

Szabó Péter Gábor, Virágh János:

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak



**A felsőfokú informatikai oktatás
minőségének fejlesztése,
modernizációja**

TÁMOP-4.1.2.A/1-11/1-2011-0104



Főkedvezményezett:
Pannon Egyetem
8200 Veszprém
Egyetem u. 10.

Kedvezményezett:
Szegedi Tudományegyetem
6720 Szeged
Dugonics tér 13.



2014



A projekt az Európai Unió támogatásával, az Európai Szociális Alap társfinanszírozásával valósul meg.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

1. előadás

Ortogonalis transzformációk

Ortogonalis mátrixok, ortogonalis transzformációk

Ortogonalis mátrixok

Definíció. A $Q \in R^{n \times n}$ mátrix ortogonalis, ha

$$QQ^T = I.$$

Példa. Az alábbi mátrixok ortogonalisak.

$$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

Ortogonalis mátrixok

- Csak **reguláris** mátrix lehet ortogonalis.
(Következik a determinánsok szorzástételéből.)
- Ortogonalis mátrix **inverze** megegyezik a **transzponáltjával**.

$$Q^{-1} = Q^T$$

Ortogonalis mátrixok

- Ortogonalis mátrix oszlopvektoraik **ortonormált** vektorrendszeret alkotnak.

$$q_i^T q_j = \delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{ha } i = j \\ 0, & \text{ha } i \neq j \end{cases}$$

- Komplex mátrixok esetén a H-ortogonalis mellett használatos az ***unitér*** elnevezés is.

Ortogonalis transzformáció

Definíció. A $Q \in R^{n \times n}$ *ortogonalis mátrixszal* megadott

$$\begin{aligned} R^n &\rightarrow R^n \\ x &\mapsto Qx \end{aligned}$$

leképezést, ortogonalis transzformációnak nevezzük.

Az ortogonalis transzformációknak számos gyakorlati alkalmazásuk van.

Ortogonalis transzformáció

Ortogonalis mátrixok távolságtartó transzformációt indukálnak.

Tétel. A $Q \in R^{n \times n}$ *ortogonalis mátrixra* és $x \in R^n$ *vektorra*

$$\|Qx\|_2 = \|x\|_2.$$

Bizonyítás.

$$\|Qx\|_2^2 = (Qx)^T (Qx) = x^T Q^T Qx = x^T (Q^T Q)x = x^T x = \|x\|_2^2.$$

Megjegyzés. A tétel megfordítása is igaz, vagyis ha minden $x \in R^n$ vektorra $\|Qx\|_2 = \|x\|_2$, akkor Q ortogonalis.

Ortogonalis transzformáció

Hasonló „hosszmegőrző” tulajdonság teljesül akkor is, ha mátrixok ortogonalis transzformációját tekintjük, a 2-es és a Frobenius normában.

Tétel. *Tetszőleges $A \in R^{n \times n}$ mátrixra és $Q \in R^{n \times n}$ ortogonalis mátrixra*

$$a) \quad \|QA\|_2 = \|A\|_2$$

$$b) \quad \|QA\|_F = \|A\|_F.$$

Bizonyítás

a)

$$\begin{aligned}\|QA\|_2^2 &= \rho((QA)^T (QA)) = \rho(A^T (Q^T Q) A) = \\ &= \rho(A^T I A) = \rho(A^T A) = \|A\|_2^2\end{aligned}$$

b)

$$\begin{aligned}\|QA\|_F^2 &= \sum_{j=1}^n \|(QA)e_j\|_2^2 = \sum_{j=1}^n \|Q(Ae_j)\|_2^2 = \\ &= \sum_{j=1}^n \|Ae_j\|_2^2 = \|A\|_F^2\end{aligned}$$

Megjegyzések

- Mivel tetszőleges $B \in R^{n \times n}$ mátrix esetén mindkét vizsgált normára teljesül $\|B\| = \|B^T\|$, így azt is igazoltuk, hogy

$$\|AQ\|_2 = \|A\|_2$$

$$\|AQ\|_F = \|A\|_F.$$

- Tetszőleges ortogonális hasonlósági transzformáció esetén

$$\|Q^T A Q\|_2 = \|A\|_2$$

$$\|Q^T A Q\|_F = \|A\|_F.$$

Következmény

- Tetszőleges $A \in R^{n \times n}$ mátrixra és $Q \in R^{n \times n}$ ortogonális mátrixra mind a 2-es, mind a Frobenius normához tartozó kondíciószámokra

$$\text{cond}(QA) = \text{cond}(A)$$

$$\text{cond}(Q^T A Q) = \text{cond}(A).$$

Megjegyzés

- A „hosszmegőrző” tulajdonságból következik, hogy minden Q valós ortogonális mátrix sajátértékeinek abszolút értéke 1. (De ettől még lehetnek komplex sajátértékei is a mátrixnak.)

Példa.

$$Q = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

ortogonális mátrix sajátértékei

$$\lambda_1 = -1, \quad \lambda_2 = i, \quad \lambda_3 = -i.$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Ortogonalis-triangularis felbontás

Definíció. Az $A \in R^{n \times n}$ mátrix ortogonalis-triangularis felbontásán, A -nak egy

$$A = QR$$

alakú dekompozícióját értjük, ahol Q ortogonalis, R felső triangularis mátrix.

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Legyen $A \in R^{n \times n}$ tetszőleges reguláris mátrix.

Az $A=QR$ egyenlőséget oszlopokra bontva

így is megadhatjuk:

$$(a_1 a_2 \dots a_k \dots a_n) = (q_1 q_2 \dots q_k \dots q_n) \begin{pmatrix} r_{11} & r_{12} & \dots & r_{1k} & \dots & r_{1n} \\ 0 & r_{22} & \dots & r_{2k} & \dots & r_{2n} \\ 0 & 0 & \ddots & \vdots & \dots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & r_{kk} & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & \ddots & \ddots & r_{n-1,n} \\ 0 & 0 & \dots & \dots & 0 & r_{nn} \end{pmatrix}$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Az A mátrix lineárisan független oszlopvektoraival az alábbi lineáris kombinációkkal fejezhetők ki a Q ortogonális mátrix ortonormált oszlopvektorrendszerével:

$$a_1 = r_{11}q_1$$

$$a_2 = r_{12}q_1 + r_{22}q_2$$

$$\vdots$$

$$a_k = r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \dots + r_{kk}q_k$$

$$\vdots$$

$$a_n = r_{1n}q_1 + r_{2n}q_2 + \dots + r_{nn}q_n.$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Az első

$$a_1 = r_{11} q_1$$

egyenlőségből

$$a_1^T a_1 = r_{11}^2 q_1^T q_1 = r_{11}^2$$

következik, így választható

$$r_{11} = +\sqrt{a_1^T a_1} \quad \text{és} \quad q_1 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{r_{11}} a_1.$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Feltéve, hogy $j=1,2,\dots,k-1$ -ig adott q_j és r_{ij} ($1 \leq i \leq j$), az $i=1,2,\dots,k-1$ értékekre a_k -t balról beszorozva q_i^T -tal:

$$q_i^T a_k = r_{1k} \underbrace{q_i^T q_1}_0 + r_{2k} \underbrace{q_i^T q_2}_0 + \dots + r_{ik} \underbrace{q_i^T q_i}_1 + \dots + r_{kk} \underbrace{q_i^T q_k}_0$$

Innen

$$r_{ik} = q_i^T a_k \quad i=1,2,\dots,k-1$$

Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció

Meghatározva a

$$b_k \stackrel{\text{def}}{=} a_k - (r_{1k}q_1 + r_{2k}q_2 + \dots + r_{k-1,k}q_{k-1})$$

vektort, a $b_k = r_{kk}q_k$ összefüggést felhasználva adódik

$$r_{kk} = +\sqrt{b_k^T b_k} \quad \text{és} \quad q_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{r_{kk}} b_k.$$

Az algoritmus műveletigénye

- n darab négyzetgyökvonás,
- az aritmetikai műveletek száma

$$\begin{aligned} \sum_{k=1}^n (2n(k-1) + 2n + 2n(k-1)) &= \\ &= 2n \sum_{k=1}^n (2k-1) = O(n^3) \end{aligned}$$

- A gyakorlatban a módosított Gram-Schmidt eljárást használják.

Maple kód a QR-felbontás meghatározására a Gram-Schmidt-féle ortogonalizáció alapján

```
3 GramSchmidt-QR:= proc( A :: 'Matrix'(shape=square))
4 local Q, R, b, i, j, k, l, n;           # lokális változók
5 #option trace;
6 use      LinearAlgebra in              # felhasználjuk a LinearAlgebra
csomagot
7     n := RowDimension(A);              # az A mátrix sorainak a száma
8     Q := Matrix(n);
9     R := Matrix(n, shape=triangular[upper]);
10    b := Vector(n);
```

```

11     for j from 1 to n do
12         for i from 1 to j-1 do          # az R mátrix j. oszlopának
kiszámítása
13             R[i,j] := DotProduct(Q[1..n,i],A[1..n,j]);
14         end do;
15         b := Vector(A[1..n,j]);
16         for k from 1 to j-1 do
17             b := b - R[k,j]*Q[1..n,k];
18         end do;
19         R[j,j] := sqrt(DotProduct(b,b));
20         for i from 1 to n do
21             Q[i,j] := 1/R[j,j]*b[i];
22         end do;
23     end do;
24     return Q,R;                        # visszaadjuk a Q és R mátrixot
25 end use;
26 end proc;                             # az eljárás vége

```

Megjegyzés

Ha a kiindulási mátrix oszlopvektoraik lineárisan függetlenek, az előbbi eljárás kiterjeszthető az $A \in R^{n \times m}$ és $n \geq m$ esetre is.

Ha az $A \in R^{n \times m}$ oszlopreguláris (s így szükségképpen $n \geq m$), akkor egyértelműen megadhatók olyan $Q \in R^{n \times m}$ és $R \in R^{m \times m}$ mátrixok, hogy $A = QR$, és

- (i) Q oszlopvektoraik ortonormált rendszert alkotnak,
- (ii) R olyan felső trianguláris mátrix, amelyben $r_{ii} > 0$ minden $i = 1, \dots, m$ -re.

Elemi tükröző mátrixok

Elemi tükröző mátrixok

Definíció. A Q kvadratikus mátrixot elemi tükröző mátrixnak mondjuk, ha $Q=I$ vagy felírható

$$Q = I - 2qq^T$$

alakban, ahol q olyan vektor, amelyre

$$q^T q = \|q\|_2^2 = 1.$$

Az elemi tükröző mátrixokat Householder-mátrixoknak is nevezik.

Elemi tükröző mátrixok

Az elnevezés onnan adódik, hogy $Q \neq I$ esetben, az $x \rightarrow Qx$ transzformáció az n -dimenziós euklideszi térnek egy q normálvektorral megadott, origón átmenő hipersíkra való tükrözését adja, ahol

$$Q = I - 2qq^T.$$

Példa

Írjuk fel a $\left(\frac{\sqrt{2}}{2}, -\frac{\sqrt{2}}{2}\right)^T$ normálvektorral megadott, origón átmenő egyenesre való tükrözést szolgáltató elemi tükröző mátrixot, és számoljuk ki a segítségével az $(5,3)$ koordinátájú pontnak az előbbi egyenesre való tükörképének a koordinátáit.

Megoldás

$$\begin{aligned} Q = I - 2qq^T &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - 2 \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} \\ -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{\sqrt{2}}{2} & -\frac{\sqrt{2}}{2} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

A megadott pont tükörképének koordinátái:

$$\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 3 \\ 5 \end{pmatrix}.$$

Elemi tükröző mátrixok

Tétel. *Minden elemi tükröző mátrix szimmetrikus és ortogonális.*

Bizonyítás.

Legyen Q elemi tükröző mátrix.

a) Q szimmetrikus, mert

$$Q^T = (I - 2qq^T)^T = I^T - 2(q^T)^T q^T = I - 2qq^T = Q.$$

Elemi tükröző mátrixok

b) Q ortogonális, mert

$$\begin{aligned} Q^T Q &= Q Q = (I - 2qq^T)(I - 2qq^T) = \\ &= I - 2qq^T - 2qq^T + 4qq^T qq^T = \\ &= I - 4qq^T + 4q(q^T q)q^T = I \end{aligned}$$

felhasználva, hogy Q szimmetrikus és

$$q^T q = 1.$$

Elemi tükröző mátrixok

Tétel. *Legyenek x és y azonos hosszúságú de különböző vektorok az R^n euklideszi térben. Ekkor a*

$$q = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}$$

és

$$Q = I - 2qq^T$$

formulákkal megadott elemi tükrözés x -et y -ba viszi.

Elemi tükröző mátrixok

Bizonyítás. Könnyen látható, hogy

$$\|q\|_2^2 = q^T q = 1.$$

Határozzuk meg a Qx vektort!

$$\begin{aligned} Qx &= \left(I - 2 \frac{x-y}{\|x-y\|_2} \left(\frac{x-y}{\|x-y\|_2} \right)^T \right) x = \\ &= x - 2(x-y) \frac{(x-y)^T x}{\|x-y\|_2^2} = \end{aligned}$$

A bizonyítás folytatása

$$= x - 2(x - y) \frac{x^T x - y^T x}{(x - y)^T (x - y)} =$$

$$= x - 2(x - y) \frac{x^T x - y^T x}{x^T x - y^T x - x^T y + y^T y} =$$

Használjuk fel, hogy

$$x^T x = y^T y \quad \text{és} \quad x^T y = y^T x.$$

A bizonyítás vége

$$\begin{aligned} &= x - 2(x - y) \frac{x^T x - y^T x}{x^T x - y^T x - x^T y + y^T y} = \\ &= x - (x - y) \frac{2(x^T x - y^T x)}{2(x^T x - y^T x)} = y. \end{aligned}$$

Ezzel igazoltuk, hogy

$$Qx = y.$$

Megjegyzés

- A későbbiekben többször használni fogjuk az előző transzformációt az $y = \|x\|_2 e_1$ speciális esetben, amikor a tükrözés célja a x vektor (elsőtől különböző) komponenseinek kinullázása. Ekkor a

$$q = \frac{x - y}{\|x - y\|_2}$$

vektor által definiált transzformációt alkalmazzuk.

Megjegyzés

- Tetszőleges Q elemi tükröző mátrix, A mátrix és x vektor esetén a Qx (illetve $x^T Q$) transzformált vektor $O(n)$ művelettel, a QA (illetve $A^T Q$) transzformált mátrix $O(n^2)$ művelettel meghatározhatók.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Hány olyan 3×3 -as Q ortogonális mátrix van, amelynek minden komponense 0, 1 vagy -1?
- Igazolja, hogy az egységmátrixtól különböző n -ed rendű elemi tükröző mátrixnak a +1 szám $(n-1)$ -szeres, a -1 pedig egyszeres multiplicitású sajátértéke.

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi mátrix QR felbontását a Gram-Schmidt-féle ortogonalizációs eljárás segítségével.

$$\begin{pmatrix} 2 & -1 & 1 & -2 \\ 2 & -1 & 1 & 2 \\ 0 & 0 & -2 & 1 \\ 0 & -2 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

2. előadás

Mátrixok ortogonális-triangularis felbontása

A Householder-algorithmus

Partícionált elemi tükröző mátrixok

Tétel. *Legyen $Q \in R^{n \times n}$ egy elemi tükröző mátrix. Ekkor az alábbi partícionált formában megadott mátrix is elemi tükröző mátrix.*

$$T = \begin{pmatrix} I & O \\ O^T & Q \end{pmatrix} \in R^{m \times m}$$

$$O \in R^{(m-n) \times n}$$

Bizonyítás

Ha Q egységmátrix, akkor

$$T = \begin{pmatrix} I & O \\ O^T & Q = I \end{pmatrix} \in R^{m \times m}$$

is egységmátrix, így az állítás ekkor igaz.

Ha $Q = I - 2qq^T$, ahol q egységnyi hosszúságú, akkor vezessük be a

$$q'^T = (0, 0, \dots, 0, q_1, q_2, \dots, q_n)$$

m -komponensű vektort.

Bizonyítás

Könnyen látható, hogy q' hossza is egységnyi és

$$T = I - 2q'q'^T,$$

tehát T is elemi tükröző mátrix.

Megjegyzés. Analóg módon, az alábbi partícionált mátrix is elemi tükröző mátrix, ha $Q \in R^{n \times n}$ elemi tükröző mátrix.

$$T = \begin{pmatrix} Q & O \\ O^T & I \end{pmatrix} \in R^{m \times m}$$

Householder-algoritmus

Tétel Minden A n -edrendű, valós, kvadratikus mátrixhoz megadhatók olyan $Q_1, Q_2, \dots, Q_{n-1}$ elemi tükröző mátrixok, hogy az

$$A_0 = A$$

$$A_j = Q_j A_{j-1},$$

rekurzióval számított A_j mátrix $1, 2, \dots, j$ -dik oszlopában minden főátló alatti elem 0.

Speciálisan így A_{n-1} felső trianguláris alakú.

Householder-algoritmus

Bizonyítás.

A bizonyítást j szerinti indukcióval végezzük.

A $j=1$ esetben használjuk fel azt a tételt, amely elemi tükröző mátrix segítségével kinullázza egy vektornak a második komponensétől kezdve az elemeit úgy, hogy közben a vektor hossza nem változik. A korábbi tételbeli jelöléseket használva legyen

$$x = Ae_1 = a \qquad y = \|a\|_2 e_1.$$

Így a $Q_1 A_0$ szorzás elvégzése után kapott mátrix első oszlopában a második elemtől kezdve minden érték 0.

Householder-algoritmus

Bizonyítás (folyt.)

Tegyük fel, hogy az állítás teljesül az első j esetre! Az A_j mátrixot írjuk fel

$$A_j = \begin{pmatrix} U_j & B_j \\ O_j^T & C_j \end{pmatrix}$$

partícionált alakban, ahol

$$\begin{aligned} U_j &\in R^{j \times j}, & B_j &\in R^{j \times (n-j)}, \\ O_j^T &\in R^{(n-j) \times j}, & C_j &\in R^{(n-j) \times (n-j)}. \end{aligned}$$

Householder-algoritmus

Bizonyítás (folyt.)

Ismét felhasználva az előbb már alkalmazott tételt, van olyan $S_j \in R^{(n-j) \times (n-j)}$ elemi tükröző mátrix, amellyel szorozva az $S_j C_j$ mátrix első oszlopában a másodiktól kezdve minden elem 0.

A partícionált elemi tükröző mátrixokra vonatkozó tétel szerint

$$Q_{j+1} = \begin{pmatrix} I_j & O_j \\ O_j^T & S_j \end{pmatrix}$$

szintén elemi tükröző mátrix.

Householder-algoritmus

Bizonyítás (befejezés).

Tehát az

$$A_{j+1} = Q_{j+1}A_j = \begin{pmatrix} I_j & O_j \\ O_j^T & S_j \end{pmatrix} \begin{pmatrix} U_j & B_j \\ O_j^T & C_j \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U_j & B_j \\ O_j^T & S_j C_j \end{pmatrix}$$

mátrix már a $j+1$ -dik oszlopában is olyan tulajdonságú lesz, hogy az A_{j+1} főátló alatti elemei rendre 0 értékűek.

Ortogonalis-triangularis felbontás

A fenti tétel bizonyításában szereplő eljárás valóban dekompozíciót ad, hiszen így

$$A_{n-1} = Q_{n-1}Q_{n-2}\dots Q_1 A,$$

ahol $R = A_{n-1}$ felső trianguláris mátrix, $Q_{n-1}Q_{n-2}\dots Q_1$ ortogonalis mátrix, aminek Q inverze (vagyis az előbbi szorzatmátrix transzponáltja) is ortogonalis, így

$$A=QR.$$

Példa

Határozzuk meg a Householder-algoritmussal az alábbi mátrix ortogonális-triangularis felbontását.

