilde{R}_k\big(a_1, \ldots, a_n, b_1^{(0)}, \ldots, b_n^{(m_n-1)}\big) / \prod_{i<j} (a_i - a_j)^m$ ill. $\widetilde{S}_k / \prod_{i<j} (a_i - a_j)^m$ alakba, ahol $\widetilde{R}_k, \widetilde{S}_k$ már többváltozós polinomok (csak $\pm, \cdot$ műveletekkel).

Tudjuk: a $\mathbb{K} = \mathbb{R}$ esetben minden $a_1, \ldots, a_n, b_1^{(0)}, \ldots, b_n^{(m_n-1)} \in \mathbb{R}$, $a_i \neq a_j$ $(i < j)$ behelyettesítésnél $R_k = S_k$. Következésképpen $\widetilde{R}_k$ ill. $\widetilde{S}_k$ megfelelő együtthatói mind megegyeznek. Ez véges sok, egész számokra érvényes, $\pm, \cdot$ műveletekkel felépített azonosságot jelent. Ezek mod_χ is állnak bármely $\chi \in \{2, 3, \ldots\}$ mellett is, speciálisan $\chi = \mathrm{char}(\mathbb{K})$-nál is, ha ez $\neq 0$. Vagyis az illető azonosságok teljesünek minden $\mathbb{K}$ (kommutatív) testben, ahonnan következik az R_k ill. S_k-ba való $\mathbb{K}$-beli behelyettesítések azonossága.

Probléma. *Hogyan kezelhető a rendezetlen X sorozatok esete?*

Rendezetlen adatsorozatok Hermite-polinomjai Newton-differencia mátrixokkal

Jelölés. $X = (x_0, x_1, \ldots), Y = (y_0, y_1, \ldots)$ rögzített sorozatok; $a^{[m]} := \overbrace{a, a, \ldots, a}^{m-\text{szer}}$;
$A|[i,j] := (a_i, a_{i+1}, \ldots, a_j)$, ha $i \leq j$ és $A = (a_0, a_1, a_2, \ldots)$.

Definíció. Az $(u_0, \ldots, u_n), (v_0, \ldots, v_n)$ pár egy *átrendezés*e $(a_0, \ldots, a_n), (b_0, \ldots, b_n)$, ha valamely $\pi : \{0, \ldots, n\} \leftrightarrow \{0, \ldots, n\}$ permutációval $a_k = u_{\pi(k)}, b_k = v_{\pi(k)}$ $(k = 0, \ldots, n)$. Ez az átrendezés *monoton*, ha van olyan $\alpha_1, \ldots, \alpha_r$ felsorolása $\{u_0, \ldots, u_n\}$ elemeinek, hogy $(a_0, \ldots, a_n) = \big(\alpha_1^{[m_1]}, \ldots, \alpha_r^{[m_r]}\big)$ alakú ($r = \#\{x_0, \ldots, x_n\}$, $\sum_k m_k = n+1$), és emellett $i < j$ és $a_i = a_j = \alpha_k$ esetén mindig $\pi(i) < \pi(j)$.

Példa. $(c, b, a, a, a, c, b), (y_0, y_1, y_2, y_3, y_4, y_5, y_6)$ két monoton átrendezése
$(c, c, b, b, a, a, a), (y_0, y_5, y_1, y_6, y_2, y_3, y_4)$ ill. $(b, b, a, a, a, c, c), (y_1, y_6, y_2, y_3, y_4, y_0, y_5)$.

Megjegyzés. Ha A, B átrendezése $(x_0, \ldots, x_n), (y_0, \ldots, y_n)$-nek, akkor $h_n^{X,Y} = h_n^{A,B}$.
Ha az A, B átrendezés monoton, akkor az előző alfejezet szerint $h_n^{A,B}$ kiszámolható a $G^{A,B} = \text{felső-tr}\big[g_{ij}^{A,B}\big]_{0 \leq i \leq j \leq n}$ $\big(g_{ij}^{A,B} = \gamma_i^{A|[i,j], B|[i,j]}\big)$ Newton-differencia mátrix használatával:

$h_n^{A,B} = \sum\limits_{k<n} g_{kk}^{A,B} \omega_k^A$, ahol $A = (\alpha_1^{[m_1]}, \ldots, \alpha_r^{[m_r]})$, $B = (\beta_1^{(0)}, \ldots, \beta_1^{(m_1)}, \ldots, \beta_r^{(m_r)})$ mellett

0. sor: $\quad g_{0,j}^{A,B} = \beta_k^{(0)}$, ha $a_j = \alpha_k \qquad (j = 0, \ldots, n)$,

i. sor: $\quad g_{i,j}^{A,B} = \beta_k^{(i)}$, ha $a_{j-i} = a_j = \alpha_k \qquad (j = i, i+1, \ldots, n)$,

$$g_{i,j}^{A,B} = \frac{g_{i-1,j}^{A,B} - g_{i-1,j-1}^{A,B}}{\alpha_k - \alpha_\ell}, \text{ ha } a_i = \alpha_k \neq \alpha_\ell = a_{j-i} \qquad (j = i, i+1, \ldots, n).$$

Ennek ellenére a $h_n^{U,V} = \sum_k \gamma_k^{U,V} \prod_{j<k}(x - u_j)$ ill. $h_n^{X,Y} = \sum_k \gamma_k^{X,Y} \prod_{j<k}(x - x_j)$ előállítások tagjai jelentősen mások lehetnek. Cél: a $\big(\gamma_k^{X,Y} : k = 0, 1, \ldots\big)$ sorozat tagjainak egymás utáni kiszámítása egymástól minél kevésbé különböző Newton-differenciákat tartalmazó mátrixokkal.

Lemma. *Legyen $A := (a_0, \ldots, a_n), B := (b_0, \ldots, b_n)$ ill. $C := (c_0, \ldots, c_n), D := (d_0, \ldots, d_n)$ két különböző átrendezése valamely sorozatpárnak. Ekkor* $\gamma_n^{A,B} = \gamma_n^{C,D}$.

Bizonyítás. Tudjuk: $h_n^{A,B} = h_n^{C,D}$. Innen

$$\gamma_n^{A,B} = \big[h_n^{A,B} \text{ főegyütthatója}\big] = \big[h_n^{C,D} \text{ főegyütthatója}\big] = \gamma_n^{C,D}.$$

Következmény. *Ha $n = 0,1,2,\ldots$ mellett $A^{(n)} = \big(a_0^{(n)},\ldots,a_n^{(n)}\big), B^{(n)} = \big(b_0^{(n)},\ldots,b_n^{(n)}\big)$ rendre monoton átrendezése az $(x_0,\ldots,x_n),(y_0,\ldots,y_n)$ párnak, akkor a $G^{A^{(k)},B^{(k)}}$ Newton-differencia mátrixok jobb-alsó elemeivel*

$$h_n^{X,Y} = \sum_{k=0}^{n} \big[G^{A^{(k)},B^{(k)}}\big]_{k,k}\ \omega_k^X \qquad (n = 0,1,\ldots).$$

Definíció. Az $(x_0,\ldots,x_n),(y_0,\ldots,y_n)$ pár *beérkezési monoton átrendezés*e az a (szükségképpen egyedüli) monoton

$$(*) \qquad A = (a_1^{[m_1]},\ldots,a_r^{[m_r]}), \quad B = (b_1^{(0)},\ldots,b_1^{(m_1)},\ldots,b_r^{(0)},\ldots,b_r^{(m_r)})$$

átrendezése, amelynél $a_i \neq a_j$ $(i \neq j)$, és $k = 0,1,\ldots,n$ mellett rendre $\{x_0,\ldots,x_k\} = \{a_1,\ldots,a_{R(k)}\}$, ahol $R(k) := \#\{x_0,\ldots,x_k\}$.

Példa. $(a,b,c,c,c,a,b),(y_0,y_1,y_2,y_3,y_4,y_5,y_6)$ beérk. mon. átrendezése (a,a,b,b,c,c,c), $(y_0,y_5,y_1,y_6,y_2,y_3,y_4)$.

Algoritmus. A $h_n^{X,Y}$ $(n = 0,1,\ldots)$ polinom-sorozatot a Következménynek megfelelően a beérkezési monoton átrendezésekkel konstruáljuk meg. Itt $G^{A^{(n)},B^{(n)}}$ alapján a rákövetkező $G^{A^{(n+1)},B^{(n+1)}}$ Newton-differencia mátrixot kevés módosítással kaphatjuk meg. Ugyanis a Newton-differencia mátrixok soronkénti rekurzív képzési szabályából azonnal adódik az alábbi:

Lemma. *Legyen $(*)$ a $(x_0,\ldots,x_n),(y_0,\ldots,y_n)$ pár beérkezési monoton átrendezése, és jelölje az $(x_0,\ldots,x_{n+1})$, $(y_0,\ldots,y_{n+1})$ pár beérkezési monoton átrendezését $\overline{A},\overline{B}$.*

1) *Ha $x_{n+1} \notin \{a_1,\ldots,a_r\}$, akkor $\overline{A} = (A, y_{n+1})\big(= (a_1^{[m_1]},\ldots,a_r^{[m_r]}, x_{n+1})\big)$, $\overline{B} = (B, y_{n+1})$.*
2) *Ha $x_{n+1} = a_k$, akkor $\overline{A} = (a_1^{[\overline{m}_1]},\ldots,a_r^{[\overline{m}_r]})$, $\overline{B} = (b_1^{(0)},\ldots,b^{(\overline{m}_1)},\ldots,b_r^{(0)},\ldots,b_r^{(\overline{m}_r)})$, ahol $\overline{m}_i = m_i$ $(i \neq k)$ és $\overline{m}_k = m_k + 1$, továbbá $b_k^{(m_k+1)} = y_{n+1}$.*
3) *Az 1) esetben $G^{\overline{A},\overline{B}} = \big[G^{A,B}\big[\begin{smallmatrix} y_{n+1} \\ * \end{smallmatrix}\big]\big]$ alakú, speciálisan $G^{A,B} = \text{felső-tr.}\big[g_{i,j}^{\overline{A},\overline{B}}\big]_{0\le i\le j\le n}$.*
4) *A 2) esetben $m := m_1 + \cdots + m_k - 1$ mellett az $I := \{(i,j) : 1 \le i \le j \le m\}$, $J := \{(i,j) : m \le i \le j,\ j - i \ge m_k\}$ indexhalmazokkal és a $\overline{\mathbf{b}_k} := \big[b_k^{(0)},\ldots,b_k^{(m_k)}, y_{n+1}\big]^{\mathrm{T}}$ oszlopvektorral*

$$G^{\overline{A},\overline{B}} = \left[\begin{array}{c|c|c} G^{A,B}|I & \overline{\mathbf{b}_k} & \big[G^{A,B}|J\big]^{\rightarrow} \\ & * & * \end{array}\right]$$

alakú, ahol a $|^{\rightarrow}$ művelet a mátrix egy pozícióval jobbra való eltolása.

Példa. A már tekintett $\mathbb{Z}_3$-beli $X = (2,1,0,0,0,2,1,\ldots)$, $Y = (2,2,2,1,1,1,2,\ldots)$ adatokhoz $h_0^{X,Y}, h_1^{X,Y},\ldots,h_6^{X,Y}$ konstrukciója.

$n=0)\ \ \omega_0=\omega_0^X=1(=x^0),\ x_0=2,\ A_0=A^{(0)}=\big[2\big],\ y_0=2,\ B_0=B^{(0)}=\big[2\big],$

$\qquad G_0=G^{A^{(0)},B^{(0)}}=\big[2\big],\quad h_0=h_0^{X,Y}=\big[G_0\big]_{00}\omega_0=2.$

$n=1)^*\ \omega_1=x-2=^{\mathrm{mod}_3}=x+1,\quad x_1=1\notin A_0,\ \ A_1=\big[A_0,1\big]=\big[\mathbf{2},1\big],$

$\qquad B_1=\big[B_0,y_1\big]=\big[\mathbf{2},\mathit{2}\big],\quad G_1=\begin{bmatrix}\mathbf{2} & 2\\ & \underline{0}\end{bmatrix},\quad h_1=h_0+\underline{0}\cdot\omega_1=2.$

$n=2)\ \ \omega_2=\omega_1(x-1)=^{\mathrm{mod}_3}=x^2+2,\quad x_2=0\notin A_1,\quad A_2=\big[A_1,0\big]=\big[\mathbf{2},\mathbf{1},0\big],$

$$B_2=\big[A_1,y_2\big]=\big[\mathbf{2},\mathbf{2},2\big],\quad G_2=\begin{bmatrix}\mathbf{2} & \mathbf{2} & 2\\ & \mathbf{0} & 0\\ & & \underline{0}\end{bmatrix},\quad h_2=h_1+\underline{0}\cdot\omega_2=2.$$

$n=3)\ \ \omega_3=\omega_2x=^{\mathrm{mod}_3}=x^3+2x,$

$\quad x_3=0=[A_2\text{ utolsó tagja}],\ A_3=\big[A_2,0\big]=\big[\mathbf{2},\mathbf{1},\mathbf{0},0\big],\ B_3=\big[A_2,y_3\big]=\big[\mathbf{2},\mathbf{2},\mathbf{2},1\big],$

$$G_3=\begin{bmatrix}\mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2\\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & 1\\ & & \mathbf{0} & 2\\ & & & \underline{2}\end{bmatrix},\quad h_3=h_2+\underline{2}\cdot\omega_3=^{\mathrm{mod}_3}=2+x^2+x^3.\ 3$$

$n=4)\ \ \omega_4=\omega_3x=^{\mathrm{mod}_3}=x^4+2x^2,\quad x_4=0=[A_2\text{ utolsó tagja}],\quad y_4=1,$

$\quad A_4=\big[A_3,0\big]=\big[\mathbf{2},\mathbf{1},\mathbf{0},\mathbf{0},0\big],\quad B_4=\big[B_3,y_4\big]=\big[\mathbf{2},\mathbf{2},\mathbf{2},\mathbf{1},1\big],$

$$G_4=\begin{bmatrix}\mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2\\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & 1\\ & & \mathbf{0} & \mathbf{2} & 1\\ & & & \mathbf{2} & 1\\ & & & & \underline{2}\end{bmatrix},\quad h_4=h_3+\underline{2}\cdot\omega_4=^{\mathrm{mod}_3}=2+x^2+2x^3+2x^4.$$

$n=5)\ \ \omega_5=\omega_4x=^{\mathrm{mod}_3}=x^5+2x^3,\quad x_5=2\in A_4,\quad y_5=1,$

$\quad A_5=\big[\mathbf{2}\ \ 2\ \ \mathbf{1}\ \ \mathbf{0}\ \ \mathbf{0}\ \ \mathbf{0}\big],\quad B_5=\big[\mathbf{2},2,\mathbf{2},\mathbf{2},\mathbf{1},\mathbf{1}\big],$

$$G_5=\begin{bmatrix}\mathbf{2} & 2 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2}\\ & 1 & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1}\\ & & 1 & \mathbf{0} & \mathbf{2} & \mathbf{1}\\ & & & 2 & \mathbf{2} & \mathbf{1}\\ & & & & 0 & \mathbf{2}\\ & & & & & \underline{2}\end{bmatrix},\quad \begin{aligned}h_5&=h_4+\underline{2}\cdot\omega_5=^{\mathrm{mod}_3}=\\ &=2+x+x^2+2x^4+2x^5.\end{aligned}$$

$n=6)\ \ \omega_6=\omega_5(x-2)=^{\mathrm{mod}_3}=2x^3+2x^4+x^5+x^6,\quad x_6=2\in A_5,\quad y_6=2,$

$\quad A_6=\big[\mathbf{2}\ \ \mathbf{2}\ \ \mathbf{1}\ \ 1\ \ \mathbf{0}\ \ \mathbf{0}\ \ \mathbf{0}\big],\quad B_6=[\mathbf{2},\mathbf{1},\mathbf{2},2,\mathbf{2},\mathbf{1},\mathbf{1}],$

$$G_6=\begin{bmatrix}\mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2 & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2}\\ & \mathbf{1} & 0 & 2 & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1}\\ & & 1 & 1 & 2 & \mathbf{2} & \mathbf{1}\\ & & & 0 & 1 & 0 & \mathbf{1}\\ & & & & 1 & 2 & 2\\ & & & & & 1 & 0\\ & & & & & & \underline{2}\end{bmatrix},\quad \begin{aligned}h_6&=h_3+\underline{2}\cdot\omega_6=^{\mathrm{mod}_3}=\\ &=2+x+x^2+x^3+x^5+2x^6\end{aligned}.$$

* Vastagon szedve az előzőből örököltek.

3- ÉS N-SPLINE FÜGGVÉNYEK

Definíció. Adottak $x_0 < x_1 < \cdots < x_r$ és $y_1, \ldots, y_r \in \mathbb{R}$,.
Az $f : [x_0, x_r] \to \mathbb{R}$ függvény *3-spline* az $\{x_1 \mapsto y_1, \ldots, x_r \mapsto y_r\}$ függvénycsírához $\big[$jelölésben: $f \in \mathrm{Spline}_3\{(x_0, y_0), \ldots, (x_r, y_r)\}\big]$, ha

$$f(x_0) = y_0, \ldots, f(x_r) = y_r, \quad f \in \mathcal{C}^2[x_0, x_r];$$
$$f|[x_{k-1}, x_k] \in \mathrm{Pol}_3 \qquad (k = 1, \ldots, r).$$

Lemma. *Ha $a, b, c, y_* \in \mathbb{R}$ továbbá $h > 0$ tetszőlegesen adottak, akkor*

$$\exists!\ P \in \mathrm{Pol}_3 \qquad P(0) = a,\ P'(0) = b,\ P''(0) = c,\ P(h) = y_*.$$

Bizonyítás. Triviális: $\quad P = a + bx + (c/2)x^2 + dx^3$, ahol $d = \big[y_* - [a + bh + (c/2)h^2]\big]/h^3$.

Következmény. *Tetszőleges $p, q \in \mathbb{R}$ számokhoz*

$$\exists!\ f_{p,q} \in \mathrm{Spline}_3\{(x_0, y_0), \ldots, (x_r, y_r) \quad f'(x_0) = p,\ f''(x_0) = q.$$

Algoritmus. $f_{p,q}$ konstrukciója [lépések: 1), 2), $\ldots$, r)].
1) A Lemma alapján $P_1 \in \mathrm{Pol}_3$ szerkesztése, amelynél
$P_1(x_0) = y_0,\ P_1'(x_0) = p,\ P_1''(x_0) = q.$ Ezzel $f_{p,q}\big|[x_0, x_1] := P_1$.
A folytatáshoz $p_1 := P_1'(x_1)$, $q_1 := P_1''(x_1)$.
$\vdots$
$k+1$) A Lemma alapján $P_{k+1} \in \mathrm{Pol}_3$ szerkesztése, amelynél
$P_{k+1}(x_k) = y_0,\ P_{k+1}'(x_k) = p_k,\ P_{k+1}''(x_k) = q_k.$ Ezzel $f_{p,q}\big|[x_k, x_{k+1}] := P_{k+1}$.
A folytatáshoz $p_{k+1} := P_{k+1}'(x_{k+1})$, $q_{k+1} := P_{k+1}''(x_{k+1})$ (ha $k < r$).

Jelölések. Ettől kezdve rögzített $x_0 < \cdots < x_r$, ill. $y_0, \ldots, y_r$ mellett

$$\mathcal{F} := \mathrm{Spline}_3\{(x_k, y_k)\}_{k=0}^r, \qquad \mathcal{S} := \mathrm{Spline}_3\{(x_k, 0)\}_{k=0}^r,$$
$$f_{p,q} := \big[f \in \mathcal{F} :\ f'(x_0) = p,\ f''(x_0) = q\big],\ s_{p,q} := \big[s \in \mathcal{S} :\ s'(x_0) = p,\ s''(x_0) = q\big].$$

Megjegyzés. $\mathcal{F}$ 2-dimenziós affin alsokaság $\mathcal{C}^2[x_0, x_r]$-ben, amelyek érintőtere $\mathcal{S}$. Azaz

$$\mathbf{T}\mathcal{F} = \mathcal{S} = \big\{f - g :\ f, g \in \mathcal{F}\big\} = \mathbb{R}s_{1,0} + \mathbb{R}s_{0,1}, \qquad f_{p,q} = f_{0,0} + p\, s_{1,0} + q\, s_{0,1}.$$

Probléma. Milyen kétoldali peremfeltételekhez van 3-spline függvény? Azaz milyen $u, v, \alpha, \beta, \lambda, \mu$ esetén

$$\exists\ f \in \mathcal{F} \qquad \alpha f'(x_0) + \beta f''(x_0) = u, \quad \lambda f'(x_r) + \beta f''(x_r) = v\ ?$$

Az $(\alpha, \beta, \lambda, \mu) = (1,0,1,0), (0,1,0,1)$ ill. $u = v = 0$ esetek (fizikai) szempontból fontosak.

Lemma. *Az $[a \mapsto 0, a+h \mapsto 0]$ függvénycsírához az $s'(a) = \alpha$, $s''(a) = \beta$ kezdeti feltétellel pontosan egy $s_{\alpha,\beta} \in \mathrm{Spline}_3\{(a,0),(a+h,0)\}$ függvény található. Ennek első két deriváltja az $a+h$ pontban negativ mátrixú lineáris módon függ az $(\alpha,\beta) = \big(s'_{\alpha,\beta}(a), s''_{\alpha,\beta}(a)\big)$ pártól. Nevezetesen*

$$\begin{bmatrix} s'_{\alpha,\beta}(a+h) \\ s''_{\alpha,\beta}(a+h) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -h/2 \\ -6/h & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha \\ \beta \end{bmatrix} .$$

Bizonyítás. Egy harmadfokú s polinom a Taylor-formula szerint

$$s(x) = s(a) + s'(a)(x-a) + \frac{1}{2}s''(a)(x-a)^2 + \frac{1}{6}s^{(3)}(a)(x-a)^3$$

alakú. Vagyis, ha itt $s(a) = s(a+h) = 0$ $s'(a) = \alpha$, $s''(a) = \beta$ ill. ${}^{(3)}(a) = \gamma$, akkor

$$s(h) = \alpha h + \frac{1}{2}\beta h^2 + \frac{1}{6}\gamma h^3 = 0 \quad \Longrightarrow \quad \gamma = -\frac{6}{h^3}\big(\alpha h + \frac{1}{2}\beta h^2\big) .$$

Tehát egyértelműen csak

$$s_{\alpha,\beta}(x) = \alpha(x-a) + \frac{1}{2}\beta(x-a)^2 - \frac{1}{h^3}\big(\alpha h + \frac{1}{2}\beta h^2\big)(x-a)^3 .$$

Ennek első két deriváltja az $a+h$ végpontban

$$s'_{\alpha,\beta}(a+h) = \alpha + \beta h + \frac{1}{2}\big[-\frac{6}{h^3}\big(\alpha h + \frac{1}{2}\beta h^2\big)\big]h^2 = -2\alpha - \frac{1}{2}\beta h ,$$
$$s''_{\alpha,\beta}(a+h) = \beta + \big[-\frac{6}{h^3}\big(\alpha h + \frac{1}{2}\beta h^2\big)\big]h = -\frac{6}{h}\alpha - 2\beta . \quad \text{Qu.e.d.}$$

Következmény. *Az $\{a_0 \mapsto 0, a_1 \mapsto 0, \ldots, a_n \mapsto 0\}$ függvénycsírához az $s'(a) = 0$, $s''(a) = 1$ kezdeti feltétellel interpoláló $s_{0,1}$ 3-spline függvény deriváltja az a_n végpontban nem tűnhet el: $s'_{0,1}(a_n) \neq 0$.*

Bizonyítás. Legyen $h_k := a_k - a_{k-1}$ $(k = 1, \ldots, n)$. Lépésenként megkonstruálva az $s_{0,1}$ spline-t az $(a_0,a_1), (a_1,a_2), \ldots, (a_{n-1},a_n)$ intervallumok felett, a lineáris függés miatt rendre

$$\begin{bmatrix} s'_{0,1}(a_1) \\ s''_{0,1}(a_1) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -h_1/2 \\ -6/h_1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} ,$$

$$\begin{bmatrix} s'_{0,1}(a_2) \\ s''_{0,1}(a_2) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -h_2/2 \\ -6/h_2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2 & -h_1/2 \\ -6/h_1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} ,$$

$$\vdots$$

$$\begin{bmatrix} s'_{0,1}(a_n) \\ s''_{0,1}(a_n) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -2 & -h_n/2 \\ -6/h_n & -2 \end{bmatrix} \cdots \begin{bmatrix} -2 & -h_2/2 \\ -6/h_2 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -2 & -h_1/2 \\ -6/h_1 & -2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} .$$

Mivel pozitiv tagú mátrixok szorzata pozitiv tagú, itt mindig

$$\begin{bmatrix} s'_{0,1}(a_k) \\ s''_{\alpha,\beta}(a_k) \end{bmatrix} = (-1)^n \begin{bmatrix} p_{11}^{(k)} & p_{12}^{(k)} \\ p_{21}^{(k)} & p_{22}^{(k)} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix} = (-1)^n \begin{bmatrix} p_{21}^{(k)} \\ p_{22}^{(k)} \end{bmatrix}$$

valamely $p_{ij}^{(k)} > 0$ $(i,j \in \{1,2\},\ k = 1,\dots,n)$ tagokkal.

Algoritmus. Adottak: $A, B \in \mathbb{R}$, $\varphi := \{x_0 \mapsto y_0, \dots, x_n \mapsto y_n\}$. Jelölje $p_k \in \mathrm{Pol}_3$ a φ csíra x_0-nál A deriváltú és B második deriváltú 3-splinejának $[x_{k-1}, x_k]$ fölötti szakaszát. *Rekurzió a*

$$p_0 := y_0 + A(x-x_0) + \frac{1}{2}B(x-x_0)^2 \textit{ segédfüggvénnyel:}$$

$$p_{k+1} := p_k + C_k(x-x_k)^3, \quad \textit{ahol} \quad C_k := \big[C:\ p_k(x_{k+1}) + C(x_{k+1}-x_k)^3 = y_{k+1}\big].$$

Az x_0-nál U, x_n-nél V deriváltú s 3-spline-ja φ-nek a következetkezőképen szerkeszthető: *Vesszük az* $(A,B) := (U,0), (U,1)$ *párokhoz az* s_0 *ill.* s_1 *3-spline-okat. Ezekkel*

$$s := \lambda_0 s_0 + \lambda_1 s_1, \quad \textit{ahol}$$

$$(\lambda_0, \lambda_1) := \Big[(\widetilde{\lambda}_0, \widetilde{\lambda}_1):\ \sum_k \widetilde{\lambda}_k = 1,\ \sum_k \widetilde{\lambda}_k s'_k(x_n) = V\Big].$$

EUKLIDESZI TÁVOLSÁG 3-SPLINE-OKRA

$$\mathcal{S} := \big\{f \in \mathcal{C}^2[x_0, \dots, x_N]:\ f(x_0) = y_0, \dots, f(x_N) = y_N\big\}$$

$$\mathcal{S}_3 := \big\{f \in \mathcal{S}:\ s\big|[x_{k-1}, x_k] \in \mathrm{Pol}_3\big\}$$

$\mathcal{S}_3, \mathcal{S}_3^0$ *hasonlóan* $y_0 = \cdots = y_N = 0$ *mellett.*

$$\langle f|g\rangle := \int_{x_0}^{x_N} f''(x)g''(x)\,dx \qquad \big(f, g \in f \in \mathcal{C}^2[x_0, \dots, x_N]\big)$$

Lemma. $d(f,g) := \langle f-g|f-g\rangle^{1/2}$ *metrika* $\mathcal{S}$*-en,* $\|h\| := \langle h|h\rangle^{1/2}$ *euklideszi norma* $\mathcal{S}^0$*-on*

Bizonyítás. $f, g \in \mathcal{S}$, $h := f - g \in \mathcal{S}^0$; $\langle h|h\rangle = 0 \Longrightarrow h'' \equiv 0 \Longrightarrow h(x) = ax + b$

$h(x_0) = h(x_N) = 0 \Longrightarrow a, b = 0 \Longrightarrow h \equiv 0$. Qu.e.d.

Jelölés. $s_f := \big[s \in \mathcal{S}_3:\ s'(x_0) = f'(x_0),\ s'(x_N) = f'(x_N)\big]$.

Tétel. $s_f = \big[s \in \mathcal{S}_3:\ d(f,s) = \min d(f, \mathcal{S}_3)\big]$.

Bizonyítás. d euklideszi távolság $\mathcal{S}$-en

Kell: $[f - s_f] \perp \big[\mathcal{S}_3 \text{ érintőtere}\big] = \{s - t:\ s, t \in \mathcal{S}_3\} = \mathcal{S}^0$

$$\int_{x_0}^{x_N}[f-s_f]''\,h''=\sum_k\int_{x_{k-1}}^{x_k}[f-s_f]''\,h''=\sum_k[f-s_f]'h''\Big|_{x_{k-1}}^{x_k}-\int_{x_{k-1}}^{x_k}[f-s_f]'\,h'''=$$

$$=\underbrace{[f-s_f]'}_{0}\,h''\Big|_{x_0}^{x_N}-\sum_k\int_{x_{k-1}}^{x_k}[f-s_f]'\,h'''=$$

$$=-\sum_k\underbrace{[f-s_f]}_{0}h'''\Big|_{x_{k-1}}^{x_k}+\sum_k\int_{x_{k-1}}^{x_k}[f-s_f]\,\underbrace{h''''}_{0}=0.\quad \text{Qu.e.d.}$$

Gyakorlat. $\big[s\in\mathcal{S}_3:\ \int_{x_0}^{x_n}s''(x)^2dx\ \text{minimális}\big]=\big[s\in\mathcal{S}_3:\ s''(x_0)=s''(x_n)=0\big]$.

N-SPLINE-OK

Definíció. Legyen $I\subset\mathbb{R}$ intervallum, $N\in\mathbb{N}$. Az $f:I\to\mathbb{R}$ függvény N*-spline*, ha $(N-1)$-szer folytonosan deriválható, továbbá található olyan véges $I_1\cup\cdots\cup I_n=I$ felbontása I-nek részintervallumokra, ahol $f^(N+1)|I_k\equiv 0$ $(k=1,\dots,N)$, azaz, ha vannak olyan $\inf I=x_0<x_1<\cdots<x_n=\sup I$ számok, hogy az $f|(x_k-1,x_k)$ függvények N-edfokú polinomok.

Észrevétel. *Ha $f,g\in\mathrm{Pol}(\mathbb{R})$ és $f^{(k)}(a)=g^{(k)}(a)$ $(k=0,\dots,N-1)$, akkor $f-g=(x-a)^Nh(x)$ valamilyen $h\in\mathrm{Pol}(\mathbb{R})$ mellett.*

Tétel. *Legyenek tetszőlegesen adottak az $x_0<x_1<\cdots<x_n$ helyek, továbbá az $y_0,\dots,y_n$ ill. $\varphi_0^{(0)},\varphi_0^{(1)},\dots,\varphi_0^{(N-1)},\varphi_1,\dots,\varphi_n$ kostansok. Ekkor pontosan egy olyan $f:[x_0,x_n]\to\mathbb{R}$ N-spline függvény van, amelynek az $[x_{k-1},x_k]$ intervallumokba eső részei N-edfokú f_k polinomok (megszorítottjai) és*

$$f^{(d)}(x_0)=\varphi_0^{(d)}\quad(d=0,\dots,N-1),\quad f(x_k)=\varphi_k\quad(k=1,\dots,n).$$

Ez a függvény felírható az alábbi alakban:

$$f(x)=\sum_{d=0}^{N-1}\frac{1}{d!}\varphi^{(d)}(x-x_0)^d+\sum_{k=1}^{n}A_k\big[(x-x_{k-1})_+\big]^N$$

Bizonyítás. Legyen $f_0:=\sum_{d=0}^{N-1}\frac{1}{d!}\varphi^{(d)}(x-x_0)^d$. Ezzel $f_0^{(d)}(x_0)=\varphi_0^{(d)}$ $(d=0,\dots,N-1)$. Ezután a $k=1,2,\dots,n$ mellett rekurzióval definiált

$$(\mathbf{ALG})\qquad \begin{aligned}&A_k:=\frac{\varphi_k-P_k(x_k)}{(x_k-x_{k-1})^N},\quad f_k(x):=f_{k-1}(x)+A_k(x-x_{k-1})^N,\\ &f|[x_{k-1},x_k]:=f_k|[x_{k-1},x_k]\end{aligned}$$

sorozat megfelel (és csak az).

Megjegyzés. Rögzített $x_0, \ldots, x_n$ és $\varphi_0 (:= \varphi 0_0^{(0)}), \varphi_1, \ldots, \varphi_n$ mellett legyen

$$f^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})}$$

az (**ALG**) algoritmussal konstruált spline-függvény. Ekkor a

$$D : \left(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)}\right) \mapsto \left(\left[f^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})}\right]'(x_n), \ldots, \left[f^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})}\right]^{(N-1)}(x_n) \right)$$

leképezés affin (azaz constans+lineáris).

Megjegyzés. Az $f^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})}$ spline-t célszerű két standard, elméletileg jól kontrollálható lépésben megkonstruálni:

1) Az $f^{(0,\ldots,0)}$ *alap spline* megkonstruálása az $y_0 + \frac{y_1 - y_0}{(x_1 - x_0)^N}(x - x_0)^N$ polinommal indulva.
2) Az $\{x_k \to 0 : \ k = 0, \ldots, n\}$ triviális függvénycsírához a $q := q^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})}$ spline megkonstruálása. Ha $s_k := q|[x_{k-1}, x_k]$ kész, akkor az $[x_k, x_{k+1}]$ intervallumon $s_{k+1} = q(x) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{i!} \frac{d^i s_k}{dx^i}\Big|_{x=x_k} (x - x_k)^i + A(x - x_k)^N$ alakú, ahol az A konstanst az $s_{k+1}(x_{k+1}) = 0$ feltételből számoljuk ki. Nevezetesen

$$s_{k+1}(x) = \sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{i!} \frac{d^i s_k}{dx^i}\Big|_{x=x_k} (x - x_k)^i - \Big[\sum_{i=1}^{N-1} \frac{1}{i!} \frac{d^i s_k}{dx^i}\Big|_{x=x_k} (x_{k+1} - x_k)^{i-N} \Big] (x - x_k)^N.$$

3) Végül $\quad f^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})} := f^{(0,\ldots,0)} + q^{(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_0^{(N-1)})}$.

Propozíció. *A D leképezés $\mathbb{R}^{N-1} \leftrightarrow \mathbb{R}^{N-1}$ (azaz minden derivált-kezdőállapotból minden lehetséges végállapot elérhető).*

Bizonyítás. A konstrukciót x_n-ből kiindulva visszafelé is végrehajtatjuk. Eszerint minden $\left(\varphi_0^{(1)}, \ldots, \varphi_n^{(N-1)}\right)$ szám-$(N-1)$-eshez van egy olyan egyértelmű

$$g^{(\varphi_n^{(1)}, \ldots, \varphi_n^{(N-1)})}$$

N-edfokú polinomokból álló N-spline függvény, amelyre

$$\left[g^{(\varphi_n^{(1)}, \ldots, \varphi_n^{(N-1)})}\right]^{(\ell)}(x_n) = \varphi_n^{(\ell)} \quad (\ell = 1, \ldots, N-1).$$

A spline-ok egyértelműsége miatt az affin

$$\overline{D} : \left(\varphi_n^{(1)}, \ldots, \varphi_n^{(N-1)}\right) \mapsto \left(\left[g^{(\varphi_n^{(1)}, \ldots, \varphi_n^{(N-1)})}\right]'(x_0), \ldots, \left[g^{(\varphi_n^{(1)}, \ldots, \varphi_n^{(N-1)})}\right]^{(N-1)}(x_0) \right)$$

leképezés D-vel összetéve identitást ad $\mathbb{R}^{N-1}$-en. Qu.e.d.

Tétel. *A D leképezés lineáris része mátrixában minden $(\varphi_0^{(1)},\dots,\varphi_0^{(N-1)}$-szerinti) együttható elöjele $=(-1)^n$, és a mátrix deteminánsa is $=(-1)^{n(N-1)}$.*

Bizonyítás. Észrevétel: a D leképezés lineáris részének mátrixa nem más, mint a lineáris

$$(\varphi_0^{(1)},\dots,\varphi_0^{(N-1)}) \mapsto \Big(\frac{d^\ell}{dx^\ell}\Big|_{x=x_N} q^{(\varphi_0^{(1)},\dots,\varphi_0^{(N-1)})} : \ \ell=1,\dots N-1\Big)$$

leképezés mátrixa. Ez pedig lépésenkénti felbontással

$$\mathbf{D}=\mathbf{D}_n\mathbf{D}_{n-1}\cdots\mathbf{D}_1,$$

alakú, ahol a Megjegyzés 2) pontja szerint

$$\mathbf{D}_k := \Big[(z_1,\dots,z_{N-1})\mapsto \Big(\frac{d^\ell s_{k+1}^{(z_1,\dots,z_{N-1})}}{dx^\ell}\Big|_{x=x_{k+1}} : \ \ell=1,\dots,K-1\Big) \ \text{mátrixa}\Big],$$

$$s_{k+1}^{(z_1,\dots,z_{K-1})} := \sum_{i=1}^{N-1}\frac{1}{i!}z_i(x-x_k)^i - \Big[\sum_{i=1}^{N-1}\frac{1}{i!}z_i(x_{k+1}-x_k)^{i-N}\Big](x-x_k)^N.$$

Elegendő csak egyetlen lépésre belátni, hogy $\mathbf{D_k}$ tagjai mind *negatívok* és $\det(\mathbf{D}_k)=(-1)^{N-1}$. Legyen k tetszőlegesen adott, $\mathbf{D}_k=\big[d_{\ell,i}\big]_{\ell,i=1}^{N-1}$, és legyen $h:=x_{k+1}-x_k$. Az általánosság megszorítása nélkül vehető $x_k:=0$ is. Ekkor a $\chi(m):=\big[0$ ha $m<0$, 1 ha $m\ge 0\big]$ választó függvénnyel

$$\begin{aligned}
d_{\ell,i} &= \Big[z_i \text{ együtthatója } \frac{d^\ell s_{k+1}^{(z_1,\dots,z_{N-1})}}{dx^\ell}\Big|_{x=h} - \text{ban}\Big] = \\
&= \frac{d^\ell}{dx^\ell}\Big|_{x=h}\Big[\frac{1}{i!}x^i-\frac{1}{i!}h^{i-N}x^N\Big] = \\
&= \frac{1}{i!}\chi(i-\ell)i(i-1)\cdots(i-\ell+1)h^{i-\ell} - \frac{1}{i!}h^{i-N}N(N-1)\cdots(N-\ell+1)h^{N-\ell} = \\
&= \frac{h^i}{i!}\,\frac{\ell!}{h^\ell}\Big[\chi(i-\ell)\binom{i}{\ell}-\binom{N}{\ell}\Big] < 0\ .
\end{aligned}$$

Tehát a $\Lambda:=\operatorname{diag}\big(\ell!/h^\ell : \ \ell=1,\dots,N-1\big)$ és a $\mathbf{C}=\big[c_{\ell,i}\big]_{\ell,i=1}^{N-1}$, $c_{\ell,i}:=\chi(i-\ell)\binom{i}{\ell}-\binom{N}{\ell}$ mátrixokkal

$$\mathbf{D}_k=\Lambda\mathbf{C}\Lambda^{-1}\ , \quad \det(\mathbf{D}_k)=\det(\mathbf{C})=\det\Big[\chi(i-\ell)\binom{i}{\ell}-\binom{N}{\ell}\Big]_{\ell,i=1}^{N-1}.$$

Megjegyzés: a Newton-féle $\binom{\alpha}{\ell}:=\alpha(\alpha-1)\cdots(\alpha-\ell+1)/\ell!$ binomiális együtthatók analitikusan folytatják α-ban az egész $\mathbb{R}$-re a kombinatorikus definíciót. Speciálisan mindig $\binom{\alpha}{\ell-1}+\binom{\alpha}{\ell}=\binom{\alpha+1}{\ell}$. Ezért a χ függvény elhagyható, és

$$\begin{aligned}
\det(\mathbf{C}) &= \det\Big[1.-2.,\dots,(N-2).-(N-1).\ \text{oszlop}\Big] = \\
&= \det\Big[\binom{i}{\ell}-\binom{N}{\ell}-\binom{i+1}{\ell}+\binom{N}{\ell}\Big]_{\ell,i=1}^{N-1} = \det\Big[\binom{i}{\ell}-\binom{i+1}{\ell}\Big]_{\ell,i=1}^{N-1} = \\
&= \det\Big[-\binom{i}{\ell-1}\Big]_{\ell,i=1}^{N-1} = (-1)^{N-1}\det\Big[\binom{i}{\ell-1}\Big]_{\ell,i=1}^{N-1}.
\end{aligned}$$

Végezzük el az $\mathbf{A} := \left[\binom{i}{\ell-1}\right]_{\ell,i=1}^{N}$ mátrixon a következő műveleteket, amelyek a determinánsát nem változtatják: 2.−1. *sor*, 2.−3. *sor*, 3.−4. *sor*, …, $(N-1).-(N-2)$. *sor*.

Megmutatjuk: ezekkel a műveletekkel olyan felső-trianguláris $\mathbf{B} = \left[(b_{\ell,i}\right]_{\ell,i=1}^{N}$ mátrixot kapunk, amelynek főátlójában csupa 1-esek vannak, ami bizonyítja is a tételt.

Mivel $i < \ell - 1$ esetén $a_{\ell,i} = \binom{i}{\ell-1} = 0$, a $\mathbf{B}$ mátrix szubdiagonálisa alatt továbbra is 0-k lesznek: $b_{i+d,i} = 0$, ha $d \geq 2$. Másrészt $\mathbf{a}_1, \ldots, \mathbf{a}_{N-1}$-gyel illetve $\mathbf{b}_1, \ldots, \mathbf{b}_{N-1}$-gyel jelölve $\mathbf{A}$ ill. $\mathbf{B}$ sorait, ℓ-szerinti indukcióval adódik, hogy

$$\mathbf{b}_\ell = \mathbf{a}_\ell - \mathbf{a}_{\ell-1} + \cdots + (-1)^{\ell-1}\mathbf{a}_1 = \sum_{k=1}^{\ell}(-1)^{\ell-k}\mathbf{a}_k \qquad (\ell = 2, \ldots, N).$$

A szubdiagonális elemekre $\mathbf{B}$-ben $i = 1, \ldots, N-2$ mellett

$$b_{i+1,i} = \sum_{k=1}^{i+1}(-1)^{i+1-k}\binom{i}{k-1} = (-1)^i \sum_{j=0}^{i}(-1)^j\binom{i}{j}(-1)^i(1-1)^i = 0\ .$$

A diagonális elemekre $\mathbf{B}$-ben $i = 2, \ldots, N-1$ mellett

$$b_{i,i} = \sum_{k=1}^{i}(-1)^{i-k}\binom{i}{k-1} = -\Big[\sum_{k=1}^{i+1}(-1)^{i+1-k}\binom{i}{k-1}\Big] + \binom{i}{i} = 0 + 1 = 1\ .$$

Végül pedig szintén $b_{1,1} = a_{1,1} = \binom{1}{0} = 1$. Qu.e.d.

Tétel (DeBoor). *Legyen $N = 2K - 1$ és $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$. Tegyük fel, hogy $f : [x_0, x_n] \to \mathbb{R}$ egy olyan N-szer folytonosan deriválható függvény, amelyre $f(x_k) = y_k$ $(k = 0, \ldots, n)$. Legyen továbbá $s : [x_0, x_n] \to \mathbb{R}$ az (jól-definiált) N-spline, amelyre $s(x_k) = y_k$ $(k = 0, \ldots, n)$ és $s^{(d)}(x_0) - f^{(d)}(x_0) = s^{(d)}(x_n) - f^{(d)}(x_n) = 0$ $(d = 1, \ldots, K)$. Ekkor*

$$\int \left|f^{(K))}(x)\right|^2 dx \geq \int \left|s^{(K)}(x)\right|^2 dx\ .$$

Bizonyítás. Az $\langle \phi, \Psi \rangle := \int \phi^{(k)}(x)\psi^{(k)}(x)\,dx$ pozitív szemidefinit skalárszoztot véve elég bizonyítani, hogy f–$s \perp s$ (a Pythagoras-tétel szerint). Parciális integrálással $\big((K$–$1)$-szer$\big)$

$$
\begin{aligned}
\big\langle f-s,s\big\rangle &= \int \big[f^{(K)}-s^{(K)}\big]s^{(K)} = \\
&= \big[\underbrace{f^{(K-1)}-s^{(K-1)}}_{0\text{ ha }x=x_i}\big]s^{(K)}\Big|_{x_0}^{x_n} - \int \big[f^{(K-1)}-s^{(K-1)}\big]s^{(K+1)} = \\
&= -\int \big[f^{(K-1)}-s^{(K-1)}\big]s^{(K+1)} = \int \big[f^{(K-2)}-s^{(K-2)}\big]s^{(K+2)} = \\
&\ \ \vdots \\
&= (-1)^{K-2}\int \big[f''-s''\big]s^{(2K-2)} = \\
&= (-1)^{K-2}\sum_{k=1}^{n}\left[\big[\underbrace{f'-s'}_{0}\big]s^{(2K-2)}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} - \int_{x_{k-1}}^{x_k}\big[f'-s'\big]\underbrace{s^{(2K-1)}}_{\alpha_k\text{ const.}}\right] = \\
&= (-1)^{K-1}\sum_{k=1}^{n}\alpha_k\big[\underbrace{\ f-s\ }_{0\text{ ha }x=x_i}\big]\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} = 0\ . \quad \text{Qed.}
\end{aligned}
$$

Tétel. *Az* $\mathbf{E}: f \mapsto \int \big|f^{(K)}(x)\big|^2\,dx$ *funkcionál felveszi a minimumát az*

$$\mathcal{F} := \Big\{f \in \mathcal{C}^{2K-1}[x_0,x_n]:\ f(x_k)=y_k\ (k=1,\ldots,n)\Big\}$$

téren, mégpedig annál az $s \in \mathcal{F}$ $(2K-1)$*-spline függvénynél, amelyre*

$$s^{(d)}(x_0) = s^{(d)}(x_n) = 0 \qquad (d = K,\ldots,2K-2).$$

Bizonyítás. Legyen $\mathcal{S} := \Big\{s \in \{(2K-1)\text{-spline fgv-ek}\}:\ s(x_k)=y_k\ (k=0,\ldots,n)\Big\}$. Láttuk: minden $f \in \mathcal{F}$ függvényhez van nála $\le$ $\mathbf{E}$-értéket adó $\mathcal{S}$-beli spline. Mivel $\mathcal{S}$ véges-dimeziós affin altér $\mathcal{C}^{2K-1}[x_0,x_n]$-ben, rajta a pozitív-szemidefinit $\mathbf{E}$ kvadratikus alak felveszi a minimumát. Legyen ez (egy ilyen minimalizáló) az s spline. Ekkor a $\langle\phi,\Psi\rangle := \int_{x_0}^{x_n}\phi^{(K)}(x)\Psi^{(K)}(x)\,dx$ pozitív-szemidefinit skalárszozattal

$$
\begin{aligned}
\big\langle s,g\big\rangle = 0 \qquad \forall g \in \mathrm{T}\mathcal{S} &= \big[\mathcal{S}\text{ érintőtere}\big] = \big\{s_1-s_2:\ s_1,s_2\in\mathcal{S}\big\} = \\
&= \Big\{g\ \ (2K-1)\text{-spline},\ g(x_k)=0\ (k=0,\ldots,n)\Big\}\ .
\end{aligned}
$$

Kiszámítjuk $(K-1)$-szeri parciális integrálással a $\big\langle s,g\big\rangle$ skalár-szorzatot úgy, hogy g-t integráljuk minden lépésben:

$$
\begin{aligned}
\langle s, g\rangle &= \int s^{(K)} g^{(K)} = \\
&= g^{(K-1)} s^{(K)} \Big|_{x_0}^{x_n} - \int g^{(K-1)} s^{(K+1)} = \\
&= g^{(K-1)} s^{(K)} \Big|_{x_0}^{x_n} - g^{(K-2)} s^{(K+1)} \Big|_{x_0}^{x_n} + \int g^{(K-2)} s^{(K+2)} = \\
&\vdots \\
&= \sum_{d=1}^{K-1} (-1)^{d-1} g^{(K-d)} s^{(K+d-1)} \Big|_{x_0}^{x_n} + (-1)^{K-1} \int g' s^{(2K-1)} .
\end{aligned}
$$

Itt az utolsó integrálos tagot az $[x_{k-1}, x_k]$ részintervallumokon még egyszer integrálhatjuk parciálisan. Ezt használva

$$
\begin{aligned}
0 = \langle s, g\rangle &= \sum_{d=1}^{K-1} (-1)^{d-1} g^{(K-d)} s^{(K+d-1)} \Big|_{x_0}^{x_n} + (-1)^{K-1} \sum_{k=1}^{n} \left[\underbrace{g s^{(2K-1)}}_{0 \Leftarrow g(x_i)=0} \Big|_{x_{k-1}}^{x_k} - \int_{x_{k-1}}^{x_k} g \underbrace{s^{(2K)}}_{\equiv 0} \right] = \\
&= \sum_{d=1}^{K-1} g^{(K-d)} s^{(K+d-1)} \Big|_{x_0}^{x_n} \qquad (g \in \mathrm{T}\mathcal{S}).
\end{aligned}
$$

Tudjuk: bármely $\alpha^{(1)}, \ldots, \alpha^{(K-1)}$ ill. $\beta^{(1}, \ldots, \beta^{(K-1}$ mellett van olyan $g \in \mathrm{T}\mathcal{S}$ spline, amelyre $g^{(d)}(x_0) = \alpha^{(d)}$ és $g^{(d)}(x_n) = \beta^{(d)}$ $(d = 1, \ldots, K-1)$. Ezért szükségképpen $s^{(K+d-1)}(x_0) = s^{(K+d-1)}(x_n) = 0$ $(d = 1, \ldots, K-1)$. Qed.

GYORS DISZKRÉT FOURIER-TRANSZFORMÁCIÓ

$a = (a_0, a_1, \dots, a_{n-1}) \in \mathbb{C}^n$

$\omega_n := e^{2\pi i/n}, \qquad \Omega_n := \left[\omega_n^{pq}\right]_{p,q=0}^{n-1} \in \mathrm{Mat}(n, n, \mathbb{C})$

$\widehat{a} := \left(a_0 + a_1\omega_n^k + a_2\omega_n^{2k} + \dots + a_{n-1}\omega_n^{(n-1)k} \,:\; k = 1, \dots, n\right) = a\Omega_n$

$a = \widehat{a}\frac{1}{n}\Omega_n^* = \widehat{a}\frac{1}{n}\overline{\Omega_n}$, mivel $\Omega_n = \sqrt{n}\mathrm{ORT}$ mátrix.

Lemma. *Legyen* $c := (a_0, b_0, a_1, b_1, \dots, a_{n-1}, b_{n-1}) \in \mathbb{C}^{2n}$. *Ekkor*

$$\begin{aligned} \left[\widehat{c}\right]_k &= \left[\widehat{a}\right]_k + \omega_{2n}^k\left[\widehat{b}\right]_k \qquad &&\text{ha} \;\; 0 \le k \le n-1, \\ \left[\widehat{c}\right]_{n+\ell} &= \left[\widehat{a}\right]_\ell - \omega_{2n}^\ell\left[\widehat{b}\right]_\ell \qquad &&\text{ha} \;\; 0 \le \ell \le n-1 \end{aligned}$$

Bizonyítás.

$$\begin{aligned} \left[\widehat{c}\right]_p &= a_0 + b_0\omega_{2n}^p + a_1\omega_{2n}^{2p} + b_1\omega_{2n}^{3p} + \dots + a_1\omega_{2n}^{(2n-2)p} + b_1\omega_{2n}^{(2n-1)p} = \\ &= \sum_{k=0}^{n-1} a_k\omega_{2n}^{2kp} + \sum_{k=0}^{n-1} b_k\omega_{2n}^{(2k+1)p} =^{\text{mivel} \;\; \omega_{2n}^2 = \omega_n, \; \omega_{2n}^n = -1} \\ &= \left[\widehat{a}\right]_{\mathrm{mod}_n p} + (-1)^{[p/n]}\omega_{2n}^p\left[\widehat{b}\right]_{\mathrm{mod}_n p} \end{aligned}$$

Következmény. A $\;J_n := \mathrm{diag}(1, \omega_{2n}, \dots, \omega_{2n}^{n-1})$ mátrixszal

$$(a_0, b_0, a_1, b_1, \dots, a_{n-1}, b_{n-1})\widehat{\ } = \left(\widehat{a}, \widehat{b}\right)L_n, \quad \text{ahol} \quad L_n := \begin{bmatrix} I_n & I_n \\ J_n & -J_n \end{bmatrix}.$$

Algoritmus $(a_0, \dots, a^{2^N-1})\widehat{\ }$ **kiszámítására**

N lépés

1) $(a_0, a_{2^{N-1}})\widehat{\ }, (a_1, a_{2^{N-1}+1})\widehat{\ }, \dots, (a_{2^N-1}, a_{2^{N-1}+2^{N-1}-1})\widehat{\ }$

ℓ) $\left(a_{2^{N-\ell}p+k} :\; p = 0, \dots, 2^\ell - 1\right)\widehat{\ } \quad (k = 0, \dots, 2^{N-\ell})$ kiszámítása
$\left(a_{2^{N-(\ell-1)}p+k} :\; p = 0, \dots, 2^{\ell-1} - 1\right)\widehat{\ } \quad (k = 0, \dots, 2^{N-(\ell-1)} - 1)$ alapján:

$$\begin{aligned} &\left(a_{2^{N-\ell}p+k} :\; p = 0, \dots, 2^\ell - 1\right)\widehat{\ } = \\ &= \left[\left(a_{2^{N-(\ell-1)}p+k} : p=0, \dots, 2^{\ell-1}-1\right)\widehat{\ }, \left(a_{2^{N-(\ell-1)}p+k+2^{N-(\ell-1)}} :\; p=0, \dots, 2^{\ell-1}-1\right)\widehat{\ }\right] L_{2^{\ell-1}} \end{aligned}$$

Minden ℓ) lépésben $2^{N-\ell}$ db. 2^ℓ hosszú vektor Fourier transzformáltját számítjuk ki 2^N szorzással. [Az $\omega_1, \omega_2, \omega_4, \dots, \omega_{2^N}$ konstansok már elővannak készítve].
Tehát $N2^N$ szorzás elegendő. Ezzel szemben $a\Omega_{2^N}$-hez $(2^N)^2$ szorzás kell.