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}$$

Megoldás

Most csak egy elemi tükröző mátrixra van szükség, arra, amely az első oszlop második elemét kinullázza. Legyen

$$x = (3, 4)^T \quad \text{és} \quad y = (5, 0)^T.$$

Így

$$q = \left(-\frac{1}{\sqrt{5}}, \frac{2}{\sqrt{5}} \right)^T \quad \text{és} \quad Q = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix}.$$

Megoldás

$$R = QA = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & -\frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

Tehát a QR dekompozíció:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & -\frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

```

1 # Az A=Q.R ortogonális trianguláris felbontást
2 # tükröző mátrixokkal előállító eljárás
3
4 QR_HOUSEHOLDER := proc(A::'Matrix'(shape=square))
5 local Q, A1, n, j, a_j, h_j, Hhat_j;
6 #option trace;
7 use LinearAlgebra in
8     n := RowDimension(A);
9     A1 := evalf(Copy(A));          #lemásoljuk az A mátrixot
10    Q := Matrix(IdentityMatrix(n));
11    for j from 1 to n-1 do
12        a_j := Vector(A1[j..n,j]);
13        h_j := a_j - sign(a_j[1])*VectorNorm(a_j,2)*UnitVector(1,n+1-j);
14        Hhat_j := HouseholderMatrix(h_j);
15        A1[j..n,j..n] := Hhat_j.A1[j..n,j..n];
16        Q[j..n,j..n] := Q[j..n,j..n].Hhat_j;
17        if j > 1 then
18            Q[1..j-1,j..n] := Q[1..j-1,j..n].Hhat_j;
19        end if;
20    end do;
21    return Q,A1;
22 end use;
23 end proc;

```


Felső Hessenberg mátrix

Definíció: *A H felső Hessenberg mátrix, ha*
$$h_{ij} = 0$$
bármely $j+1 < i$ -re.

Példa:

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 4 \\ 2 & 3 & 2 & 2 \\ 0 & -1 & 2 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Felső Hessenberg alakra transzformálás

Megjegyzés. Tetszőleges $A \in R^{n \times n}$ mátrix véges sok elemi tükröző mátrixszal végzett ortogonális hasonlósági transzformáció segítségével felső Hessenberg alakra transzformálható, vagyis megadhatók olyan $Q_1, Q_2, \dots, Q_{n-2}$ elemi tükröző mátrixok, hogy az

$$A_0 = A \quad A_j = Q_j A_{j-1} Q_j,$$

rekurzióval számított $1, 2, \dots, j$ -dik oszlopában már felső Hessenberg alakú. Speciálisan az A_{n-2} mátrix felső Hessenberg alakú mátrix lesz.

Reguláris mátrixok QR-felbontása a Cholesky-féle dekompozícióval

Eljárás

Ha A reguláris, akkor a $B = A^T A$ mátrix pozitív definit, tehát létezik B -nek kanonikus Cholesky-felbontása.

Legyen $Q = AR^{-1}$. Ekkor az $A=QR$ ortogonális trianguláris felbontás, hiszen R felső trianguláris mátrix, másrészt Q ortogonális.

Q ortogonalitásának bizonyítása

$$\begin{aligned} Q^T Q &= (AR^{-1})^T (AR^{-1}) = (R^{-1})^T A^T AR^{-1} = \\ &= (R^{-1})^T BR^{-1} = (R^{-1})^T (R^T R) R^{-1} = \\ &= \left((R^T)^{-1} R^T \right) (RR^{-1}) = II = I \end{aligned}$$

A Cholesky-féle felbontáson alapuló QR-felbontás numerikusan instabil.

Példa

Határozzuk meg a Cholesky-felbontáson alapuló eljárással az alábbi reguláris mátrix ortogonális-trianguáris felbontását

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}.$$

Megoldás

$$B = A^T A = \begin{pmatrix} 3 & 4 \\ 2 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 25 & 26 \\ 26 & 29 \end{pmatrix}$$

B Cholesky-felbontása:

$$B = R^T R = \begin{pmatrix} 5 & 0 \\ \frac{26}{5} & \frac{7}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

Megoldás

Így

$$Q = AR^{-1} = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{5} & -\frac{26}{35} \\ 0 & \frac{5}{7} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix}$$

Tehát a QR-dekompozíció:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

Összehasonlítás

Hasonlítsuk össze a Householder-algoritmus és a Cholesky-féle felbontáson alapuló eljárás eredményeit.

Householder-algoritmus:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & -\frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & -\frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

Cholesky-féle felbontáson alapuló eljárás:

$$\begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}.$$

A felbontás unicitásáról

Tétel. *Reguláris A mátrix ortogonális triangularizációja Q oszlopainak és R sorainak előjelétől eltekintve egyértelmű.*

Bizonyítás.

Tekintsük A két felbontását.

$$A = Q_1 R_1 = Q_2 R_2$$

Bizonyítás (folytatás)

Mivel A reguláris, így a determinánsok szorzástétele miatt, a felbontásban szereplő minden mátrix reguláris, ezért

$$Q_2^T Q_1 = R_2 R_1^{-1}.$$

Itt a baloldalon ortogonális mátrix áll, a jobb oldalon viszont felső trianguláris mátrix, ami csak úgy lehet, ha mindkét oldal egy V diagonális mátrixszal azonos.

Bizonyítás (befejezés)

Mivel V egyszerre diagonális és ortogonális mátrix is, így a főátlójában csak $+1$ és -1 állhat, valamint

$$Q_2 = Q_1 V \qquad R_2 = V R_1$$

ami a tétel bizonyítását jelenti.

Elemi forgatómátrixok

Elemi forgatómátrixok

Definíció. *Tetszőleges $1 \leq p < q \leq n$ és $0 \leq \theta \leq 2\pi$ esetén az*

$$S(p, q, \theta) =$$

$$I + (\cos \theta - 1)(e_p e_p^T + e_q e_q^T) + \sin \theta (e_p e_q^T - e_q e_p^T)$$

alakban megadható mátrixokat elemi forgatómátrixoknak nevezzük.

*(Másik szokásos elnevezésük: **Givens-mátrixok.**)*

$$S(p, q, \theta)$$

$$\begin{pmatrix} 1 & & & & & \\ & \ddots & & & & \\ & & 1 & & & \\ & & & \cos \theta & \sin \theta & \\ & & & & \ddots & \\ & & & -\sin \theta & \cos \theta & \\ & & & & & 1 & \ddots & \\ & & & & & & & 1 \end{pmatrix} \begin{matrix} \leftarrow (p) \\ \leftarrow (q) \end{matrix}$$

$\uparrow$
 (p)

$\uparrow$
 (q)

Tulajdonságok

Tetszőleges $S(p,q,\theta)$ elemi forgatómátrix és A mátrix esetén

- a) az $S(p,q,\theta)$ mátrix ortogonális,
- b) az $A'=AS(p,q,\theta)$ mátrix oszlopvektorai tetszőleges $1 \leq m \leq n$ -re A oszlopvektoraiból az alábbi képlettel számolhatóak

$$a'_m = \begin{cases} a_m & , \text{ ha } m \neq p \text{ és } m \neq q \\ \cos \theta a_p + \sin \theta a_q, & \text{ ha } m = p \\ -\sin \theta a_p + \cos \theta a_q, & \text{ ha } m = q \end{cases}$$

QR-felbontás, felső Hessenberg- alakra transzformálás

- Tetszőleges valós, kvadratikus mátrix ortogonális trianguláris felbontása előállítható elemi forgató mátrixokkal $O(n^3)$ művelettel.
- Tetszőleges valós, kvadratikus mátrix $O(n^2)$ elemi forgatómátrixszal végzett ortogonális hasonlósági transzformáció segítségével $O(n^3)$ művelettel felső Hessenberg-alakra transzformálható.

QR-felbontás

Példa. Határozzuk meg az alábbi mátrix QR-felbontását elemi forgató mátrixokkal

$$A = \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix}.$$

Megoldás.

$$\cos \alpha = \frac{3}{\sqrt{3^2 + 4^2}} = \frac{3}{5} \quad \sin \alpha = \frac{4}{\sqrt{3^2 + 4^2}} = \frac{4}{5}$$

$$SA = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & \frac{4}{5} \\ -\frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3 & 2 \\ 4 & 5 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} \frac{3}{5} & -\frac{4}{5} \\ \frac{4}{5} & \frac{3}{5} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 5 & \frac{26}{5} \\ 0 & \frac{7}{5} \end{pmatrix}$$

Miért 'forgató' mátrix?

- Ha az (x,y) koordinátájú pont β szöget zár be az x -tengellyel és azt az origó körül $-\alpha$ szöggel elforgatjuk, akkor az így kapott pont (x',y') koordinátái

$$(z \cos(\beta - \alpha), z \sin(\beta - \alpha))$$

ahol $z = \sqrt{x^2 + y^2} = \sqrt{x'^2 + y'^2}$. Így

$$x' = z(\cos \alpha \cos \beta + \sin \alpha \sin \beta) = z\left(\cos \alpha \frac{x}{z} + \sin \alpha \frac{y}{z}\right) =$$

$$= x \cos \alpha + y \sin \alpha$$

$$y' = z(\sin \beta \cos \alpha - \cos \beta \sin \alpha) = z\left(\frac{y}{z} \cos \alpha - \frac{x}{z} \sin \alpha\right) =$$

$$= y \cos \alpha - x \sin \alpha$$

Megjegyzés

- Ha ismert az $A=QR$ dekompozíció, könnyen megkapható $|\det A|$ is. Ehhez elég meggondolni, hogy egy ortogonális mátrix determinánsa csak +1 vagy -1 lehet. Ekkor viszont

$$|\det A| = \prod_{i=1}^n |r_{ii}|.$$

- Ha ismert az $Ax=a$ lineáris egyenletrendszer együtthatómátrixának $A=QR$ felbontása, akkor tekintve a

$$Qy=a$$

$$Rx=y$$

egyenletrendszereket y könnyen meghatározható, kihasználva Q ortogonalitását ($y = Q^T a$), majd a szokásos visszahelyettesítéssel x is megkapható.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Létezik-e olyan elemi tükrözés, amely az egységkört az egységnégyszetre képezi le?

Gyakorló feladatok

- Lehet-e egy mátrix egyszerre elemi tükröző és elemi forgató mátrix is?

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi mátrix QR felbontását a Householder-algoritmussal.

$$\begin{pmatrix} 2 & -2 & 0 & -1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & -2 \\ -2 & -2 & 1 & -1 \end{pmatrix}$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

3. előadás

A sajátérték-probléma numerikus
megoldása

Sajátérték, sajátvektor

Definíció. Legyen A n -ed rendű mátrix. A $\lambda \in \mathbb{C}$ számot az A sajátértékének hívjuk, ha létezik olyan $v \in \mathbb{C}^n, v \neq 0$ vektor, amellyel

$$Av = \lambda v.$$

Ekkor v -t a λ -hoz tartozó sajátvektornak mondjuk.

Sajátértékek

- Egy A mátrix sajátértékei pontosan a

$$p_A(\lambda) = \det(A - \lambda I)$$

karakterisztikus polinomjának a gyökei.

$$\det(A - \lambda I) = \begin{vmatrix} a_{11} - \lambda & a_{12} & a_{13} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} - \lambda & a_{23} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots \\ a_{n-1,1} & a_{n-1,2} & \cdots & a_{n-1,n-1} - \lambda & a_{n-1,n} \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{n,n-1} & a_{nn} - \lambda \end{vmatrix}$$

Sajátértékek

- Trianguláris mátrix sajátértékei a mátrix főátlójában álló elemei.
- A karakterisztikus polinomot szokás az alábbi alakban is felírni:

$$p_A(\lambda) = (-1)^n (\lambda^n - \alpha_1 \lambda^{n-1} - \dots - \alpha_{n-1} \lambda - \alpha_n)$$

- Egy $p_A(\lambda)$ polinomhoz több olyan mátrix is megadható, amelynek az adott polinom a karakterisztikus polinomja. Ezek közül különösen fontos a polinom *kísérő mátrixa*.

Karakterisztikus polinom kísérő mátrixa

Az alábbi

$$p_A(\lambda) = (-1)^n (\lambda^n - \alpha_1 \lambda^{n-1} - \dots - \alpha_{n-1} \lambda - \alpha_n)$$

polinomhoz tartozó *kísérő mátrix*

$$C_p = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \alpha_2 & \alpha_3 & \cdots & \alpha_n \\ 1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Összefüggés a mátrix sajátértékei, determinánsa és nyoma között

$$\text{a) } \alpha_1 = \sum_{j=1}^n a_{jj} = \operatorname{tr} A = \sum_{j=1}^n \lambda_j$$

$$\text{b) } (-1)^{n+1} \alpha_n = \det A = \prod_{j=1}^n \lambda_j$$

Bizonyítás

- a) Írjuk fel λ^{n-1} együtthatóját, felhasználva a karakterisztikus polinom előbbi két, valamint a gyöktényezős alakját!

$$(-1)^n(-\alpha_1) = (-1)^{n-1} \sum_{j=1}^n a_{jj} = (-1)^n(-1) \sum_{j=1}^n \lambda_j$$

Szorozzuk meg az előbbi egyenlőséget $(-1)^{n+1}$ -nel!

$$\alpha_1 = \sum_{j=1}^n a_{jj} = \sum_{j=1}^n \lambda_j$$

Bizonyítás

b) Tekintsük a karakterisztikus polinomnak a $\lambda = 0$ helyen vett helyettesítési értékét!

$$(-1)^n (-\alpha_n) = \det(A - 0I) = (-1)^n \prod_{j=1}^n (-\lambda_j)$$

Ebből következőleg

$$(-1)^{n+1} \alpha_n = \det A = \prod_{j=1}^n \lambda_j.$$

Innen rögtön látható az is, hogy egy mátrix akkor és csak akkor reguláris, ha nincs 0 sajátértéke.

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{Sajátértékek : } \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 4.$$

Karakterisztikus polinom: $p_A(\lambda) = \lambda^2 - 5\lambda + 4$

$$\text{tr}(A) = 2 + 3 = 5 = \lambda_1 + \lambda_2 = 1 + 4$$

$$\det(A) = 4 = \lambda_1 \lambda_2 = 1 \cdot 4$$

A karakterisztikus polinom kísérő mátrixa: $\begin{pmatrix} 5 & -4 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$

Hasonlósági transzformáció

Definíció. *Legyen A tetszőleges mátrix, T pedig tetszőleges reguláris mátrix. Az*

$$A \mapsto T^{-1}AT$$

hozzárendelést hasonlósági transzformáció-nak nevezzük. Azt mondjuk, hogy A hasonló B -hez, ha létezik olyan reguláris T mátrix, hogy $B = T^{-1}AT$. Jele: $A \sim B$.

Hasonlóság

Állítás. Hasonló mátrixok karakterisztikus polinomjaik megegyeznek és így sajátértékeik is azonosak.

Bizonyítás.

Legyen $B = T^{-1}AT$.

$$\begin{aligned} p_A(\lambda) &= \det(A - \lambda I) = \det(T(T^{-1}AT - \lambda I)T^{-1}) \\ &= \det T \det(T^{-1}AT - \lambda I) \det T^{-1} \\ &= \det T \det T^{-1} \det(B - \lambda I) \\ &= p_B(\lambda) \end{aligned}$$

Az állítás megfordítása

- Az állítás megfordítása nem igaz. Az alábbi A mátrix sajátértékei megegyeznek az egységmátrix sajátértékeivel, a két mátrix mégsem hasonlóak.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \neq T^{-1} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} T$$

Hasonlóság

Állítás. Ha $A \sim B$ és A egy sajátvektorrendszere $\{u_1, u_2, \dots, u_n\}$, akkor B sajátvektorrendszere felírható $\{v_1, v_2, \dots, v_n\}$ formában, ahol

$$v_j = T^{-1}u_j \quad (1 \leq j \leq n).$$

Bizonyítás.

Legyen u_j az A tetszőleges sajátvektora.

Ekkor

$$B(T^{-1}u_j) = T^{-1}AT(T^{-1}u_j)$$

Bizonyítás (folyt.)

$$\begin{aligned} B(T^{-1}u_j) &= T^{-1}AT(T^{-1}u_j) = T^{-1}Au_j \\ &= T^{-1}\lambda_j u_j = \lambda_j T^{-1}u_j \end{aligned}$$

A fenti egyenlőség azt mutatja, hogy B sajátvektorai, pontosan az állításban megfogalmazott módon írhatók fel.

A sajátérték-probléma numerikus megoldása

Feladattípusok

- Határozzuk meg egy mátrix összes sajátértékét.
- Határozzuk meg egy mátrix összes sajátértékét és minden sajátértékéhez egy-egy sajátvektort.
- Határozzuk meg egy mátrix minimális/maximális abszolút értékű sajátértékét és hozzá egy hozzá tartozó sajátvektort.

A numerikus módszerek fontossága

Mivel egy mátrix sajátértékeinek a meghatározásának problémája ekvivalens egy algebrai egyenlet gyökeinek megadásával, így a Ruffini-Abel tétel miatt, nincs olyan **véges**, effektív eljárás, amellyel a sajátértékeket **tetszőleges** mátrix esetén **pontosan** meg tudnánk határozni.

Sajátvektorok

- A továbbiakban a hangsúlyt a *sajátértékek* kiszámítására helyezzük. Adott sajátértékhez tartozó sajátvektor, megkapható egy homogén lineáris egyenletrendszer megoldásával. (Ha a sajátvektornak ismert egy közelítése, akkor a hatékonyabb inverz hatványiteráció is alkalmazható.)

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 \\ 2 & 3 \end{pmatrix} \quad \text{Sajátértékek : } \lambda_1 = 1, \lambda_2 = 4.$$

A λ_1 -hez tartozó sajátvektor lehet minden olyan $\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ vektor, amelyre $v_1 + v_2 = 0$, ahol $v_1 \neq 0$.

A λ_2 -höz tartozó sajátvektor lehet minden olyan $\begin{pmatrix} v_1 \\ v_2 \end{pmatrix}$ vektor, amelyre $v_2 = 2v_1$, ahol $v_1 \neq 0$.

Sajátértékek közelítése QR-transzformációval

QR-transzformáció

Tetszőleges A mátrix esetén képezhető az alábbi mátrixsorozat:

$$A_k = Q_k R_k$$

$$A_{k+1} = R_k Q_k$$

Q_k ortogonális mátrix

R_k felső trianguláris mátrix.

Tétel

A $V_k = Q_1 Q_2 \dots Q_k$ ortogonális és az $U_k = R_k R_{k-1} \dots R_1$ felső trianguláris mátrixokat bevezetve

$$\begin{aligned} a) \quad A_k &= (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1})^T A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1}) \\ &= V_{k-1}^T A_1 V_{k-1} \end{aligned}$$

$$b) \quad A_1^k = V_k U_k.$$

Bizonyítás

A bizonyítást k szerinti indukcióval végezzük.
 $k=1$ -re az állítás igaz.

a) Mivel a Q_k ortogonális mátrix reguláris és

$$A_{k+1} = Q_k^T A_k Q_k$$

így

$$\begin{aligned} A_{k+1} &= Q_k^T A_k Q_k \\ &= Q_k^T (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1})^T A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_{k-1}) Q_k \end{aligned}$$

az indukciós feltevésalapján:

$$\begin{aligned} &= (Q_1 Q_2 \dots Q_k)^T A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_k) \\ &= V_k^T A_1 V_k. \end{aligned}$$

Bizonyítás

$$\begin{aligned} \text{b)} \quad A_1^{k+1} &= A_1 A_1^k \\ &= A_1 V_k U_k \\ &= A_1 (Q_1 Q_2 \dots Q_k) (R_k R_{k-1} \dots R_1) \\ &= (Q_1 Q_2 \dots Q_k) A_{k+1} (R_k R_{k-1} \dots R_1) \\ &= (Q_1 Q_2 \dots Q_k) Q_{k+1} R_{k+1} (R_k R_{k-1} \dots R_1) \\ &= V_{k+1} U_{k+1} \end{aligned}$$

felhasználva a $V_k A_{k+1} = A_1 V_k$ összefüggést.