Megjegyzés. Írjuk fel a $0, 1, \dots, 2^N - 1$ indexeket 2-es számrendszerben, majd ezeket a 2-es számrendszerbeli alakokat fordítsuk meg. Olyan sorrendet kapunk, hogy az alá képezhető bináris fa szerint haladhatunk az algoritmusbeli duplázással.

Példa. $(N = 3)$

$$\begin{array}{cccccccc}
000 & 001 & 010 & 011 & 100 & 101 & 110 & 111 \\
000 & 100 & 010 & 110 & 001 & 101 & 011 & 111 \\
\mathbf{0} & \mathbf{4} & \mathbf{2} & \mathbf{6} & \mathbf{1} & \mathbf{5} & \mathbf{3} & \mathbf{7}
\end{array}$$

$$(\mathbf{0}, \mathbf{4}) \qquad (\mathbf{2}, \mathbf{6}) \qquad (\mathbf{1}, \mathbf{5}) \qquad (\mathbf{3}, \mathbf{7})$$

$$(\mathbf{0}, \mathbf{2}, \mathbf{4}, \mathbf{6}) \qquad\qquad (\mathbf{1}, \mathbf{3}, \mathbf{5}, \mathbf{7})$$

$$(\mathbf{0}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{3}, \mathbf{4}, \mathbf{5}, \mathbf{6}, \mathbf{7})$$

Lemma. (A Megjegyzés alapja). *A* $T_n[\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n]_2 := [\alpha_n\alpha_{n-1}\dots\alpha_1]_2 \quad (\alpha_1, \dots, \alpha_n = 0, 1)$ *leképezésre* állnak a következők:*
(1) $T_n : \{0, 1, \dots, 2^n - 1\} \leftrightarrow \{0, 1, \dots, 2^n - 1\}$,
(2) $T_n\{\ell : 2^k m \le \ell < 2^k(m + 1)\}$ *mindig egy* 2^{n-k}*-differenciájú számtani sorozat.*

Bizonyítás. (1) triviális.
(2): 2-es számrendszerben az $\{\ell : 2^k m \le \ell < 2^k(m + 1)\}$ halmaz tagjai

$$[\beta_1\beta_2\dots\beta_{n-k}\alpha_1\dots\alpha_k]_2 \quad (\alpha_1, \dots, \alpha_k = 0, 1), \text{ ahol } [\beta_1\dots\beta_{n-k}]_2 = m.$$

Vagyis az $\overline{m} := [\beta_{n-k}\dots\beta_1]_2 = T_{n-k}(m)$ számmal

$$\begin{aligned}
T_n\{\ell : 2^k m \le \ell < 2^k(m + 1)\} &= \big\{[\alpha_k\dots\alpha_1\beta_{n-k}\dots\beta_1]_2 : \alpha_1, \dots, \alpha_k = 0, 1\big\} = \\
&= \big\{2^{n-k}[\alpha_1\dots\alpha_k]_2 + [\beta_{n-k}\dots\beta_1]_2 : \alpha_1, \dots, \alpha_k = 0, 1\big\} = \\
&= \big\{2^{n-k}r + \overline{m} : r = 0, \dots, 2^k - 1\big\}.
\end{aligned}$$

* $[\alpha_1\alpha_2\dots\alpha_n]_2 := 2^{n-1}\alpha_1 + 2^{n-2}\alpha_2 + \dots + 2^0\alpha_n$ *a 2-es számrendzerbeli érték.*

ROMBERG-INTEGRÁL

Jelölések. $X \subset [-1,1]$ véges halmaz, $w : X \to \mathbb{R}_+$ súlyfüggvény

$$Af := \sum_{x \in X} w(x) f(x) \qquad (f \in \mathcal{C}[-1,1]$$

közelítése az $If := \int_{-1}^{1} f(x)\, dx$ integrálnak.

Tétel. *Ha* $Ip = Ap$ $\big(\forall\, p \in \mathrm{Pol}_n(\mathbb{R})\big)$ *és* $f \in \mathcal{C}^{n+1}[-1,1]$, $n \geq 0$, *akkor*

$$\big|If - Af\big| \leq 4 \max_{p \in \mathrm{Pol}_n(\mathbb{R})} \|f - p\|_\infty \leq \frac{\big\|f^{(n+1)}\big\|_\infty}{2^{n-2}(n+1)!} \ .$$

Bizonyítás. Kompaksági érv [Gyakorlat] mutatja, hogy a $\max_{p \in \mathrm{Pol}_n(\mathbb{R})}$ távolság jól-definiált. Másrészt $g_1 \geq g_2 \Rightarrow Ig_1 \geq Ig_2$, $Ag_1 \geq Ag_2$, továbbá $A1_{[-1,1]} = I1_{[-1,1]} = 2$ (mivel $1_{[-1,1]} \in \mathrm{Pol}_0(\mathbb{R})$). Legyen $p \in \mathrm{Pol}_n(\mathbb{R})$ tetszőlegesen rögzítve. Ekkor $Ip = Ap$ feltevés szerint. Ezért

$$\begin{aligned}\big|If - Af\big| &= \big|Ip + I(f-p) - [Ap + A(f-p)]\big| = \big|I(f-p) - A(f-p)\big| \leq \\ &\leq I|f-p|\big| + A|f-p|\big| \leq I\big(\max|f-p|1_{[-1,1]}\big) + A\big(\max|f-p|1_{[-1,1]}\big) = \\ &= \max|f-p|\big[I1_{[-1,1]} + A1_{[-1,1]}\big] = \|f-p\|_\infty \cdot (2+2).\end{aligned}$$

A második egyenlőtlenség bizonyításához legyen

$$p_*(x) := f\big(c_0, \ldots, c_n \big| x\big)\ , \quad \text{ahol } c_0, \ldots, c_n \text{ a } T_{n+1} \text{ Csebisev-polinom gyökei.}$$

Tudjuk: az általános Rolle-tétel következményeként

$$f(x) - p_*(x) = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\vartheta_x) \prod_{i=0}^{n} (x - c_i) \quad (x \in [-1,1].$$

Innen, mivel $\|T_{n+1}\|_\infty = 2^{1-(n+1)} = 2^{-n}\Big[= \min_{1 \leq a_0, \ldots, a_n \leq 1} \big\| \prod_{i=0}^{n} (x - a_i)\big\|_\infty\ !\Big]$, itt

$$\begin{aligned}\|f - p_*\|_\infty &\leq \frac{1}{(n+1)!} \max_{\vartheta \in [-1,1]} \big|f^{(n+1)}(\vartheta)\big| \cdot \max_{x \in [-1,1]} \Big|\prod_{i=0}^{n}(x - c_i)\Big| = \\ &= \frac{1}{(n+1)!} \big\|f^{(n+1)}\big\|_\infty \cdot \big\|T_{n+1}\big\|_\infty = \frac{2^{-n}}{(n+1)!} \big\|f^{(n+1)}\big\|_\infty.\end{aligned}$$

Heurisztika. Véve egy Pol_m-en pontos szimmetrikus súlyfüggvényű A integrálközelítést, olyan újabb $v : Y \to \mathbb{R}$ súlyfüggvényt képezünk az $A^{(2)}f := \frac{1}{2} A\big(f(\frac{x+1}{2}) + f(\frac{x-1}{2})\big)$ *duplázás*sal, amelynél az

$$A^{[*,2^{m+2}]} := \frac{2^{m+2}}{2^{m+2}-1} A^{(2)} - \frac{1}{2^{m+2}-1} A$$

integrálközelítés pontos Pol_{m+2} fölött is. A [Móricz] jegyzeben nyitva marad a kérdés, *miért pozitív súlyú* $A^{[*,2^{m+2}]}$?

Megjegyzés. $A^{(2)}$ súlyai $\frac{1}{2}w(2y+1)+\frac{1}{2}w(2y-1)$ vagy $\frac{1}{2}w(2y\pm 1)$ alakúak.

Jelölés. Általában is legyen

$X \subset Y$ véges, $w : X \to \mathbb{R}$, $u : Y \to \mathbb{R}$ és $\rho > 1$ esetén

$$A^{[w,u,\rho]}f := \frac{1}{\rho-1}\Big[\rho\sum_{y\in Y}u(y)f(y) - \sum_{x\in X}w(x)f(x)\Big].$$

Lemma. *Legyen* $\rho \geq 2$, *és tegyük fel, hogy* $u : Y \mapsto \frac{1}{2}\big[\big(\mathrm{ran}(w)+\mathrm{ran}(w)\big)\cup\mathrm{ran}(w)\big]$. *Ekkor*
$\max w/\min w < \rho/2 \implies$ *az* $A^{[u,w,\rho]}$ *funkcionál* $v : Y \to \mathbb{R}$ *súlyai pozitivok,*
$\max w/\min w < \rho/4 \implies$ $\max v/\min v \leq 4\max w/\min w$.

Bizonyítás. Legyen $w^* := \max w$, $w_* := \min w$. Észrevétel:

$$v(y) = \frac{\rho u(y) - 1_X(y)w(y)}{\rho-1} \in \Big[\frac{\rho w_*/2 - w^*}{\rho-1}, \frac{\rho w^*}{\rho-1}\Big] \qquad (y\in Y).$$

Vagyis $w^*/w_* < \rho/2$ esetén azaz $v_* := \min v \geq [\rho w_*/2 - w^*]/[\rho-1] > 0$. Másrészt mivel $v^* := \max v \leq \rho w^*/[\rho-1]$,

$$\frac{v^*}{v_*} \leq \frac{\rho w^*}{\rho w_*/2 - w^*} = \frac{2w^*/w_*}{1-(2/\rho)(w^*/w_*)} \qquad (w^*/w_* < \rho/2)$$

mert a nevező > 0 ilyenkor. Ha pedig $w^*/w_* < \rho/4$ is teljesül, akkor

$$\frac{v^*}{v_*} \leq \frac{2w^*/w_*}{1-(2/\rho)(w^*/w_*)} \leq \frac{2w^*/w_*}{1-1/2} = 4\frac{w^*}{w_*}.$$

Tétel. *Legyenek* $k = 0,1,2,\ldots$ *mellett* X_k véges $\subset [-1,1]$, $w_k : X_k \to (0,\infty)$, *és ezekkel* $A_k : f \mapsto \sum_{x\in X_k} w_k(x)f(x)$. *Ha* $X_0 \subset X_1 \subset X_2 \subset \cdots$ *és*

$$A_{k+1} = A^{[w_k,u_k,\rho_k]} \qquad (k=0,1,2,\ldots)$$

alakú, ahol $u_k : X_{k+1} \to \frac{1}{2}\big[\big(\mathrm{ran}(w_k)+\mathrm{ran}(w_k)\big)\cup\mathrm{ran}(w_k)\big]$, *továbbá*

$$\max w_0/\min w_0 \leq \rho_0, \qquad \rho_k \geq 4\rho_{k-1} \qquad (k=1,2,\ldots),$$

akkor az A_k $(k=0,1,2,\ldots)$ *funkcionálok mind pozitív súlyúak.*

Bizonyítás. A lemma szerint indukcióval adódik $\max w_k / \min w_k \le \rho_k \le \rho_{k+1}/4$ és innen a pozitív súlyozás is.

Direkt megközelítés

Legyen adott $A_m : f \mapsto \sum_{x \in X_m} w_m(x) \quad (m = 0, 1, 2, \ldots)$, ahol $w_m(x) \neq 0$ $(x \in X_m)$, a Romberg-féle

$$w_0 \equiv \text{Const.}, \quad A_{m+1} := \frac{4^{m+1}}{4^{m+1}-1} A_m^{(2)} - \frac{1}{4^{m+1}-1} A_m$$

rekurzióval ($A_m^{(2)} :=$ [A duplázottja]). Tudjuk: ez biztosítja A_m pontosságát Pol_{2m+1}-re.

Tétel. *Minden* $m = 0, 1, \ldots$ *mellett* $\min w_m > 0$ *és* $\dfrac{\max w_m}{\min w_m} \le 4^m \dfrac{\max w_0}{\min w_0}$.

Bizonyítás. Az $m = 0$ eset triviális. Tegyük fel, $\min w_m > 0$ és $\frac{\max w_m}{\min w_m} \le 4^m \frac{\max w_0}{\min w_0}$. Ekkor

$$\max w_{m+1} \le \frac{4^{m+1}}{4^{m+1}-1} \max w_m - \frac{1}{4^{m+1}-1} \min w_n,$$
$$\min w_{m+1} \ge \frac{4^{m+1}}{4^{m+1}-1} \frac{1}{2} \min w_m - \frac{1}{4^{m+1}-1} \max w_n \ ,$$

ahonnan

$$\frac{\max w_{m+1}}{\min w_{m+1}} \le \frac{\frac{4^{m+1}}{4^{m+1}-1} \max w_m - \frac{1}{4^{m+1}-1} \min w_n}{\frac{4^{m+1}}{4^{m+1}-1} \frac{1}{2} \min w_m - \frac{1}{4^{m+1}-1} \max w_n} =$$
$$= \frac{4^{m+1} \frac{\max w_m}{\min w_m} - 1}{\frac{1}{2} 4^{m+1} - \frac{\max w_m}{\min w_m}} \le \frac{4^{m+1} 4^m - 1}{\frac{1}{2} 4^{m+1} - 4^m} < 4^{m+1}$$

mivel az $x \mapsto \frac{4^{m+1} x - 1}{\frac{1}{2} 4^{m+1} - x}$ függvén növő az $1 \le x < \frac{1}{2} 4^{m+1} = 2 \cdot 4^m$ szakaszon. Qu.e.d.

FÜGGELÉK

Kimaradt műhelymunkák

Rendezetlen adatsorozatok Hermite-polinomjai Newton-differencia mátrixokkal

Jelölés. $X=(x_0,x_1,\ldots), Y=(y_0,y_1,\ldots)$ rögzített sorozatok; $a^{[m]}:=\overbrace{a,a,\ldots,a}^{m-\text{szer}}$;
$A|[i,j]:=(a_i,a_{i+1},\ldots,a_j)$, ha $i\le j$ és $A=(a_0,a_1,a_2,\ldots)$.

Definíció. Az $(u_0,\ldots,u_n),(v_0,\ldots,v_n)$ pár egy *átrendezés*e $(a_0,\ldots,a_n),(b_0,\ldots,b_n)$, ha valamely $\pi:\{0,\ldots,n\}\leftrightarrow\{0,\ldots,n\}$ permutációval $a_k=u_{\pi(k)}, b_k=v_{\pi(k)}$ $(k=0,\ldots,n)$. Ez az átrendezés *klasszikus*, ha van olyan $\alpha_1,\ldots,\alpha_r$ felsorolása $\{u_0,\ldots,u_n\}$ elemeinek, hogy $(a_0,\ldots,a_n)=\big(\alpha_1^{[m_1]},\ldots,\alpha_r^{[m_r]}\big)$ alakú ($r=\#\{x_0,\ldots,x_n\}$, $\sum_k m_k=n{+}1$), és emellett $i<j$ és $a_i=a_j=\alpha_k$ esetén mindig $\pi(i)<\pi(j)$.

Példa. $(c,b,a,a,a,c,b),(y_0,y_1,y_2,y_3,y_4,y_5,y_6)$ két klasszikus átrendezése
$(c,c,b,b,a,a,a),(y_0,y_5,y_1,y_6,y_2,y_3,y_4)$ ill. $(b,b,a,a,a,c,c),(y_1,y_6,y_2,y_3,y_4,y_0,y_5)$.

Megjegyzés. Ha A,B átrendezése $(x_0,\ldots,x_n),(y_0,\ldots,y_n)$-nek, akkor $h_n^{X,Y}=h_n^{A,B}$.
Ha az A,B átrendezés klasszikus, akkor az előző alfejezet szerint $h_n^{A,B}$ kiszámolható a $G^{A,B}$= felső-tr$\big[g_{ij}^{A,B}\big]_{0\le i\le j\le n}$ $\big(g_{ij}^{A,B}=\gamma_i^{A|[i,j],B|[i,j]}\big)$ Newton-differencia mátrix használatával:

$h_n^{A,B}=\sum\limits_{k<n}g_{kk}^{A,B}\omega_k^A$, ahol $A=(\alpha_1^{[m_1]},\ldots,\alpha_r^{[m_r]})$, $B=(\beta_1^{(0)},\ldots,\beta_1^{(m_1)},\ldots,\beta_r^{(m_r)})$ mellett

$$\begin{array}{lll}
\text{0. sor:} & g_{0,j}^{A,B}=\beta_k^{(0)},\ \text{ ha }\ a_j=\alpha_k & (j=0,\ldots,n),\\
i.\ \text{sor:} & g_{i,j}^{A,B}=\beta_k^{(i)},\ \text{ ha }\ a_{j-i}=a_j=\alpha_k & (j=i,i{+}1,\ldots,n),\\
 & g_{i,j}^{A,B}=\dfrac{g_{i-1,j}^{A,B}-g_{i-1,j-1}^{A,B}}{\alpha_k-\alpha_\ell},\ \text{ ha }\ a_i=\alpha_k\ne\alpha_\ell=a_{j-i} & (j=i,i{+}1,\ldots,n).
\end{array}$$

Ennek ellenére a $h_n^{U,V}=\sum_k\gamma_k^{U,V}\prod_{j<k}(x-u_j)$ ill. $h_n^{X,Y}=\sum_k\gamma_k^{X,Y}\prod_{j<k}(x-x_j)$ előállítások tagjai jelentősen mások lehetnek. Cél: a $\big(\gamma_k^{X,Y}\ :\ k=0,1,\ldots\big)$ sorozat tagjainak egymás utáni kiszámítása egymástól minél kevésbé különböző Newton-differenciákat tartalmazó mátrixokkal.

Lemma. *Legyen* $A:=(a_0,\ldots,a_n),B:=(b_0,\ldots,b_n)$ *ill.* $C:=(c_0,\ldots,c_n),D:=(d_0,\ldots,d_n)$ *két különböző átrendezése valamely sorozatpárnak. Ekkor*

$$a_n=c_n\implies\quad\gamma_n^{A,B}=\gamma_n^{C,D},\ \omega_n^A=\omega_n^C\ .$$

Bizonyítás. Tudjuk: $h_n^{A,B}=h_n^{C,D}$. Tegyük fel, hogy $a_n=c_n$. Észrevétel: ekkor $(a_0,\ldots,a_{n-1}),(b_0,\ldots,b_{n-1})$ átrendezése $(c_0,\ldots,c_{n-1}),(d_0,\ldots,d_{n-1})$-nek. Innen $h_{n-1}^{A,B}=h_{n-1}^{C,D}$ is adódik. Másrészt valamely $\rho:\{0,\ldots,n-1\}\leftrightarrow\{0,\ldots,n-1\}$ permutációval

$$\omega_n^A=\prod_{j<n}(x-a_j)=\prod_{j<n}(x-a_{\rho(j)})=\prod_{j<n}(x-c_j)=\omega_n^C\ .$$

Ezért végül $\gamma_n^{A,B}\omega_n^A = h_n^{A,B} - h_{n-1}^{A,B} = h_n^{C,D} - h_{n-1}^{C,D} = \gamma_n^{C,D}\omega_n^C, \Longrightarrow \gamma_n^{A,B} = \gamma_n^{C,D}$.

Következmény. *Ha $n = 0,1,2,\ldots$ mellett $A^{(n)} = \big(a_0^{(n)},\ldots,a_n^{(n)}\big), B^{(n)} = \big(b_0^{(n)},\ldots,b_n^{(n)}\big)$ rendre klasszikus átrendezései az $(x_0,\ldots,x_n),(y_0,\ldots,y_n)$ pároknak, akkor a $G^{A^{(k)},B^{(k)}}$ Newton-differencia mátrixok jobb-alsó elemeivel*

$$h_n^{X,Y} = \sum_{k=0}^{n} \big[G^{A^{(k)},B^{(k)}}\big]_{k,k}\, \omega_k^X \qquad (n = 0,1,\ldots).$$

Algoritmus. Egy, a Következmény szerinti $A^{(n)}, B^{(n)}$ sorozatot konstruálunk rekurzióval.

Kiindulás: $\quad A^{(0)} := \big(x_0\big),\ B^{(0)} := \big(y_0\big),\ \omega_0 \equiv 1,\ h_0^{X,Y} \equiv y_0.$

$A^{(n-1)}, B^{(n-1)}, \omega_{n-1}^X, G^{A^{(n-1)},B^{(n-1)}}, h_{n-1}^{X,Y}$ alapján $A^{(n)}, B^{(n)}, \omega_n^X, G^{A^{(n)},B^{(n)}}, h_n^{X,Y}$:

(∗) $A^{(n-1)} = \big(\alpha_1^{[m_1]},\ldots,\alpha_s^{[m_s]}\big),\ \ x_n = \alpha_\ell\ \ \big(m_1,\ldots,m_s > 0,\ \alpha_i \neq \alpha_j\ (i \neq j)\big)$ esetén

$A^{(n)} := \big(\alpha_{\ell+1}^{[m_{\ell+1}]},\ldots,\alpha_s^{[m_s]},\alpha_1^{]m_1]},\ldots,\alpha_{\ell-1}^{[m_{\ell-1}]},x_n^{[m_\ell+1]}\big)$,

$B^{(n)} := \big(b_{L+1}^{(n-1)},\ldots,b_{n-1}^{(n-1)},b_0^{(n-1)},\ldots,b_L^{(n-1)},y_n\big)$, ahol $L := \sum_{j\le\ell} m_j$;

$G^{A^{(n)},B^{(n)}}$ kiszámításakor

az $(i,j) \in [0 \le i \le j \le n-L] \cup [0, \le i \le L, i \le j \le n-1]$ indexű

elemek készen vannak $G^{A^{(n-1)},B^{(n-1)}}$-ben;

(∗∗) $x_n \notin \{x_0,\ldots,x_{n-1}\}$ esetén $A^{(n)} := \big(A^{(n-1)},x_n\big),\ B^{(n)} := \big(B^{(n-1)},y_n\big)$;

$G^{A^{(n)},B^{(n)}}$ kiszámításakor az első n oszlop $= G^{A^{(n-1)},B^{(n-1)}}$;

(∗∗∗) A rekurziós lépés vége: $\omega_n^X := (x - x_n)\omega_{n-1}^X,\ \ h_n^{X,Y} := h_{n-1}^{X,Y} + \big[G^{A^{(n)},B^{(n)}}\big]_{n,n}\omega_n^X$.

Megjegyzés. $A^{(n)}$ képzése A^{n-1} alapján: x_n-et írunk az n. pozícióba, elé tesszük az $A^{(n-1)}$-beli x_n-eseket, majd az $A^{(n-1)}$-beli x_n-esek utáni részt a sorozat elejére írjuk, végül mögéje tesszük az $A^{(n-1)}$-beli x_n-esek előtti tagokat. Ekkor $B^{(6)}$ $B^{(5)}$-ből és y_6-ból ennek megfelelő ciklkus indexeltolással adódik. Pl.: $x_6 = \mathbf{1}$ és $A^{(5)} = (2,2,\mathbf{1},0,0,0)$ esetén $A^{(6)} = (0,0,0,2,2,\mathbf{1},\mathbf{1})$. Ekkor $B^{(5)} = (y_0,y_5,y_1,\mathbf{y_2},y_3,y_4)$ esetén $B^{(5)} = (y_3,y_4,y_0,y_5,y_1,\mathbf{y_2},y_6)$.

Példa. A már tekintett $\mathbb{Z}_3$-beli $X = (2,1,0,0,0,2,1,\ldots)$, $Y = (2,2,2,1,1,1,2,\ldots)$ adatokhoz $h_0^{X,Y}, h_1^{X,Y},\ldots,h_6^{X,Y}$ konstrukciója.

$n = 0)$ $\ \omega_0 = \omega_0^X = 1 (= x^0)$, $x_0 = 2$, $A_0 = A^{(0)} = \big[2\big]$, $y_0 = 2$, $B_0 = B^{(0)} = \big[2\big]$,

$G_0 = G^{A^{(0)},B^{(0)}} = \big[2\big], \quad h_0 = h_0^{X,Y} = \big[G_0\big]_{00}\omega_0 = 2.$

$n = 1)^*$ $\omega_1 = x - 2 \overset{\mathrm{mod}_3}{=} x + 1, \quad x_1 = 1 \notin A_0,\ \ A_1 = \big[A_0, 1\big] = \big[\mathbf{2}, 1\big]$,

$B_1 = \big[B_0, y_1\big] = \big[\mathbf{2}, \mathit{2}\big], \quad G_1 = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & 2 \\ & \underline{0} \end{bmatrix}, \quad h_1 = h_0 + \underline{0}\cdot\omega_1 = 2.$

∗ Vastagon szedve az előzőből örököltek + utolsó új elem + 0 nevező miatti elemek.