Parlett klasszikus konvergencia-tétele a QR-algoritmusra

- Ha az $A_1 \in R^{n \times n}$ mátrixra teljesül, hogy sajátértékeit alkalmasan indexezve $|\lambda_1| > |\lambda_2| > \dots |\lambda_n| > 0$ és megadható az A_1 -et diagonalizáló olyan X mátrix, amellyel

$$X^{-1} A_1 X = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n)$$
és létezik az $X^{-1} = LR$ felbontás, akkor

$$\lim_{k \rightarrow \infty} A_k = \lim_{k \rightarrow \infty} R_k = \begin{pmatrix} \lambda_1 & * & * & \dots & * \\ 0 & \lambda_2 & * & \dots & * \\ 0 & 0 & \lambda_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & & \ddots & & * \\ 0 & 0 & \dots & 0 & \lambda_n \end{pmatrix} \quad \text{és} \quad \lim_{k \rightarrow \infty} Q_k = I.$$

A QR-algoritmus előnyei

- Mindig alkalmazható, mert minden mátrixnak van QR-felbontása.

- Megőrzi a szimmetriát.

Ha A_k szimmetrikus, akkor

$$A_{k+1} = R_k Q_k = Q_k^T A_k Q_k$$
$$(A_{k+1})^T = (Q_k^T A_k Q_k)^T = A_{k+1}$$

- A kerekítési hibákkal szemben stabilisan viselkedik.

Eltolásos QR-algoritmus

- A QR-algoritmus konvergenciája döntően a sajátértékek elhelyezkedésétől, a $|\lambda_i| / |\lambda_j|$ hányadosok nagyságától függ.
- A konvergencia jelentősen javítható az eltolásos QR-algoritmus segítségével. Minden lépés előtt meghatározunk egy alkalmas $\sigma_k \in R$ konstanst, és a következő képletpárokkal dolgozunk:

Eltolásos QR-algoritmus

Az eltolt mátrix ortogonális trianguláris felbontása:

$$A_k - \sigma_k I = Q_k R_k$$

Fordított sorrendben összeszorzás és korrekció:

$$A_{k+1} = R_k Q_k + \sigma_k I$$

```

0 # Az eltolásos Q.R transzformációt megvalósító Maple eljárás
1 # Az A=Q.R felbontást a beépített QRDecomposition eljárás adja
2
3 ELTOLT_QR_TRAFO := proc(A::'Matrix'(numeric), kMAX::posint, epsilon::positive)
4 local A1, Q1, R1, MaxElem, i, k, j, n, feps, sigmak;
5 #option trace;
6 use LinearAlgebra in
7 A1 := evalf(A);      # lemásoljuk az A mátrixot
8 feps := evalf(epsilon);
9 n := RowDimension(A);
10 for k from 1 while k<kMAX do
11     MaxElem := 0;
12     for i from 2 to n do
13         for j from 1 to i-1 do
14             if (abs(A1[i,j]) > MaxElem) then
15                 MaxElem := abs(A1[i,j]);
16             end if;
17         end do;
18     end do;
19     #print(k, MaxElem);
20     if MaxElem > feps then
21         sigmak := A1[n,n];
22         Q1,R1 := QRDecomposition(A1-sigmak*IdentityMatrix(n),fullspan);
23         A1 := R1.Q1 + sigmak*IdentityMatrix(n);
24     else return A1;
25     end if;
26 end do;
27 return A1;
28 end use;
29 end proc:

```

Sajátértékek perturbációja

Sajátértékek perturbációja

Feladat: Jelölje az A mátrix sajátértékeit

$$\lambda_1, \dots, \lambda_n$$

a ΔA mátrixszal „perturbált” $A + \Delta A$ mátrix sajátértékeit $\tilde{\lambda}_1, \dots, \tilde{\lambda}_n$.

Adjunk felső korlátot a

$$|\lambda_i - \tilde{\lambda}_i|$$

eltérésekre.

Sajátértékek perturbációja (Ostrowski-tétel)

- Legyenek az $A \in R^{n \times n}$ mátrix sajátértékei $\lambda_1, \dots, \lambda_n$. Ekkor bármely $\varepsilon > 0$ -hoz megadható olyan $\delta > 0$, hogy ha a $\Delta A \in \tilde{R}^{n \times n}$ perturbáló mátrix normájára $\|\Delta A\| < \delta$, akkor a $\lambda_1, \dots, \lambda_n$ sajátértékeihez megadható az $1, 2, \dots, n$ egészek olyan $j_1, \dots, j_n$ permutációja, amellyel teljesül a

$$\max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \tilde{\lambda}_{j_i}| \leq \varepsilon$$

egyenlőtlenség.

Sajátértékek perturbációja

Egy explicit felső korlát a változásra:

$$\left| \lambda_i - \tilde{\lambda}_{j_i} \right| \leq n \left(\|A\|_2 + \|A + \Delta A\|_2 \right)^{1 - \frac{1}{n}} \|\Delta A\|_2^{\frac{1}{n}}$$

Abszolút norma.

A továbbiakban feltesszük, hogy tetszőleges D diagonális mátrixra:

$$\|D\| = \max_{1 \leq j \leq n} |d_{jj}|.$$

Sajátértékek perturbációja (Bauer-Fike tétel)

- Ha az $A \in R^{n \times n}$ mátrix diagonalizálható, vagyis $T^{-1}AT = D = \text{diag}(\lambda_1, \dots, \lambda_n) \in C^{n \times n}$ a $T \in C^{n \times n}$ reguláris mátrixszal, akkor tetszőleges $\Delta A \in R^{n \times n}$ perturbáció esetén az $A + \Delta A$ perturbált mátrix minden $\tilde{\lambda}_j$ sajátértékére igaz a

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \tilde{\lambda}_j| \leq \text{cond}(T) \|\Delta A\|.$$

egyenlőtlenség.

Sajátértékek perturbációja

- Ha az $A \in R^{n \times n}$ mátrix szimmetrikus, akkor tetszőleges $\Delta A \in R^{n \times n}$ perturbáció esetén az $A + \Delta A$ perturbált mátrix $\tilde{\lambda}_j$ sajátértékeire

$$\min_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i - \tilde{\lambda}_j| \leq \|\Delta A\|_2.$$

Szimmetrikus mátrixok sajátértékei mindig jól kondicionáltak.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy ha két mátrix sajátértékei megegyeznek és mindkét mátrix diagonalizálható, akkor hasonlóak.

Gyakorló feladatok

- Közelítse az alábbi mátrix sajátértékeit a QR-algoritmussal.

$$\begin{pmatrix} 0 & 3 & -5 \\ 4 & -2 & 2 \\ -4 & 3 & -1 \end{pmatrix}$$

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi $B(\varepsilon) \in R^{2 \times 2}$ és $\varepsilon = 0$ esetben adódó $B(0)$ mátrix sajátértékeit és sajátvektorait. Mit tapasztal?

$$B(\varepsilon) = \begin{pmatrix} 0 & \varepsilon \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

4. előadás

Általánosított inverz,
SVD-felbontás

A Moore-Penrose inverz

Mátrixok inverze

- Kvadratikus mátrix bal és jobb oldali inverze

$$AX = I \quad YA = I$$

- Mátrix inverze

$$(X = Y) \quad AA^{-1} = A^{-1}A = I$$

- Csak reguláris mátrixok invertálhatók.

Cél: Szinguláris mátrixokra, valamint nemcsak négyzetes mátrixokra is vezessünk be egy

általánosított inverz mátrix

fogalmat.

Rang-faktorizáció

Definíció. *Egy $m \times n$ -es mátrixot maximális rangúnak nevezünk, ha a rangja $\min(m, n)$.*

Ha a mátrix rangja m , akkor sor-regulárisnak, ha n , akkor oszlop-regulárisnak mondjuk.

Minden $A \neq 0$ mátrix előállítható két maximális rangú mátrix szorzataként $A = BC$, ahol B oszlop-reguláris, C sor-reguláris mátrix.

Példa

A rang-faktorizáció nem egyértelmű.

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix} = \\ = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{bmatrix}$$

Általánosított inverz

Definíció: Az $A \in R^{m \times n}$ mátrix $A^+ \in R^{n \times m}$ általánosított inverzét a következőképpen definiáljuk.

Ha $A \neq 0$ és $A=BC$ egy rang-faktorizáció, akkor

$$A^+ := C^+ B^+ = C^T (CC^T)^{-1} (B^T B)^{-1} B^T$$

Ha A zérómátrix, akkor inverze a transzponáltja.

Az általánosított inverzet szokás Moore-Penrose inverznek is nevezni. A teljes rangú felbontás itt eredetileg Egerváry Jenő (1891-1958) magyar matematikustól származik.

A fogalom bevezetésének motivációjáról

Alul- és túlhatározott lineáris egyenletrendszerek vizsgálata azt mutatta, hogy az alábbi speciális esetekben az általánosított inverzet célszerű így bevezetni:

Ha $\text{rang}(A) = n \leq m$, akkor

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$$

Ha $\text{rang}(A) = m \leq n$, akkor

$$A^+ = A^T (A A^T)^{-1}$$

Megjegyzés

Ha $\text{rang}(A) = m = n$, vagyis A reguláris,
akkor

$$A^+ = A^T (AA^T)^{-1} = A^T (A^T)^{-1} A^{-1} = A^{-1}$$

és hasonlóképpen

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T = A^{-1} (A^T)^{-1} A^T = A^{-1}.$$

A fogalom bevezetésének motivációjáról

$$A^+ := C^+ B^+ = C^T (C C^T)^{-1} (B^T B)^{-1} B^T$$

Oszlop-reguláris eset:

$$A^+ = (A^T A)^{-1} A^T$$

Sor-reguláris eset:

$$A^+ = A^T (A A^T)^{-1}$$

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 2 \end{pmatrix}$$

Az A mátrix **sor-reguláris**, rangja: 2.

$$A^+ = A^T (AA^T)^{-1}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{5} \\ 0 & \frac{2}{5} \end{pmatrix}$$

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Az A mátrix **szinguláris**, rangja: 1.

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} (1 \quad 1) = BC$$

$$A^+ = C^+ B^+ = C^T (CC^T)^{-1} (B^T B)^{-1} B^T$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \\ \frac{1}{4} & \frac{1}{4} \end{pmatrix}$$

Az általánosított inverz tulajdonságai

- AA^+ és A^+A mátrixok **szimmetrikusak**,
vagyis

$$(AA^+)^T = AA^+ \quad (A^+A)^T = A^+A$$

Valóban, hiszen

$$AA^+ = BCC^T(CC^T)^{-1}(B^TB)^{-1}B^T = B(B^TB)^{-1}B^T$$

$$A^+A = C^T(CC^T)^{-1}(B^TB)^{-1}B^TBC = C^T(CC^T)^{-1}C.$$

Az általánosított inverz tulajdonságai

- $AA^+A = A$
- $A^+AA^+ = A^+$

Valóban, hiszen

$$AA^+A = B(B^TB)^{-1}B^TBC = BC = A$$

$$\begin{aligned} A^+AA^+ &= C^T(CC^T)^{-1}CC^T(CC^T)^{-1}(B^TB)^{-1}B^T = \\ &= C^T(CC^T)^{-1}(B^TB)^{-1}B^T = A^+ \end{aligned}$$

Az általánosított inverz tulajdonságai

- Az AA^+ és A^+A mátrixok **idempotensek**, vagyis

$$(AA^+)^2 = AA^+ \qquad (A^+A)^2 = A^+A$$

Valóban, hiszen

$$(AA^+)^2 = (AA^+A)A^+ = AA^+$$

$$(A^+A)^2 = A^+(AA^+A) = A^+A$$

Az általánosított inverz tulajdonságai

- Vannak olyan $n \times n$ -es U és $m \times m$ -es V mátrixok, amelyekkel fennáll, hogy

$$A^+ = UA^T = A^T V$$

Valóban, hiszen

$$A^+ = A^+ (AA^+) = A^+ (AA^+)^T = A^+ (A^+)^T A^T = UA^T$$

$$A^+ = (A^+ A)A^+ = (A^+ A)^T A^+ = A^T (A^+)^T A^+ = A^T V$$

ahol

$$U = A^+ (A^+)^T \quad V = (A^+)^T A^+$$

Unicitás

Mivel a rang-faktorizáció nem egyértelmű, így nem nyilvánvaló, hogy a bevezetett általánosított inverz fogalom jól definiált-e.

Tétel. *Tetszőleges $A \neq 0$ mátrix esetén a korábbi tulajdonságoknak eleget tevő A^+ mátrix egyértelműen meghatározott.*

Bizonyítás

Tegyük fel, hogy A_1^+ és A_2^+ egyaránt eleget tesz az előbb felsorolt tulajdonságoknak, így

$$AA_1^+A = AA_2^+A = A$$

$$A_1^+ = U_1A^T = A^TV_1$$

$$A_2^+ = U_2A^T = A^TV_2.$$

A bizonyítás folytatása

Vezessük be a következő jelöléseket:

$$D := A_2^+ - A_1^+$$

$$U := U_2 - U_1$$

$$V := V_2 - V_1$$

Ekkor

$$ADA = O$$

$$D = UA^T = A^T V$$

A bizonyítás folytatása

Vegyük észre, hogy

$$D^T = (A^T V)^T = V^T A$$

$$(DA)^T (DA) = A^T D^T DA = A^T V^T (ADA) = 0$$

Mivel $X^T X = O$, ill. $XX^T = O$ maga után vonja, hogy $X = O$, így a fenti egyenlőségből adódóan

$$DA = O.$$

A bizonyítás vége

Mivel

$$D^T = (UA^T)^T = AU^T$$

$$DD^T = (DA)U^T = O$$

így

$$D = O$$

vagyis

$$A_2^+ = A_1^+.$$

Néhány további tulajdonság

- $(A^+)^+ = A$

Valóban, hiszen

$$A^+ (A^+)^+ A^+ = A^+$$

$$A^+ A A^+ = A^+.$$

Így

$$(A^+)^+ = A.$$

Néhány további tulajdonság

- $(A^T)^+ = (A^+)^T$

Ha $A = BC$ rang-faktorizáció, akkor $A^T = C^T B^T$ szintén az. Ezért

$$\begin{aligned}(A^T)^+ &= (B^T)^T (B^T (B^T)^T)^{-1} ((C^T)^T C^T)^{-1} (C^T)^T = \\ &= B(B^T B)^{-1} (CC^T)^{-1} C = (A^+)^T.\end{aligned}$$

Az utolsó egyenlőség azért igaz, mert $(B^T B)^{-1}$ és $(CC^T)^{-1}$ szimmetrikus mátrixok.

Lineáris egyenletrendszerek és az általánosított inverz

Definíció. Az $Ax=b$ lineáris egyenletrendszer pseudo megoldásának mondunk minden olyan x vektort, amelyre

$$\|Ax - b\|_2^2 = (Ax - b)^T (Ax - b)$$

minimális. Azt a pseudo megoldást, amelyre az

$$\|x\|_2^2 = x^T x$$

minimális, normál megoldásnak nevezzük.

Lineáris egyenletrendszerek és az általánosított inverz

- Tetszőleges lineáris egyenletrendszer esetén a normál megoldás mindig **létezik és egyértelmű**.
- Az $Ax=b$ lineáris egyenletrendszer egyetlen normál megoldása:

$$x = A^+ b.$$

Példa

$$2x_1 + x_2 + 2x_3 = 3$$

$$x_2 + x_3 = 4$$

$$A = \begin{pmatrix} 2 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \quad b = \begin{pmatrix} 3 \\ 4 \end{pmatrix}$$

$$A^+ = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{1}{2} \\ 0 & \frac{1}{5} \\ 0 & \frac{2}{5} \end{pmatrix}$$

Normál megoldás:

$$x = A^+ b = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ \frac{4}{5} \\ \frac{8}{5} \end{pmatrix}$$

SVD-felbontás

(Singular Value Decomposition)

SVD-felbontás

Singular Value Decomposition

Minden $A \in R^{m \times n}$ mátrix felírható

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

alakban, ahol

$U \in R^{m \times m}$ és $V \in R^{n \times n}$ ortogonális (komplex esetben unitér), $\Sigma \in R^{m \times n}$ téglalap alakú diagonális mátrix. Σ főátlójának elemei (σ_i) az A **szinguláris értékei**.

Példa

$$A = \begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

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

$$= \begin{pmatrix} 0.4338 & 0.8925 & -0.1226 \\ 0.1254 & -0.1946 & -0.9728 \\ -0.8922 & 0.4066 & -0.1964 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 3.1801 & 0 & 0 \\ 0 & 2.2558 & 0 \\ 0 & 0 & 1.6727 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -0.4641 & 0.5928 & -0.6581 \\ 0.8425 & 0.5247 & -0.1214 \\ 0.2733 & -0.6108 & -0.7430 \end{pmatrix}$$

Az A mátrix szinguláris értékei: 3.1801, 2.2258, 1.6727

SVD-felbontás

- A szinguláris felbontásban az U és V mátrixok rendre az AA^T és az $A^T A$ ortonormált sajátvektorait tartalmazza.
- Az A mátrix szinguláris értékei az $A^T A$ mátrix sajátértékeinek gyökei, speciálisan

$$\sigma_1 = \sqrt{\rho(A^T A)} = \|A\|_2.$$

Szinguláris értékek

- $\sigma_n \leq \frac{\|Ax\|_2}{\|x\|_2} \leq \sigma_1$

Valóban, hiszen

$$\begin{aligned}\sigma_n \|x\|_2 &= \sigma_n \|y\|_2 \leq \|Ax\|_2 = \|U\Sigma V^T x\|_2 = \\ &= \|\Sigma y\|_2 \leq \sigma_1 \|y\|_2 = \sigma_1 \|x\|_2\end{aligned}$$

ahol

$$y = V^T x.$$

Lineáris egyenletrendszerek és az SVD-felbontás

$$Ax = b \quad A = U\Sigma V^T$$

$$\begin{cases} \Sigma y = c \\ y = V^T x \\ c = U^T b \end{cases}$$

Lineáris egyenletrendszerek és az SVD-felbontás

$$x = V \Sigma^+ U^T b$$

ahol

$$\Sigma^+ = (\sigma_{ij}^+) \in R^{n \times m}$$

$$\sigma_{ij}^+ = \begin{cases} 1/\sigma_i, & \text{ha } i = j \text{ és } \sigma_i \neq 0 \\ 0, & \text{különben} \end{cases}$$

Kapcsolat az általánosított inverzzel

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

- A szinguláris felbontásban U és V elemei nem egyértelműen meghatározottak, de ennek ellenére A^+ csak egy van.

Megjegyzések a szinguláris felbontásról

- A szinguláris felbontás segítségével mondhatni mindent ismerhetünk egy mátrixról.
- Elsősorban elméleti eszköz.
- Különösen rosszul kondicionált feladatok megoldásában szokták használni, ha mással nem megy a megoldás.

SVD-felbontás meghatározása a Maple segítségével

- A Maple-rendszerben a szinguláris felbontást az Svd függvény segítségével kaphatjuk meg.
- Hívásakor az evalf függvénnnyel együtt alkalmazzuk.

`evalf(Svd(A))`

`evalf(Svd(A,U,V))`

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi mátrix általánosított inverzét.

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & -1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az alábbi mátrix SVD-felbontását a Maple segítségével.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 2 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy egy mátrix Frobenius normája kifejezhető a szinguláris értékeinek segítségével.

Irodalomjegyzék

- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Móricz Ferenc, *Numerikus módszerek az algebrában és az analízisben*, Polygon, Szeged, 1997.
- Stoyan Gisbert – Takó Galina, *Numerikus módszerek I.*, Typotex Kiadó, Budapest, 2002.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

5. előadás
Interpolációs
függvényközelítések

Általánosított interpoláció

Problémafelvetés

- A Lagrange-interpolációs formula:

$$P_n(x) = \sum_{i=1}^n f_i L_i(x)$$

ahol
$$L_i(x) = \frac{(x-x_1)\dots(x-x_{i-1})(x-x_{i+1})\dots(x-x_n)}{(x_i-x_1)\dots(x_i-x_{i-1})(x_i-x_{i+1})\dots(x_i-x_n)}.$$

- Hogyan írható fel a megoldás, ha a folytonos függvények $C[a,b]$ terének egy véges dimenziós $\langle g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x) \rangle$ alterében keresünk hasonló közelítő függvényt?