$n=2)\;\; \omega_2 = \omega_1(x-1) =^{\mathrm{mod}_3}= x^2+2, \quad x_2 = 0 \notin A_1, \quad A_2 = \big[A_1, 0\big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{1}, 0\big],$

$$B_2 = \big[A_1, y_2\big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{2}, 2\big], \quad G_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2 \\ & \mathbf{0} & 0 \\ & & \underline{0} \end{bmatrix}, \quad h_2 = h_1 + \underline{0}\cdot\omega_2 = 2.$$

$n=3)\;\; \omega_3 = \omega_2 x =^{\mathrm{mod}_3}= x^3+2x,$

$x_3 = 0 = [A_2 \text{ utolsó tagja}],\ A_3 = \big[A_2, 0\big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{1}, \mathbf{0}, 0\big],\ B_3 = \big[A_2, y_3\big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{2}, 1\big],$

$$G_3 = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & 1 \\ & & \mathbf{0} & 2 \\ & & & \underline{2} \end{bmatrix}, \quad h_3 = h_2 + \underline{2}\cdot\omega_3 =^{\mathrm{mod}_3}= 2 + x^2 + x^3.\ 3$$

$n=4)\;\; \omega_4 = \omega_3 x =^{\mathrm{mod}_3}= x^4+2x^2, \quad x_4 = 0 = [A_2 \text{ utolsó tagja}],$

$A_4 = \big[A_3, 0\big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{1}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, 0\big], \quad y_4 = \mathbf{1},\ B_4 = \big[B_3, y_4\big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{1}, 1\big],$

$$G_4 = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{1} & 1 \\ & & \mathbf{0} & \mathbf{2} & 1 \\ & & & \mathbf{2} & 1 \\ & & & & \underline{2} \end{bmatrix}, \quad h_4 = h_3 + \underline{2}\cdot\omega_4 =^{\mathrm{mod}_3}= 2 + x^2 + 2x^3 + 2x^4.$$

$n=5)\;\; \omega_5 = \omega_4 x =^{\mathrm{mod}_3}= x^5+2x^3, \quad x_5 = 2 \in A_4, \quad A_5 = \big[(A_4)^{\to x_5}_{\leftarrow}, x_5\big],\ B_5 = \big[(B_4)^{\to}_{\leftarrow}, y_5\big],$

$$A_5 = \Big[\overbrace{\mathbf{2}}^{\to}, \underbrace{\mathbf{1}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}}_{\leftarrow}, 2\Big] = \big[\mathbf{1}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{0}, \mathbf{2}, 2\big],\ B_5 = \Big[\overbrace{\mathbf{2}}^{\to}, \underbrace{\mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{1}, \mathbf{1}}_{\leftarrow}, 2\Big] = \big[\mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{2}, \mathbf{1}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, 1\big],$$

$$G_5 = \Big[(G_4)^{\to}_{\leftarrow}, \left[\begin{smallmatrix} y_5 \\ * \end{smallmatrix}\right]\Big] = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2 \\ & \mathbf{0} & \mathbf{1} & \mathbf{1} & 0 & 1 \\ & & \mathbf{2} & \mathbf{1} & 1 & 2 \\ & & & \mathbf{1} & 0 & 2 \\ & & & & 2 & 1 \\ & & & & & \underline{2} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} h_5 &= h_4 + \underline{2}\cdot\omega_5 =^{\mathrm{mod}_3}= \\ &= 2 + x + x^2 + 2x^4 + 2x^5. \end{aligned}$$

$n=6)\;\; \omega_6 = \omega_5(x-2) =^{\mathrm{mod}_3}= 2x^3 + 2x^4 + x^5 + x^6, \quad x_6 = 1 \in A_5,$

$A_6 = \big[(A_5)^{\to}_{\leftarrow}, x_6\big] = \big[\mathbf{0}\ \ \mathbf{0}\ \ \mathbf{0}\ \ \mathbf{2}\ \ \mathbf{2}\ \ 1\ \ 1\big], \quad B_6 = \big[\mathbf{2}, \mathbf{1}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, \mathbf{1}, \mathbf{2}, 1, 2\big],$

$$G_6 = \Big[(G_5)^{\to}_{\leftarrow}, \left[\begin{smallmatrix} y_6 \\ * \end{smallmatrix}\right]\Big] = \begin{bmatrix} \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & \mathbf{2} & 2 & 2 \\ & \mathbf{1} & \mathbf{1} & 0 & \mathbf{1} & 0 & 2 \\ & & \mathbf{1} & 1 & 2 & 1 & 1 \\ & & & 0 & 2 & 2 & 0 \\ & & & & 1 & 0 & 1 \\ & & & & & 2 & 1 \\ & & & & & & \underline{2} \end{bmatrix}, \quad \begin{aligned} h_6 &= h_3 + \underline{2}\cdot\omega_6 =^{\mathrm{mod}_3}= \\ &= 2 + x + x^2 + x^3 + x^5 + 2x^6 \end{aligned}.$$

Hermite interpoláció és Hermite-Vandermonde mátrixok

Alapfeladat. Adottak: $x_1 < x_2 < \cdots < x_r$, $[y_k^{(0)}, y_k^{(1)}, \dots, y_k^{(m_k)}]$ $(k = 1, \dots, r)$.
Keresendő a

$$\Phi := \big\{ \big(x_k, [y_k^{(0)}, \dots, y_k^{m_k}]\big) : \ k = 1, \dots, r \big\}$$

függvénycsíra $(m_1 + \cdots + m_r - 1)$-edfokú polinomos kiterjesztése,
Azaz olyan $P = P_\Phi \in \mathrm{Pol}_{m_1+\cdots+m_r-1}$, amelyre

$$\begin{aligned}
&P(x_1) = y_1^{(0)}, \quad P'(x_1) = y_1^{(1)}, \quad P^{(2)}(x_1) = y_1^{(2)}, \dots, P^{(m_1)}(x_1) = y_1^{(m_1)};\\
&P(x_2) = y_2^{(0)}, \quad P'(x_2) = y_2^{(1)}, \quad P^{(2)}(x_2) = y_2^{(2)}, \dots, P^{(m_2)}(x_2) = y_2^{(m_2)};\\
&\qquad\vdots\\
&P(x_r) = y_r^{(0)}, \quad P'(x_r) = y_r^{(1)}, \quad P^{(2)}(x_r) = y_r^{(2)}, \dots, P^{(m_r)}(x_r) = y_r^{(m_r)} \ .
\end{aligned}$$

Van-e ehhez az $m_1 + \ldots + m_r + r$ adathoz ilyen $(m_1 + \ldots + m_r + r - 1)$-edfokú polinom?

Tétel. (Hermite) *IGEN, és egyértelműen. Ugyanis a*

$$P_\Phi := \alpha_0 + \alpha_1 x + \ldots + \alpha_{m_1+\cdots+m_r+r-1} x^{m_1+\ldots+m_r+r-1}$$

alaknak megfelelő $\alpha_0, \dots, \alpha_{m_1+\cdots+m_r-1}$ *ismeretlenű*

$$\begin{aligned}
\frac{d^m}{dx^m}\Big|_{x=x_1} P(x) &= y_1^{(m)} \qquad (m = 0, \dots, m_1)\\
\frac{d^m}{dx^m}\Big|_{x=x_2} P(x) &= y_2^{(m)} \qquad (m = 0, \dots, m_2)\\
&\ \vdots\\
\frac{d^m}{dx^m}\Big|_{x=x_r} P(x) &= y_r^{(m)} \qquad (m = 0, \dots, m_r)
\end{aligned}$$

lineáris egyenletrendszer $\det \neq 0$.

Megjegyzés. A fenti egyenletrendszer mátria egy ún. *Hermite–Vandermonde-mátrix.* Ennek determinánsa

$$\prod_{1 \le j < k \le r} (x_k - x_j)^{(m_j+1)(m_k+1)} \neq 0 \ .$$

Visszavezetés Vandermonde-mátrixokra:
Tekintsük mindegyik $\alpha \in \mathbb{R}$ számhoz az $(m_1 + 1) + \cdots + (m_r + 1)$-es

$$\widehat{\alpha} := \begin{bmatrix} 1 \\ \alpha \\ \vdots \\ \alpha^{m_1+\cdots+m_r+r-1} \end{bmatrix}$$

oszlopvektort. Ezzel az Hermite–Vandermonde-mátrix

$$\left[\left(\frac{d^\ell}{d\varepsilon^\ell}\Big|_{\varepsilon=0}\widehat{(x_k+\varepsilon)}:\ \ell=0,\dots,m_r\right):\ k=1,\dots,r\right]=\lim_{\varepsilon\to 0}\frac{1}{\prod_{k=1}^r (m_k)!\varepsilon^{1+\dots+m_k}}\cdot$$
$$\cdot\left[\left(\text{Newton-diff}_\ell\big(\widehat{x_k},\widehat{(x_k+\varepsilon)},\dots,\widehat{(x_k+\ell\varepsilon)}:\ \ell=0,\dots,m_r\right):\ k=1,\dots,r\right]$$

alakban írható fel. Ez determinánstartó oszlop-kombinációkkal előáll az

$$\left[\left(\widehat{(x_k+\ell\varepsilon)}:\ \ell=0,\dots,m_r\right):\ k=1,\dots,r\right]$$

szuper-Vandermonde-mátrixból. Ezért

$$\big[\text{Hermite–Vandermonde-determináns}\big]=$$
$$=\lim_{\varepsilon\to 0}\prod_{k=1}^r (m_k)!^{-1}\varepsilon^{-m_k(m_k+1)/2}\big[\text{szuper-Vandermonde-determináns}(\varepsilon)\big]=$$
$$=[\prod_{s=1}^r\prod_{i<j\le m_s}(j-i)]\prod_{1\le j<k\le r}(x_k-x_j)^{(m_j+1)(m_k+1)}.$$

Hermite-Vandermonde mátrixok LU-felbontása

Legyen N adott szám, és tetszőleges $x\in\mathbb{R}$ mellett legyen

$$v^{(k)}(x):=\left[\frac{d^k}{dx^k}\Big|_{t=x}t^{i-1}\right]_{i=1}^N\qquad(k=0,\dots,N-1).$$

Azaz pl. $N=4$-nél

$$v^{(0)}(x)=\begin{bmatrix}1\\x\\x^2\\x^3\end{bmatrix},\ \ v^{(1)}(x)=\begin{bmatrix}0\\1\\2x\\3x^2\end{bmatrix},\ \ v^{(2)}(x)=\begin{bmatrix}0\\0\\2\\6x\end{bmatrix},\ \ v^{(3)}(x)=\begin{bmatrix}0\\0\\0\\6\end{bmatrix}.$$

Tudjuk: $(d_1+1)+(d_2+1)+\dots+(d_r+1)=N$ esetén az

$$f^{(k)}(x_j)=y_j^{(k)}\quad(j=1,\dots,r;\ k=0,\dots,d_j-1),\quad f(x)=a_0+\dots+a_{N-1}x^{N-1}\in\mathrm{Pol}_N$$

Hermite-féle interpolációs feladat az

$$[a_0\ a_1\dots a_{N-1}]V\big(x_1^{(d_1)},\dots x_r^{(d_r)}\big)=[y_1^{(0)}\dots y_r^{(d_r)}]$$

lineáris egyenletrendszerre vezet ahol

$$V\big(x_1^{(d_1)},\dots x_r^{(d_r)}\big)=\Big[v^{(0)}(x_1)\cdots v^{(d_1)}(x_1)\ \ v^{(0)}(x_2)\ \ \cdots\ \ v^{(d_r)}(x_r)\Big].$$

Pl. $N=3$ esetén

$$V\big(a^{(0)},b^{(0)},c^{(0)}\big)=\begin{bmatrix}1&1&1\\a&b&c\\a^2&b^2&c^2\end{bmatrix},\ V\big(a^{(1)},c^{(0)}\big)=\begin{bmatrix}1&0&1\\a&1&c\\a^2&2a&c^2\end{bmatrix},\ V\big(a^{(2)}\big)=\begin{bmatrix}1&0&0\\a&1&0\\a^2&2a&2\end{bmatrix}.$$

Differenciálás-mentes, testek fölötti polinomokra is átvihető megfogalmazásban a Hermite-feladattal ekvivalens a következő: *adunk meg olyan* $f(x):=a_0+a_1x+\cdots+a_Nx^N$ *polinomot, amelyre*

$$f(a_m+t)=z_m^{(0)}+z_m^{(1)}t+\cdots+z_{d_m}^{(m)}t^{d_m}\qquad(m=1,\ldots,r).$$

[Ezt a Taylor-formula szerint a $z_j^{(k)}:=k!y_j^{(k)}$ helyettesítéssel kapjuk.]
Tudjuk: a k-adik differenciálhányados a k-adik osztott differenciák határértéke:

$$\frac{d^k}{dt^k}\Big|_{t=x}\varphi(t)=\lim_{t\to0}t^{-k}\Delta_t^k\varphi(x)=\lim_{t\to0}\frac{1}{t^k}\sum_{\ell=0}^{k}(-1)^{k-\ell}\binom{k}{\ell}\varphi(x+\ell t).$$

Speciálisan

$$\frac{d^k}{dt^k}\Big|_{t=x}t^{i-1}=\lim_{t\to0}\frac{1}{t^k}\sum_{\ell=0}^{k}(-1)^{k-\ell}\binom{k}{\ell}(x+\ell t)^{i-1}.$$

Ezért

$$v^{(k)}(x)=\lim_{t\to0}\frac{1}{t^k}\sum_{\ell=0}^{k}(-1)^{k-\ell}\binom{k}{\ell}v^{(0)}(x+\ell t).$$

Propozíció. *A* $V\big(x_1^{(d_1)},\ldots,x_r^{(d_r)}\big)$ *Hermite–Vandermonde-mátrix a közönséges*

$$W_t(x^{(d_1)},\ldots,x_r^{(d_r)}):=V\big(\underbrace{x_1,x_1+t,\ldots,x_1+d_1t}_{},\ldots,\underbrace{x_r,x_r+t,\ldots,x_r+d_rt}_{}\big)$$

Vandermonde-mátrixokkal a következőképpen fejezhető ki:

$$V\big(x_1^{(d_1)},\ldots,x_r^{(d_r)}\big)=\lim_{t\to0}W_t\big(x_1,\ldots,x_r+d_rt\big)\big[U_{d_1}\oplus\cdots\oplus U_{d_r}\big]\big[D_{d_1}(t)\oplus\cdots\oplus D_{d_r}(t)\big]\ ,$$

ahol

$$U_d:=\mathrm{feltr}\Big[(-1)^{j-i}\binom{j-1}{i-1}\Big]_{i\le j\le d+1}\ ,\quad D_d(t):=\mathrm{diag}(1,t^{-1},\ldots,t^{-d}).$$

Következmény. $\det V\big(x_1^{(d_1)},\ldots,x_r^{(d_r)}\big)=\big[\prod_{m=1}^{r}\prod_{i<j\le d_m}(j-i)\big]\prod_{m<n\le r}(x_n-x_m)^{(d_m+1)(d_n+1)}$.

Példa. $N=5$, $d_1=2$, $d_2=1$ estén

$$V\big(a^{(2)},b^{(1)}\big)=\begin{bmatrix}1&0&0&1&0\\a&1&0&b&1\\a^2&2a&2&b^2&2b\\a^3&3a^2&6a&b^3&3b^2\\a^4&4a^3&12a^2&b^4&4b^3\end{bmatrix}=$$

$$= \lim_{t\to 0} \begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ a & a+t & a+2t & b & b+t \\ a^2 & (a+t)^2 & (a+2t)^2 & b^2 & (b+t)^2 \\ a^2 & (a+t)^3 & (a+2t)^3 & b^3 & (b+t)^3 \\ a^4 & (a+t)^4 & (a+2t)^4 & b^4 & (b+t)^4 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & -2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & t^{-1} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & t^{-2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & t^{-1} \end{bmatrix}$$

Ekkor

$$\begin{aligned} \det V\big(a^{(2)}, b^{(1)}\big) &= \lim_{t\to 0}[(a+t)-a][(a+2t)-a][b-a][(b+t)-a]\cdot \\ &\qquad \cdot [(a+2t)-(a+t)][b-(a+t)][(b+t)-(a+t)]\cdot \\ &\qquad \cdot [b-(a+2t)][(b+t)-(a+2t)][(b+t)-b]t^{-4} \quad = \\ &= 2(b-a)^6. \end{aligned}$$

Jelölés. Legyen $\big(m(j), q(j)\big)$ az az indexpár, amellyel a $W_t(x_1^{(d_)}, \ldots, x_r^{(d_r)})$ mátrix j-edik oszlopa $\big[1, x_{m(j)} + q(j)t, \big(x_{m(j)} + q(j)t\big)^2, \ldots, \big(x_{m(j)} + q(j)t\big)^{N-1}\big]^{\mathrm{T}}$.

Tétel. *A $W_t(x_1^{(d_1)}, \ldots, x_r^{(d_r)})$ mátrix $W_t = L(t)U(t)$ LU-felbonása $L(t)$ L-tényezőjének limesze $t \to 0$ mellett*

$$I\text{+altr.} \left[\sum_{k_1+\cdots+k_{m(j)}=i-j} \binom{k_1+d_1}{d_1} \cdots \binom{k_{m(j)-1}+d_{m(j)-1}}{d_{m(j)-1}} \binom{k_{m(j)}+q(j)}{q(j)} x_1^{k_1} \cdots x_{m(j)}^{k_{m(j)}} \right]_{j<i}.$$

Bizonyítás. A közönséges $W_t = V_n(x_1, x_1+t, \ldots, x_r + d_r t)$ Vandermonde-mátrix LU-felbontása L-tényezőjének (i,j) indexű tagja $i < j$ mellett

$$\sum_{\ell_{1,0}+\cdots+\ell_{m(j),q(j)}=i-j} [x_1 + 0\cdot t]^{\ell_{1,0}} \cdots [x_{m(j)} + q(j)t]^{\ell_{m(j),q(j)}}$$

alakú, míg a főátlóban 1-esek, fölötte 0-k vannak. Ennek a limesze $t \to 0$ mellett egy invertálható 1-főátlójú felső-trialguláris mátrix, amelynél az (i,j) indexű tag $i < j$ mellett

$$\begin{aligned} \sum_{\ell_{1,0}+\cdots+\ell_{m(j),q(j)}=i-j} x_1^{m_{1,0}} \cdots x_{m(j)}^{\ell_{m(j),q(j)}} &= \sum_{k_1+\cdots+k_{m(j)}=i-j} \; \sum_{\ell_{1,0}+\cdots+\ell_{1,d_1}=k_1} \cdots \sum_{\ell_{m(j),0}+\cdots+m_{m(j),q(j)}=k_{m(j)}} x_1^{k_1} \cdots x_{m(j)}^{k_{m(j)}} = \\ &= \sum_{k_1+\cdots+k_{m(j)}=i-j} \binom{k_1+d_1}{d_1} \cdots \binom{k_{m(j)}+q(j)}{q(j)} x_1^{k_1} \cdots x_{m(j)}^{k_{m(j)}} \end{aligned}$$

az ismétléses kombinációk binomiális kifejezésével. Mivel fennáll az

$$\begin{aligned} U(t)[U_1 \oplus \cdots U_r][D_1(t) \oplus \cdots D_r(t)] &= L(t)^{-1} V(t)[U_1 \oplus \cdots U_r][D_1(t) \oplus \cdots D_r(t)] \to \\ &\to L^{-1} \lim_t V(x_1^{(d_1)}, \ldots, x_r^{(d_r)}) \quad (t \to 0) \end{aligned}$$

konvergecia, fennáll

$$\big[V(x_1^{(d_1)},\dots,x_r^{(d_r)})\text{ L-tényezője}\big]=\lim_{t\to 0}L(t),$$

$$\big[V(x_1^{(d_1)},\dots,x_r^{(d_r)})\text{ U-tényezője}\big]=\lim_{t\to 0}U(t)[U_1\oplus\cdots U_r][D_1(t)\oplus\cdots D_r(t)].\quad\text{Qu.e.d.}$$

Lemma. *Legyenek* $a_1,\dots,a_n:\mathbb{R}\to\mathbb{R}$ *a* 0*-nál folytonos függvények,* $x\in\mathbb{R}$*, továbbá* $0\le k\le n$ *egész. Ekkor az*

$$\big[\alpha_0,\alpha_1,\dots,\alpha_m\big]_\Delta:=\frac{1}{m!}\sum_{\ell=0}^{m}(-1)^{m-\ell}\binom{m}{\ell}\alpha_\ell$$

Newton-differenciákkal

$$\lim_{t\to 0}\frac{1}{t^k}\left[\prod_{j=1}^{n}\big[x-a_j(t)\big],\prod_{j=1}^{n}\big[x+t-a_j(t)\big],\dots,\prod_{j=1}^{n}\big[x+kt-a_j(t)\big]\right]_\Delta=$$

$$=\frac{d^k}{d\xi^k}\bigg|_{\xi=x}\prod_{j=1}^{n}[\xi-a_j(0)].$$

Bizonyítás. A $\sigma_k(\alpha_1,\dots,\alpha_n):=\sum_{0\le i_1<i_2<\cdots<i_k\le n}\alpha_{i_1}\cdots\alpha_{i_k}$ szimmetrikus alappolinomokkal

$$\prod_{j=1}^{n}\big[\xi-a_j(t)\big]=\sum_{\ell=0}^{n}\xi^\ell\sigma_{n-\ell}\big(a_1(t),\dots,a_n(t)\big).$$

Ezért

$$\Big[\prod_{j=1}^{n}\big[x-a_j(t)\big],\big[x+t-a_j(t)\big],\dots,\big[x+kt-a_j(t)\big]\Big]_\Delta=$$

$$=\Big[\sum_{\ell=0}^{n}x^\ell\sigma\big(a_1(t),\dots,a_n(t)\big),\dots,\sum_{\ell=0}^{n}(x+kt)^\ell\sigma_{n-ell}\big(a_1(t),\dots,a_n(t)\big)\Big]_\Delta=$$

$$=\sum_{\ell=0}^{n}\big[x^\ell,\dots,(x+kt)^\ell\big]_\Delta\,\sigma_{n-\ell}\big(a_1(t),\dots,a_n(t)\big).$$

Tudjuk: $\lim_{t\to 0}t^{-k}\big[x^\ell,\dots,(x+kt)^\ell\big]_\Delta=\frac{d^k}{d\xi^k}\big|_{\xi=x}\xi^\ell$. Innen

$$\lim_{t\to 0}\frac{1}{t^k}\Big[\prod_{j=1}^{n}\big[x-a_j(t)\big],\big[x+t-a_j(t)\big],\dots,\big[x+kt-a_j(t)\big]\Big]_\Delta=$$

$$=\sum_{\ell=0}^{n}\Big[\frac{d^k}{d\xi^k}\bigg|_{\xi=x}\xi^\ell\Big]\sigma_{n-\ell}\big(a_1(t),\dots,a_n(t)\big)=$$

$$=\frac{d^k}{d\xi^k}\Big|_{\xi=x}\sum_{\ell=0}^{n}\xi^\ell\sigma_{n-\ell}\big(a_1(t),\dots,a_n(t)\big)=$$

$$=\frac{d^k}{d\xi^k}\bigg|_{\xi=x}\prod_{j=1}^{n}[\xi-a_j(0)].\quad\text{Qu.e.d.}$$

Tétel. *Az Hermite–Vandermonde-mátrix U-tényezőjében az (i,j)-indexű tag*

$$\frac{d^{q(j)}}{d\xi^{q(j)}}\bigg|_{\xi=x_{m(j)}} \prod_{\ell<i} \big[\xi - x_{m(\ell)}\big].$$

Bizonyítás. Azonnali következménye a Propozíciónak.

Tétel. *Legyen* $\mathbb{K}$ *tetszőleges test. Az* $a_0, a_1, \dots, a_N \in \mathbb{K}$ *ismertelenű és*

$$y_0^{(m)}, y_1^{(m)}, \dots, y_{d_m}^{(m)} \qquad (m = 1, \dots, r)$$

adatú

$$f(x) := a_0 + a_1 x + \cdots + a_N x^N \in \mathrm{Pol}_{N,\mathbb{K}}[x], \quad N := (d_1+1) + \cdots + (d_r+1) - 1,$$
$$f(x_m + t) = y_0^{(m)} + y_1^{(m)} t + \cdots + y_{d_m}^{(m)} t^{d_m} \qquad (m = 1, \dots, r)$$

Hermite–Vandermonde típusú feladat mátrixa az előzőekben használt $m(i), q(i)$ jelölésekkel

$$H = \left[\binom{i}{q(j)} x_{m(i)}^{j-q(i)}\right]_{i,j=1}^{N+1}.$$

A transzponált H^{T} mátrix LU-felbontású L-tényezőjében az (i,j) $(i>j)$ indexű tag

$$\sum_{k_1+\cdots+k_{m(j)}=i-j} \binom{k_1+d_1}{d_1} \cdots \binom{k_{m(j)-1}+d_{m(j)-1}}{d_{m(j)-1}} \binom{k_{m(j)}+q(j)}{q(j)} x_1^{k_1} \cdots x_r^{k_r}.$$

Az U-tényező (i,j) $(1 < i \le j)$ indexű tagja

$$\sum_{1 \le \ell_1 < \cdots < \ell_{i-1-q(j)} \le i} \ \prod_{p=1}^{i-1-q(j)} [x_{m(j)} - x_{m(\ell_p)}] = \Big[\xi^j \text{ együtthatója } \prod_{\ell<i} \big[\xi - x_{m(\ell)}\big]\text{-ben}\Big]\big(x_{m(j)}\big).$$

Inverz Vandermonde-mátrixok LU-felbontása

Az $A = L_A U_A$ felbontásnál $A^{-1} = U_A^{-1} L_A^{-1} =$[feltr][altr].

$\Pi = \big[\delta_{i,N+1-j}\big]_{i,j=1}^{N}$ permutáló mátrix.

$\Pi X = \big[X$ sorai fordított sorrendeben$\big]$, $\quad X\Pi = \big[X$ oszlopai fordított sorrendeben$\big]$

$\Pi X \Pi = \big[x_{N+1-i,N+1-j}\big]_{i,j=1}^{N}$ tükrzés a mátrix középpontjára.

Π[altr]$\Pi =$[feltr], $\quad \Pi$[feltr]$\Pi =$[altr].

$A^{-1} = \left[\Pi U_{\Pi A\Pi}^{-1}\Pi\right]\left[\Pi L_{\Pi A\Pi}^{-1}\Pi\right] =$[altr][feltr].

Tétel. *A* $V := V(x_1,\dots,x_N)$ *Vandermonde-mátrixnál*

$$\widetilde{V} := \Pi V\Pi = V(x_N^{-1}, x_{N-1}^{-1},\dots,x_1^{-1})\,\mathrm{diag}(x_N^{N-1},\dots,x_1^{N-1}),$$
$$L_{\widetilde{V}} = I + \text{al-tr.}\Big[\sum_{k_1+\cdots+k_j=i-j} x_N^{k_1}\cdots x_{N+1-j}^{k_j}\Big]_{i>j},$$
$$U_{\widetilde{V}} = \text{fel-tr.}\Big[x_{N+1-j}^{N-1}\prod_{m<i}\big(x_{N+1-j}^{-1} - x_{N+1-i}^{-1}\big)\Big]_{i\le j}.$$

Következmény. *Egy* $(N\times N)$*-es* W *Hermite–Vandermonde-mátrix* $\Pi W\Pi$ *transzformáltjának az LU-felbontásában az L-tényező nem-triviális elemei*

$$\sum_{k_1+\cdots+k_j=i-j} x_{m(N)}^{k_1}x_{m(N-1)}^{k_2}\cdots x_{m(N+1-j)}^{k_j}$$

alakúak. Az U-tényző nem-triviális elemeinek alakja

$$\frac{d^{q(N+1-j)}}{d\xi^{q(N+1-j)}}\bigg|_{\xi=x_{m(j)}}\xi^{N-1}\prod_{\ell<i}\big[\xi^{-1} - x_{N+1-m(\ell)}\big].$$

Emékeztető. Az Hermite-Lagrange interpoláció feladata a következőképpen is megfogalmazható. Adottak: $x_0,\dots,x_R$ alappontok, $N\ge R$, $b_0,\dots,b_N\in\mathbb{R}$,

$$m(0), m(1),\dots,m(N)\in\{0,\dots,R\},\quad k(0),k(1),\dots,k(N)\in I:=\{0,\dots,N\}$$

úgy, hogy minden $0\le\mu\le R$ indexű alappontnál

$$I_\mu := \{i\in I:\ m(i)=\mu\} = \big\{i(\mu,0), i(\mu,1),\dots,i(\mu,R_\mu)\big\}\ne\emptyset,\quad k\big(i(\mu,\kappa)\big)\equiv\kappa.$$

Keresendő: $f(x) := a_0 + a_1x + \cdots + a_Nx^N$ polinom, amelyre

$$(*)\ \ f\big(x_{m(\ell)}+t\big) = b_{i\left(m(\ell),0\right)} + b_{i\left(m(\ell),1\right)}t + \cdots + b_{i\left(m(\ell),k(\ell)\right)}t^{k(\ell)} + o\big(t^{k(\ell)}\big)\quad (\ell=0,\dots,N).$$

Newton-típusú polinomfejlesztés: rendre kiszámoljuk az alábbi $f_0, f_1,\dots,f_N$ polinomokat, és $f=f_N$ lesz, ahol

$$\begin{aligned} f_n(x) :=& A_0 + A_1(x-x_{m(0)}) + A_2(x-x_{m(0)})(x-x_{m(1)}) + \cdots + \\ &+ \cdots + A_n(x-x_{m(0)})\cdots(x-x_{m(n-1)}).\end{aligned}$$

Itt mindegyik A_n együttható csak $\big[b_0,\dots,b_n\big]$-től függ, mégpedig lineárisan. Tehát

$$\begin{bmatrix} A_0\\ \vdots\\ A_N\end{bmatrix} = \mathbf{L}\begin{bmatrix} b_0\\ \vdots\\ b_N\end{bmatrix}$$

egy *alsó-trianguláris* $\mathbf{L}$ mátrixszal, amelynek együtthatói egymás után kiszámolhatók.

Kapcsolat az Hermite–Vandermonde-mátrix inverzével.
Általánosítunk egy [Math.Monthly]-beli gondolatot. Mivel az

$$1,(x-x_{m(0)}),(x-x_{m(0)})(x-x_{m(1)}),\ldots,(x-x_{m(0)})\cdots(x-x_{m(N-1)})$$

polinomok rendre $0,1,2,\ldots,N$-edfokúak, egy *felső-trianguláris* $\mathbf{U}$ mátrixszal

$$\big[1,x-x_{m(0)},\ldots,(x-x_{m(0)})\cdots(x-x_{m(N-1)})\big]=\big[1,x,\ldots,x^N\big]\mathbf{U}.$$

Ennek az együtthatói is direkt kiszámíthatók.
Tétel. *A* $(*)$*-ot teljesítő polinom* $f(x)=\big[1,x,\ldots,x^N\big]\mathbf{UL}\big[b_0,\ldots,b_N\big]^{\mathrm{T}}$. *Tehát* $\mathbf{VU}=V^{-1}$, *ahol* $V:=\Big[\binom{j}{k(i)}x^j_{m(i)}\Big]_{i,j=0}^N$ *a* $(*)$ *feladat Hermite–Vandermonde-mátrixa.*

$\mathbf{U}$ (i,n)-edik tagja $(0\le i<n)$ éppen x^i együtthatója $\prod_{\ell=0}^n(x-x_{m(\ell)})$-ben:

$$u_{in}=(-1)^i\sum_{0\le\ell_1<\cdots<\ell_i\le n}x_{\ell_1}\cdots x_{\ell_i}.$$

$\mathbf{L}$ (n,j)-edik tagja $(n\ge j\ge 0)$ éppen b_j együtthatója A_n-ben. Rekurzióval

$$\begin{aligned}f_n(t+x_{m(n)})&=\mathrm{Pol}_{k(n)-1}(t)+b_nt^{k(n)}+o(t^{k(n)})=\\&=A_0+A_1\big(t+(x_{m(n)}-x_{m(1)})\big)+\cdots+A_{n-1}\prod_{\ell=0}^{n-1}\big(t+[x_{m(n)}-x_{m(\ell)}]\big)+\\&\quad+A_nt^{k(n)}\prod_{\ell:\,n>\ell\ne m(n)}[x_{m(n)}-x_{m(\ell)}]\;+\;o(t^{k(n)}).\end{aligned}$$

Vagyis, egy J halmaz r-elemű részhalmazainak a családját J_r-rel jelölve,

$$\begin{aligned}&b_n=A_n\prod_{\ell:\,n>\ell\ne m(n)}[x_{m(n)}-x_{m(\ell)}]\;+\sum_{j=0}^{n-1}A_j\sum_{L\in\{\ell\le j:\;m(\ell)\ne m(n)\}_{n-k(n)}}\prod_{\ell\in L}[x_{m(n)}-x_{m(\ell)}],\\&A_n=\lambda_{n,0}A_0+\lambda_{n,1}A_1+\cdots\lambda_{n-1,n}A_{n-1}+\lambda_{n,n}b_n,\quad\text{ahol}\\&\lambda_{n,n}:=-\prod_{\ell:\,n>\ell\ne m(n)}[x_{m(n)}-x_{m(\ell)}]^{-1},\\&\lambda_{n,j}:=\lambda_{n,n}^{-1}\sum_{L\in\{\ell\le j:\;m(\ell)\ne m(n)\}_{n-k(n)}}\prod_{\ell\in L}[x_{m(n)}-x_{m(\ell)}]\qquad(j<n).\end{aligned}$$

Itt $A_0=b_0$ konstans, $A_1=A_1(b_0,b_1),\ldots,A_{n-1}=A_{n-1}(b_0,\ldots,b_{n-1})$. Ezért

$$\mathbf{L}=\mathbf{L}_N\mathbf{L}_{N-1}\cdots\mathbf{L}_1\mathbf{L}_0,$$

ahol

$$L_n := \begin{bmatrix} 1 & & & & & & \\ & \ddots & & & & & \\ & & 1 & & & & \\ \lambda_{n,0} & \cdots & \lambda_{n,n-1} & 1 & & & \\ & & & & 1 & & \\ & & & & & \ddots & \\ & & & & & & 1 \end{bmatrix} \qquad (n = 0, \ldots, N).$$

Innen nagyon szép eredmény adódik indukcióval a klasszikus Lagrange-interpolációs esetben, azaz amikor $r = N + 0$ $d_1 = \cdots = d_{N+1} = 0$: az alappontokat $x_0, \ldots, x_N$-nel jelölve,

$$A_n := A_n(z_0, \ldots, z_N) = \sum_{j=0^n} A_{n,j} z_j \ ; \qquad A_{n,j} := \prod_{i:\, j \neq i \leq n} (x_j - x_i)^{-1}.$$

Láttuk: a $V_t := V(\underbrace{x_1, x_1 + t, \ldots, x_1 + d_1 t}_{d_1+1}, \ldots, \underbrace{x_r, x_r + t, \ldots, x_r + d_r t}_{d_r+1})$ mátrixokkal, ahol

$$V(x_0, \ldots, x_N) := \begin{bmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ x_0 & x_1 & \cdots & x_N \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ x_0 & x_1^N & \cdots & x_N^N \end{bmatrix}$$

az algebrai Hermite-feladat mátrixának W transzponáltja a következőképpen írható fel limeszként:

$$W = \lim_{t \to 0} V_t \underbrace{[N_{d_1} \oplus \cdots \oplus N_{d_r}]}_{\mathcal{N}} \underbrace{[D_{d_1}(t)^{-1} \oplus \cdots \oplus D_{d_r}(t)^{-1}]}_{\mathcal{D}(t)^{-1}} = \lim_{t \to 0} V_t \mathcal{N} \mathcal{D}(t)^{-1},$$

ahol

$$N_d := \text{alsó-tr.} \left[(-1)^{j-i} \binom{j}{i} \right]_{0 \leq i \leq j \leq d}, \qquad D_d(t) := \operatorname{diag}(1, t, 2t^2, \ldots, d! t^d).$$

Tudjuk még: a V_t mátrixok jól-kezelhető $V_t = L_t U_t$ LU-felbontásával

$$W = LU, \quad L = \lim_{t \to 0} L_t, \quad U = \lim_{t \to 0} U_t \mathcal{N} \mathcal{D}(t)^{-1}.$$

Ezért

$$W^{-1} = U^{-1} L^{-1} = \left[\lim_{t \to 0} \mathcal{D}(t) \mathcal{N}^{-1} U_t^{-1} \right] L^{-1}.$$

Itt ismertek az inverz Vandermonde-mátrixról már tudottak alapján az összes U_t^{-1}, U_t^{-1} mátrixok transzponáltja, sőt $[L^1]^{\mathrm{T}}$ =felső-tr.$\big[1, x - x_0, \ldots, \prod_{n=0}^{N-1} (x - x_n)$ együtthatói$\big]$. Tudjtk még: egyszerűen $\mathcal{N}^{-1} =$ alsó-tr. $\left[\binom{j}{i} \right]_{0 \leq i \leq j \leq d}$. Vagyis

$$[W^{\mathrm{T}}]^{-1} = \underbrace{[L^{-1}]^{\mathrm{T}}}_{\text{ISMERT}} \lim_{t \to 0} \underbrace{[U_t^{-1}]^{\mathrm{T}}}_{\text{ISMERT}} \underbrace{[\mathcal{N}^{-1}]^{\mathrm{T}}}_{\text{ISMERT}} \underbrace{\mathcal{D}(t)^{\mathrm{T}}}_{\text{TRIV}}.$$

Foglalkozzunk először az *alsó-trianguláris*

$$\overline{U}_t := [U_t^{-1}]^{\mathrm{T}} = \Big[\overline{U}_t^{(m,\overline{m})}\Big]_{m,\overline{m}=1}^{r}, \qquad \overline{U}_t^{(m,\overline{m})} \in \mathrm{Mat}([0,d_m]\times[0,d_{\overline{m}}])$$

mátrixokkal. Itt a Lagrange-alappontokat a $\{x_m + jt :\ j = 0,\dots,d_m\}$ $(m = 1,\dots,r)$ pontcsaládok adják. Ezért

$$\overline{U}_t^{(m,m)} = \text{al-tr.}\left[\prod_{\mu:\,1\le\mu<m}\big[x_m - x_\mu + o(t)\big]^{-d_\mu}\prod_{\substack{p:\,0\le p\le i\\ p\ne j}}\big[(x_m+jt)-(x_m+pt)\big]^{-1}\right]_{1\le j\le i\le d_m},$$

ha pedig $\overline{m} < m$, akkor

$$\overline{U}_t^{(m,\overline{m})} = \left[\prod_{\mu:\,m>\mu\ne\overline{m}}\big[x_m - x_\mu + o(t)\big]^{-d_\mu}\big[x_{\overline{m}} - x_m + o(t)\big]^{-(i+1)}\right]_{1\le i,j\le d_m}.$$

Vagyis

$$\overline{U}_t^{(m,m)} = \text{al-tr.}\left[\prod_{\mu:\,1\le\mu<m}\big[x_m - x_\mu\big]^{-d_\mu}[j!(i-j)!]^{-1}t^{-i}\right]_{1\le j\le i\le d_m} + o(t),$$

$$\overline{U}_t^{(m,\overline{m})} = \left[\prod_{\mu:\,m>\mu\ne\overline{m}}\big[x_m - x_\mu\big]^{-d_\mu}\big[x_{\overline{m}} - x_m\big]^{-(i+1)}\right]_{1\le i,j\le d_m} + o(t) \qquad (\overline{m}<m).$$

A Newton-differenciák differenciál-közelítése alapján kapjuk a következőt.

Lemma. *Legyen $\mathcal{I}$ véges indexhalmaz, $a_i : \mathbb{R}\to\mathbb{R}$ $i\in\mathcal{I}$) olyan függvények, hogy $\lim_{t\to 0} a_i(t) = \alpha_i \ne 0$. Ekkor a $(d+1)$-hosszú $z(t) = [z_j(t) :\ j = 0,\dots,d]$,*

$$z_j(t) := \left[\prod_{i\in\mathcal{I}}\big[a_i(t) + jt\big]^{-1}\prod_{\substack{s=0\\ s\ne j}}^{d}[jt - st]^{-1}\right]$$

vektorfüggvényre

$$\lim_{t\to 0} z(t)N_dD_d(t) = \Big[\sum_{\substack{[k_i:\subset\in\mathcal{I}]\ge 0\\ \sum_i k_i = d-j}}\prod_{i\in\mathcal{I}}\alpha_i^{-k_i-1} :\ j = 0,\dots d\Big].$$

Bizonyítás. Az $N_dD_d(t)$ mátrix n-edik oszlopa

$$\left[\underbrace{0,\dots,0}_{n},\binom{n}{n}n!t^n,\binom{n+1}{n}(n+1)!t^{n+1},\dots,\binom{d}{n}d!t^d\right]^{\mathrm{T}}.$$

Ezért a $w(t) := z(t)N_d D_d(t)$ vektor n-edik eleme

$$\begin{aligned}
w_n(t) &= \sum_{j=n}^{d} \prod_{i\in\mathcal{I}} \big[a_i(t) + jt\big]^{-1} \prod_{\substack{s=0\\ s\neq j}}^{d} [jt - st]^{-1} \binom{j}{n} n!t^n = \\
&= \sum_{j=n}^{d} \prod_{i\in\mathcal{I}} \big[a_i(t) + jt\big]^{-1} \frac{(-1)^{d-j} t^{-d}}{j!(d-j)!} \frac{j!}{n!(j-n)!} n!t^n = \\
&= \sum_{j=n}^{d} \frac{(-1)^{d-j}}{t^{d-n}} \frac{1}{(d-j)!(j-n)!} \prod_{i\in\mathcal{I}} \big[a_i(t) + jt\big]^{-1} =^{s:=j-n} \\
&= \frac{(-1)^{d-n}}{(d-n)!} t^{d-n} \sum_{s=0}^{d-n} (-1)^s \binom{d-n}{s} \prod_{i\in\mathcal{I}} \big[\big(a_i(t) + nt\big) + st\big]^{-1} = \\
&= \frac{1}{(d-n)!t^{d-n}} \sum_{s=0}^{d-n} (-1)^{(d-n)-s} \binom{d-n}{s} f_{n,t}(st) ,
\end{aligned}$$

ahol $f_{n,t}(h) := \prod_{i\in\mathcal{I}} \big[\big(a_i(t)+nt\big)+h\big]^{-1}$. Vagyis $w_n(t)$ egy $(d-n)$-edik Newton-differencia $1/(d-n)!$-szorosa. Tehát

$$w_n(t) = \frac{1}{(d-n)!} f_{n,t}^{(d-n)}\big(\underbrace{\theta_{n,t}}_{\in[0,t]} \big).$$

Mivel $\alpha_i = a_i(0) \neq 0$ $(i \in \mathcal{I})$, a $(t,h) \to f_{n,t}(h)$ függvény analitikus $(0,0)$ körül. Így $t \to 0$ esetén

$$w_n(t) \to \Big[f_{n,0}(h) \text{ Taylor-sorában } h^{n-d} \text{ együtthatója}\Big] = \sum_{\substack{[k_i:\subset\in\mathcal{I}]\geq 0\\ \sum_i k_i=d-j}} \prod_{i\in\mathcal{I}} \alpha_i^{-k_i-1}.$$

Következmény. $\overline{U}_{p,j}^{(m,m)} = \displaystyle\sum_{k_0+\cdots+k_{m-1}=p-j} \prod_{i=0}^{m-1} \binom{d_i}{k_i} (x_m - x_i)^{-d_i} \quad (0 \leq j \leq p \leq d_m),$

$$\overline{U}_{p,j}^{(m,\overline{m})} = \sum_{\substack{k_0+\cdots+k_{m-1}=p-j\\ k_{\overline{m}}=0}} \prod_{\substack{i=0\\ i\neq\overline{m}}}^{m-1} \binom{d_i}{k_i} (x_{\overline{m}} - x_i)^{-d_i-1} \binom{}{k_m} (x_{\overline{m}} - x_m)^{-p-1} \quad (\overline{m} < m).$$

Tudjuk: ha $x_1, \ldots, x_n$ páronként különbözőek, akkor az $f(x_k) = b_k$ $(k = 1, \ldots, n)$ Lagrange-interpolációs feladat megoldása

$$f(x) = A(b_1)+A(b_1,b_2)(x-x_1)+A(b_1,b_2,b_3)(x-x_1)(x-x_2)+\cdots+A(b_1,\ldots,b_n)\prod_{k:k<n}(x-x_k),$$

ahol $A(b_1,\dots,b_\ell)=\sum_{k:k\le\ell} b_k\prod_{j:j\le\ell}(x_k-x_j)^{-1}$.
Legyenek $a_1,\dots,a_K$ páronként különbözőek $\mathbb{K}$-ban, és legyenek $d_1,\dots,d_K\ge 0$ adott egészek,

$$P_g(t):=b_g^{(0)}+b_g^{(1)}t+\dots+b_g^{(d_g)}t^{d_g}\qquad (g=1,\dots,K)$$

pedig adott $\mathbb{K}$-fölötti polinomok. Az

$$f(a_g+t)=P_g(t)+o(t^{d_g})\qquad (g=1,\dots,K)$$

Hermite-féle interpolációs feladat polinomfejlesztéses megoldása egy

$$f(x)=\sum_{(g,p)} A\big[b_{\overline{g}}^{\overline{p}}:\ (\overline{g},\overline{p})\le(g,p)\big]\prod_{(\overline{g},\overline{p}):\ (\overline{g},\overline{p})<(g,p)}(x-a_{\overline{g}})$$

alakú polinomot ad. Az $A\big[b_{\overline{g}}^{\overline{p}}:\ (\overline{g},\overline{p})\le(g,p)\big]$ együttható pontos alakját az

$$\begin{aligned}&x_1=x_1(t):=a_1,\quad x_2=a_1+t,\quad\dots,\quad x_{d_1+1}:=a_1+d_1t,\\&\quad x_{d_1+2}:=a_2,\quad\dots,\quad x_n:=a_K+d_Kt;\\&b_1=b_1(t):=P_1(0),\quad b_2:=P_1(t),\quad\dots,\quad b_{d_1+1}:=P_1(d_1t),\\&\quad b_{d_1+2}:=P_2(0),\quad\dots,\quad b_n:=P_K(d_Kt)\end{aligned}$$

adatú Lagrange-feladat $f_t(x)$ megoldásainak a $t\to\infty$ limeszéből nyerjük.
Észrevétel: elég csak az utolsó együttható alakját meghatározni:

$$A\big[b_{\overline{g}}^{\overline{p}}:\ (\overline{g},\overline{p})\le(g,p)\big]=\lim_{t\to0}A\big(b_1(t),\dots,b_n(t)\big),$$

ahol az általánosság megszorítása nélkül $(g,p)=(g_K,d_K)$. Itt

$$\begin{aligned}A(b_1,\dots,b_n)&=\sum_{k=1}^n b_k\prod_{j=1}^n(x_k-x_j)^{-1}=\\&=\sum_{g=1}^K\sum_{p=0}^{d_g}b_g^{(p)}(t)\prod_{\substack{\overline{g}=1\\ \overline{g}\ne g}}^K\prod_{\overline{p}=0}^{d_{\overline{g}}}\big[(a_g+pt)-(a_{\overline{g}}+\overline{p}t)\big]^{-1}\cdot\\&\qquad\cdot\prod_{\substack{q=0\\ q\ne p}}^{d_g}\big[(a_g+pt)-(a_g+qt)\big]^{-1}=\\&=\sum_{g=1}^K\sum_{p=0}^{d_g}\frac{(-1)^{d_g+p}}{d_g!\,t^{d_g}}b_g^{(p)}(t)\prod_{\substack{\overline{g}=1\\ \overline{g}\ne g}}^K\prod_{\overline{p}=0}^{d_{\overline{g}}}\big[(a_g-a_{\overline{g}})+(p-\overline{p}\,t)\big]^{-1}=\end{aligned}$$

$$= \sum_{g=1}^{K} \sum_{p=0}^{d_g} \frac{1}{d_g!} \, \frac{\partial^{d_g}}{\partial t^{d_g}} \Big|_{z=\underbrace{\vartheta_t}_{\in[0,d_g]}} \prod_{\substack{\overline{g}=1 \\ \overline{g}\neq g}}^{K} \prod_{\overline{p}=0}^{d_{\overline{g}}} \big[(a_g - a_{\overline{g}}) + z - \overline{p}\, t\big]^{-1} \to$$

$$\to \sum_{g=1}^{K} \frac{1}{d_g!} \, \frac{\partial^{d_g}}{\partial t^{d_g}} \Big|_{z=0} \Big\{ P_g(z) \prod_{\substack{\overline{g}=1 \\ \overline{g}\neq g}}^{K} \big[(a_g - a_{\overline{g}}) + z\big]^{-1} \Big\} =$$

$$= \sum_{g=1}^{K} \Big[\prod_{\substack{\overline{g}=1 \\ \overline{g}\neq g}}^{K} \big[(a_g - a_{\overline{g}}) + z\big]^{-1} \ \text{Taylor-sorának } d_g\text{-ik koefficiense} \Big].$$

Az $[AB]^+ = B^+A^+$ relációról

Tegyük fel, hogy $[AB]^+ = B^+A^+$. Ekkor

$$\begin{aligned}
P_{\mathrm{ran}}(AB) &= \big[AB[AB]^+\big]^n = \big[ABB^+A^+\big]^n = \\
&= A\big[[BB^+][A^+A]\cdots[BB^+][A^+A][BB^+]\big]A^+ = \\
&= A\big[P_{\mathrm{ran}(B)}P_{\ker^\perp(A)}\big]^{n-1}P_{\mathrm{ran}(B)}A^+ \to \\
&\to AP_{\mathrm{ran}(B)\cap\ker^\perp(A)}A^+. \\
\mathrm{ran}(AB) &= A\big[\mathrm{ran}(B)\cap\ker^\perp(A)\big], \\
A^+\mathrm{ran}(AB) &= A^+A\big[\mathrm{ran}(B)\cap\ker^\perp(A)\big], \\
P_{\ker^\perp(A)}\mathrm{ran}(B) &= P_{\ker^\perp(A)}\big[\mathrm{ran}(B)\cap\ker^\perp(A)\big] = \\
&= \mathrm{ran}(B)\cap\ker^\perp(A).
\end{aligned}$$

Ez utóbbi pontosan akkor teljesül, ha a $P_{\mathrm{ran}(B)}, P_{\ker^\perp(A)}$ ortogonális projekciók felcserélhetők (l. Megjegyzés), azaz ha a merőleges $\oplus$ felbontással

$$(*)\quad \mathrm{ran}(B)+\ker^\perp(A) = \big[\mathrm{ran}(B)\cap\ker^\perp(A)\big]\oplus\big[\mathrm{ran}(B)\cap\ker(A)\big]\oplus\big[\mathrm{ran}^\perp(B)\cap\ker(A)\big].$$

Az $A_0 := A|\ker^\perp(A)$, $A = P_{\mathrm{ran}(A)}A_0P_{\ker^\perp(A)}$, $A^+ = P_{\ker^\perp(A)}A_0^{-1}P_{\mathrm{ran}(A)}$ ill.
$B_0 := B|\ker^\perp(B)$, $B = P_{\mathrm{ran}(B)}B_0P_{\ker^\perp(B)}$ fűrész-felbontásokkal adódik a fordított is.

Tétel. *Pontosan akkor áll az* $[AB]^+ = B^+A^+$ *reláció, ha* $(*)$ *teljesül, azaz ha a* $P_{\mathrm{ran}(B)}, P_{\ker^\perp(A)}$ *ortogonális projekciók felcserélhetők.*

Megjegyzés. Legyenek S, T zárt alterek egy X belső-szorzat-térben. Ekkor

$$S\cap T = P_ST \iff P_SP_T = P_TP_S \iff X = (S\cap T)\oplus(S^\perp\cap T)\oplus(S\cap T^\perp)\oplus(S^\perp\cap T^\perp).$$

Bizonyítás: Mindig $S\cap T = P_S(S\cap T)\subset P_ST$.
(a) Tegyük fel, hogy $P_SP_T = P_TP_S$. Ekkor $P_ST\subset\mathrm{ran}(P_S) = S$ továbbá $P_ST = P_SP_TX = P_TP_SX\subset\mathrm{ran}(P_T) = T$, ahonnan $SP_ST\subset S\cap T$.
(b) Tegyük fel, hogy $S\cap T = P_ST$. Ekkor $S\cap T = P_SP_TX$ és minden $x\in X$-re $P_SP_Tx\in S\cap T \Rightarrow P_TP_SP_Tx$, azaz $P_SP_T = P_TP_SP_T$. Itt $P_TP_SP_T$ szimmetrikus, mivel ortogobnalitásuk miatt P_S, P_T szimmetrikusak ($P_S = P_S^{\mathrm{T}}$, $P_T = P_T^{\mathrm{T}}$). Vagyis $P_SP_T = P_TP_SP_T = (P_TP_SP_T)^{\mathrm{T}} = (P_SP_T)^{\mathrm{T}} = P_TP_S$.
(c) A $\overline{P} = I-P$ komplementer-projekciókkal jól-ismert (Bool-algebrából), hogy $P_S\smile P_T$ pontosan akkor, ha $P_SP_T = P_{S\cap T}$, $P_S\overline{P_T} = P_{S\cap T^\perp}$, $\overline{P_S}P_T = P_{S^\perp\cap T}$, $\overline{P_SP_T} = P_{S^\perp\cap T^\perp}$ páronként 0-szorzatú (azaz merőleges képterű) ortogonális projekciók $I = \mathrm{Id}_X$ összeggel.

SPLINE-OK MINT EXTRENÁLIS FÜGGVÉNYEK

$\big(\mathcal{F}, \langle .|. \rangle\big)$ szemidefinit belső-szorzat tér, $\quad \|x\| := \langle x|x\rangle^{1/2}$

$\mathcal{A}$ affin altér $\subset \mathcal{F}$, $\quad \mathrm{T}\mathcal{A} := \mathcal{A} - \mathcal{A} = \{f - g : \ f, g \in \mathcal{F}\} \quad \mathcal{A}$ érintőtere.

Lemma. (∼Riesz). $\delta := \mathrm{dist}(0, \mathcal{A}) = \inf\{\|a\| : \ a \in \mathcal{A}\}$, $\varepsilon > 0$ *esetén*

$$\mathrm{diam}\big\{x \in \mathcal{A} : \ \|x\| \le \delta + \varepsilon\big\} = 2\sqrt{(\delta+\varepsilon)^2 - \delta^2}\ .$$

Bizonyítás. Legyen $x, y \in \mathcal{A}$ két különböző pont, amelyre $\|x\|, \|y\| \le \delta + \varepsilon$. Tekintsük a

$$z := \Big[\text{az } \{x, y\}\text{-on átmenő egyenes 0-hoz (egy) legközelebbi pontja}\Big]$$

pontot. (Ilyen van, mert a $t \mapsto \big\langle (1-t)x + ty \big| 1-t)x + ty \big\rangle$ hossz-négyzet 2-odfokú polinom $\mathbb{R}$-en, amel ≥ 0, és így felveszi a minimumát). Mivel $\mathcal{A}$ affin altér $\mathcal{F}$-ben, $t \in \mathcal{A}$. Másrészt $z \perp z - x$, és a Pythagoras-tétel szerint

$$\|x - z\| \le \sqrt{\|x\|^2 - \|z\|^2} \le \sqrt{(\delta+\varepsilon)^2 - \delta^2}.$$

Hasonlóképpen $\|y - z\| \le \sqrt{(\delta+\varepsilon)^2 - \delta^2}$. A háromszög-egyenlőtlenség szerint így $\|x - y\| \le \|x - z\| + \|z - y\| \le 2\sqrt{(\delta+\varepsilon)^2 - \delta^2}$.