Általánosított interpolációs polinom meghatározása

Tekintsük az alábbi páronként különböző **interpolációs alappontokat**

$$x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$$

és $f_1, f_2, \dots, f_n$ függvényértékeket.

Határozzunk meg olyan

$$p(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i g_i(x)$$

általánosított interpolációs polinomot, amely eleget tesz a

$$p(x_i) = f_i \quad i = 1, 2, \dots, n$$

interpolációs feltételeknek.

Speciális eset

- Az előbbi problémafelvetésben a Lagrange-interpoláció annak a speciális esetnek felel meg, amikor a legfeljebb $n-1$ -ed fokú polinomok

$$\langle 1, x, \dots, x^{n-1} \rangle$$

alterében keressük a megoldást.

- Milyen tulajdonságok jellemzik az interpolációra alkalmas altereket?

Haar-altér

Definíció. A G n dimenziós alteret Haar-altérnek nevezzük, ha bármely $p(x) \in G$, nem azonosan 0 általánosított polinomnak legfeljebb $n-1$ zérushelye van $[a,b]$ -ben.

- Haar Alfréd (1885-1933) magyar matematikus, a szegedi matematikai iskola egyik megalapítója volt.

Csebisev-féle függvényrendszerek

Definíció. A Haar-altér bázisait Csebisev-féle függvényrendszereknek nevezzük.

Példa Csebisev-féle függvényrendszerekre:

- az $\{1, x, \dots, x^{n-1}\}$ hatványfüggvény-rendszer,
- az $\{1, e^x, \dots, e^{(n-1)x}\}$ exponenciális függvényrendszer,
- az $\{1, \sin x, \cos x, \dots, \sin(n-1)x, \cos(n-1)x\}$ trigonometrikus függvényrendszer a $[0, 2\pi)$ intervallumon.

Átfogalmazás

- A Haar-alteret úgy is definiálhattuk volna, hogy G *Haar-altér*, ha tetszőleges

$$\langle g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x) \rangle$$

bázisát véve az ezzel felírt tetszőleges nem azonosan 0

$$p(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i g_i(x)$$

alakú általánosított polinomnak legfeljebb $n-1$ zérushelye van $[a,b]$ -ben.

Haar-mátrix

Definíció. A G altér $\{q_1(x), q_2(x), \dots, q_n(x)\}$ függvényeihez és az $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$ pontokhoz tartozó Haar-mátrixon a

$$H = \begin{pmatrix} q_1(x_1) & q_2(x_1) & \dots & q_n(x_1) \\ q_1(x_2) & q_2(x_2) & \dots & q_n(x_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ q_1(x_n) & q_2(x_n) & \dots & q_n(x_n) \end{pmatrix}$$

mátrixot értjük.

Az általánosított interpolációs feladat megoldása és a Haar-altér

Tétel. *A $G \subseteq C[a,b]$ n dimenziós altérre a következő három állítás ekvivalens:*

- (i) G Haar-altér.*
- (ii) G bármely $\{g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)\}$ bázisához és tetszőleges $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a,b]$ alappontokhoz tartozó Haar-mátrix reguláris.*
- (iii) Az általánosított interpolációs feladat tetszőleges alappontok és tetszőleges függvényértékek esetén egyértelműen megoldható.*

Bizonyítás

Bizonyítás. $i) \Rightarrow ii)$

Legyen a $\{g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x)\}$ bázisban felírt

$$\bar{p}(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i g_i(x)$$

általánosított polinomnak n különböző zérushelye

$x_1, x_2, \dots, x_n$, ekkor

$$\bar{p}(x_j) = \sum_{i=1}^n \alpha_i g_i(x_j) = 0. \quad (1 \leq j \leq n)$$

A megfelelő Haar-mátrixot véve, így a $H\alpha = 0$ homogén lineáris egyenletrendszernek $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ megoldása. Ez azonban i) miatt csak a triviális megoldás lehet, így H valóban reguláris.

A bizonyítás második része

ii) $\Rightarrow$ iii) Adott alappontokhoz és függvényértékekhez tartozó általánosított interpolációs polinom meghatározása ekvivalens az alábbi lineáris egyenletrendszer megoldásával:

$$\begin{aligned}\alpha_1 g_1(x_1) + \alpha_2 g_2(x_1) + \dots + \alpha_n g_n(x_1) &= f_1 \\ \alpha_1 g_1(x_2) + \alpha_2 g_2(x_2) + \dots + \alpha_n g_n(x_2) &= f_2 \\ &\vdots \\ \alpha_1 g_1(x_n) + \alpha_2 g_2(x_n) + \dots + \alpha_n g_n(x_n) &= f_n\end{aligned}$$

Mivel az együtthatómátrix ii) alapján reguláris, így a megoldás egyértelműen létezik.

A bizonyítás vége

iii) $\Rightarrow$ i) Ha $p(x_i) = 0$ a páronként különböző $x_1, x_2, \dots, x_n$ helyeken, akkor $p(x)$ megoldása az ezen alappontokhoz és az $f_i = 0 \quad i = 1, 2, \dots, n$ értékekhez tartozó interpolációs feladatnak. Viszont $q(x) \equiv 0$ is megoldás. Így azonban, mivel iii) szerint a megoldás egyértelmű:

$$p(x) \equiv 0.$$

Általánosított interpolációs polinom

Haar-alterek esetében is felírható az általánosított interpolációs polinom a Lagrange-féle

bázisfüggvények segítségével: $p(x) = \sum_{i=1}^n f_i L_i(x)$

$$L_i(x) = \frac{1}{\det H} \det \begin{pmatrix} g_1(x_1) & g_2(x_1) & \cdots & g_n(x_1) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ g_1(x_{i-1}) & g_2(x_{i-1}) & \cdots & g_n(x_{i-1}) \\ g_1(x) & g_2(x) & \cdots & g_n(x) \\ g_1(x_{i+1}) & g_2(x_{i+1}) & \cdots & g_n(x_{i+1}) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ g_1(x_n) & g_2(x_n) & \cdots & g_n(x_n) \end{pmatrix}$$

Racionális interpoláció

Adottak az n, m természetes számok,
 $x_0, x_1, \dots, x_{n+m} \in [a, b]$ interpolációs alappontok és
 $f_0, f_1, \dots, f_{n+m}$ függvényértékek. Határozzunk meg
olyan

$$r_{n,m}(x) = \frac{p_n(x)}{q_m(x)} = \frac{\alpha_0 x^n + \alpha_1 x^{n-1} + \dots + \alpha_{n-1} x + \alpha_n}{\beta_0 x^m + \beta_1 x^{m-1} + \dots + \beta_{m-1} x + \beta_m}$$

racionális interpolációs polinomot, amely eleget
tesz az

$$r_{n,m}(x_i) = f_i \quad i = 0, 1, \dots, n+m$$

interpolációs feltételeknek.

Racionális interpoláció

- Az interpolációs feltételek teljesüléséhez szükséges, hogy

$$p_n(x_i) - f_i q_m(x_i) = 0 \quad i = 0, 1, \dots, n+m$$

legyen.

- Az α_i, β_j ismeretlenekre ez egy $n+m+1$ egyenletből álló $n+m+2$ ismeretlenes homogén lineáris egyenletrendszer határoz meg.

Trigonometrikus interpoláció

Adott az $n=2m+1$ természetes szám, a páronként különböző $x_0, x_1, \dots, x_{n-1} \in [0, 2\pi)$ interpolációs alappontok és az $f_0, f_1, \dots, f_{n-1}$ függvényértékek. Határozzunk meg olyan

$$s_n(x) = \frac{a_0}{2} + \sum_{l=1}^m (a_l \cos lx + b_l \sin lx)$$

trigonometrikus interpolációs polinomot, amely eleget tesz az

$$s_n(x_i) = f_i \quad i = 0, 1, \dots, n-1$$

interpolációs feltételeknek.

Trigonometrikus interpoláció

- Ekvidisztáns alappontokat véve

$$x_k = \frac{2\pi k}{n} \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

- Az $s_n(x)$ meghatározása visszavezethető olyan

$$p_n(x) = \beta_0 + \beta_1 e^{ix} + \beta_2 e^{2ix} + \dots + \beta_{n-1} e^{(n-1)ix}$$

ún. *fázispolinom* keresésére, amely teljesíti az alábbi feltételeket:

$$p_n(x_k) = f_k \quad k = 0, 1, 2, \dots, n-1$$

Hermite interpoláció

Hermite interpoláció

Adott az n pozitív egész szám, a páronként különböző $\{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ alappontok, az pozitív egész számok, az $m = \sum_{i=1}^n m_i$ konstans és az egyes alappontokhoz tartozó $\{f_i^0, f_i^1, \dots, f_i^{m_i-1}\}$ értékek.

Határozzunk meg olyan legfeljebb $m-1$ -ed fokú

$$H_m(x) = \alpha_0 x^{m-1} + \alpha_1 x^{m-2} + \dots + \alpha_{m-2} x + \alpha_{m-1}$$

Hermite-féle interpolációs polinomot, amely eleget tesz a

$$i = 1, 2, \dots, n, \quad j = 0, 1, \dots, m_i - 1$$

interpolációs feltételeknek.

Speciális esetek

- A Lagrange-interpoláció

$$m_1 = m_2 = \dots = m_n = 1 \quad (m = n)$$

- Taylor-polinom (x_1 körüli)

$$n = 1$$

- Hermite-Fejér interpoláció

$$m = 2n$$

$$m_i = 2$$



Egy lineáris egyenletrendszer

$$H_m(x) = \alpha_0 x^{m-1} + \alpha_1 x^{m-2} + \dots + \alpha_{m-2} x + \alpha_{m-1}$$

$$\alpha_0 x_1^{m-1} + \alpha_1 x_1^{m-2} + \dots + \alpha_{m-1} = f_1^0$$

$$\vdots$$

$$\alpha_0 x_n^{m-1} + \alpha_1 x_n^{m-2} + \dots + \alpha_{m-1} = f_n^0$$

$$(m-1)\alpha_0 x_1^{m-2} + (m-2)\alpha_1 x_1^{m-3} + \dots + \alpha_{m-2} = f_1^1$$

$$\vdots$$

$$(m_n-1)!\alpha_0 x_1^{m-1-(m_n-1)} + \dots = f_n^{m_n-1}$$

- Az interpolációs probléma megoldása ekvivalens egy $m \times m$ -es együtthatómátrixú lineáris egyenletrendszer megoldásával.

Unicitás és egzisztencia

Unicitás

Tétel. *Tetszőlegesen megadott feltételrendszerhez legfeljebb egy azt kielégítő Hermite-féle interpolációs polinom létezik.*

Bizonyítás.

Tegyük fel, hogy van olyan feltételrendszer, amelyhez két különböző $H_m(x)$ és $\bar{H}_m(x)$ polinom létezik. Tekintsük az alábbi különbségpolinomot:

$$S(x) = H_m(x) - \bar{H}_m(x)$$

A bizonyítás vége

Az $S(x)$ különbségpolinomnak minden alappont zérushelye, sőt minden zérushely multiplicitása legalább m_i .

$$S^{(j)}(x_i) = H_m^{(j)}(x_i) - \overline{H}_m^{(j)}(x_i) = f_i^j - f_i^j = 0$$
$$0 \leq j \leq m_i - 1$$

$S(x)$ -nek tehát multiplicitással számolva legalább m zérushelye van. Másrészt azonban $S(x)$ fokszáma legfeljebb $m-1$, így nem létezhet két különböző Hermite-féle interpolációs polinom.

Egzisztencia

Tétel. *Tetszőlegesen megadott feltételrendszerhez létezik azt kielégítő Hermite-féle interpolációs polinom.*

Bizonyítás.

Az unicitástétel alapján a megoldás akkor is egyértelmű, ha olyan feltételrendszert veszünk, amelyhez a $H\alpha = 0$ homogén lineáris egyenletrendszer tartozik.

A bizonyítás

Az egyértelműség miatt az egyenletrendszer egyetlen megoldása a triviális megoldás:

$$\alpha = 0.$$

Ez viszont azt jelenti, hogy az egyenletrendszer együtthatómátrixa reguláris, vagyis

$$\det H \neq 0.$$

Ekkor azonban az egyenletrendszer tetszőleges jobboldali értékekkel is megoldható.

Hermite-Fejér interpoláció

- Speciális eset: $m = 2n$, $m_i = 2$, vagyis minden pontban a függvényérték és az első derivált értéke van megadva.

Fejér Lipót (1880-1959) magyar matematikus, az első magyar matematikai iskola megalapítója volt a budapesti tudományegyetemen.

Hermite-Fejér interpoláció

- **Állítás.** *A Hermite-polinom a Lagrange-féle bázispolinomok segítségével a következő alakban írható fel:*

$$H_{2n}(x) =$$

$$\sum_{i=1}^n f_i^0 (1 - 2(x - x_i)L_i'(x_i))L_i^2(x) + \sum_{i=1}^n f_i^1 (x - x_i)L_i^2(x)$$

A bizonyítás behelyettesítéssel elvégezhető.

Példa az Hermite-Fejér interpolációra

Példa

Tekintsük az alábbi Hermite-Fejér interpolációs feladatot és határozzuk meg a hozzá tartozó interpolációs polinomot.

x_i	-1	1	2
y_i	1	-1	-29
y'_i	5	-7	-43

Megoldás

$$m = 6$$

$$\alpha_0(-1)^5 + \alpha_1(-1)^4 + \alpha_2(-1)^3 + \alpha_3(-1)^2 + \alpha_4(-1) + \alpha_5 = 1$$

$$\alpha_0 1^5 + \alpha_1 1^4 + \alpha_2 1^3 + \alpha_3 1^2 + \alpha_4 1 + \alpha_5 = -1$$

$$\alpha_0 2^5 + \alpha_1 2^4 + \alpha_2 2^3 + \alpha_3 2^2 + \alpha_4 2 + \alpha_5 = -29$$

$$5\alpha_0(-1)^4 + 4\alpha_1(-1)^3 + 3\alpha_2(-1)^2 + 2\alpha_3(-1) + \alpha_4 = 5$$

$$5\alpha_0 1^4 + 4\alpha_1 1^3 + 3\alpha_2 1^2 + 2\alpha_3 1 + \alpha_4 = -7$$

$$5\alpha_0 2^4 + 4\alpha_1 2^3 + 3\alpha_2 2^2 + 2\alpha_3 2 + \alpha_4 = -43$$

Megoldás

$$-\alpha_0 + \alpha_1 - \alpha_2 + \alpha_3 - \alpha_4 + \alpha_5 = 1$$

$$\alpha_0 + \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3 + \alpha_4 + \alpha_5 = -1$$

$$32\alpha_0 + 16\alpha_1 + 8\alpha_2 + 4\alpha_3 + 2\alpha_4 + \alpha_5 = -29$$

$$5\alpha_0 - 4\alpha_1 + 3\alpha_2 - 2\alpha_3 + \alpha_4 = 5$$

$$5\alpha_0 + 4\alpha_1 + 3\alpha_2 + 2\alpha_3 + \alpha_4 = -7$$

$$80\alpha_0 + 32\alpha_1 + 12\alpha_2 + 4\alpha_3 + \alpha_4 = -43$$

Megoldásvektor: $\alpha = (2, -6, -4, 9, 1, -3)$.

Megoldás

A keresett Hermite-Fejér interpolációs polinom:

$$H_6(x) = 2x^5 - 6x^4 - 4x^3 + 9x^2 + x - 3$$

x_i	-1	1	2
y_i	1	-1	-29
y'_i	5	-7	-43

A megoldás előállítás Lagrange-féle bázispolinomokkal

$$H_{2n}(x) = \sum_{i=1}^n f_i^0 (1 - 2(x - x_i)L_i'(x_i))L_i^2(x) + \sum_{i=1}^n f_i^1 (x - x_i)L_i^2(x)$$

$$L_1(x) = \frac{(x-1)(x-2)}{6}$$

$$L_1'(x) = \frac{1}{6}(2x-3)$$

$$L_1^2(x) = \frac{(x-1)^2(x-2)^2}{36}$$

$$L_2(x) = \frac{(x+1)(x-2)}{-2}$$

$$L_2'(x) = \frac{-1}{2}(2x-1)$$

$$L_2^2(x) = \frac{(x+1)^2(x-2)^2}{4}$$

$$L_3(x) = \frac{(x+1)(x-1)}{3}$$

$$L_3'(x) = \frac{1}{3}2x$$

$$L_3^2(x) = \frac{(x+1)^2(x-1)^2}{9}$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

Mutassa meg, hogy ha a $g(x)$ függvény szigorúan monoton $[a,b]$ -n, akkor a

$$\langle 1, g(x), g(x)^2, \dots, g(x)^{n-1} \rangle$$

Haar-altér az $[a,b]$ -n.

Gyakorló feladatok

Adjuk meg az alábbi pontokhoz tartozó Hermite interpolációs polinomot

$$\begin{array}{c|ccc} x_i & -1 & 1 & 2 \\ y_i & 1 & -1 & -29 \\ y'_i & 5 & -7 & -61 \end{array}$$

Gyakorló feladatok

Készítsen olyan eljárást, amely Hermite polinom előállítását valósítja meg! Az eljárás paraméterezése **Hermint(x,y,yd)** alakú legyen, ahol az **x** és **y** vektor az adott pontok **x** és **y** koordinátaiból áll, és **xd** az **y** derivált koordinátáit tartalmazza.

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

6. előadás

Közelítések normált lineáris
terekben

Alapfeladat

Tekintsük a V normált lineáris térnek egy n dimenziós G alterét és rögzítsük G -nek egy $\{g_1, g_2, \dots, g_n\}$ bázisát. Tegyük fel, hogy $f \in V$.

Feladatunk f -nek a **legjobb** $p = \sum_{i=1}^n \alpha_i g_i$ alakú p^* közelítését meghatározni, amelyre a **közelítés hibája minimális**, vagyis

$$\|f - p^*\| \leq \|f - p\|$$

bármely $p \in G$ -re.

Alapkérdések

Vezessük be a következő jelölést: $E_G(f) = \inf \{ \|f - p\| \mid p \in G \}$.
Tehát p^* pontosan akkor lesz a legjobb közelítés, ha

$$E_G(f) = \|f - p^*\|.$$

A kitűzött feladattal kapcsolatos alapvető kérdések:

- Van-e olyan $p^* \in G$, amelyre $E_G(f) = \|f - p^*\|$?
- Egyértelmű-e p^* ?
- Milyen tulajdonságok jellemzik p^* -ot?
- Hogyan becsülhető $E_G(f)$?
- Praktikusan, milyen módon határozható meg p^* ?

Egzisztencia és unicitás

A legjobban közelítő elem egzisztenciája

Tétel. *A V normált lineáris tér tetszőleges f eleméhez létezik V -nek az n dimenziós G alterében f -et legjobban közelítő p^* elem.*

Bizonyítás.

$E_G(f)$ definíciójából következik, hogy megadható olyan G -beli elemekből álló $\{p_k\}$ sorozat, amelyre

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \|f - p_k\| = E_G(f) .$$

A bizonyítás folytatása

A háromszög-egyenlőtlenséget felhasználva

$$\|p_k\| \leq \|f\| + \|f - p_k\|,$$

amiből következőleg a $\{p_k\}$ sorozat korlátos.

Vegyünk a $p_k = \sum_{i=1}^n \beta_i^{(k)} g_i$ előállítást, és így a $\{\beta_k\} = (\beta_1^{(k)}, \beta_2^{(k)}, \dots, \beta_n^{(k)})$ korlátos vektorsorozatot, (a sorozat korlátos, mert $\left(\sum_{i=1}^n \beta_i^{(k)2}\right)^{1/2}$ vektornormát határozza meg, így a vektornormák ekvivalenciája miatt van olyan γ konstans, hogy $\left(\sum_{i=1}^n \beta_i^{(k)2}\right)^{1/2} \leq \gamma \|p_k\|$ és a $\{p_k\}$ sorozat korlátos).

A bizonyítás vége

A $\{\beta_k\}$ sorozat korlátossága miatt kiválasztható belőle egy konvergens részsorozat:

$$\beta_{k_l} \rightarrow \beta^*$$

Tekintsük a $p^* = \sum_{i=1}^n \beta_i^* g_i \in G$ elemet! Mivel a $\{p_{k_l}\}$ részsorozatra

$$\|p_{k_l} - p^*\| \rightarrow 0, \text{ így}$$

$$\|f - p^*\| \leq \|f - p_{k_l}\| + \|p_{k_l} - p^*\| \rightarrow E_G(f)$$

ahonnan adódik, hogy p^* az f -et legjobban közelítő elem.

Unicitás

Az általános esetben az unicitás nem garantált, így előfordulhat, hogy egy elemnek végtelen sok legjobb közelítése van.

Példa. Legyen $V = R^2$, $G = R^1 = \langle e_1 \rangle$ és $f = e_2$. Ha a $\|\cdot\|_\infty$ vektornormát használjuk, akkor f -nek végtelen sok legjobb közelítése van, hiszen tetszőleges $|\alpha| \leq 1$ mellett igaz, hogy

$$\|f - \alpha e_1\|_\infty = 1 = E_G(f).$$

Szigorúan normált lineáris tér

Definíció. *A V normált lineáris tér szigorúan normált, ha tetszőleges a zéró elemtől különböző f és h elemére az*

$$\|f + h\| = \|f\| + \|h\|$$

egyenlőségből következik, hogy a két elem lineárisan függő.

A legjobban közelítő elem unicitása

Tétel. *Ha a V lineáris tér szigorúan normált, akkor tetszőleges f -hez legfeljebb egy G -beli legjobban közelítő p^* létezik.*

Bizonyítás.

Tegyük fel, hogy f -hez két különböző legjobban közelítő elem létezik p^* és p^{**} . Ekkor a

$$q^* = 1/2(p^* + p^{**})$$

is legjobban közelítő elem lenne.

A bizonyítás folytatása

Valóban, ugyanis az f elemet legjobban közelítő elemek a G altér konvex részhalmazát alkotják. Ez könnyen látható, mivel, ha $\lambda \in [0,1]$, akkor

$$\begin{aligned} \| f - (\lambda p^* + (1-\lambda)p^{**}) \| &= \| \lambda(f - p^*) + (1-\lambda)(f - p^{**}) \| \leq \\ &\leq \lambda \| f - p^* \| + (1-\lambda) \| f - p^{**} \| = \\ &= \lambda E_G(f) + (1-\lambda)E_G(f) = E_G(f). \end{aligned}$$

A bizonyítás folytatása

Ekkor

$$\begin{aligned} E_G(f) &\leq \|f - q^*\| = \left\| f - \frac{1}{2}(p^* + p^{**}) \right\| \leq \\ &\leq \frac{1}{2} \|f - p^*\| + \frac{1}{2} \|f - p^{**}\| = E_G(f) \end{aligned}$$

ami azt jelenti, hogy teljesül az

$$\left\| \frac{1}{2}(f - p^*) + \frac{1}{2}(f - p^{**}) \right\| = \left\| \frac{1}{2}(f - p^*) \right\| + \left\| \frac{1}{2}(f - p^{**}) \right\|$$

egyenlőség. A tér szigorú normáltsága miatt

$$\frac{1}{2}(f - p^*) = \alpha \frac{1}{2}(f - p^{**})$$

A bizonyítás vége

$$\frac{1}{2}(f - p^*) = \alpha \frac{1}{2}(f - p^{**})$$

$$(1 - \alpha)f = p^* - \alpha p^{**}$$

A fenti egyenlőségből következőleg

$$\alpha = 1,$$

vagyis
$$p^* = p^{**},$$

ami ellenkezik kiindulásunkkal.

Négyzetes közelítések

Euklideszi tér

Definíció. A V lineáris teret euklideszi térnek (vagy lineáris belsőszorzat-térnek) nevezzük, ha értelmezve van a tér tetszőleges f, h elemeinek $[f, h]$ belső szorzata, azaz van olyan $[.,.]: V \times V \rightarrow R$ leképezés, hogy

- (i) $[f, f] \geq 0$ és ha $[f, f] = 0$, akkor $f = 0$,
- (ii) $[f, h] = [h, f]$,
- (iii) $[f+g, h] = [f, h] + [g, h]$,
- (iv) $[\alpha f, h] = \alpha [f, h]$, tetszőleges α skalárra.

Cauchy-Schwarz-Bunyakovszkij egyenlőtlenség

Tétel. *Euklideszi térben tetszőleges f és h elemekre*

$$|[f, h]| \leq \sqrt{[f, f]} \sqrt{[h, h]}$$

Bizonyítás.

$$0 \leq [f - th, f - th] = [h, h]t^2 - 2t[f, h] + [f, f]$$

Az előbbi egyenlőtlenség minden t -re teljesül, ami csak úgy lehetséges, ha a t -re másodfokú függvény diszkriminánsa nem pozitív.

A bizonyítás vége

$$4([f, h])^2 - 4[f, f][h, h] \leq 0$$

$$[f, h]^2 \leq [f, f][h, h]$$

$$|[f, h]| \leq \sqrt{[f, f]}\sqrt{[h, h]}$$

Norma származtatása belső szorzatból

Tétel. Az $\|f\| = \sqrt{[f, f]}$ definícióval adott $\|\cdot\|: V \rightarrow \mathbb{R}^+$ leképezéssel V normált vektortér.

Bizonyítás.

- a) $\|f\| \geq 0$, és ha $\|f\| = 0$, akkor $f=0$ a belső szorzat
(i) tulajdonsága miatt,
- b) $\|\alpha f\| = |\alpha| \|f\|$ a (iv) tulajdonság miatt,

A bizonyítás vége

c) a háromszög-egyenlőtlenség a Cauchy-Schwarz-Bunyakovszkij egyenlőtlenség segítségével bizonyítható.

$$\|f + h\|^2 = [f + h, f + h] = [f, f] + 2[f, h] + [h, h] \leq$$

$$\leq [f, f] + 2\|f\|\|h\| + [h, h] = (\|f\| + \|h\|)^2$$

$$\|f + h\| \leq \|f\| + \|h\|$$

Euklideszi tér

Tétel. *Minden euklideszi tér szigorúan normált.*

Bizonyítás. Ha f és g a tér két tetszőleges 0 -tól különböző eleme, akkor az alábbi egyenlőségek és egyenlőtlenségek teljesülnek:

$$\begin{aligned}\|f + g\|^2 &= [f + g][f + g] = [f, f] + 2[f, g] + [g, g] \leq \\ &\leq \|f\|^2 + 2|[f, g]| + \|g\|^2 \leq (\|f\| + \|g\|)^2\end{aligned}$$

Itt végig egyenlőségek viszont csak úgy állhatnak, ha f és g lineárisan függők.

„Geometriai” jellemzés a legjobban közelítő elemre

- Euklideszi terekben a p^* legjobban közelítő elemre „geometriai” jellemzés adható. Az euklideszi vektornormával ellátott vektortér esetében ez annak a szemléletes ténynek felel meg, hogy f -et legjobban éppen a G altérre való merőleges vetülete közelíti.

Tétel. *Legyen V tetszőleges euklideszi tér, G a V altere és f V -beli. A G -beli p^* akkor és csak akkor lesz f legjobb közelítése, ha*

$$[f-p^*, g]=0 \quad \text{bármely } G\text{-beli } g\text{-re.}$$

Bizonyítás/Szükségesség

Indirekt úton bizonyítunk. Legyen p^* legjobban közelítő elem. Tegyük fel, hogy van olyan $g \in G$, amelyre $[f - p^*, g] = \beta \neq 0$. Tegyük fel, hogy $\|g\| = 1$. Legyen $p^{**} = p^* + \beta \cdot g$. Ekkor

$$\begin{aligned}\|f - p^{**}\|^2 &= \|f - p^* - \beta g\|^2 = \\ &= [(f - p^*) - \beta g, (f - p^*) - \beta g] = \\ &= \|f - p^*\|^2 - 2\beta[f - p^*, g] + \beta^2 \|g\|^2 = \|f - p^*\|^2 - \beta^2\end{aligned}$$

Ami ellentmondás, hiszen akkor p^{**} még jobb közelítés lenne.

Bizonyítás/Elégségeesség

Tegyük fel, hogy $[f-p^*,g]=0$, bármely $g \in G$. Legyen $g=p^*+h$, valamilyen alkalmas G -beli h elemmel.

Ekkor

$$\begin{aligned}\|f - g\|^2 &= \|f - p^* - h\|^2 = \\ &= [(f - p^*) - h, (f - p^*) - h] = \\ &= [f - p^*, f - p^*] + [h, h] = \|f - p^*\|^2 + \|h\|^2\end{aligned}$$

Tehát valóban p^* adja a legjobb közelítést.

Két következmény

Következmény. *Egy euklideszi tér (lineáris belsőszorzat-tér) tetszőleges elemének pontosan egy legjobb közelítése létezik.*

Következmény. *A p^* elem pontosan akkor lesz f legjobb közelítése, ha*

$$[f - p^*, g_i] = 0 \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

Gram-mátrix

Ha $p^* = \sum_{k=1}^n \alpha_k g_k$, akkor az előbbi feltétel ekvivalens azzal, hogy az $(\alpha_1, \alpha_2, \dots, \alpha_n)$ vektor az alábbi **normálegyenletek** megoldása:

$$\sum_{k=1}^n \alpha_k [g_k, g_i] = [f, g_i] \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

A rendszer alábbi mátrixát a $(g_1, g_2, \dots, g_n)$ bázishoz tartozó **Gram-mátrix**nak nevezzük.

$$G = \begin{pmatrix} [g_1, g_1] & [g_2, g_1] & \cdots & [g_n, g_1] \\ [g_1, g_2] & [g_2, g_2] & \cdots & [g_n, g_2] \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [g_1, g_n] & [g_2, g_n] & \cdots & [g_n, g_n] \end{pmatrix}$$

Észrevételek

- **Valós** V tér esetén a belső szorzat szimmetriájából következik, hogy G szimmetrikus, sőt az is bizonyítható, hogy pozitív definit mátrix. A közelítés hibájára ekkor az alábbi adódik: $(E_G(f))^2 = [f - p^*][f - p^*] =$

$$= [f, f] - [f, \sum_{k=1}^n \alpha_k g_k] = \|f\|^2 - \sum_{k=1}^n \alpha_k [f, g_k]$$

- Ha G valamely **ortonormált bázisára** írjuk fel a normálegyenleteket, akkor az együtthatómátrix az egységmátrix lesz. Ekkor $\alpha_i = [f, g_i]$. ($i = 1, 2, \dots, n$)
- Ha G egy **ortogonális bázisára** írjuk fel a normálegyenleteket, akkor

$$\alpha_i = \frac{[f, g_i]}{[g_i, g_i]}. \quad (i = 1, 2, \dots, n)$$

Észrevételek

- Véges n dimenziós euklideszi terekre a legismertebb példákat az R^n terek adják, sőt bármely n dimenziós euklideszi tér izomorf R^n -nel.
- Az alkalmazások szempontjából legfontosabbak azok a **függvényterek**, ahol a tartóhalmaz elemei adott tulajdonságú függvények. Itt a belső szorzat fogalmát legtöbbször valamilyen integrálfogalomból vezetik le.

Példa. Vegyük az $[a,b]$ intervallumon Lebesgue szerint négyzetesen integrálható függvények $L_2[a,b]$ terét. Két elem belső szorzatát az alábbi integrál adja:

$$[f(x), g(x)] = \int_a^b f(x)g(x)dx$$

Egyenletes konvergencia

Tétel. *Ha folytonos függvényekből álló $f_n(x)$ függvény sorozat egyenletesen tart $f(x)$ -hez $[a,b]$ -n, akkor teljesül az euklideszi térbeli konvergencia is:*

$$\|f - f_n\|_2^2 = \int_a^b (f(x) - f_n(x))^2 dx \rightarrow 0$$

- (Emlékeztető: (f_n) sorozatra azt mondjuk *egyenletesen konvergál* f -hez, ha minden pozitív ε -hoz létezik egy $n_0 \in \mathbb{N}$ úgy, hogy minden $x \in D_f$ és minden $n \geq n_0$ -ra $|f_n(x) - f(x)| < \varepsilon$.)

Egyenletes közelítések

Csebisev-approximáció

- Az $f \in C[a,b]$ folytonos függvényt közelítjük egy rögzített $G = \langle g_1(x), g_2(x), \dots, g_n(x) \rangle$ altérben felírható $p(x) = \sum_{i=1}^n \alpha_i g_i(x)$ alakú általánosított polinomokkal.
- A $C[a,b]$ -t azonban mint normált lineáris teret tekintjük a

$$\|g(x)\|_{\infty} = \max_{x \in [a,b]} |g(x)|$$

maximum- vagy más néven Csebisev-normával. Ezt a közelítést egyenletes vagy **Csebisev-approximáció**nak nevezik.

Unicitás

Példa. Az $f(x) \equiv 1$ és $g(x) = x$ függvények a $C[-1,1]$ tér elemei. Könnyű látni, hogy

$$2 = \|f(x) + g(x)\|_{\infty} = \|f(x)\|_{\infty} + \|g(x)\|_{\infty} = 1 + 1$$

viszont az f és g mégsem lineárisan függők, hiszen nem teljesül az $f(x) = \alpha g(x)$, vagyis a tér nem szigorúan normált.

Az unicitás pontosan a Haar-alterek esetében teljesül.

Alternáló sorozat

Definíció. Az $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} \leq b$ értékek az $f(x)$ függvény $p(x) \in G$ közelítésének $(n+1)$ tagú alternáló sorozatát alkotják, ha

$$\operatorname{sgn} e(x_{i+1}) = -\operatorname{sgn} e(x_i)$$

bármely $1 \leq i \leq n$, vagyis az $e(x) = f(x) - p(x)$ hibafüggvény a szomszédos helyeken mindig ellentétes előjelű. Az x_i -k optimális alternáló sorozatot határoznak meg, ha még

$$|e(x_i)| = \|e(x)\|_\infty$$

is igaz minden $1 \leq i \leq n+1$ -re.

Korlát a legjobb közelítés hibájára

Tétel (de la Vallée-Poussin). *Legyen a $p(x)$ közelítés egy tetszőleges alternáló sorozata*

Ekkor
$$a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} \leq b.$$

$$\min_{1 \leq i \leq n+1} |e(x_i)| \leq E_G(f) \leq \|e(x)\|_{\infty}$$

- Itt különösen az alsó korlát igen hasznos, mivel a segítségével meg tudjuk ítélni, hogy mennyire jó az adott közelítő függvény. A felső korlát következik $E_G(f)$ definíciójából.

Csebisev tétele

Tétel. *A $p^*(x) \in G$ függvény pontosan akkor közelíti egyenletesen legjobban $f(x)$ -et, ha megadható hozzá olyan $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n < x_{n+1} \leq b$. alternáló sorozat, hogy $|e(x_i)| = \|e(x)\|_\infty$ minden $1 \leq i \leq n+1$ -re és*

$$\operatorname{sgn} e(x_{i+1}) = -\operatorname{sgn} e(x_i) \quad 1 \leq i \leq n$$

Példa

Példa. Mi lesz az $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényt az $[a,b]$ intervallumon egyenletesen legjobban közelítő konstans függvény?

Megoldás.

Csebisev tétele szerint az

$$\frac{1}{2} \left(\min_{x \in [a,b]} f(x) + \max_{x \in [a,b]} f(x) \right)$$

konstans függvény, ugyanis ennek van két optimális alternáló pontja: a és b .

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Igazoljuk, hogy egy normált lineáris tér akkor és csak akkor euklideszi tér, ha bármely f és h elemére teljesül a

$$\| f + h \|^2 + \| f - h \|^2 = 2(\| f \|^2 + \| h \|^2)$$

egyenlőség.

Gyakorló feladatok

- Igazoljuk, hogy az

$$\| \underline{x} \|_p = \sqrt[p]{\sum_{j=1}^n |x_j|^p} \quad p > 1$$

normával ellátott R^n lineáris tér akkor és csak akkor lineáris belsőszorzat-tér, ha

$$p = 2.$$

Gyakorló feladatok

- Határozzuk meg az $f(x)=\ln(x+1)$ valós függvényt a $[-0.5,0.5]$ intervallumon egyenletesen legjobban közelítő elsőfokú polinomot.

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

7. előadás

Lineáris egyenletrendszerek
megoldása iterációval,
relaxációs módszerek

Mátrixok reguláris szétvágásai

Definíció. Az A mátrix egy reguláris szétvágásán,
 A -nak egy

$$A=R-S$$

alakban való felbontását értjük, ahol R reguláris mátrix.

A továbbiakban feltesszük, hogy A erősen reguláris mátrix, vagyis olyan reguláris mátrix, amelynek a főátlójában nincs 0.

Ekvivalens átalakítás

Alapötlet: A kiindulási

$$Ax=a$$

lineáris egyenletrendszer ekvivalens módon hozzuk

$$x=Bx+b$$

alakra. Ebből a célból tekintsük a kiinduló egyenletrendszer A együtthatómátrixának egy R - S alakú reguláris szétvágását.

Ekvivalens átalakítás

$$Ax = a$$

$$(A = R - S)$$

$$(R - S)x = a$$

$$Rx = Sx + a$$

$$x = R^{-1}Sx + R^{-1}a$$

Ekvivalens átalakítás

$$x = R^{-1}Sx + R^{-1}a \qquad B = R^{-1}S$$

$$x = Bx + b \qquad b = R^{-1}a$$

R és S meghatározását az $A=D-L-U$ alakú előállításban szereplő D diagonális, L alsó trianguláris és U felső trianguláris mátrixok segítségével határozzuk meg.

$$A=D-L-U$$

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$D = \begin{pmatrix} a_{11} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & a_{22} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

$$L = \begin{pmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ -a_{21} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -a_{n1} & -a_{n2} & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

$$U = \begin{pmatrix} 0 & -a_{12} & \dots & -a_{1n} \\ 0 & 0 & \dots & -a_{2n} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

Jacobi-iteráció

Tekintsük az

$$R=D, S=L+U$$

reguláris szétvágást. Ekkor

$$B_J = D^{-1}(L + U)$$

$$b_J = D^{-1}a$$

Iterációs formula:

$$x_n = D^{-1}(L + U)x_{n-1} + D^{-1}a$$

Gauss-Seidel-iteráció

Tekintsük az

$$R=D-L, \quad S=U$$

reguláris szétvágást. Ekkor

$$B_S = (D - L)^{-1}U$$

$$b_S = (D - L)^{-1}a$$

Iterációs formula:

$$x_n = (D - L)^{-1}Ux_{n-1} + (D - L)^{-1}a$$

Gyakorlati számítások

Jacobi-iteráció:

$$x_i^{k+1} = -\frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^k + \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^k - a_i \right)$$

Gauss-Seidel-iteráció:

$$x_i^{k+1} = -\frac{1}{a_{ii}} \left(\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{k+1} + \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^k - a_i \right)$$

Relaxációs módszerek

Relaxációs paraméter

$$A=D-L-U$$

$$A = \frac{1}{\omega} D - \left(L + U + \left(\frac{1}{\omega} - 1 \right) D \right)$$

$\omega > 0$ valós paraméter, az ún. relaxációs paraméter

Jacobi-féle relaxációs módszer

- A Jacobi-iteráció kiterjesztése.

Tekintsük az

$$R = \frac{1}{\omega} D$$

$$S = L + U + \left(\frac{1}{\omega} - 1 \right) D$$

reguláris szétvágást.