Következmény. *Ha* $f_1, f_2, \ldots \in \mathcal{A}$ *és* $\big\|f_n\big\| \to \mathrm{dist}(0, \mathcal{A})$, *akkor* $\big[f_1, f_2, \ldots\big]$ *Cauchy-féle a* $\|.\|$ *félnorma szerint, és*

$$\big\langle f_n \big| s \big\rangle \to 0 \qquad (n \to \infty;\ s \in \mathrm{T}\mathcal{A}).$$

Bizonyítás. Legyen $\delta_n := \sup\big\{\|f_n\|, \|f_{n+1}\|, \ldots\big\}$. Ekkor $\delta_n \to \delta := \mathrm{dist}(0, \mathcal{A})$, és így $\mathrm{diam}\{f_n, f_{n+1}, \ldots\} \le \sqrt{\delta_n^2 - \delta^2} \to 0$ (ami azt jelenti, hogy $\big[f_1, f_2, \ldots\big]$ $\|.\|$-Cauchy). HTekintsünk egy $s \in \mathrm{T}\mathcal{A}$ pontot. Ha $\|s\| = 0$, akkor triviálisan $\langle f_n|s\rangle = 0$ mindig. Legyen $\|s\| > 0$. Mivel $s \in \mathrm{T}\mathcal{A}$, az $f_n + \mathbb{R}s$ egyenes $\mathcal{A}$-ban fekszik, és ennek az origóhoz legközelebbi pontja $s_n := f_n - \langle f_n|s\rangle\langle s|s\rangle^{-1}s$. Tudjuk már: ez a pont f_n-től $\sqrt{\delta_n^2 - \delta^2}$-nél nem lehet távolabb. Ezért $\|f_n - s_n\| = \big|\langle f_n|s\rangle\langle s|s\rangle^{-1}\big|\|s\| = \big|\langle f_n|s\rangle\big|/\|s\| \to 0$.

Definíció. Ettől kezdve $x_0 < x_1 < \cdots < x_N$, $y_0, \ldots y_N \in \mathbb{R}$ adott valós számok, $K > 0$ adott egész,

$$\mathcal{F} := \Big\{f \in C^K[x_0, x_N] : \ f(x_0) = y_0,\ \ldots\ , f(x_N) = y_N\Big\},$$

$$\mathcal{S} := \mathrm{T}\mathcal{F} = \Big\{s \in C^K[x_0, x_N] : \ s(x_0) = \cdots = s(x_N) = 0\Big\},$$

$$\mathcal{S}_0 := \Big\{s \in \mathcal{S} \cap C^\infty[x_0, x_N] : \ s^{(\ell)}(x_k) = 0 \quad (k = 0, \ldots, N;\ \ell = 0, 1, \ldots)\Big\},$$

$$\big\langle f \big| g \big\rangle := \int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}(x) g^{(K)}(x)\, dx \qquad (f, g \in \mathcal{F}).$$

Alapfeltevés. Ettől kezdve feltesszük, hogy

$$\mathcal{A} \text{ affin altér } \subset \Big\{ f \in \mathcal{F} : \ f(x_k) = y_k \quad (k = 0, \ldots, N) \Big\}, \qquad \mathcal{S}_0 \subset \mathrm{T}\mathcal{A} := \mathcal{A} - \mathcal{A}.$$

Lemma. *Tegyük fel, hogy $f_1, f_2, \ldots \in \mathcal{F}$ Cauchy-sorozat a $\langle .|. \rangle$ szemidefinit skalárszorzat $\|.\|$ félnormája szerint. Ekkor*

$$\begin{aligned} &\exists\ g \in C^{K-1}[x_0, x_N] \quad \exists\ p_1, p_2, \ldots \in \mathrm{Pol}_{K-1} \\ &\qquad \big[f_n - p_n\big]^{(\ell)} \rightrightarrows g^{(\ell)} \qquad (n \to \infty;\ \ell = 0, \ldots, K-1). \end{aligned}$$

Bizonyítás. Válasszuk p_n-et úgy, hogy $\big[f_n - p_n\big]^{(\ell)}(x_0) = 0 \ \ (\ell = 0, \ldots, K-1)$ legyen, azaz $p_n := \sum_{\ell=0}^{K-1} f_n^{(\ell)}(x_0)(x - x_0)^\ell / \ell!$, és tekintsük a $g_n := f_n - p_n$ függvényeket. Triviálisan $f_n^{(K)} = g_n^{(K)}$ $(n = 1, 2, \ldots)$. Ezért $x \in [x_0, x_N]$ esetén

$$\Big| g_n^{(K-1)}(x) - g_m^{(K-1)}(x) \Big| = \Big| \int_{x_0}^{x} \big[g_n - g_m\big]^{(K)} \Big| \le \int_{x_0}^{x} \Big| \big[f_n - f_m\big]^{(K)} \Big| \le^{\mathrm{Cauchy-Schwarz}}$$

$$\le \left[\int_{x_0}^{x} \Big| \big[f_n - f_m\big]^{(K)} \Big|^2 \right]^{1/2} \left[\int_{x_0}^{x} 1 \right]^{1/2} = \big\| f_n - f_m \big\| \sqrt{x - x_0}\ .$$

Innen $k = 1, 2, \ldots, (K-1)$-szeri integrálással kapjuk, hogy

$$\frac{\Big| g_n^{(K-1-k)}(x) - g_m^{(K-1-k)}(x) \Big|}{\big\| f_n - f_m \big\|} \le \int_{z_1 = x_0}^{x} \int_{z_2 = x_0}^{z_1} \cdots \int_{z_k = x_0}^{z_{k-1}} \sqrt{z_k - x_0}\ dz_k \cdots dz_2\ dz_1\ ,$$

vagyis az $\ell = 0, 1, \ldots, (K-1)$-edik deriváltakra

$$\Big| g_n^{(\ell)}(x) - g_m^{(\ell)}(x) \Big| \le \frac{\big\| f_n - f_m \big\|}{\frac{3}{2} \cdot \frac{5}{2} \cdots \frac{2(K-1-\ell)+1}{2}} \big[x - x_0\big]^{K-1-\ell+(1/2)}\ .$$

A jobb oldal pontos alakja kevéssé érdekes, csak annyi kell, hogy innen következnek az

$$\max_{x \in [x_0, x_N]} \Big| g_n^{(\ell)}(x) - g_m^{(\ell)}(x) \Big| \to 0 \qquad (n, m \to \infty;\ \ell = 0, \ldots, K-1)$$

egyenletes konvergencák. Ez $C^{K-1}[x_0, x_N]$ teljessége miatt adja a Lemma állítását.

Megjegyzés. A Lemma konstruktív bizonyítása olyan $f \in C^{K-1}[x_0, x_N]$ függvényt ad, amelyre $f^{(\ell)}(x_0) = 0 \ \ (\ell = 0, \ldots, K-1)$.

Tétel. *Tegyük fel, hogy $f_1, f_2, \ldots \in \mathcal{A}$ és $\big\| f_n \big\| \searrow \mathrm{dist}(0, \mathcal{A})$ $(n \to \infty)$. Ekkor*

$$\begin{aligned} &\exists\ g \in C^{K-1}[x_0, x_N] \qquad \exists\ p_1, p_2, \ldots \in \mathrm{Pol}_{K-1} \\ &\qquad \big[f_n - p_n\big]^{(\ell)} \rightrightarrows g^{(\ell)} \qquad (n \to \infty;\ \ell = 0, \ldots, K-1), \\ &\qquad \int_{x_0}^{x_N} g^{(K-1)}(x) s^{(K+1)}(x)\ dx = 0 \qquad \Big(s \in \mathrm{T}\mathcal{A} \cap C^{K+1}[x_0, x_N] \Big). \end{aligned}$$

Bizonyítás. Riesz Lemmája szerint az $f_1, f_2, \ldots$ sorozat Cauchy-féle az $\langle .|. \rangle$ skalárszorzat félnormája szerint. A g függvényt és a p_n polinomokat vegyük ezért a Lemma alapján. Legyen $s \in \mathrm{T}\mathcal{A} \cap C^{K+1}[x_0, x_N]$ tetszőlegesen adott. Tudjuk: $s(x_0) = s(x_N) = 0$. Sőt Riesz Lemmája szerint fennáll

$$\big\langle f_n - p_n \big| s \big\rangle = \big\langle f_n \big| s \big\rangle \to 0 \qquad (n \to \infty)$$

is. Itt a $g_n := f_n - p_n$ függvényekre parciális integrálással

$$\big\langle g_n \big| s \big\rangle = \int_{x_0}^{x_N} g_n^{(K)} s^{(K)} = g_n^{(K-1)} s^{(K)} \Big|_{x_0}^{x_N} - \int_{x_0}^{x_N} g_n^{(K-1)} s^{(K+1)} = \int_{x_0}^{x_N} g_n^{(K-1)} s^{(K+1)} \,.$$

Mivel pedig $g_n^{(K-1)} \rightrightarrows g^{(K-1)}$, innen $\int_{x_0}^{x_N} g^{(K-1)} s^{(K+1)} = \lim_{n\to\infty} \int_{x_0}^{x_N} g_n^{(K-1)} s^{(K+1)} = \lim_{n\to\infty} \big\langle g_n \big| s \big\rangle = \lim_{n\to\infty} \big\langle f_n \big| s \big\rangle = 0$.

Következmény. 1) *Ha az alappontok száma $N \geq K-1$, akkor*

$$\begin{aligned} &\exists\ f \in C^{K-1}[x_0, x_N] \qquad f(x_k) = y_k \quad (k = 0, \ldots, N) \\ &\qquad\qquad f_n^{(\ell)} \rightrightarrows f^{(\ell)} \qquad (n \to \infty;\ \ell = 0, \ldots, K-1), \\ &\qquad\qquad \int_{x_0}^{x_N} f^{(K-1)}(x) s^{(K+1)}(x)\ dx = 0 \qquad \Big(s \in \mathrm{T}\mathcal{A} \cap C^{K+1}[x_0, x_N]\Big). \end{aligned}$$

2) *Ha az alappontok száma $N < K-1$, akkor*

$$\begin{aligned} &\exists\ f \in C^{K-1}[x_0, x_N] \qquad\qquad \exists\ q_1, q_2, \ldots \in \mathrm{Pol}_{K-1} \\ &\qquad\qquad f(x_k) = y_k, \quad q_n(x_k) = 0 \qquad (k = 0, \ldots, N;\ n = 1, 2, \ldots) \\ &\qquad\qquad \big[f_n + q_n\big]^{(\ell)} \rightrightarrows f^{(\ell)} \qquad (n \to \infty;\ \ell = 0, \ldots, K-1), \\ &\qquad\qquad \int_{x_0}^{x_N} f^{(K-1)}(x) s^{(K+1)}(x)\ dx = 0 \qquad \Big(s \in \mathrm{T}\mathcal{A} \cap C^{K+1}[x_0, x_N]\Big). \end{aligned}$$

Bizonyítás. 1) Az előző jelölésekkel $g_n = f_n - p_n$, $\;g_n \to g\;$ $\big(C^{K-1}[x_0, x_N]\text{-ben}\big)^*$, továbbá $f_n(x_k) = y_k$ $\;(k = 0, \ldots, N)$. Vagyis

$$p_n = f_n - g_n, \quad p_n(x_k) = y_k - g_n(x_k) \to y_k - g(x_k) \quad (n \to \infty;\ k = 0, \ldots, N).$$

Mivel $p_n \in \mathrm{Pol}_{K-1}$ és $\deg(p_n) \leq K-1 \leq N$, a $[p_1, p_2, \ldots]$ polinomsorozat konvergenciája az $x_0 < \cdots < x_N$ pontokban maga után vonja az együtthatóik konvegenciáját is, azaz

$$\exists\ p \in \mathrm{Pol}_{K-1} \qquad p_n \to p \ \ \big(C^{\infty}[x_0, x_N]\text{-ben}\big).$$

Ekkor $f_n = g_n + p_n \to g + p =: f$ $\big(C^{K-1}[x_0, x_N]\text{-ben}\big)$, ahol $f(x_k) = \lim_{n\to\infty} f_(x_k) = y_k$ $(k = 0, \ldots, N)$.

---

* Szokásosan $g_n \to g$ $\big(C^{K-1}[x_0, x_N]\text{-ben}\big)$ jelentése: $g_n^{(\ell)} \rightrightarrows g^{(\ell)}$ $(n \to \infty;\ \ell = 0, \ldots, K-1)$

2) Legyen $r_n := \Big[$Lagrange-inp. pol. $\{x_k \mapsto g_n(x_k) - y_k : k=0,\dots,N\}$-hez$\Big]$, ezzel pedig $q_n := p_n + r_n$. Ekkor $r_n(x_k) \to r := \Big[$Lagrange-inp. pol. $\{x_k \mapsto g(x_k) - y_k : k=0,\dots,N\}$-hez$\Big]$ $C^\infty[x_0,x_N]$-ben, továbbá

$$f_n + q_n = (g_n - p_n) + (p_n + r_n) = g_n + r_n \to g - r \quad \big(C^\infty[x_0,x_N]\text{-ben}\big).$$

Vagyis az $f := g - r$ választás megfelel.

Lemma. (Polinomok disztribúciós jellemzése).
Ha $\varphi \in C[a,b]$ *és* $\int_a^b \varphi(x) s^{(\ell)}(x)\,dx = 0$ $\big(s \in C_0^\infty(a,b)\big)$, *akkor* $\varphi \in \mathrm{Pol}_{\ell-1}$.

Következmény. *Ha* $g \in C^{K-1}[x_0,x_N]$ *és* $\displaystyle\int_{x_0}^{x_N} g^{(K-1)}(x) s^{(K+1)}(x)\,dx = 0 \quad (s \in \mathcal{S}_0)$, *akkor* $g\big|_{[x_{k-1},x_k]} \in \mathrm{Pol}_{2K-1}$ $(k=1,\dots,N)$. *Speciálisan a Tétel g ill. a Köv. f limeszfüggénye az* $[x_{k-1},x_k]$ *szakaszokon* $2K-1$*-edfokó polinom* $\big($*mivel* $g^{(K-1)}\big|_{[x_{k-1},x_k]} \in \mathrm{Pol}_K\big)$. *Ezzel tetszőleges* $\phi \in C^K[x_0,x_N]$ *mellett*

$$\begin{aligned}
\int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}\phi^{(K)} &= \sum_{k=1}^{N}\int_{x_{k-1}}^{x_k} f^{(K)}\phi^{(K)} =^{\text{parc.int.}} \\
&= \sum_{k=1}^{N}\left[f^{(K)}\phi^{(K-1)}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} - \int_{x_{k-1}}^{x_k} f^{(K+1)}\phi^{(K-1)} \right] = \\
&= \sum_{k=1}^{N}\left[f^{(K+1)}\phi^{(K-2)}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} - f^{(K+2)}\phi^{(K-1)}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} + \int_{x_{k-1}}^{x_k} f^{(K+2)}\phi^{(K-2)} \right] = \\
&= \cdots = \\
&= \sum_{k=1}^{N}\left[\sum_{\ell=0}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} + (-1)^K \int_{x_{k-1}}^{x_k} \underbrace{f^{(2K)}}_{\equiv 0}\underbrace{\phi^{(0)}}_{\phi} \right] = \\
&= \sum_{\ell=0}^{K-1} (-1)^\ell \sum_{k=1}^{N} f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}\Big|_{x_{k-1}}^{x_k} = \\
&= \sum_{\ell=0}^{K-1} (-1)^\ell \left[f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}\Big|_{x_0}^{x_N} - \sum_{k=1}^{N-1} f^{(K+\ell)}\Big|_{x_k-0}^{x_k+0}\phi^{(K-\ell-1)}(x_k) \right].
\end{aligned}$$

Főtétel. *Tegyük fel, hogy* $\mathcal{A}$ *érintőtere tetszőleges* $\big[\lambda_{k,\ell}\big]_{k=1\ \ell=1}^{N-1\ K}$ *mátrix mellett tartalmazza az összes olyan* $s \in C^\infty[x_0,x_N] \cap \mathcal{S}$ *függvényt, amelyre* $s^{(\ell)}(x_0) = \lambda_{k\ell}$, $s^{(\ell)}(x_0) = s^{(m)}(x_N) = 0$ $(0 < k < N;\ 0 < \ell < K;\ m \in \mathbb{N})$. *Ekkor létezik pontosan egy olyan* $f : [x_0,x_N] \to \mathbb{R}$ $(2K-1)$*-spline, amelyre*

$$\int_{x_0}^{x_N} \big|f^{(K)}\big|^2 = \mathrm{dist}(0,\mathcal{A})^2, \quad \int_{x_0}^{x_N} \big|f_n^{(K)} - f^{(K)}\big|^2 \to 0 \quad \text{valahányszor } f_n \in \mathcal{A},\ \big\|f_n\big\| \to \mathrm{dist}(0,\mathcal{A}).$$

Bizonyítás. Az előbbiek alapján csak annyit kell bizonyítani, hogy az előző Tétel f függvénye $(2K-1)$-spline. Tudjuk már, hogy f $(K-1)$-szer folytonosan differenciálható az $[x_{k-1,k}]$ intervalluokon $\leq (2K-1)$-edfokú polinom. Tehát elegendő belátni, hogy

$$(*) \qquad f^{(\ell)}(x_k-0) = f^{(\ell)}(x_k+0) \qquad (\ell = K, K+1, \dots, 2K-1).$$

Ez következik a legutóbbi integrálformulából és abból a tényből, hogy $\int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}s^{(K)} = 0$ $(s \in \mathrm{T}\mathcal{A})$. Feltevés szerint minden $\Lambda = [\lambda_{k\ell}] \in \mathbb{R}^{(K-1)\times(N-1)}$ mátrixhoz van (több) olyan $\phi = \phi_\Lambda \in \mathrm{T}\mathcal{A}$ függvény, hogy $\phi^{(2K-1-\ell)}(x_k) = \lambda_{k\ell}$, $\phi^{(\ell)}(x_0) = \phi^{(\ell)}(x_N) = 0$. Ezért

$$0 = \int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}\phi^{(K)} = \sum_{k=1}^{N-1} \lambda_{k\ell} f^{(2K-1-\ell)}\Big|_{x_k-0}^{x_k+0} \quad \Big(\ell = 1, \dots, K-1;\ [\lambda_{k\ell}] \in \mathbb{R}^{(K-1)\times(N-1)}\Big).$$

Innen azonnal következnek a $(*)$ relációk.

Technikai feltevés. *Ettől kezdve az alappontok számára* $N > K-1$.
Ekkor a $d(f,g) := \sqrt{\int_{x_0}^{x_N}\big[f^{(K)} - g^{(K)}\big]^2}$ félmetrika $\mathcal{F}$-en már metrika $\big(d(f,g)=0 \Rightarrow f=g\big)$.
Ilyenkor ugyanis $\phi \in \mathrm{T}\mathcal{F},\ \phi^{(K)} \equiv 0 \Rightarrow \phi \in \mathrm{Pol}_{K-1},\ \phi(x_0) = \cdots \phi(x_N) = 0 \Rightarrow \phi \equiv 0$.

Normál spline

Propozíció. *Az $\mathcal{F} \ni f \mapsto \|f\|$ funkcionál minimalizáló sorozatainak $C^{K-1}[x_0, x_N]$-beli limesze ($\mathcal{A} = \mathcal{F}$ eset) egy olyan (egyedüli) $f : [x_0, x_N] \to \mathbb{R}$ $(2K-1)$-spline, amelyre*

$$(**) \qquad f^{(\ell)}(x_0) = f^{(\ell)}(x_N) = 0 \qquad (\ell = K, \dots, 2K-1).$$

Bizonyítás. Tetszőleges $\widetilde{\Lambda} = [\lambda_{k\ell}]_{k=0}^{N}{}_{\ell=1}^{K-1}$ mátrixhoz található olyan $\phi = \phi_{\widetilde{\Lambda}} \in \mathcal{S} = \mathrm{T}\mathcal{A}$ függvény, amelyre $\phi^{(\ell)}(x_k) = \lambda_{k\ell}$ $0 \leq k \leq N;\ 0 < \ell < K)$. Ezért

$$0 = \int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}\phi^{(K)} = -\lambda_{0,\ell} f^{(\ell)}(x_0) + \sum_{k=1}^{N-1} \lambda_{k\ell} f^{(2K-1-\ell)}\Big|_{x_k-0}^{x_k+0} + \lambda_{N,\ell} f^{(\ell)}(x_N)$$

az összes $\lambda_{k\ell} \in \mathbb{R}$ választásnál, ami bizonyítja $(**)$-ot.

Definíció. Az $\{(x_k, y_k) :\ k = 0, \dots, N\}$ pontrendszer $(2K-1)$-ed rendű *normál spline*-ja a $(**)$ relációkat teljesítő $(2K-1)$-spline.

Peremfeltételi spline-ok

Probléma. *Milyen* $r_0, r_N < R,\ 0 \leq \ell_1 < \cdots < \ell_{r_N} < R,\ 0 \leq m_1 < \cdots < m_{r_N} < R$ *sorozatok mellett létezik tetszőleges* $[y_0^{(\ell_1)}, \dots, y_0^{(\ell_{r_0})}] \in \mathbb{R}^{r_0}$, $[y_N^{(m_1)}, \dots, y_N^{(m_{r_N})}] \in \mathbb{R}^{r_N}$ *esetén olyan $f \in \mathcal{F}$ R-spline, amelyre*

$$(***) \qquad f^{(\ell_j)}(x_0) = y_0^{(\ell_j)} \quad (1 \leq j \leq r_0); \qquad f^{(\ell_j)}(x_N) = y_N^{(m_j)} \quad (1 \leq j \leq r_N).$$

Ezzel kapcsolatban az $R := 2K-1$ esetet tudjuk

$$(V) \qquad f\in\mathcal{A}\big(\subset C^K[x_0,x_N]\big), \quad \int_{x_0}^{x_N} |f^{(K)}|^2 \to \text{MIN}$$

variációs módszerrel kezelni. Tekintsük először a (V) problémát az

$$\mathcal{A} := \Big\{f \in C^K[x_0,x_N]:\ f^{(\ell)}(x_0) = y_0^{(\ell)},\ f^{(m)}(x_N) = y_N^{(m)} \quad \big(\ell \in I_0,\ m \in I_N\big)\Big\}$$

esetben, ahol $I_0, I_N \subset \big\{1,2,\dots,K\big\}$. Megjegyzés: $I_0 = I_N = \emptyset \longrightarrow$ normál spline.
A Főtétel azonnali következménye az alábbi.

Propozíció. *Tetszőlegesen adott $\lambda := \big[\lambda_1,\dots,\lambda_{K-1}\big]$, $\mu := \big[\mu_1,\dots,\mu_{K-1}\big]$ sorozatokhoz található (pontosan egy) olyan $f \in \mathcal{F}$ $(2K-1)$-spline, amelyre $f^{(\ell)}(x_0)=\lambda_\ell$, $f^{(\ell)}(x_N)=\mu_\ell$ $(\ell = 1,\dots,K-1)$. Ez nem más, mint a (V) probléma megoldása az $r_0 = r_N = K-1$, $\ell_i=m_i=i$ $(i=1,\dots,K-1)$ esetben.*

Bizonyítás. Legyen $\mathcal{A} := \Big\{f \in \mathcal{F}:\ f^{(\ell)}(x_0)=\lambda_\ell,\ f^{(\ell)}(x_N)=\mu_\ell\ (\ell = 1,\dots,K-1)\Big\}$, és tekintsünk egy $f_1, f_2, \ldots \in \mathcal{F}$ sorozatot, amelyre $\int_{x_0}^{x_N} \big[f^{(K)}\big]^2 \searrow \operatorname{dist}(0,\mathcal{A})$. Mivel $\mathrm{T}\mathcal{A} = \Big\{f \in \mathcal{S}:\ f^{(\ell)}(x_0)=f^{(\ell)}(x_N)=0\ (\ell = 1,\dots,K-1)\Big\}$, alkalmazható a Főtétel. Innen a konklúzió: $C^{K-1}[x_0,x_N]$-ben $f_n \to f$ valamely $f \in \mathcal{F}$ $(2K-1)$-spline-ra. Speciálisan $\lambda_\ell = f_n^{(\ell)}(x_0) \to f^{(\ell)}(x_0)$, $\mu_\ell = f_n^{(\ell)}(x_N) \to f^{(\ell)}(x_N)$ $(\ell = 1,\dots,K-1)$.

Jelölés: $f_{[\lambda,\mu]} := \big[$a Propozícióban leírt spline$\big]$.

Algoritmus. (Normál spline és $f_{[\lambda,\mu]}$ szerkesztése). *Külön-külön megszerkesztjük intervallumonként azokat az $f_0 \in \mathcal{F}$, $\phi_1,\dots,\phi_{2K-2} \in \mathcal{S}$ $(2K-1)$-spline-okat, amelyekre*

$$f_0\big|_{[x_0,x_1]} \equiv y_0 + (y_1-y_0)\frac{(x-x_0)^{2K-1}}{(x_1-x_0)^{2K-1}},$$
$$\phi_\ell\big|_{[x_0,x_1]} \equiv \frac{1}{\ell!}(x-x_0)^\ell - \frac{1}{\ell!}\frac{(x_1-x_0)^\ell}{(x_1-x_0)^{2K-1}}\frac{(x-x_0)^{2K-1}}{(x_1-x_0)^{2K-1}} \ .$$

Mind a normál spline, mind bármelyik $f_{[\lambda,\mu]}$ ezek alkalmas $f_0+\sum_\ell \alpha_\ell\phi_\ell$ alakú kombinációi.
Nevezetesen: [normál spline]$= f_0 + \sum_{\ell=1}^{K-1}\alpha_\ell\phi_\ell$, $\quad f_{[\lambda,\mu]} = f_0 + \sum_{\ell=1}^{K-1}\lambda_\ell\phi_\ell + \sum_{\ell=K}^{2K-2}\alpha_\ell\phi_\ell$.