Jacobi-féle relaxációs módszer

$$B_{J(\omega)} = \omega D^{-1} \left(L + U + \left(\frac{1}{\omega} - 1 \right) D \right)$$

$$b_{J(\omega)} = \omega D^{-1} a$$

Iterációs formula:

$$x_n = B_{J(\omega)} x_{n-1} + b_{J(\omega)}$$

Szukcesszív túlrelaxációs módszer

- A Gauss-Seidel-iteráció kiterjesztése.

Tekintsük az

$$R = \frac{1}{\omega} D - L$$

$$S = U + \left(\frac{1}{\omega} - 1 \right) D$$

reguláris szétvágást.

Szukcesszív túlrelaxációs módszer

$$B_{S(\omega)} = (D - \omega L)^{-1} (\omega U + (1 - \omega)D)$$

$$b_{S(\omega)} = \omega (D - L\omega)^{-1} a$$

Iterációs formula:

$$x_n = B_{S(\omega)} x_{n-1} + b_{S(\omega)}$$

Elnevezések

- Jacobi-iteráció: **J-módszer**
- Gauss-Seidel-iteráció: **S-módszer**
- Jacobi-féle relaxációs módszer: **JOR-módszer**
- Szukcesszív túlrelaxációs módszer: **SOR-módszer**

Konvergencia-kritériumok

Konvergenca-kritérium

Erősen reguláris együtthatómátrixú $Ax=a$ lineáris egyenletrendszerre a JOR- vagy SOR-módszer akkor és csak akkor konvergens, ha $\rho(B) < 1$. (B az iterációs formulában szereplő mátrix.)

A spektrálsugárra vonatkozó feltétel azzal is helyettesíthető, hogy van olyan mátrixnorma, amelyben a B mátrix értéke 1-nél kisebb.

Relatív konvergencia-kritérium

Tétel. *Legyen*

$$Ax=a$$

egy erősen reguláris együtthatómátrixú lineáris egyenletrendszer. Ha a J-módszer konvergens, akkor tetszőleges

$$0 < \omega < 1$$

relaxációs paraméterre a JOR-módszer is konvergens lesz.

Bizonyítás

Azt fogjuk megmutatni, hogy

$$\rho(B_{J(\omega)}) < 1.$$

Nem nehéz belátni, hogy

$$B_{J(\omega)} = \omega B_J + (1 - \omega)I.$$

Ha B_J sajátértékei $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$, akkor viszont

$B_{J(\omega)}$ μ_i ($1 \leq i \leq n$) sajátértékei felírhatók

$$\mu_i = \omega \lambda_i + 1 - \omega$$

alakban.

A bizonyítás vége

Így azonban

$$\begin{aligned} |\mu_i| &= |\omega \lambda_i + 1 - \omega| \leq |\omega \lambda_i| + |1 - \omega| \\ &= \omega |\lambda_i| + 1 - \omega < \omega \cdot 1 + 1 - \omega = 1 \end{aligned}$$

vagyis $B_{J(\omega)}$ spektrálsugara 1-nél kisebb,
így a JOR-módszer is konvergens.

A relaxációs paraméter

Tétel. Minden $\omega > 0$ relaxációs paraméter esetén

$$|1 - \omega| \leq \rho(B_{J(\omega)})$$

Bizonyítás. Vegyük észre, hogy $B_{J(\omega)}$ főátlójában minden elem $1 - \omega$, hiszen

$$B_{J(\omega)} = \omega B_J + (1 - \omega)I$$

$$B_J = D^{-1}(L + U).$$

Bizonyítás

Ekkor viszont, ha $B_{J(\omega)}$ sajátértékei $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$ akkor

$$\text{tr}(B_{J(\omega)}) = n(1 - \omega)$$

és ez azt jelenti, hogy

$$n|1 - \omega| \leq \sum_{i=1}^n |\lambda_i| \leq n\rho(B_{J(\omega)})$$

amiből a bizonyítandó egyenlőtlenség n -nel való leosztással következik.

A relaxációs paraméter

Tétel. Minden $\omega > 0$ relaxációs paraméter esetén

$$|1 - \omega| \leq \rho(B_{S(\omega)})$$

Bizonyítás. Határozzuk meg a $B_{S(\omega)}$ mátrix karakterisztikus polinomjának a 0 helyen felvett értékét.

$$p_{B_{S(\omega)}}(0) = \det(B_{S(\omega)})$$

Bizonyítás

$$\begin{aligned} p_{B_{S(\omega)}}(0) &= \det(B_{S(\omega)}) = \det(D - \omega L)^{-1} \det(\omega U + (1 - \omega)D) \\ &= \frac{1}{\det D} (1 - \omega)^n \det D = (1 - \omega)^n \end{aligned}$$

Mivel $p_{B_{S(\omega)}}(0)$ egyben a $B_{S(\omega)}$ sajátértékeinek szorzata is, így

$$\prod_{i=1}^n \lambda_i = (1 - \omega)^n.$$

Ebből

$$|1 - \omega|^n = \prod_{i=1}^n |\lambda_i| \leq (\rho(B_{S(\omega)}))^n$$

következik, amiből n -dik gyököt vonva a bizonyítandó egyenlőtlenséget kapjuk.

Egy szükséges feltétel a konvergenciához

Az előbbi tételek folyamánya, hogy a relaxációs módszerek esetén a konvergencia szükséges feltétele, hogy a relaxációs paraméter 2-nél kisebb pozitív szám legyen.

$$|1 - \omega| \leq \rho(B_{J(\omega)}) \quad |1 - \omega| \leq \rho(B_{S(\omega)}) \quad \rho(B) < 1$$

$$|1 - \omega| < 1$$

$$0 < \omega < 2$$

Konvergencia-tételek speciális mátrixokra

Konvergencia-tételek diagonális domináns mátrixok esetén

- Ha az A együtthatómátrix diagonális domináns, akkor mind a J-módszer, mind az S-módszer konvergens.
- Hasonló feltétel mellett a JOR-módszer is minden 1-nél kisebb pozitív relaxációs paraméterre konvergens.

Konvergencia-tételek pozitív definit együtthatómátrix esetén

- Ha az A együtthatómátrix pozitív definit, akkor az S -módszer mindig konvergens.
- Hasonló feltétel mellett a SOR -módszer is mindig konvergens lesz, 2-nél kisebb pozitív relaxációs paraméterrel.

Optimális relaxációs paraméter

Tétel. *Tegyük fel, hogy a B_J mátrix minden sajátértéke valós és $1 > \lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n$.*

Ekkor az

$$\omega^* := \frac{2}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)}$$

értékre a JOR-módszer konvergens.

Ha $\omega \neq \omega^$, akkor*

$$\rho(B_{J(\omega^*)}) < \rho(B_{J(\omega)}).$$

Megjegyzés

ω^* -ra is teljesül a relaxációs paraméterre vonatkozó azon szükséges feltétel, miszerint az csak 2-nél kisebb pozitív szám lehet. Ehhez elég azt meggondolni, hogy a B_J főátlójában minden elem 0, így a mátrix nyoma, és egyben a sajátértékek összege is 0 kell, hogy legyen. Összevetve ezt a tételnek a sajátértékekre vonatkozó feltételével, következik, hogy

$$\lambda_1 \geq 0 \qquad \lambda_n \leq 0$$

Ekkor viszont áll az is, hogy

$$\lambda_n < 1 - \lambda_1 \quad \text{vagyis} \quad \omega^* < 2$$

Bizonyítás

Mivel

$$B_{J(\omega)} = \omega B_J + (1 - \omega)I$$

így a $B_{J(\omega)}$ mátrix

$$\mu_i = \omega \lambda_i + (1 - \omega)$$

sajátértékeire

$$\mu_1 \geq \mu_2 \geq \dots \geq \mu_n$$

is teljesül.

$$\text{Így } \rho(B_{J(\omega)}) = \max(|\mu_1|, |\mu_n|)$$

Bizonyítás

$$\mu_1^* = \frac{2}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} \lambda_1 + 1 - \frac{2}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} = \frac{\lambda_1 - \lambda_n}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)}$$

$$\mu_n^* = \frac{2}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} \lambda_n + 1 - \frac{2}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} = \frac{\lambda_n - \lambda_1}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} = -\mu_1^*$$

Tehát

$$\rho(B_{J(\mathfrak{w}^*)}) = \max(|\mu_1^*|, |\mu_n^*|) = \frac{\lambda_1 - \lambda_n}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} = \frac{2\lambda_1 - (\lambda_1 + \lambda_n)}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)} < \frac{2 - \lambda_1 - \lambda_n}{2 - \lambda_1 - \lambda_n} = 1$$

vagyis a JOR-módszer konvergens.

Bizonyítás

Definiáljuk az

$$f_i(\omega) = |(\lambda_i - 1)\omega + 1|$$

függvényeket, minden $1 \leq i \leq n$ -re.

Az optimális ω^* értéket, vagyis ahol a $B_{J(\omega)}$ spektrálsugara minimális az

$$\omega^* = \min_{\omega > 0} \max(f_1(\omega), f_n(\omega))$$

képlet határozza meg. Itt a maximum akkor lesz minimális, ha $f_1(\omega) = f_n(\omega)$.

A bizonyítás vége

$$-((\lambda_n - 1)\omega + 1) = (\lambda_1 - 1)\omega + 1$$

$$\omega = \frac{2}{2 - (\lambda_1 + \lambda_n)}$$

Ha $\omega^* < \omega$, akkor $\rho(B_{J(\omega)}) = f_n(\omega) > f_n(\omega^*) = \rho(B_{J(\omega^*)})$

Ha $\omega < \omega^*$, akkor $\rho(B_{J(\omega)}) = f_1(\omega) > f_1(\omega^*) = \rho(B_{J(\omega^*)})$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Vizsgálja meg a négy iterációs módszer konvergenciáját az α valós paraméter különböző értékeire az alábbi együtthatómátrixú lineáris egyenletrendszerekre.

$$\begin{pmatrix} 2 & 1 & \alpha \\ 1 & 2 & \alpha \\ \alpha & \alpha & 2 \end{pmatrix}$$

Gyakorló feladatok

- Igazoljuk, hogy

$$B_{J(\omega)} = \omega B_J + (1 - \omega)I.$$

Gyakorló feladatok

Igazoljuk, hogy ha B_J sajátértékei

$$\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$$

akkor $B_{J(\omega)}$ sajátértékei előállnak a következő alakban:

$$\mu_i = \omega \lambda_i + 1 - \omega \quad (1 \leq i \leq n)$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

8. előadás

Nemlineáris egyenletrendszerek megoldása, fixpontiteráció és a Newton-módszer változatai

Nemlineáris egyenletrendszerek

Nemlineáris egyenletrendszer

$$F_1(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$F_2(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$\vdots$$

$$F_n(x_1, x_2, \dots, x_n) = 0$$

$$F_i : R^n \rightarrow R \quad (1 \leq i \leq n)$$

Nemlineáris egyenletrendszer

- Tömörebb írásmód

$$F(x) = 0$$

$$F : R^n \rightarrow R^n$$

$$F(x) = (F_1(x), F_2(x), \dots, F_n(x))$$

Hány megoldása lehet egy egyenletrendszernek?

- Lineáris egyenletrendszer esetén 0,1 vagy végtelen sok.
- Nemlineáris esetben **akármennyi**.

Példa. Az alábbi egyenletrendszernek a paraméterek alkalmas megválasztásával bármennyi gyöke lehet (0,1,2,3,4,...végtelen sok).

$$\alpha x_1 + \beta x_2 + \gamma = 0$$

$$\sin x_1 - x_2 = 0$$

Nemlineáris egyenletek gyökeinek közelítése

- Newton-módszer (érintő-módszer)

$$f(x) = 0$$
$$x_{n+1} = x_n - \frac{f(x_n)}{f'(x_n)}$$

- A Newton-módszer iterációs formulája **nemlineáris egyenletrendszerek** megoldására is használható. Ehhez azonban szükségünk van a derivált fogalmának egy általánosításához.

Derivált

Definíció. Az $F : R^n \rightarrow R^m$ leképezés (Fréchet-) differentiálható az x^* helyen, ha létezik olyan $A \in R^{m \times n}$ mátrix, amellyel

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{\| F(x^* + h) - F(x^*) - Ah \|}{\| h \|} = 0$$

Az A mátrixot az F függvény x^* -beli deriváltjának nevezzük és $F'(x^*)$ -gal jelöljük.

Derivált függvény

Definíció. Az F függvény differentiálható az $D \subseteq \mathbb{R}^n$ halmazon, ha bármely $x^* \in \overset{O}{D}$ helyen létezik $F'(x^*)$. Ekkor az

$$F'(x) : D \subseteq \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^{m \times n}$$

az (első) derivált függvény.

Megjegyzés

- Az $m=n=1$ **speciális esetben** a differenciálhatóság szokásos definíciójával ekvivalens fogalomhoz jutunk.

$$\lim_{h \rightarrow 0} \frac{|F(x^* + h) - F(x^*) - F'(x^*)h|}{|h|} = 0$$

- A bevezetett derivált szorosan kapcsolódik a **parciális differenciálhatósághoz**.

Megjegyzés

- Ha $F'(x^*)$ létezik, akkor egyértelmű, és megegyezik a parciális deriváltak helyettesítési értékeiből álló **Jacobi-mátrixszal** ($m=n$ esetén):

$$a_{ij} = \frac{\partial F_i(x^*)}{\partial x_j}$$

$$1 \leq i, j \leq n$$

Példa

Határozzuk meg az alábbi függvény deriváltját.

$$F : R^3 \rightarrow R^2 \qquad F(x) = \begin{pmatrix} x_1^2 + x_2 \\ x_2 + x_3 \end{pmatrix}$$

A derivált függvény:

$$F'(x) = \begin{pmatrix} 2x_1 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$

Fixponttételek, fixpontiteráció

Fixpont

Az $F(x) = 0$ egyenletrendszer hozzuk ekvivalens módon a következő alakra:

$$x = G(x).$$

A fenti egyenletrendszer megoldásai a G függvény **fixpontjai**.

Az eredeti egyenletrendszer megoldásának problémáját **fixpontok meghatározására** vezethetjük vissza.

Kontrakció

Definíció. Legyen $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nem üres halmaz. A $G : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ leképezés kontrakció D -ben, ha létezik olyan $0 \leq \kappa < 1$ kontrakciós konstans, hogy bármely $u, v \in D$ -re

$$\| G(u) - G(v) \| \leq \kappa \| u - v \| .$$

- A kontrakciós konstans választása nem egyértelmű és függhet a normától is.
- A kontrakcióból következik a folytonosság.

Kontrakció és fixpont

- Ha G kontrakció D -ben, $x_0 \in D$ és az

$$x_{n+1} = G(x_n)$$

képlettel definiált $\{x_n\}$ sorozat minden tagja D -ben van, akkor $\{x_n\}$ **Cauchy-sorozat**.

- Legyen $D \subseteq R^n$ nem üres zárt halmaz és a $G : D \rightarrow D$ függvény kontrakció D -ben. Ekkor G -nek **pontosan egy** x^* fixpontja van D -ben.

(Banach-féle fixponttétel véges dimenziós vektorterekre vonatkozó speciális esete.)

Brouwer-féle fixponttétel

- Legyen $D \subseteq \mathbb{R}^n$ nem üres korlátos zárt halmaz és a $G : D \rightarrow D$ függvény folytonos D -ben. Ekkor G -nek van x^* fixpontja D -ben.
- Az egyértelműség még az egydimenziós esetben sem áll fenn. Pl. a $[0,1] \rightarrow [0,1]$ identikus leképezésre minden $[0,1]$ pont fixpont.

Egyenletrendszer megoldása fixpontiterációval

Feladat: Az $F(x)=0$ x^* gyökének közelítése.

Eljárás: Hozzuk ekvivalens átalakításokkal az egyenletrendszert $x=G(x)$ alakra, válasszunk alkalmas x_0 **kezdőértéket** és képezzük az $x_{n+1} = G(x_n)$ **iterációs sorozat** tagjait.

A G függvényt **iterációs függvénynek** nevezzük.

Globális és lokális konvergencia

- Az iteráció **globálisan konvergens**, ha tetszőleges kezdőértéket választva a megoldáshoz tart az iteráció sorozat.
- Az iteráció **lokálisan konvergens**, ha a gyöknek van olyan környezete, hogy abból tetszőleges kezdőelemet választva, az iteráció sorozat nem lép ki és tart a megoldáshoz.

Ostrowski-tétel

Legyen $G : R^n \rightarrow R^n$ leképezés, x^* a G fixpontja. Ha G differenciálható x^* -ban és a $G'(x^*)$ derivált mátrix spektrálsugara kisebb mint 1, akkor az iteráció lokálisan konvergens.

- A tétel kétféle értelemben is lokális: 1) lokális konvergenciát mond ki, 2) csak lokális differenciálhatóságot követel meg.

A Newton-módszer és változatai

Newton-módszer

- Tekinthető úgy, mint a fixpont-iteráció speciális esete, amikor a G iterációs függvényt így definiáljuk:

$$G(x) = x - (F'(x))^{-1} F(x)$$

- A Newton-módszer iterációs formulája:

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

- A módszer akkor alkalmazható, ha

$$F'(x_n)$$

nem szinguláris.

Példa

- Közelítsük a Newton-módszerrel az alábbi egyenletrendszer egyik megoldását a $(-0.6, 0.6)$ pontból kiindulva.

$$x^3 - 3xy^2 = 1$$

$$3x^2y - y^3 = 0$$

Megoldás

A Jacobi-mátrix és inverze: $J(x_n, y_n) = 3 \begin{pmatrix} x_n^2 - y_n^2 & -2x_n y_n \\ 2x_n y_n & x_n^2 - y_n^2 \end{pmatrix}$

$$J^{-1}(x_n, y_n) = \frac{1}{3(x_n^2 + y_n^2)^2} \begin{pmatrix} x_n^2 - y_n^2 & 2x_n y_n \\ -2x_n y_n & x_n^2 - y_n^2 \end{pmatrix}$$

(-0.6000, 0.6000)

(-0.4000, 0.8629)

(-0.4998, 0.8660)

(-0.5000, 0.8660)

(-0.4999, 0.8660)

...

A kezdőértéktől függően az eljárással közelíthetők az egyenletrendszer megoldásai:

$$\left(-\frac{1}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}\right), \left(-\frac{1}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), (1, 0)$$

Megjegyzés

- A gyakorlatban az invertálást elkerülik az alábbi módon:

$$S_n := X_{n+1} - X_n$$

$$F'(X_n)S_n = -F(X_n) \quad (\text{lin. egyenletrend.})$$

$$X_{n+1} = X_n + S_n$$

Vesd össze a fentieket az iterációs képlettel:

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

Lokális konvergencia tétel (Baluev tétele)

Legyen $F : R^n \rightarrow R^n$ leképezés és x^* az

$F(x) = 0$ egyenletrendszer megoldása.

Tegyük fel, hogy megadhatók olyan $\beta, \gamma, \delta, \sigma > 0$ konstansok, hogy $\sigma = \beta\gamma/2$, $\delta\sigma < 1$, F folytonosan differenciálható $S_\delta(x^*)$ -ban, továbbá

a) $\| (F'(x))^{-1} \| \leq \beta$, bármely $x \in S_\delta(x^*)$ -ra

b) $\| F'(u) - F'(v) \| \leq \gamma \| u - v \|$ bármely

$u, v \in S_\delta(x^*)$ -ra.