Ezután áttérünk a $(***)$ probléma általános megoldására $1 < R_0, R_n < k$ esetén.
Ettől kezdve feltesszük, hogy $\emptyset \neq I, J \subset \{1,\dots,K-1\}I$, továbbá hogy az $\big[y_0^{(\ell)}:\ \ell \in I\big]$, $\big[y_N^{(m)}:\ m \in J\big]$ sorozatok tetszőlegesen adottak. Legyen most

$$\mathcal{A} := \Big\{f \in \mathcal{F}:\ f^{(\ell)}(x_0) = y_0^{(\ell)}\ (\ell \in I),\quad f^{(m)}(x_N) = y_N^{(m)}\ (m \in J)\Big\} \ .$$

Propozíció. *Az $f_n \in \mathcal{A}$, $\int_{x_0}^{x_N} |f_n^{(K)}|^2 \searrow \min_{f\in\mathcal{A}} \int_{x_0}^{x_N} |f^{(K)}|^2$ sorozatok $C^{2K-1}[x_0, x_N]$-ben egy $(***)$-ot teljesítő $(2K-1)$-spline-hoz tartanak. Ezt $(***)$-gal együtt egyértelműen jellemzik a következő peremfeltételek*

$$(P)\quad f^{(2K-1-\overline{\ell})}(x_0) = 0 \ \ (1 \le \overline{\ell} < K;\ \overline{\ell} \notin I), \quad f^{(2K-1-\overline{m})}(x_N) = 0 \ \ (1 \le \overline{m} < K;\ \overline{m} \notin J)$$

Bizonyítás. Jelölje f az $\big[f_n : n = 1, 2, \dots\big]$ sorozat limeszfüggvényét. Tudjuk a Főtételből: $f \in \mathcal{F}$ egy olyan $(2K-1)$-spline, amelyre $f \perp \phi$ $(\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A})$ a $\langle\varphi|\psi\rangle := \int_{x_0}^{x_N} \varphi^{(K)}\psi^{(K)}$ skalárszorzat szerint. Itt

$$\mathrm{T}\mathcal{A} = \Big\{\phi \in C^K[x_0, x_N] : \phi(x_k)=0 \ \big(\forall\, k\big);\ \phi^{(\ell)}(x_0)=\phi^{(m)}(x_N)=0 \ \big(\ell\in I,\, m\in J\big)\Big\}.$$

Vagyis a Főtétel elötti most levezetés a következőképpen specializálódik: ha $\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A}$,

$$\begin{aligned}
0 = \big\langle f\big|\phi\big\rangle &= \int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}\phi^{(K)} = \\
&= \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell \Bigg[f^{(K+\ell)} \underbrace{\phi^{(K-\ell-1)}}_{\substack{0 \text{ ha } K-\ell-1\in I,x=x_0\\ 0 \text{ ha } K-\ell-1\in J,x=x_N}} \Bigg|_{x_0}^{x_N} - \sum_{k=1}^{N-1} \underbrace{f^{(K+\ell)}\Big|_{x_k-0}^{x_k+0}}_{0 \ \leftarrow (2K-1)-\text{spline}} \phi^{(K-\ell-1)}(x_k)\Bigg] = \\
&= - \sum_{0<\ell<K,\ \ell\notin I} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}(x_0) + \sum_{0<\ell<K,\ \ell\notin J} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}(x_N) = \\
&= \sum_{0<\overline{\ell}<K,\ \overline{\ell}\notin I} (-1)^{K-\overline{\ell}} f^{(2K-1-\overline{\ell})}\phi^{(\overline{\ell})}(x_0) - \sum_{0<\overline{m}<K,\ \overline{m}\notin J} (-1)^{K-\overline{m}} f^{(K+\ell)}\phi^{(\overline{m})}(x_N)
\end{aligned}$$

az $x = x_0$ esetben az $\overline{\ell} := K - \ell - 1$, az $x = x_N$ esetben az $\overline{m} = K - \ell - 1$ indextranszformációval. Tetszőleges $[\lambda_1, \dots, \lambda_{K-1}], [\mu_1, \dots, \mu_{K-1}]$ sorozatkhoz van olyan $\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A}$ függvény, amelynél $\phi^{(\overline{\ell})}(x_0) = \lambda_{\overline{\ell}}$ $(0 < \overline{\ell} < K, \overline{\ell} \notin I)$ és $\phi^{(\overline{m})}(x_N) = \mu_{\overline{m}}$ $(0 < \overline{m} < K, \overline{m} \notin J)$. Ez csak úgy lehetséges, ha (P) teljesül.
Unicitás: mivel az előbbi levezetés megfordítható, $(***) + (P) \iff f \perp \mathrm{T}\mathcal{A}$.

Mely $(2K-2)$-rendű peremfeltételek adnak $(2K-1)$-spline-okat?

Ettől kezdve feltesszük, hogy $1 \le r_0, r_N < 2K$, továbbá hogy $[y_0^{(\ell_1)}, \dots, y_0^{(\ell_{r_0})}] \in \mathrm{I\!R}^{r_0}$, $[y_N^{(m_1)}, \dots, y_N^{(m_{r_N})}] \in \mathrm{I\!R}^{r_N}$ tetszőlegesen adott. Legyen most

$$\mathcal{A} := \left\{ f \in \mathcal{F} :\ f\big|_{[x_0,x_1]}, f\big|_{[x_{N-1},x_N]} \in \mathrm{Pol}_{2K-1};\quad (***) \right\} .$$

Propozíció. *Ha $r_0 + r_N \le 2K$, akkor az $f_n \in \mathcal{A}$, $\int_{x_0}^{x_N} |f_n^{(K)}|^2 \searrow \min_{f\in\mathcal{A}} \int_{x_0}^{x_N} |f^{(K)}|^2$ sorozatok $C^{2K-1}[x_0, x_N]$-ben egy $(***)$-ot teljesítő $(2K-1)$-spline-hoz tartanak.*

Bizonyítás. Jelölje f az $\big[f_n :\ n = 1, 2, \dots\big]$ sorozat limeszfüggvényét. Tudjuk: $f \perp \phi$ $(\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A})$ a $\langle\varphi|\psi\rangle := \int_{x_0}^{x_N} \varphi^{(K)}\psi^{(K)}$ skalárszorzat szerint. Itt

$$\mathrm{T}\mathcal{A} = \Big\{ \phi \in C^K[x_0, x_N] : \phi(x_k) = 0 \ \ \big(0 \le k \le N\big);\ \phi\big|_{[x_0,x_1]}, \phi\big|_{[x_{N-1},x_N]} \in \mathrm{Pol}_{2K-1},$$
$$\phi^{(\ell_i)}(x_0) = \phi^{(m_j)}(x_N) = 0 \quad \big(1 \le i \le r_0;\ 1 \le j \le r_N\big) \Big\}.$$

Speciálisan az összes olyan C^∞-függvény $\mathrm{T}\mathcal{A}$-ban van, amelynek tartója valamely zárt (kompakt) (x_{k-1}, x_k)-beli halmaz. Ezért a polinomok disztribuciós jellemzése szerint $f\big|_{[x_{k-1},x_k]} \in \mathrm{Pol}_{2K-1}$ $(k = 1, \dots, N)$ is. A Főtétel gondolatmenete azt is adja, hogy a "belső" intervallumokon f már $(2K-1)$-spline, azaz $f^{(\ell)}\big|_{x_k-0}^{x_k+0} = 0$ $(2 \le k \le N-2;\ 0 \le \ell \le 2K-1)$. Vagyis

$$0 = \big\langle f\big|\phi\big\rangle = \int_{x_0}^{x_N} f^{(K)}\phi^{(K)} \overset{\text{Főtétel előtt}}{=}$$
$$= \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell \left[f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}\Big|_{x_0}^{x_N} - \sum_{k=1}^{N-1} f^{(K+\ell)}\Big|_{x_k-0}^{x_k+0} \phi^{(K-\ell-1)}(x_k) \right] =$$
$$= -\sum_{\ell:\nexists i\ \ell=\ell_i} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}(x_0) + \sum_{\ell:\nexists j\ \ell=m_j} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}(x_N) +$$
$$+ \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}\Big|_{x_1-0}^{x_1+0} - \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}\phi^{(K-\ell-1)}\Big|_{x_{N-1}-0}^{x_{N-1}+0} .$$

Emlékeztető ("N-spline-ok" fejezet): mivel $\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A}$ esetén $\phi\big|_{[x_0,x_1]}$ $(2K-1)$-edfokú polinom, amelynél $\phi(x_0) = \phi(x_1) = 0$, van egy olyan $(2K-2) \times (2K-2)$-es $\mathbf{D}_1$ mátrix, hogy

$$\begin{bmatrix} \phi^{(1)}(x_1) \\ \vdots \\ \phi^{(2K-2)}(x_1) \end{bmatrix} = \mathbf{D}_1 \begin{bmatrix} \phi^{(1)}(x_0) \\ \vdots \\ \phi^{(2K-2)}(x_0) \end{bmatrix} \qquad \big(\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A}\big) .$$

Nevezetesen itt $h_1 := x_1 - x_0$ mellett

$$\mathbf{D}_1 = \Lambda_1 \mathbf{C} \Lambda_1^{-1}, \quad \text{ahol} \quad \mathbf{C} := \left[\binom{i}{\ell} - \binom{N}{\ell} \right]_{\ell,i=1}^{2K-2}, \quad \Lambda_1 := \operatorname{diag}\Bigl(\ell!/h_1^\ell : \ \ell = 1, \ldots, 2K{-}2\Bigr).$$

Hasonlóan $\left[\phi^{(\ell)}(x_N)\right]_{\ell=1}^{2K-2} = \mathbf{D}_N \left[\phi^{(\ell)}(x_{N-1})\right]_{\ell=1}^{2K-2}$, ahol $\mathbf{D}_N := \Lambda_N \mathbf{C} \Lambda_N^{-1}$ a $h_N := x_N - x_{N-1}$ melletti $\Lambda_N := \operatorname{diag}\bigl(\ell!/h_N^\ell : \ \ell = 1, \ldots, 2K{-}2\bigr)$ mátrixszal.
Észrevétel: tetszőleges olyan $\left[\lambda_1, \ldots, \lambda_{2K-2}\right]$, $\left[\mu_1, \ldots, \mu_{2K-2}\right]$ sorozatpárhoz, amelynél

$$(S) \qquad\qquad \lambda_{\ell_i} = 0 \quad (1 \leq i \leq r_0), \qquad \mu_{m_j} = 0 \quad (1 \leq j \leq r_N),$$

található olyan $\phi \in \mathrm{T}\mathcal{A}$ függvény, hogy $\phi^{(\ell)}(x_0) = \lambda_\ell$, $\phi^{(\ell)}(x_N) = \mu_\ell$ $(\ell = 1, \ldots, N)$. Ezért az ilyen sorozatokkal

$$\begin{aligned} 0 = &- \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}(x_0) \lambda_{K-\ell-1} + \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}(x_N) \mu_{K-\ell-1} + \\ &+ \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)} \Big|_{x_1-0}^{x_1+0} \left[\mathbf{D}_1 \lambda\right]_{K-\ell-1} - \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)} \Big|_{x_{N-1}-0}^{x_{N-1}+0} \left[\mathbf{D}_N^{-1} \mu\right]_{K-\ell-1} . \end{aligned}$$

A λ ill. μ sorozatok egymástól függetlenül választhatók, ezért külön is

$$\begin{aligned} &\sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}(x_0) \lambda_{K-\ell-1} - \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)} \Big|_{x_1-0}^{x_1+0} \left[\mathbf{D}_1 \lambda\right]_{K-\ell-1} = 0, \\ &\sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)}(x_N) \mu_{K-\ell-1} - \sum_{\ell=1}^{K-1} (-1)^\ell f^{(K+\ell)} \Big|_{x_{N-1}-0}^{x_{N-1}+0} \left[\mathbf{D}_N^{-1} \mu\right]_{K-\ell-1} = 0 \end{aligned}$$

az (S)-et teljesítő sorozatokra.

Sturm sorozatok és euklideszi oszás

$P \in \mathrm{Pol}_N(\mathbb{R})$, P, P' relatív prímek

$P_0 := P,\ P_1 := P', P_2, \ldots, P_{r-1},\ P_r \equiv \text{const} > 0$ Euklideszi osztás sorozata

$\widetilde{P}_0 := P,\ \widetilde{P}_1 := P', \widetilde{P}_2, \ldots, \widetilde{P}_{r-1},\ \widetilde{P}_{\widetilde{r}} \equiv \text{const} > 0$ P Sturm-sorozata

Lemma. *$\widetilde{r} = r$ és $\widetilde{P}_k = \sigma_k P_k$ $(k = 0, \ldots, r)$, ahol*

$$(*) \qquad [\sigma_0, \ldots, \sigma_r] = [\underbrace{+,+},\underbrace{-,-},\underbrace{+,+},\ldots]; \qquad \sigma_k = (-1)^{\lfloor k/2 \rfloor}.$$

Bizonyítás. Definíció szerint $P_{k-1} = P_k Q_k + P_{k+1}$, $\widetilde{P}_{k-1} = \widetilde{P}_k \widetilde{Q}_k + \widetilde{P}_{k+1}$ mindig a $Q_k := P_{k-1} : P_k$ ill. $\widetilde{Q}_k := \widetilde{P}_{k-1} : \widetilde{P}_k$ polinomosztási hányadosokkal. Indukció k szerint:

$$\widetilde{P}_k = \sigma_k P_k, \quad \widetilde{Q}_k = \tau_k Q_k \qquad \exists\ \sigma_k, \tau_k \in \{\pm 1\}.$$

Valóban, a $\sigma_0 = \sigma_1 = 1$ megfelel a $P = P_0 = \widetilde{P}_0$, $P' = P_1 = \widetilde{P}_1$ relációknak. Ha $(*)$ áll $k = 1, \ldots, K$ mellett, akkor

$$\begin{aligned} \widetilde{P}_K = \widetilde{P}_{K+1}\widetilde{Q}_{K+1} - \widetilde{P}_{K+2} &\iff \sigma_K P_k = \sigma_{K+1} P_{K+1} \widetilde{Q}_{K+1} - \widetilde{P}_{K+2} \\ &\iff \sigma_K [P_{K+1} Q_{K+1} + P_{K+2}] = \sigma_{K+1} P_{K+1} \widetilde{Q}_{K+1} - \widetilde{P}_{K+2}, \end{aligned}$$

ami teljesül ha

$$\widetilde{Q}_{K+1} = \tau_{K+1} Q_{K+1}, \quad \tau_{K+1} = \sigma_K \sigma_{K+1}, \quad \widetilde{P}_{K+2} = \sigma_{K+2} P_{K+2}, \quad \sigma_{K+2} = -\sigma_K.$$

Innen $\sigma_{2\ell} = \sigma_{2\ell+1} = (-1)^\ell$, $\tau_k = \sigma_{k-1}\sigma_k$ minden lehetséges k, ℓ választásra megfelel.

Többváltozós Taylor-formula integrálos maradéktaggal*

Legyen $f \in \mathcal{C}^n(D, \mathbb{R}^K$, ahol D egy $\mathbb{R}^M$-beli tartomány.
Emlékeztető. Jól-definiáltak f-nek az $1, 2, \ldots, n$-edik (Fréchet-féle) deriváltjai:

$$f^{(k)}(a)h_1h_2\cdots h_k := \frac{\partial^k}{\partial\tau_1\cdots\partial\tau_k}\Big|_{\tau_1=\cdots=\tau_k=0} f\big(a+\tau_1h_1+\cdots+\tau_kh_k\big).$$

Tétel. *Ha* $[a, a+h] = \{(a+\tau h : \tau \in [0,1]\} \subset D$, *akkor*

$$f(a+h) = \sum_{k=0}^{n-1} \frac{1}{k!} f^{(k)}(a)h^k + \frac{1}{n!}\int_{\tau=0}^{1} f^{(n)}(a+\tau h)h^n w_n(\tau)\ d\tau$$

egy olyan $w_n \in \mathcal{C}_+^\infty(0,1)$ *függvénnyel, amelyre* $\int_0^1 w_n = 1$. *(Nevezetesen* $w_n = n(1-\tau)^{n-1}$*).*

Bizonyítés. Elég csak a $D \subset \mathbb{R}$, $a = 0, h = 1$, $M = 1$ 1-dimenziós alapesetre igazolni a formulát. A Newton–Leibniz-tétel szerint

$$\begin{aligned}
&f(1) = f(0) + \int_{\tau_1=0}^{1} f'(\tau_1)\ d\tau_1 = \\
&= f(0) + \int_{\tau_1=0}^{1} \Big[f'(0) + \int_{\tau_2=0}^{\tau_1} f''(\tau_2)\ d\tau_2\Big] d\tau_1 = \\
&= f(0) + \int_{\tau_1=0}^{1} \Big[\Big[f'(0) + \int_{\tau_2=0}^{\tau_1} f''(0) + \int_{\tau_3=0}^{\tau_2} f^{(3)}(\tau_3)\ d\tau_3\Big]\ d\tau_2\Big] d\tau_1 = \\
&\vdots \\
&= \sum_{k=0}^{n-1} f^{(k)}(0) \int_{\tau_1=0}^{1}\int_{\tau_2=0}^{\tau_1}\cdots\int_{\tau_k=0}^{\tau_{k-1}} d\tau_{k-1}\cdots d\tau_1 + \int_{\tau_1=0}^{1}\int_{\tau_2=0}^{\tau_1}\cdots\int_{\tau_n=0}^{\tau_{n-1}} f^{(n)}(\tau_n)\ d\tau_n\cdots d\tau_1.
\end{aligned}$$

Itt

$$\int_{\tau_1=0}^{1}\int_{\tau_2=0}^{\tau_1}\cdots\int_{\tau_k=0}^{\tau_{k-1}} d\tau_{k-1}\cdots d\tau_1 = \int_{1\ge\tau_1\ge\tau_2\ge\cdots\ge\tau_k\ge0} d\tau_{k-1}\cdots d\tau_1 = \mathrm{Vol}_k(\mathrm{SIMPLEX}_k) = \frac{1}{k!}.$$

Másrészt

$$\begin{aligned}
&\int_{\tau_1=0}^{1}\int_{\tau_2=0}^{\tau_1}\cdots\int_{\tau_n=0}^{\tau_{n-1}} f^{(n)}(\tau_n)\ d\tau_n\cdots d\tau_1 = \int_{1\ge\tau_1\ge\tau_2\ge\cdots\ge\tau_n\ge0} f^{(n)}(\tau_n)d\tau_n\cdots d\tau_1 = \\
&= \int_{\tau_n=0}^{1} f^{(n)}(\tau_n)\Big[\int_{1\ge\tau_1\ge\cdots\ge\tau_{n-1}\ge\tau_n} d\tau_{n-1}\cdots d\tau_1\Big] d\tau_n = \\
&= \int_{\tau_n=0}^{1} f^{(n)}(\tau_n)\mathrm{Vol}_{n-1}\big((1-\tau_n)\mathrm{SIMPLEX}_{n-1}\big)d\tau_n = \int_{\tau_n=0}^{1} f^{(n)}(\tau_n)\frac{(1-\tau_n)^{n-1}}{(n-1)!} d\tau_n.
\end{aligned}$$

Vagyis a $w_n(\tau) := (1-\tau)^{n-1}$ függvénnyel teljesül a tétel állítása.

---

* A többváltozós Newton-iteráció becsléséhez.

KONJUGÁLT GRADIENS MINIMALIZÁLÁS (Lánczos-Fletcher módszer)

Minimalizálás Newton-iterációval. Folytonosan differenciálható $f : \mathbb{R}^N \to \mathbb{R}$ esetén $\{f \text{ min-helyei}\} \subset \{x : \nabla f(x) = 0\}$ a $\nabla f = \big[\partial f/\partial x_1, \ldots, \partial f/\partial x_N\big]^{\mathrm{T}}$ gradiens-vektorral. Mivel $f'(a)h = \big\langle \nabla f(a)\big|h\big\rangle$, $f''(a)h_1h_2 = \big\langle \nabla^2 f(a)h_1\big|h_2\big\rangle$, ahol $\nabla^2 f = \big[\partial^2 f/\partial x_i \partial x_j\big]_{i,j=1}^N$, a Newton iteráció lépései $\nabla f(x_*) = 0$-ra 2-szer folytonosan differenciálható f-nél

$$(*) \qquad x_{n+1} = x_n - \big[\nabla^2 f(x_n)\big]^{-1} \nabla f(x_n) \qquad (n = 0, 1, \ldots).$$

Emlékeztető. Egy $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$ függvénynek az x_* pont nem-degenerált minimumhelye, ha $\nabla^2 f(x_*) \succ 0$ (azaz ha a $\nabla^2 f(x_*)$ mátrix pozitív definit). Ekkor van olyan U gömbi környezete x_*-nak, hogy $\nabla^2 f(x) \succ 0$ $(x \in U)$, és a fenti Newton-iterációnál

$$\exists\, M < 1 \ \ \forall x_0 \in U \quad \|x_n - x_*\| < M^{2^n - 1} \mathrm{diam}(U)/2 \ \ (n = 1, 2, \ldots).$$

Megjegyzés. Adott $x_n \in U$ hely esetén a $v := \big[\nabla^2 f(x_n)\big]^{-1} \nabla f(x_n)$ vektor kiszámítása a lineáris

$$Av = b \quad \big(A := \nabla^2 f(x_n) \succ 0, \ b := \nabla f(x_n)\big)$$

egyenlet megoldását jelenti. Bár erre már több jól-ismert módszerünk van, az A mátrix pozitív definit volta lehetőséget ad egy *minimalizációval* való numerikusan nagyon stabil megoldásra, mivel

$$A \succ 0 \quad \text{esetén} \qquad Av = b \iff v = \Big[x \mapsto \frac{1}{2}\big\langle Ax\big|x\big\rangle - \big\langle b\big|x\big\rangle \ \text{ min-helye}\Big].$$

Jelölés. A továbbiakban $A \succ 0$ adott $N \times N$-es mátrix ($A = A^{\mathrm{T}} \in \mathbb{R}^{N \times N}$) és $b \in \mathbb{R}^N$ adott N-es oszlopvektor, és a standard $\langle x|y\rangle := \sum_{k=1}^N x_k y_k$ belső szorzattal

$$\big\langle x\big|y\big\rangle_A := \big\langle Ax\big|y\big\rangle, \quad g(x) := \frac{1}{2}\big\langle Ax\big|y\big\rangle - \big\langle b\big|y\big\rangle \quad (x, y \in \mathbb{R}^{N \times 1}).$$

Emlékeztető. Egy X (valós) vektortéren egy $[\cdot|\cdot] : X^2 \to \mathbb{R}$, $(x, y) \mapsto [x|y]$ függvény belső (vagy skaláris) szorzat, ha mindig $[\alpha_1 x_1 + \alpha_2 x_2|y] = \sum_{k=1}^2 \alpha_k [x_k|y]$, $[x|y] = [y|x]$, $[x|x] > 0$ $(x \neq 0)$. Az $\mathbb{R}^N \sim \mathbb{R}^{N \times 1}$-en értelmezhető belső szorzatok pontosan az $(x, y) \mapsto \langle x|y\rangle_C$ $(C \succ 0)$ alakú 2-lineáris formák; $\langle\cdot|\cdot\rangle_A$ neve: *az A-belső szorzat* (A-skaláris szorzat).

Távolság minimalizálása egyenesek menti minimalizációval. *Legyen* $\big(X, [\cdot|\cdot]\big)$ *belső szorzat tér, S pedig K-dimenziós affin altere X-nek. Ha $z_0 \in S$ és $v_1, \ldots, v_K \in X$ olyan $[\cdot|\cdot]$ szerint ortogonális vektorok, hogy $S = z_0 + \sum_{k=1}^K \mathbb{R} v_k$, akkor S-nek az origóhoz $[\cdot|\cdot]$-szerint legközelebbi s_* pontját, a $d_2(s) := [s|s]$ $(s \in S)$ függvény min-helyét megkaphatjuk a következő $z_0, \ldots, z_K$ lépésekkel:*

$$z_k := \big[d_2 \text{ min-helye az } z_{k-1} + \mathbb{R} v_k \text{ egyenesen}\big] \quad (k = 1, \ldots K), \quad s_* := z_K.$$

Bizonyítás. Tudjuk, hogy minden véges-dimenziós altérnek pontosan egy legközelebbi pontja van az origóhoz a $d(p,q) := \sqrt{[p-q|p-q]}$ távolság szerint. Tehát az $s_*, x_1, \dots, x_K$ pontok mind jól-definiáltak. Másrészt S pontjai $s_* + \xi_1 v_1 + \dots + \xi_K v_K$ alakúak, és

$$d_2(s_* + \xi_1 v_1 + \dots + \xi_K v_K) = d_2(s_*) + \xi_1^2[v_1|v_1] + \dots + \xi_K^2[v_K|v_K].$$

Innen azonnal következik, hogy $z_0 = s_* + \alpha_1 v_1 + \dots + \alpha_K v_k$ esetén

$$z_k = s_* + \alpha_{k+1}v_{k+1} + \dots + \alpha_K v_k \quad (k = 1, \dots, K-1), \quad x_K = s_*.$$

Következmény. *Véve tetszőleges $\langle\cdot|\cdot\rangle_A$-szerinti $v_1, \dots, v_N$ teljes ortogonális rendszert, tetszőleges $z_0 \in \mathbb{R}^{N\times 1}$ pontból kiindulva az*

$$z_k := \big[g \text{ min-helye az } z_{k-1} + \mathbb{R}v_k \text{ egyenesen}\big] \quad (k = 1, \dots, N)$$

sorozat utolsó tagjaként kapjuk az $z_N = A^{-1}b$ vektort.

Bizonyítás. Csak annyi kell észrevenni, hogy

$$\begin{aligned} g(x) &= \frac{1}{2}\big\langle Ax\big|x\big\rangle - \big\langle b\big|x\big\rangle = \frac{1}{2}\big\langle x\big|x\big\rangle_A - \big\langle A^{-1}b\big|x\big\rangle_A = \\ &= \frac{1}{2}\big\langle x - A^{-1}b\big|x - A^{-1}b\big\rangle_A - \big\langle A^{-1}b\big|A^{-1}b\big\rangle_A = \\ &= \frac{1}{2}d_2\big(x - A^{-1}b\big) + \text{const.} \end{aligned}$$

a $[\cdot|\cdot] := \langle\cdot|\cdot\rangle_A$ skalárszorzat d_2 origótávolság-négyzet függvényével az $S := X := \mathbb{R}^{N\times 1}$ terek mellett. Az előzőek szerint x_N $d_2(x - A^{-1}b)$-nek, és így az attól csak konstansban eltérő g-nek a min-helye, azaz $x_N = A^{-1}b$.