Lokális konvergencia tétel (folytatás)

Ekkor tetszőleges $x_0 \in S_\delta(x^*)$ kezdőértéket választva képezhető az

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

képlettel definiált iterációs sorozat, és a következőket teljesíti bármely $n \geq 1$ -re:

az iteráció lokálisan konvergens, azaz

- (i) $x_n \in S_\delta(x^*)$
- (ii) $x_n \rightarrow x^*$ és x^* az $F(x) = 0$ egyetlen megoldása az $S_\delta(x^*)$ környezetben,

Lokális konvergencia tétel (vége)

továbbá érvényesek az alábbi
hibabecslések ($e_n = x_n - x^*$ a hibavektor):

$$(iii) \quad \|e_n\| \leq \sigma \|e_{n-1}\|^2$$

$$(iv) \quad \|e_n\| \leq \frac{1}{\sigma} (\sigma \|e_0\|)^{2^n}$$

Megjegyzések

- A konvergencia rendje legalább 2.
- A Newton-módszer intervallumos változata (intervallum aritmetikán alapuló kiterjesztése), használható matematikai állítások **számítógépes bizonyítására**, ahogyan más fixpontiterációs módszerek is.
- Számítógépes bizonyítások (négyszín tétel, Kepler-probléma, körpakolási feladatok)

Globális konvergencia tétel

Legyen az $F : R^n \rightarrow R^n$ függvény folytonosan differenciálható és konvex R^n -ben. Tegyük fel, hogy az $F(x) = 0$ egyenletrendszernek létezik $x^* \in R^n$ megoldása, $F'(x)$ reguláris és

$$(F'(x))^{-1} \geq O$$

R^n -ben mindenütt.

Globális konvergencia tétel (folytatás)

Ekkor az x^* megoldás egyértelmű, és
tetszőleges $x_0 \in R^n$ kezdőértéket választva
a Newton-módszerrel számolt

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_n))^{-1} F(x_n)$$

iterációs sorozat x^* -hoz konvergál.

A konvergencia monoton:

$$x^* \leq x_{n+1} \leq x_n \quad (n \geq 1)$$

A Newton-módszer változatai

- **Egyszerűsített Newton-módszer.** A Jacobi-mátrix minden elemének minden lépésben szükséges újraszámolását kerülhetjük el vele, mivel csak az induláskor számítjuk ki a parciális deriváltakat. Az egyszerűsített Newton-módszer konvergencia tétele alapján a konvergencia rendje legalább lineáris.

$$x_{n+1} = x_n - (F'(x_0))^{-1} F(x_n)$$

- **Kvázi-Newton módszerek.** Felfogathatók úgy is, mint a nemlineáris egyenletek gyökének a szelő-módszerrel történő közelítésének egyfajta általánosításai.

Deriválás számítógéppel

- Deriválás „kézzel”, vagy szimbolikus számításokat segítő programmal (pl. Maple, Mathematica, Matlab)
- Numerikus deriválás (δ kicsi)

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

- Automatikus deriválás

Automatikus deriválás

- **Együtt számoljuk** az adott függvényre ismert kiszámítási eljárást az egyes műveletekhez tartozó **deriválási szabályokkal**.
- A változóhoz egy **elempárt** rendelünk, amelynek első komponense a függvényértéknek, a második a derivált értékének felel meg.

Példa

$$f(x) = (x-1)^2 \quad f'(2) = ?$$

Az x változóhoz hozzárendeljük a $(2,1)$ számpárt. Itt 2 a helyettesítési érték, 1 az x -nek x szerinti deriváltja.

$(2,1)-(1,0)=(1,1)$ (Az $(1,0)$ az 1-es értékhez tartozik.)

$(1,1) \times (1,1) = (1,2)$ **az eredmény.**

(Itt a második komponens kiszámításánál használtuk az $(fg)' = f'g + fg'$ összefüggést.)

Függvényminimalizálás

- Többváltozós f függvény stacionárius pontjainak meghatározásához nemlineáris egyenletrendszert kell megoldanunk.

Stacionárius egyenletrendszer:

$$F(x) = \nabla f(x) = 0$$

A Newton-módszerben szereplő F deriváltja, f Hesse-mátrixával egyezik meg:

$$F'(x) = \nabla_{xx}^2 f(x) = \left[\frac{\partial^2 f(x)}{\partial x_i \partial x_j} \right]_{i,j=1}^n$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy az alábbi leképezés kontrakció a megadott halmazon.

$$G(x_1, x_2) = \begin{pmatrix} \frac{1}{6} e^{-(x_1^2 + x_2^2)} \\ \frac{1}{6} (x_1^2 - x_2^2) \end{pmatrix}$$

$$D = \{(x_1, x_2) \mid 0 \leq x_1, x_2 \leq 1\}$$

Gyakorló feladatok

- Közelítse Newton-módszerrel az alábbi nemlineáris egyenletrendszer megoldását.

$$\sin(x_1 + x_2) - \frac{3}{2}x_1 = 0$$

$$x_1^2 + x_2^2 - 1 = 0$$

Gyakorló feladatok

- Határozza meg optimalizálással az alábbi nemlineáris egyenletrendszer megoldását.

$$x_1^2 + x_2 - 5 = 0$$

$$x_1 + x_2^2 + 2 = 0$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

9. előadás

Numerikus integrálás,
Gauss-kvadratúra

Numerikus integrálás

Numerikus integrálás

- Newton-Leibniz szabály

$$I(f) \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b f(x) dx = F(b) - F(a)$$

- Határozott (Riemann-)integrálok
numerikus módszerekkel való közelítése

Korábban tanult fogalmak

- **Kvadratúra-formula**

súlyozott összeg $\int_a^b f(x)dx \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$

- **Interpolációs kvadratúra-formula**

megkapható az alappontjaira felírt Lagrange-féle interpolációs polinom kiintegrálásával

- **Newton-Cotes formula**

ekvidisztáns módon választunk alappontokat

Korábban tanult fogalmak

- **Nyitott formula** (a határok nem alappontok)
- **Zárt formula** (a határok is alappontok)

- **Érintő-formula**

$$I(f) \approx (b - a) f\left(\frac{a + b}{2}\right)$$

- **Trapéz-formula**

$$I(f) \approx (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Kvadrátúra-formula rendje

Definíció. A Q_n kvadrátúra-formula rendje az r szám, ha Q_n bármely legfeljebb r -ed fokú $p(x)$ polinomra pontos ($0 = R_n(p) \stackrel{\text{def}}{=} I(p) - Q_n(p)$), de létezik olyan $r+1$ -ed fokú $q(x)$ polinom, amire Q_n már nem pontos, tehát $R_n(q) \neq 0$.

A fenti definíciót átfogalmazhatjuk: A rend r , ha Q_n pontos az $1, x, x^2, \dots, x^r$ hatványfüggvényekre, de nem pontos x^{r+1} -re.

A rend meghatározása

- Az átfogalmazott definíció alapján a rend meghatározásához csak véges sok (legfeljebb $2n$) polinomot kell megvizsgálni.
- Ha az alappontokat és a súlyokat ismeretlennek tekintjük, akkor egy $r+1$ egyenletből álló $2n$ változós nemlineáris egyenletrendszer kell megvizsgálni.

A rend meghatározása

$$w_1 + w_2 + \dots + w_n = \int_a^b 1 dx$$

$$w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n = \int_a^b x dx$$

$\vdots$

$$w_1 x_1^r + w_2 x_2^r + \dots + w_n x_n^r = \int_a^b x^r dx$$

Sejtés: $r + 1 \leq 2n$

Felső korlát

Tétel. *A Q_n n alappontos kvadratura-formula rendje legfeljebb $2n-1$ lehet.*

Bizonyítás.

Tekintsük $q(x) = (\omega_n(x))^2$ $2n$ -ed fokú polinomot, ahol $\omega_n(x) = (x - x_1) \dots (x - x_n)$.

$$0 < \int_a^b (\omega_n(x))^2 dx = I(q) \neq Q_n(q) = \sum_{i=1}^n w_i (\omega_n(x_i))^2 = 0$$

Tehát erre már nem pontos a formula.

Példa

*Határozzuk meg az **a** és **b** alappontokhoz tartozó maximális pontosságú formulát!*

Tekintsük az alábbi egyenletrendszer!

$$w_1 + w_2 = \int_a^b 1 dx = b - a$$

$$w_1 a + w_2 b = \int_a^b x dx = \frac{b^2 - a^2}{2}$$

Ennek egyetlen megoldása a trapéz-formulához vezet:

$$w_1 = w_2 = \frac{b - a}{2} \quad Q_2(f) = (b - a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Gauss-kvadrátúra

Súlyfüggvény

- Tekintsük az alábbi integrált!

$$I(f) = \int_a^b f(x) \rho(x) dx$$

$\rho(x)$ rögzített, nemnegatív integrálható
ún. **súlyfüggvény**

- A numerikus közelítést továbbra is

$$I(f) \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

alakú kvadratura-formulával végezzük, ami
explicit módon a súlyfüggvényt **nem**
tartalmazza.

Súlyfüggvény

- Olyan súlyfüggvényekkel foglalkozunk, amelyek teljesítik a következő feltételeket:
a) $\rho(x) \geq 0$ és $\rho(x)$ -nek legfeljebb véges sok zérushelye van $[a,b]$ -ben

b) $\rho(x)$ folytonos $[a,b]$ -ben

Alkalmazások

- Ha sok olyan függvény integrálját kell kiszámítani, amelyek közös tényezőt tartalmaznak (érdekemes a közös tényezőt súlyfüggvénynek venni).
- Valószínűségszámítási feladatok
- Fizikai, kémiai jellegű problémák
- Korábban tulajdonképpen a $\rho(x) \equiv 1$ speciális esettel dolgoztunk.

Az interpolációs kvadratura formulákra általánosítások

$$\int_a^b f(x)\rho(x)dx \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n f(x_i) \int_a^b L_i(x)\rho(x)dx$$

Súlyok: $w_i \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b L_i(x)\rho(x)dx$

Hasonlóan átalakíthatók az interpolációs kvadratura-formulákra vonatkozó számos alapvető tétel (képlet hibára, rendre, stb.)

Gauss-kvadratura

- Határozzuk meg, hogy melyek a „legjobb” kvadratura-formulák, amelyeknek **maximális** a rendjük.

Definíció. *Adott $[a,b]$ intervallumhoz és $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó maximális rendű kvadratura-formulákat Gauss-féle kvadratura-formuláknak nevezzük.*

Mikor lehet a rend maximális?

Tétel. Az $[a, b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó n alappontos Q_n interpolációs kvadrátúra-formula rendje akkor és csak akkor $2n-1$, ha bármely legfeljebb $n-1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra

$$\int_a^b p(x) \omega_n(x) \rho(x) dx = 0.$$

Bizonyítás

Szükségesség

A $p(x)\omega_n(x)$ polinom fokszáma legfeljebb $2n-1$,
így pontos rá a formula:

$$\int_a^b p(x)\omega_n(x)\rho(x)dx = \sum_{i=1}^n w_i p(x_i)\omega_n(x_i) = 0.$$

Bizonyítás

Elegendőség

Legyen $g(x)$ egy tetszőleges legfeljebb $2n-1$ -ed fokú polinom.

Végezzünk el egy euklideszi osztást $g(x)$ -en $\omega_n(x)$ -szel:

$$g(x) = q(x)\omega_n(x) + r(x)$$

ahol

$$\partial q, \partial r \leq n-1.$$

Bizonyítás

Az előbbi osztást felhasználva:

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x)\omega_n(x)\rho(x)dx &= \\ \int_a^b q(x)\omega_n(x)\rho(x)dx + \int_a^b r(x)\rho(x)dx &= \\ 0 + Q_n(r) &= \\ Q_n(g). \end{aligned}$$

Ortogonalitás

Definíció. Az $f(x), g(x) \in C[a, b]$ függvényeknek az $[a, b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó belső szorzatát az

$$[f, g] \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b f(x)g(x)\rho(x)dx$$

integrállal értelmezzük. Az $f(x)$ és a $g(x)$ függvények ortogonálisak, ha

$$[f, g] = 0.$$

$C_2[a, b]$ euklideszi tér

- Megmutatható, hogy az előbbi definícióban szereplő formula valóban belső szorzatot definiál.

- A kapott euklideszi teret, így jelöljük:

$$C_2[a, b].$$

- Az egyszerűség kedvéért nem tüntetjük fel külön a súlyfüggvényt, és a belső szorzat felírásánál elhagyjuk az argumentumot:
 $[f, g]$ -t írunk $[f(x), g(x)]$ helyett.

Az előző tétel átfogalmazása

Tétel. Az $[a,b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó tetszőleges n alapponthoz pontos Q_n interpolációs kvadratura-formula rendje akkor és csak akkor $2n-1$, ha az alappontjaira felírt $\omega_n(x)$ n -ed fokú polinom ortogonális bármely legfeljebb $n-1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra.

Megjegyzés. Fontos szerepe van a polinomokból álló $P_2[a,b] \subset C_2[a,b]$ altérnek.

Ortogonalis polinomrendszer

Definíció. Rögzített $[a,b]$ intervallumhoz és $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó ortogonalis polinomrendszeren polinomok olyan

$$p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x), \dots$$

sorozatát értjük, ahol

a) $\partial p_n(x) = n$

b) $[p_i, p_n] = \int_a^b p_i(x) p_n(x) \rho(x) dx = 0, \text{ ha } i \neq n.$

Ortogonalis polinomrendszer

Ortogonalis polinomrendszert tekintve

- $\{p_0(x), p_1(x), \dots, p_n(x), \dots\}$ a $P_2[a, b]$ tér bázisa, vagyis minden $n-1$ -ed fokú $q(x) \in P_2[a, b]$ polinom egyértelműen felírható így:

$$q(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i p_i(x).$$

- $p_n(x)$ ortogonalis minden legfeljebb $n-1$ -ed fokú $q(x)$ polinomra.

Ortogonalis polinomrendszer létezése

$$p_{-1}(x) \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1$$

$$p_{n+1}(x) = (x - \beta_{n+1})p_n(x) - \gamma_{n+1}^2 p_{n-1}(x)$$

rekurzió ortogonalis polinomrendszert
határoz meg, ahol

$$\beta_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[xp_n, p_n]}{[p_n, p_n]}, \quad \gamma_1^2 = 0, \quad \gamma_{n+1}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[p_n, p_n]}{[p_{n-1}, p_{n-1}]},$$

tetszőleges $[a,b]$ intervallumot és $\rho(x)$ súly-
függvényt véve.

Ortogonalis polinomrendszer unicitásáról

- Ha $\{p_n(x)\}$ és $\{q_n(x)\}$ azonos intervallumhoz és súlyfüggvényhez tartozó ortogonalis polinomrendszerek, akkor megadható olyan $\{\alpha_n\}$ számsorozat, hogy

$$q_n(x) = \alpha_n p_n(x),$$

minden n természetes számra.

Ortogonalis polinomok gyökeinek eloszlásáról

- A $\{p_n(x)\}$ ortogonalis polinomrendszer $p_n(x)$ elemének $x_i^{(n)}$ gyökeire igaz, hogy $(1 \leq i \leq n)$
 - a) a gyökök valósak, egyszeresek és az (a,b) intervallumban vannak.
 - b) $p_{n-1}(x)$ gyökei szétválasztják $p_n(x)$ gyökeit,
$$a < x_1^{(n)} < x_1^{(n-1)} < x_2^{(n)} < x_2^{(n-1)} < \dots < x_{n-1}^{(n-1)} < x_n^{(n)} < b$$
 - c) a gyökök mindenütt sűrűn vannak (a,b) -ben, (végtelen sok gyök van minden részintervallumban).

Gauss-kvadratúrák

- Maximális rendű kvadratúra-formulát kapunk, ha a $p_n(x)$ polinom zérushelyeihez tartozó interpolációs kvadratúra-formulát vesszük.
- A Gauss-kvadratúrák tulajdonságait a következő tételben foglaljuk össze.

Gauss-kvadrátúrák

- Tetszőleges $[a,b]$ intervallum és $\rho(x)$ súlyfüggvény esetén a Q_n Gauss-kvadrátúra
 - a) egyértelműen létezik és rendje $2n-1$
 - b) alappontjai a $p_n(x)$ polinom $x_1, \dots, x_n$ gyökei, súlyait az alábbi integrálok adják:
$$w_i \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b \frac{p_n(x)}{(x-x_i)p'_n(x_i)} \rho(x) dx$$
 - c) a súlyok pozitívak.

A Gauss-kvadratura súlyai

- A Gauss-kvadratura súlyait úgy is megkaphatjuk, hogy az alappontokat behelyettesítjük az ortogonális polinomokba és megoldjuk az alábbi lineáris egyenletrendszer $0 \leq i \leq n-1$:

$$\sum_{j=1}^n \omega_j p_i(x_j) = \begin{cases} [p_0, p_0], & \text{ha } i = 0 \\ 0, & \text{ha } 1 \leq i \leq n-1 \end{cases}$$

Megjegyzés

- Kidolgozhatók a Gauss-formulákon alapuló kvadrátúraszabályok is, de használatuk nehézkes, mert a súlyok értéke általában függ az integrálási intervallumtól.
- Használni lehet a $\rho(x) \equiv 1$ súlyfüggvényhez tartozó **Legendre-Gauss fomulákat**.

Példa

Vezessük le a $[0,1]$ intervallumhoz és a $\rho(x) = \sqrt{x}$ súlyfüggvényhez tartozó Gauss-kvadrátúra formulát 1 alappont esetén.

$$p_{-1}(x) \equiv 0, \quad p_0(x) \equiv 1 \quad p_{n+1}(x) = (x - \beta_{n+1})p_n(x) - \gamma_{n+1}^2 p_{n-1}(x)$$

$$\beta_{n+1} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[xp_n, p_n]}{[p_n, p_n]}, \quad \gamma_1^2 = 0, \quad \gamma_{n+1}^2 \stackrel{\text{def}}{=} \frac{[p_n, p_n]}{[p_{n-1}, p_{n-1}]},$$

$$p_1(x) = (x - \beta_1)p_0(x) - \gamma_1^2 p_{-1}(x) = x - \beta_1$$

Példa

$$\beta_1 = \frac{[x,1]}{[1,1]} = \frac{\int_0^1 x\sqrt{x}dx}{\int_0^1 \sqrt{x}dx} = \frac{3}{5} \quad p_1(x) = x - \frac{3}{5}$$

$$w_1 = \int_a^b \frac{p_1(x)}{(x-x_1)p_1'(x_1)} \rho(x) dx = \int_0^1 \sqrt{x} dx = \frac{2}{3}$$

$$Q_1(f) = \frac{2}{3} f\left(\frac{3}{5}\right)$$

Példa

$$\int_0^1 x^3 (\sin \pi x)^2 dx$$

Az integrál pontos értéke:

$$\frac{\pi^2 - 3}{8\pi^2} \approx 0.08700455614$$

A $\rho(x) \equiv 1$ súlyfüggvényhez tartozó 5 alappontos Gauss-kvadratúrával való közelítés eredménye:

$$0.08790654574$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Vezesse le a $[0,1]$ intervallumhoz és a $\rho(x) = \sqrt{x}$ súlyfüggvényhez tartozó Gauss-féle kvadrátúra formulát 3 alappont esetén.

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy

$$\int_{-1}^1 |\omega_n(x)| dx$$

pontosan akkor lesz minimális, ha az

$$U_0(x) = 1, U_1(x) = 2x, \dots,$$

$$U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x)$$

rekurzióval definiált n -edik másodfajú Csebisev-polinom zérushelyeit vesszük alappontoknak.

Gyakorló feladat

- Közelítse a $[0,1]$ intervallumhoz és az azonosan 1 súlyfüggvényhez tartozó 5 alappontos Gauss-kvadratúrával az alábbi integrált.

$$\int_0^1 x^3 (\sin \pi x)^2 dx$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

10. előadás

Kvadrátúra-sorozatok
konvergenciája, Romberg
integrálás

Kvadrátúra-sorozatok konvergenciája

Problémafelvetés

- Numerikus integrálás során gyakran **előre nem ismeretes**, hogy melyik kvadrátúra-formulát kell alkalmazni ahhoz, hogy a kívánt pontosságot elérjük.
- **Kvadrátúra-formulák sorozatát** vesszük és ezekkel közelítések egy $\{Q_n(f)\}$ sorozatát számítjuk ki.
- A sorozat a gyakorlatban csak **véges** sok tagú.
- Fontos a $\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f)$ **határérték** vizsgálata is.