A Lánczos–Fletcher-féle konjugált gradiensek. A fenti mószerhez a g függvény gradienseivel konstruálunk egy természetes $v_1, \dots, v_N$ $\langle\cdot|\cdot\rangle_A$-ortogonális rendszert *lépésenként*:

$$\begin{aligned} v_k &:= \Big[\ -\nabla g(x_{k-1})\text{-nek } v_1, \dots, v_{k-1}\text{-re } \langle\cdot|\cdot\rangle_A\text{-ortogonális komponense}\Big] = \\ &= -\nabla g(x_{k-1}) + \sum_{\ell<k} \frac{\nabla g(x_{k-1})|v_\ell\rangle_A}{\langle v_\ell|v_\ell\rangle_A} v_\ell = [-Ax_{k-1} + b] + \sum_{\ell<k} \frac{\langle Ax_{k-1} - b|v_\ell\rangle_A}{\langle v_\ell|v_\ell\rangle_A} v_\ell. \end{aligned}$$

A konjugált gradiens módszer. Az $f \in \mathcal{C}^2(\mathbb{R}^N, \mathbb{R})$ függvény (lokális) minimalizálását a gradiens $(*)$ Newton-iterációjával közelítjük. Adott n-nél benne a $\big[\nabla^2 f(x_n)\big]^{-1}\nabla f(x_n)$ vektort az $z_0 := 0$ pontból indított

$$z_k := \Big[x \mapsto \tfrac{1}{2}\big\langle \nabla^2 f(x_n)x\big|x\big\rangle - \big\langle \nabla f(x_n)\big|x\big\rangle \text{ fgv. min-helye az } z_{k-1} + \mathbb{R}v_k \text{ egyenesen}\Big]$$

sorozat utolsó tagjaként kapjuk meg, ahol a $v_1, \dots, v_N$ vektorokat (amelyek páronként ortogonálisak a $\big\langle\cdot\,\big|\,\cdot\big\rangle_{\nabla^2 f(x_n)}$ skalárszorzat szerint) *lépésenként konstruáljuk*:

$$v_k := -\nabla g_n(x_{n,k-1}) + \sum_{\ell<k} \frac{\langle \nabla g_n(x_{n,k-1})|v_\ell}{\langle v_\ell|v_\ell\rangle_A} v_\ell, \quad \text{itt} \quad \nabla g_n(x) = \nabla^2 f(x_n)x - \nabla f(x_n).$$

Tenzori szorzat általánosított inverze és QR-felbontása

Emlékeztető. Az $(m \times n)$-es $A = [a_{ij}]$ mátrix *tenzori szorzata* az $(m' \times n')$-es $B = [b_{i'j'}]$-vel

$$A \otimes B := \begin{bmatrix} a_{11}B & \dots & a_{1n}B \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1}B & \dots & a_{mn}B \end{bmatrix}$$

Azaz $A \otimes B$ egy $(m \cdot m') \times (n \cdot n')$ típusú mátrix, amelynek $I := (i-1)m' + i'$-edik sorában a $J := (j-1)n' + j'$-edik tag $[A \otimes B]_{IJ} = a_{ij}b_{i'j'}$. Tudjuk: általában is

$$[A \otimes B][C \otimes D] = (AC) \otimes (BD), \quad [A \otimes B]^{\mathrm{T}} = A^{\mathrm{T}} \otimes B^{\mathrm{T}},$$
$$\det(A \otimes B) = \det(A)^{n'} \det(B)^{n}, \quad \text{ha } m = n, m' = n'.$$

Mivel egy (valós) négyzetes Q mátrix pontosan akkor ortogonális, ha $Q^{\mathrm{T}}Q = \mathrm{Id}$, fennáll

$$Q_1 \otimes Q_2 \text{ ortogonális} \iff Q_1, Q_2 \text{ ortogonálisak.}$$

Direkt a definicóból adódik: $\big[\text{Felső triang,}\big] \otimes \big[n{\times}n \text{ Felső triang,}\big] = \big[\text{Felső triang,}\big]$. Ezért

$$Q_{A\otimes B} = Q_A \otimes Q_B, \quad R_{A\otimes B} = R_A \otimes R_B \qquad \text{QR-felbontásokra, ha } B \text{ négyzetes.}$$

Mivel $X = A^+ \iff AX = (AX)^{\mathrm{T}}, XA = (XA)^{\mathrm{T}}, AXA = A, XAX = X,$

$$(A \otimes B)^+ = A^+ \otimes B^+ \quad \text{az általánosított inverzekre.}$$

Példa. $C = \begin{bmatrix} 8 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 8 \\ 15 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 15 & 0 & 15 \end{bmatrix}$. Észrevétel: $C = A \otimes B$, ahol $A = \begin{bmatrix} 8 & 8 \\ 15 & 15 \end{bmatrix}$, $B = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$.
Itt $Q_A = \frac{1}{17}\begin{bmatrix} 8 & -15 \\ 15 & 8 \end{bmatrix}$, $R_A = 17\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 0 \end{bmatrix}$ egy QR-felbontása A-nak, és $A^+ = R_A^+ Q_A^{\mathrm{T}} =$
$= \frac{1}{17} \cdot \frac{1}{2}\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 0 \end{bmatrix} \frac{1}{17}\begin{bmatrix} 8 & 15 \\ -15 & 8 \end{bmatrix} = \frac{1}{578}\begin{bmatrix} 8 & 15 \\ 8 & 15 \end{bmatrix}$. Triviálisan $\mathrm{Id} = B = Q_B = R_B = B^+$.
Innen

$$Q_C = Q_A \otimes Q_B = \frac{1}{17}\begin{bmatrix} 8 & 0 & -15 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & -15 \\ 15 & 0 & 8 & 0 \\ 0 & 15 & 0 & 8 \end{bmatrix}, \quad R_C = R_A \otimes R_B = 17\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix},$$

$$C^+ = A^+ \otimes B^+ = \frac{1}{578}\begin{bmatrix} 8 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 15 \\ 8 & 0 & 15 & 0 \\ 0 & 8 & 0 & 15 \end{bmatrix}.$$

Standard QR-felbontás nem-négyzetes mátrixokra

Emlékeztető (1). Ha $A \in \mathrm{Mat}(N,N)$ és $\det(A) \neq 0$, akkor

$$\exists!\ Q_A \in \mathrm{Ort}(N),\ R_A \in \mathrm{Feltriang}(N) \quad A = Q_A R_A,\ \mathrm{diag}(R) > 0.$$

Emlékeztető (2). Általában is, ha $A \in \mathrm{Mat}(M,N)$, akkor

$$\exists\ Q \in \mathrm{Ort}(M),\ R \in \mathrm{Feltriang}_*(M,N) \ \ A = QR,\ R\text{-ben a soronkénti első nem-0 elemek} > 0.$$

Itt az *erősen felső-trianguláris* terminus jelentése: $R = \big[r_{ij}\big]_{i=1}^{M}{}_{j=1}^{N} \in \mathrm{Feltriang}_*(M,N)$, ha

$$\exists\ n^{[1]}, n^{[2]}, \dots, n^{[M]} \quad 1 \le n^{[1]} < n^{[2]} < \cdots n^{[M]} \quad r_{ij} = 0 \ \text{ valahányszor } \ j < n^{[i]}.$$

Példa. $\begin{bmatrix} 0 & 0 & \mathbf{1} & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \in \mathrm{Feltriang}_*(3,6),\quad \begin{bmatrix} 0 & 0 & \mathbf{1} & 1 & 1 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \mathbf{1} & 0 \end{bmatrix} \notin \mathrm{Feltriang}_*(3,6).$

Megjegyzés. $R = \big[r_{ij}\big]$ erősen felső-trianguláris $\iff$ $r_{mn} \neq 0$ esetén mindig $r_{ij} = 0$ az összes $i \le m,\ j < n$ indexpárokra.

Propozíció. *Tegyük fel,* $A \in \mathrm{Mat}(M,N)$, $\mathrm{rank}(A) = k$ *és* $A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2$, *ahol* $Q_1, Q_2 \in \mathrm{Ort}(M)$, $R_1, R_2 \in \mathrm{Feltriang}(M,N)$. *Ekkor* R_1, R_2 *első* k *sora lin.fgtl., a többi*$=0$, *és*

$$\begin{aligned} &\exists\ \sigma_1, \dots, \sigma_k \in \{\pm 1\} \qquad && \big[R_2\ i.\mathrm{sora}\big] = \sigma_i \big[R_1\ i.\mathrm{sora}\big] \ \ (i = 1, \dots, k); \\ &\exists U \in \mathrm{Ort}(M-k) && Q_2 = Q_1 [\mathrm{diag}(\sigma_1, \dots, \sigma_k) \oplus U_2]. \end{aligned}$$

Példa. $\begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & \tau a & \tau b \\ 0 & -b & a \\ -\sigma & 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \sigma \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},\ \ \sigma, \tau \in \{\pm 1\},\ a^2 + b^2 = 1.$

Következmény. *Egy* k*-rangú mátrix QR-felbontásában* Q *első* k *oszlopa ill.* R *első* k *sora egyérteműen meghatározott azzal a feltétellel, hogy* R*-ben minden sor első nem-0 eleme* >0.

Standardizálás. Az $A \in \mathrm{Mat}(M,N)$ mátrix *standard QR-felbontását* kis ortogonális lépésekkel kapjuk meg, úgy, hogy mindegyik lépés forgatás (det=1) és pozitívvá teszi az első változtatott sor első nem-0 tagját.

Algoritmus. Az $\{(i,j) : 1 \le i \le M,\ 1 \le j \le N\}$ indexpárok oszloponkénti

$$\big[(1,1), (2,1), \dots, (M,1), (1,2), (2,2), \dots, (M,N)\big] = \big[(i_\ell, j_\ell) : \ell = 1, 2, \dots, MN)\big]$$

felsorolásával. $R^{[0]} := A$, $Q^{[0]} := \mathrm{Id}_M$. Az $\ell = 1, 2, \dots$ lépéseknél

$$R^{[\ell]} := T_\ell R^{[\ell-1]}, \quad Q^{[\ell]} := Q^{[\ell-1]} T_\ell^{\mathrm{T}}$$

alakú. Itt egyszerűen $T_\ell := \mathrm{Id}_M$, ha $\big[R^{[\ell-1]}\big]_{i_\ell,j_\ell} = 0$ vagy ha $R^{[\ell-1]}$-ben az $i \le i_\ell, j < j_\ell$ indexű elemek közt van $\ne 0$ (v.ö. Megjegyzés).* A többi esetekben pedig legyen

$$k(\ell) := \min\Big\{k :\ \forall\, i{\le}k, j < j_\ell \quad \big[R^{[\ell-1]}\big]_{ij} = 0\Big\}.$$

Ez a definíció most értelmes, sőt $k(\ell) \le i_\ell$. Legyen

$$T_\ell := \mathrm{sign}\Big(\big[R^{[\ell-1]}\big]_{i_\ell,j_\ell}\Big) \quad \text{ha } k(\ell) = i_\ell,$$

a $k(\ell) < i_\ell$ (nem triviális) esetekben pedig legyen

$$T_\ell := \Big[\mathrm{Id}_M \text{mátrixa átírva a } \big(k(\ell), i_\ell\big), \big(k(\ell), i_\ell\big), \big(k(\ell), j_\ell\big), \big(k(\ell), i_\ell\big) \text{ elemeknél}\Big],$$

$$\begin{bmatrix} T_{k(\ell),k(\ell)} & T_{k(\ell),i_\ell} \\ T_{i_\ell,k(\ell)} & T_{i_\ell,i_\ell} \end{bmatrix} := \frac{1}{\sqrt{a^2+b^2}} \begin{bmatrix} a & b \\ -b & a \end{bmatrix} \qquad \begin{matrix} a := \big[R^{[\ell-1]}\big]_{k(\ell),j_\ell} \\ b := \big[R^{[\ell-1]}\big]_{i_\ell,j_\ell}. \end{matrix}$$

Az utolsó (MN-edik) lépéssel

$$Q_A := Q^{[MN]}, \quad R_A := R^{[MN]}.$$

A Propozíció bizonyítása.
Tekintsük a $V := Q_1^{\mathrm{T}} Q_2 \in \mathrm{Ort}(M)$ mátrixot, amellyel

$$Q_2 = Q_1 V, \quad R_2 = V^{\mathrm{T}} R_1.$$

A k rang szerinti indukcióval bizonyítunk. Tudjuk: invertálható mátrixszal valós szorzás nem változtatja a rangot, mivel az a képtér dimenziója. Ezért

$$R_1 = \begin{bmatrix} R_1^0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad R_1^0 = \begin{bmatrix} k \text{ db. sor} \\ i. \text{ sorban } n^{[i]}. \text{ az első nem-0} \end{bmatrix}, \quad 1 \le n^{[1]} < \cdots < n^{[k]} \le N.$$

$k = 1$ esete. Ekkor $i > 1$ esetén

$$0 = \big[R_2\ i.\ \text{sora}\big] = \sum_{j=1}^N V_{ij} \big[R_1\ j.\ \text{sora}\big] = V_{i1}\big[R_1\ 1.\ \text{sora}\big], \ \Rightarrow V_{i1} = 0.$$

Mivel V ortogonális, a sorai és oszlopai egységvektorok, így az elsőknél

$$|V_{11}| = 1, \quad V_{1i} = V_{i1} = 0 \quad (i = 2, \ldots, M).$$

* Kezdetben. az első oszlop eliminációinál ($1, 2, \ldots, M$ lépések) úgy járunk el, mintha lenne egy csupa 0-kból álló 0. oszlop.

Vagyis V alakja valóban

$$V = \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & W \end{bmatrix} = \sigma \oplus W, \quad \sigma \in \{\pm 1\},\ W \in \mathrm{Ort}(M-1).$$

Indukciós lépés (feltevés: $\mathrm{rank}(A) = k$ és $(k-1)$-re igaz az állítás). Megint $i > 1$ estén

$$\big[R_2\ i.\ \text{sora}\big] = \sum_{j=1}^{N} V_{ij}\big[R_1\ j.\ \text{sora}\big] = \sum_{m=1}^{k} V_{i1}\big[R_1\ m.\ \text{sora}\big].$$

Ezért az $n^{[1]}$-edik elemeket ill. az előttük levőket tekintve:

$$[R_2]_{ij} = 0 \quad (1 \leq i,\ j < n^{[1]}), \quad [R_2]_{i,n^{[1]}} = \sum_{i=m}^{k} V_{im}[R_1]_{m,n^{[1]}} = V_{i1}[R_1]_{1,n^{[1]}} \quad (1 \leq i).$$

Vagyis R_2 első $n^{[1]}-1$ oszlopa $=0$, az $n^{[1]}$-edikben pedig V első oszlopának $\neq 0$ többszöröse. Mivel R_2 erősen felső-trianguláris, ez csak úgy lehet, ha ennek az oszlopnak az első eleme $\neq 0$, azaz V első oszlopa $= [\sigma, 0, 0, \ldots, 0]^{\mathrm{T}}$ alakú. Mivel V ortogonális, megint $V = \sigma \oplus W$ írható, ahol $\sigma \in \{\pm 1\}$, $W \in \mathrm{Ort}(M-1)$. Csakhogy ekkor

$$R_2 = VR_1 = \begin{bmatrix} \sigma & 0 \\ 0 & W \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \big[R_1\ 1.\ \text{sora}\big] \\ 0 \qquad S_1 \end{bmatrix}, \qquad S_1 := \big[[R_1]_{ij}\big]_{i,j>1} \in \mathrm{Feltriang}_*(M-1, N-1).$$

Ez csak úgy lehet, ha

$$S_2 = WS_1, \quad \text{ahol}\ \ S_2 := \big[[R_2]_{ij}\big]_{i,j>1} \in \mathrm{Feltriang}_*(M-1, N-1).$$

Itt S_2 $(k-1)$-rangű (hiszen $(k-1)$ db. $\neq 0$ sora van. Tehát az indukciós feltevés szerint W alakja $W = \mathrm{diag}(\sigma_2, \ldots, \sigma_{k-1}) \oplus U$, alkalmas $\sigma_j \in \{\pm 1\}$, $U \in \mathrm{Ort}(M-k)$ mellett. Vagyis $V = \sigma \oplus W = \mathrm{diag}(\sigma, \sigma_1, \ldots, \sigma_k) \oplus U$. Q.e.d.

Racionális ortogonális mátrixok generálása (pl. dolgozathoz)

Forrás: H. Liebeck - A. Osborne, *The Generation of all Rational Orthogonal Matrices,* The Amer. Math. Monthly, **98,** No.2 (Feb. 1991), 131-133.

Emlékeztető. A Cayley féle $C : S \mapsto (S-I)^{-1}(S+I)$ leképezéssel

$$C : \big\{\text{Antisymm. } N\times N\text{-es mátrixok}\big\} \leftrightarrow \big\{U \in \mathrm{Ort}(N) : 1 \notin \mathrm{Sp}(U)\big\}.$$

Másrészt racionális együtthatójú mátrix inverze is racionális.

Lemma. *Ha* $A \in \mathrm{Mat}(N,N)$*, akkor* $\exists\ \sigma_1,\dots,\sigma_N \in \{\pm 1\}\quad 1 \notin \mathrm{Sp}\big(\mathrm{diag}(\sigma_1,\dots,\sigma_N)A\big)$.

Bizonyítás. Indukció N szerint. Az $N=1$ eset triviális. Tegyük fel, hogy $(N-1)$-re igaz az állítás, de

$$A \in \mathrm{Mat}(N,N) \ \text{ és }\ 1 \in \mathrm{Sp}\big(\mathrm{diag}(\sigma_1,\dots,\sigma_N)A\big) \quad (\sigma_1,\dots,\sigma_N \in \{\pm 1\}).$$

Észrevétel: $1 \in \mathrm{Sp}\big(\mathrm{diag}(\sigma_1,\dots,\sigma_N)A\big) \iff \det\big(A - \mathrm{diag}(\sigma_1,\dots,\sigma_N)\big) = 0$. Tekintsük a

$$d(\sigma_1,\dots,\sigma_N) := \det\big(A - \mathrm{diag}(\sigma_1,\dots,\sigma_N)\big)$$

függvényt. Feltevés szerint $d\big(\{\pm 1\}^N\big) = 0$. A determinánst az első sor szerint kifejtve

$$d(\sigma_1,\sigma_2,\dots,\sigma_N) = (A_{11}-\sigma_1)d_0(\sigma_2,\dots,\sigma_N) + \mathrm{Pol}(\sigma_2,\dots,\sigma_N),$$

ahol $d_0 := \det\big([A_{ij}]_{i,j>1} - \mathrm{diag}(\sigma_2,\dots,\sigma_N)\big)$. Az indukciós feltevés szerint

$$\exists\ \sigma_2^*,\dots\sigma_N^* \in \{\pm 1\}^{N-1} \qquad \delta^* := d_0(\sigma_2^*,\dots,\sigma_N^*) \neq 0.$$

Ezzel $0 = d(\pm 1, \sigma_2^*,\dots,\sigma_N^*)$, ami az $(A_{11}-1)\delta^* = (A_1 1 + 1)\delta^*)$ ellentmondásra vezet.

Következmény. *Racionális ortogonális mátrixok konstrukciója antiszimmetrikusokból*

$$\mathrm{Ort}(N,\mathbb{Q}\ ) = \big\{\mathrm{diag}(\sigma)(S-I)^{-1}(S+I) :\ \sigma \in \{\pm 1\}^N,\ S = -S^{\mathrm{T}} \in \mathrm{Mat}(N,N,\mathbb{Q}\ )\big\}.$$

Másik algoritmus. A QR-felbontás kis ortogonális lépéseivel sok (de nem minden!) racionális ortogonális mátrix kapható Pythagoraszi (a,b,c) számhármasokat használva

$$T_{i,j,a,b,\tau} := \left[I \text{ átírva az } (i,i),(i,j),(j,i),(j,j) \text{ helyeken } \frac{1}{c}\begin{bmatrix}\tau a & \tau b\\ -a & b\end{bmatrix}\text{-vel}\right]$$

alakú forgatások ill. tükrözések szorzataiként.

Gyakorlat. (1) Vezessük le Cayley-transzformációval a Pythagoraszi számhármasok $\big((x-y)^2, 2xy, (x+y)^2\big)$ formuláját. $\left[S := \begin{bmatrix}0 & x/y\\ -x/y & 0\end{bmatrix}.\right]$

(2) Előállíthatók-e az összes Pythagoraszi számnégyesek Cayley-transzformációval?

Lineáris egyenletrendszer numerikus megoldásának verifikálása

Elméleti probléma: $Ax = b$. Ismert numerikusan egy $\widetilde{x}$ megoldás. Azaz

$$\widetilde{A}\widetilde{x} = \widetilde{b}, \quad x = \widetilde{x} + e, \quad A = \widetilde{A} + E, \quad b = \widetilde{b} + d,$$

ahol az d ill E hibákról vannak előzetes becsléseink. Legáltalánosabban

$$d \in \mathcal{D}, \qquad E \in \mathcal{E},$$

ahol a $\mathcal{D}$ vektorhalmaz ill. a $\mathcal{E}$ mátrixhalmaz adott.

Kérdés: Mennyire jó x helyett $\widetilde{x}$?

Becslés $\mathcal{D}, \mathcal{E}$ alapján.

$$\begin{aligned}
&(\widetilde{A} + E)(\widetilde{x} + e) = \widetilde{b} + d,\\
&E\widetilde{x} + Ee + \widetilde{A}e = d,\\
&e = (\widetilde{A} + E)^{-1}(d - E\widetilde{x}).
\end{aligned}$$

Kiindulás becslésekhez: $e \in \Big\{ \big(\widetilde{A} + E\big)^{-1}(d - E\widetilde{x}) : \ E \in \mathcal{E}, \ d \in \mathcal{D} \Big\}$.

Példa. $\mathcal{D} := \big\{ d' : \ \|b'\| < \delta \big\}, \ \mathcal{E} := \big\{ E' : \ \|E'\| < \varepsilon \big\}$. Ekkor

$$\|e\| \le \sup_{\|E\|<\varepsilon} \big\|(\widetilde{A} + E)^{-1}\big\|(\delta + \varepsilon\|\widetilde{x}\|).$$

Általában is $\big\|B^{-1}\big\| = \sup_{\|z\|=1} \big\|B^{-1}z\big\| = \dfrac{1}{\inf_{\|y\|=1} \big\|By\big\|}$. Innen

$$\big\|(\widetilde{A} + E)^{-1}\big\| \le \frac{1}{\Big[\inf_{\|y\|=1} \|\widetilde{A}y\| - \varepsilon\Big]_+} = \frac{1}{\frac{1}{\|\widetilde{A}^{-1}\|} - \varepsilon},$$

ha egyáltalán $\|\widetilde{A}y\| > \varepsilon$ ($\|y\| = 1$). Átírhatjuk ez utóbbit a

$$K(B) := \big\|B^{-1}\big\| \, \|B\| \quad \text{kondicionális norma}$$

terminusaival, ahonnan

$$\begin{aligned}
&(\big\|\big(\widetilde{A} + E\big)^{-1}\big\| \le \frac{\widetilde{A}^{-1}}{1 - \varepsilon\big\|\big(\widetilde{A} + E\big)^{-1}\big\|} = \frac{K(\widetilde{A})}{\|\widetilde{A}\| - \varepsilon K(\widetilde{A})},\\
&\|e\| \le \frac{K\big(\widetilde{A}\big)}{\|\widetilde{A}\| - \varepsilon K\big(\widetilde{A}\big)} \big(\delta + \varepsilon\|\widetilde{x}\|\big).
\end{aligned}$$

Gyakorlat: képlethiba

Hány tizedesjegyre adja ki pontosan a π értékét $\quad \left[2^3(2^3+2)^{2^4}\right]^{1/(2^5+2)}$?

Forrás: `https://www.linkedin.com/in/fernando-mancebo-b8942a2a/`

$\pi = 4\mathrm{arctg}(1) = 4\int_0^1 [1+x^2]^{-1}\, dx = 4\sum\limits_{n=1}^{\infty}(-1)^n/(2n-1)$ konvegenciasebessége

$\pi = 6\arcsin(1/2) = 6\int_0^1/2[1{-}x^2]^{-1/2}dx = 6\sum_{n=0}^{\infty}\binom{-1/2}{n}\int_0^1 x^2\,dx$ konvegenciasebessége

Milyen közel van a gyök a Newton módszernél

$D \subset \mathbb{R}^N$ kompakt konvex tartomány, $f : D \to \mathbb{R}^N$ C^2-síma, $f'(x)$ invertálható $(x \in D)$

$$M := \max\left\{\frac{1}{2}\big\|f'(x_1)^{-1}f''(x_2)\big\| : x_1, x_2 \in D\right\}.$$

$x_0 \in D$, $x_{k-1} := x_k - f'(x_k)f(x_k)$ jól-def. $(k = 1, \dots, n)$.

Kérdés. Ha "közel" van x_n x_{n+1}-hez, milyen közel lehet hozzájuk f-nek egy gyöke?

Tegyük fel: $f(x_*) = 0$, $[x_n, x^*] \subset D$

$$0 = f(x_*) = f(x_n) + f'(x_n)(x_n - x_*) + \underbrace{\frac{1}{2}f''_{[x_n,x_*]}}_{\int_{t_1=0}^1 \int_{t_2=0}^1 f''(x_n+t_2(x_*-x_n))\,dt_2\,dt_1}(x_* - x_n)^2$$

$$y_* := x_n - x_*$$

$$y_* = -f'(x_n)^{-1}f(x_n) - \frac{1}{2}f'(x_n)^{-1}f''_{[x_n,x_*]}y_*^2$$

$$y_* = T(y_*), \qquad T(y) := \underbrace{-f'(x_n)^{-1}f(x_n)}_{x_{n+1}-x_n} - \frac{1}{2}f'(x_n)^{-1}f''_{[x_n,x_*]}y^2$$

Emlékeztető. Brower fixpont-tétele szerint, ha a T leképezés egy zárt gömböt (vagy azzal toplogikusan ekvivalens alakzatot) önmagába visz, akkor van fixpontja). Vagyis
ha valamilyen $\delta > 0$ *mellett* $T : \overline{B(\delta)} = \{y \in \mathbb{R}^N : \|y\| \le \delta\} \to \overline{B(\delta)}$,
akkor $\exists\ y_* \in \overline{B(\delta)}$ $\quad y_* = T(y_*)$.
Ha tehát van olyan $\delta > 0$, hogy $x_n + \overline{B(\delta)} \subset D$ és $\|T(y)\| \le \delta$ valahányszor $\|y\| \le \delta$, akkor egy ilyen δ mellett van olyan $x_* \in D$, amelyre $f(x_*) = 0$ és $\|x_n - x_*\| \le \delta$.
Mekkora lehet egy ilyen δ?

$$\begin{aligned}\|T(y)\| \le \delta \quad (\|y\| \le \delta), \quad \Leftarrow \quad & \|x_{n+1} - x_n\| + M\delta^2 \le \delta,\\ & M\delta^2 - \delta + \|x_{n+1} - x_n\| \le 0,\\ & \delta \in \left[\frac{1-\sqrt{1-4M\|x_{n+1}-x_n\|}}{2M}, \frac{1+\sqrt{1-4M\|x_{n+1}-x_n\|}}{2M}\right].\end{aligned}$$

Tétel. Ha $4M\|x_{n+1} - x_n\| \le 1$, és az x_n körüli $\delta_n := \left[1 - \sqrt{1-4M\|x_{n+1}-x_n\|}\right]/(2M)$ sugarú zárt gömb D-ben van, akkor van f-nek $x_* \in D$ gyöke x_n-től δ_n távolságon belül.

Következmény. Mivel ekkor $M\delta_n \le 1/2 < 1$ és $\|x_n - x_*\| \le \delta_n$, a Newton algoritmus folytatásakor $\|x_{n+k} - x_*\| \le M^{2^k-1}\delta_n^{2^k} \searrow 0 \quad (k \to \infty)$.