Interpolációs kvadrátúra-formulák

- Interpolációs kvadrátúra-formulák esetében a megfelelő **interpolációs polinomok sorozatának viselkedéséből** is következtethetünk a konvergenciára.

Ha $g_n(x)$ folytonos $[a, b]$ -n és
$$g_n(x) \Rightarrow f(x),$$

akkor $f(x)$ integrálható, és

$$\int_a^b g_n(x) dx \rightarrow \int_a^b f(x) dx.$$

($\Rightarrow$ egyenletes konvergencia)

Newton-Cotes formulák

- Ha olyan interpolációs kvadratura-formulákat használunk, amelyeket definiáló interpolációs polinomok sorozata **egyenletesen** tart $f(x)$ -hez, akkor a kvadratura-formulákkal számított értékek is konvergálnak az integrálhoz.
- A fenti tulajdonság azonban általában **nem igaz** a Newton-Cotes formulák alkalmazásával kapott $\{Q_n(f)\}$ sorozatra.

Konvergenca

Definíció. *Kvadratúra-formulák valamely $\{Q_n(\cdot)\}$ sorozata konvergens függvények valamely $V \subseteq I[a,b]$ osztályára nézve, ha bármely $f(x) \in V$ -re*

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I(f).$$

$I[a,b]$ az $[a,b]$ intervallumon (Riemann szerint) integrálható függvények osztálya.

Konvergencia

- Egy kvadratúra sorozat n -dik tagját **egyértelműen meghatározza** az n alappont és az n súly értéke.
- A fenti adatokat két **végtelen** alsó trianguláris mátrixszal adhatjuk meg.
- Az X mátrix az **alappontokat**, a W mátrix a **súlyokat** tartalmazza.

Az X mátrix

- Az **alappontokat** tartalmazza.
- Az egyes formulák alappontjai függetlenek.

$$X = \begin{pmatrix} x_1^1 & & & & & \\ x_1^2 & x_2^2 & & & & \\ x_1^3 & x_2^3 & x_3^3 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ x_1^n & x_2^n & x_3^n & \cdots & x_n^n & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

A W mátrix

- A **súlyok**at tartalmazza
- A egyes formulák súlyai is függetlenek

$$W = \begin{pmatrix} w_1^1 & & & & & \\ w_1^2 & w_2^2 & & & & \\ w_1^3 & w_2^3 & w_3^3 & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & \\ w_1^n & w_2^n & w_3^n & \cdots & w_n^n & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

Pólya-Sztyeklov tétel

Tétel. Az X és a W mátrixok segítségével megadott $\{Q_n(f)\}$ sorozat akkor és csak akkor konvergens tetszőleges $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényre, ha az alábbi feltételek teljesülnek:

a) $\{Q_n(p)\}$ konvergens tetszőleges $p(x)$ polinomra

b) $\sum_{i=1}^n |w_i^{(n)}| \leq K$ bármely $n \geq 1$ esetén.

Bizonyítás

Szükségesség (vázlat)

Az a) feltétel nyilvánvalóan teljesül, a b) bizonyítása meglehetősen hosszadalmas konstrukciót igényel. Mindenesetre indirekt módon megmutatható, hogy ha nem teljesülne, akkor meg tudnánk konstruálni olyan $f(x)$ folytonos függvényt, amelyre nem lenne igaz a konvergencia.

Bizonyítás

Elegendőség

Megmutatjuk, hogy ha a tétel feltételei teljesülnek, akkor tetszőleges $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényhez és tetszőleges $\varepsilon > 0$ számhoz megadható olyan $\nu \in \mathbb{N}$ küszöb-szám, hogy ha $n > \nu$, akkor

$$|I(f) - Q_n(f)| < \varepsilon.$$

Bizonyítás

Weierstrass híres tétele szerint, van olyan $p(x)$ polinom, amelyre

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - p(x)| < \varepsilon.$$

A fenti polinom segítségével becsülni fogjuk az alábbi értéket:

$$\left| \int_a^b f(x) \rho(x) dx - Q_n(f) \right|.$$

Bizonyítás

$$\begin{aligned}
 & \left| \int_a^b f(x) \rho(x) dx - Q_n(f) \right| \leq \\
 & \left| \int_a^b f(x) \rho(x) dx - \int_a^b p(x) \rho(x) dx \right| + \left| \int_a^b p(x) \rho(x) dx - Q_n(p) \right| + |Q_n(p) - Q_n(f)| = \\
 & \left| \int_a^b (f(x) - p(x)) \rho(x) dx \right| + \left| \int_a^b p(x) \rho(x) dx - Q_n(p) \right| + \left| \sum_{i=1}^n w_i^n (f(x_i^n) - p(x_i^n)) \right| \leq \\
 & \int_a^b |f(x) - p(x)| \rho(x) dx + \left| \int_a^b p(x) \rho(x) dx - Q_n(p) \right| + \sum_{i=1}^n |w_i^n| |f(x_i^n) - p(x_i^n)| \leq \\
 & \varepsilon \int_a^b \rho(x) dx + \left| \int_a^b p(x) \rho(x) dx - Q_n(p) \right| + \varepsilon K.
 \end{aligned}$$

Bizonyítás

Ha n elég nagy, akkor az a) feltétel miatt

tehát ekkor

$$\left| \int_a^b p(x) \rho(x) dx - Q_n(p) \right| < \varepsilon$$
$$\left| \int_a^b f(x) \rho(x) dx - Q_n(f) \right| < \varepsilon \left(\int_a^b \rho(x) dx + 1 + K \right),$$

ahonnan az elegendőség következik.

Pólya György (1887-1985) világhírű magyar származású matematikus volt.

Következmény

- *Ha $Q_n(\cdot)$ interpolációs kvadratura-formula minden n -re, akkor a konvergenciához szükséges és elegendő csupán a b) feltétel.*

Valóban, hiszen ekkor $Q_n(\cdot)$ rendje legalább $n-1$, amiből következőleg bármely rögzített $p(x)$ polinomra $Q_n(p) = I(p)$, ha n értékét elég nagyra választjuk, így teljesül az a) feltétel.

Következmény

- *Legyen $\{Q_n(\cdot)\}$ kvadratúra-formulák olyan sorozata, amely teljesíti az alábbi két feltételt:*

a') $\lim_{n \rightarrow \infty} r_n = \infty$, ahol r_n a $Q_n(\cdot)$ formula rendje,

b) $\sum_{i=1}^n |w_i^{(n)}| \leq K$, bármely $n \geq 1$ esetén.

Ekkor bármely $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényre

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I(f).$$

Bizonyítás

Valóban, hiszen a'')-ből most is a

$$\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(p) = I(p)$$

adódik minden rögzített $p(x)$ polinomra, hiszen ha a $p(x)$ m -edrendű, akkor van olyan ν küszöbszám, hogy ha $n > \nu$, akkor $r_n > m$, tehát ilyen értékekre már a

$$Q_n(p) = I(p)$$

pontos egyenlőség is teljesül.

Következmény

- *Ha $Q_n(f)$ pozitív kvadrátúra-formula minden n -re, akkor a konvergenciához szükséges és elegendő csupán az a) feltétel.*

Valóban, hiszen a konstans 1 függvényre

$$\sum_{i=1}^n w_i^n = Q_n(1) = I(1) = \int_a^b \rho(x) dx.$$

Itt a $K = \int_a^b \rho(x) dx$ konstanssal következik a b) feltétel:

$$\sum_{i=1}^n |w_i^n| = \sum_{i=1}^n w_i^n \leq K.$$

Következmény

- *Tetszőleges $[a,b]$ intervallumhoz és $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó Gauss-kvadratúrák sorozata konvergens, vagyis tetszőleges $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényre $Q_n(f) \rightarrow I(f)$.*

Valóban, hiszen az n -edik Gauss-kvadratúra formula rendje $2n-1$ és ezek mind pozitív kvadratura-formulák, ami az előző két következmény szerint már garantálja a konvergenciát.

Newton-Cotes formulák sorozata

- A $[-1,1]$ intervallumon a zárt Newton-Cotes formulák súlyainak szorzata nem teljesíti a

$$\sum_{i=1}^n |w_i^{(n)}| \leq K$$

feltételt, és a Pólya-Sztyeklov tétel miatt így ez a kvadratúrasorozat **nem** konvergens.

Romberg integrálás

Trapéz-formula

- Lineáris polinommal közelítünk:

$$f(x) \approx \frac{b-x}{b-a} f(a) + \frac{x-a}{b-a} f(b)$$

- Trapéz formula. Az a és b alappontokra felírt zárt formula:

$$I(f) \approx T(f; a, b) \stackrel{\text{def}}{=} (b-a) \frac{f(a) + f(b)}{2}$$

Trapéz-szabály

- Az $[a,b]$ intervallumot osztópontokkal N egyenlő részre osztjuk és alkalmazzuk a trapéz formulát minden részintervallumon.

$$T_N(f; a, b) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^N T(f; x_{k-1}, x_k) = \frac{b-a}{N} \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{k=1}^{N-1} f(x_k) \right)$$

$$x_k \stackrel{\text{def}}{=} a + \frac{k(b-a)}{N} \quad (k = 0, 1, \dots, N)$$

Simpson-szabály

- Az a, b és $(a+b)/2$ pontokhoz felírt Simpson-formula:

$$I(f) \approx S(f; a, b) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{b-a}{6} \left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b) \right)$$

- Simpson-szabály, összetett Simpson-formula:

$$I(f) \approx S_N(f; a, b) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=1}^N S(f; x_{k-1}, x_k)$$

Összehasonlítás

- Az

$$S_{2n} = T_{2n} + \frac{1}{4^1 - 1} (T_{2n} - T_n)$$

Simpson-összegek általában jobban közelítik az integrált, mint a T_n trapézösszegek.

- Az

$$R_{4n} = S_{4n} + \frac{1}{4^2 - 1} (S_{4n} - S_{2n})$$

kifejezések általában jobban közelítenek, mint a Simpson-összegek.

További kifejezések

- Az előbbiek analógiájára be lehet látni, hogy az alábbi kifejezések még jobban közelítenek.

$$Q_{8n} = R_{8n} + \frac{1}{4^3 - 1} (R_{8n} - R_{4n})$$

$$P_{16n} = R_{16n} + \frac{1}{4^4 - 1} (Q_{16n} - Q_{8n})$$

és ezt lehet folytatni...

Motiváció

$$\begin{array}{ccccccccc} T_1 & & & & & & & & \\ T_2 & S_2 & & & & & & & \\ T_4 & S_4 & R_4 & & & & & & \\ T_8 & S_8 & R_8 & Q_8 & & & & & \\ T_{16} & S_{16} & R_{16} & Q_{16} & P_{16} & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \cdot & \cdot & \cdot & \end{array}$$

Addig képezzük ezeket a mennyiségeket, amíg valamely sor két utolsó elemének különbségének abszolút értéke elég kicsi nem lesz.

Romberg integrálási eljárás

Definíció. A Romberg integrálási eljárást a következő kétszeresen rekurzív definícióval értelmezzük:

$$T_{k0}(f) \stackrel{\text{def}}{=} T_k(f; a, b)$$

$$T_{2^m k, m}(f) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4^m T_{2^{m-1} k, m-1}(f) - T_{2^{m-1} k, m-1}(f)}{4^m - 1}$$

$$k = 1, 2, \dots; m = 1, 2, \dots$$

Példa

- Az $m=1$ speciális esetben a

$$T_{2^m k, m}(f) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4^m T_{2^m k, m-1}(f) - T_{2^{m-1} k, m-1}(f)}{4^m - 1}$$

formula ez lesz:

$$T_{2k, 1}(f) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4T_{2k, 0}(f) - T_{k, 0}(f)}{3}$$

Konvergenencia

Tétel. *Ha $f(x) \in C^{2m+2}[a,b]$ és $N \stackrel{\text{def}}{=} 2^m k$, ahol $m \geq 0$
 $k \geq 1$ egész számok, akkor*

$$|I(f) - T_{N,m}(f)| \leq \frac{C_{2m+1}}{2^{2m+3}} (b-a)^{2m+3} \max_{[a,b]} |f^{(2m+2)}(x)| (2^m k)^{-2m-2}.$$

(Az egyenlőtlenség jobb oldala nullához tart,
ha m rögzített és $k \rightarrow \infty$.)

Példa

- Közelítsük Romberg integrálással az alábbi integrál értékét:

$$\int_1^{10} \frac{1}{x} dx = \ln 10 \approx 2.302585$$

Megoldás

$$T(f; a, b) = T\left(\frac{1}{x}; 1, 10\right) = (10 - 1) \frac{\frac{1}{1} + \frac{1}{10}}{2} = \frac{99}{20} = 4.95$$

A közelítések további értékeit számítógéppel kiszámítva kapunk egy alsó trianguláris alakú mátrixot, az ún. Romberg táblázatot.

Romberg táblázat

4.9500

3.2931 2.7409

2.6292 2.4079 2.3857

2.3977 2.3205 2.3147 2.3136

2.3279 2.3046 2.3036 2.3034 2.3034

A táblázat alsó sorának két utolsó eleme alapján adott közelítés: 2.3034.

Megjegyzések

- A Romberg integrálási eljárás alapvetően extrapolációs eljárás, ezért **műveletigény és pontosság** tekintetében jobb, mint a Newton-Cotes, vagy a Gauss kvadrátúra-formulák bármelyike.
- Az előbbi módszer alapján **kiterjeszthető** a sík háromszögein történő kétdimenziós integrálok közelítő kiszámítására is.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Igazolja, hogy ha a Q_n kvadratura-formulák sorozata minden $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényre konvergens, akkor a formulák alappontjai $[a,b]$ -ben mindenütt sűrűn helyezkednek el.

Gyakorló feladatok

- Mutassa meg, hogy a Gauss-kvadratura formulák sorozata minden $f(x) \in C[a,b]$ folytonos függvényre konvergens.

Gyakorló feladatok

- Határozza meg az

$$\int_0^1 \frac{1}{2 + \cos \pi x} dx$$

integrál értékét Romberg-integrálással és hasonlítsa össze a kapott eredményt a trapéz-szabállyal kiszámolható közelítéssel.

Irodalomjegyzék

- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Móricz Ferenc, *Numerikus módszerek az algebrában és analízisben*, Polygon, Szeged, 1997.
- Virágh János, *Numerikus matematika*, JATEPress, Szeged, 1997.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

11. előadás

Differenciálegyenletek
numerikus megoldása

Bevezetés

A differenciálegyenletekről

Differenciálegyenletek

- A **differenciálegyenletek** olyan egyenletek, amelyekben az ismeretlen egy differenciálható függvény, és az egyenlet a függvény és ennek deriváltja(i) között teremt kapcsolatot.

Példák differenciálegyenletre

- Differenciálegyenletek

$$\frac{\partial u}{\partial x} = x^2 + 9$$

$$y'' = y' \sin x - \cos x$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial z} = 0$$

$$y''' + 2y'^2 + y' = e^x$$

Alkalmazások

- Különböző problémáknak differenciálegyenletben való megfogalmazása a **fizikában, kémiában, biológiában, mérnöki tudományokban** és számos más tudományban alapvető szerepet játszik.
- Pl. a rezgő húr differenciálegyenlete, a hővezetés differenciálegyenlete, stb.

A differenciálegyenletek típusai

- **Közönséges differenciálegyenlet**
az egyenlet egyváltozós függvényre van felírva
- **Parciális differenciálegyenlet**
az ismeretlen függvény többváltozós és az egyenletben szereplő deriváltjai parciális deriváltak

Közönséges differenciálegyenletek

Példa

$$y'' = y' \sin x - \cos x$$

n-ed rendűnek nevezzük a differenciálegyenletet, ha a benne szereplő magasabb rendű deriváltak között az n-edik a legnagyobb. (A fenti példa egy másodrendű differenciálegyenlet.)

Általános megoldás

Az n -ed rendű közönséges differenciálegyenlet **általános megoldása** az a függvény, amely pontosan n számú egymástól független konstans (paramétert) tartalmaz, és kielégíti az adott differenciálegyenletet.

Partikuláris megoldás

- Az n -ed rendű közönséges differenciálegyenlet **partikuláris megoldása** az a függvény, mely legfeljebb $n-1$ számú egymástól független konstans (paramétert) tartalmaz, és kielégíti a differenciálegyenletet.
- Speciális esetben egyetlen paramétert sem tartalmaz a partikuláris megoldás.

Kezdeti feltételek

- A differenciálegyenlet valamely partikuláris megoldásának kiválasztásához feltételeket kell megadni.
- Egy n -ed rendű közönséges differenciálegyenlet esetében meg lehet adni a független változó egy adott értékhez tartozó függvényértékét, az első, második, ..., $(n-1)$ -edik derivált értékét. Ezek a **kezdeti feltételek**.

Lineáris és nemlineáris differenciálegyenletek

- **Lineáris differenciálegyenlet**

az ismeretlen függvény és annak differenciálhányadosa(i) csak lineáris kifejezésekben szerepel

- **Nemlineáris differenciálegyenlet**

az ismeretlen függvényt vagy deriváltját tartalmazó tag nemlineáris kifejezésben is előfordul

Néhány nevezetes differenciálegyenlet

- Bernoulli-egyenletek

$$y' + P(x)y = Q(x)y^n$$

- Clairaut-egyenletek

$$y = xy' + F(y')$$

- Ricatti-egyenletek

$$y' = P(x)z^2 + Q(x)y' + R(x)$$

Néhány nevezetes differenciálegyenlet

- Euler-egyenletek

$$xy'' + axy' + by = c(x)$$

- Bessel-egyenletek

$$xy'' + (2k + 1)xy' + (\alpha^2 x^{2r} + \beta^2)y = 0$$

ahol k, α, r, β valósak és $\alpha r \neq 0$.

Autonóm differenciálegyenlet

- A közönséges differenciálegyenletet **autonóm differenciálegyenletnek** nevezzük, ha a független változót explicit módon nem tartalmazza.
- Autonóm rendszer például a híres Lotka-Volterra-egyenletrendszer, a ragadozó-áldozat rendszer egyik legegyszerűbb modellje.

Lotka-Volterra-egyenletrendszer

$$x'(t) = a_1 x(t) - a_2 x(t)y(t)$$

$$y'(t) = -b_1 y(t) + b_2 x(t)y(t)$$

ahol a_1, a_2, b_1, b_2 pozitív konstansok, $x(t)$
és $y(t)$ a ragadozó és áldozat egyedszám.

Megoldási módszerek

- **Analitikus megoldás meghatározása**
pl. a differenciálegyenletek klasszikus elméletének alkalmazása
- **Közelítő megoldás keresése**
pl. Taylor-sor módszer
- **A megoldás numerikus meghatározása**
pl. Runge-Kutta módszerek

Példák

Példa

Határozzuk meg az alábbi differenciálegyenlet általános megoldását.

$$y(9 + 4x^2)y' = 1$$

Megoldás

Ha y' helyébe $\frac{dy}{dx}$ -et írunk és a változókat szétválasztjuk, akkor az

$$ydy = \frac{dx}{9 + 4x^2}$$

egyenlethez jutunk. A két oldalt integrálva:

$$\frac{y^2}{2} = \frac{1}{6} \operatorname{arctg} \frac{2x}{3} + c$$

vagyis

$$y = \pm \sqrt{\frac{1}{3} \operatorname{arctg} \frac{2x}{3} + c}.$$

Példa

Határozzuk meg az alábbi egyenletnek azt a partikuláris megoldását, amelyre $y(0) = 0$.

$$e^x \cos y dx + (1 + e^x) \sin y dy = 0$$

Megoldás

Írjuk át az

$$e^x \cos y dx + (1 + e^x) \sin y dy = 0$$

egyenletet a következő alakba:

$$\frac{-\sin y}{\cos y} dy = \frac{e^x}{1 + e^x} dx$$

ahol $\cos(y) \neq 0$.

Megoldás

Integrálva a

$$\frac{-\sin y}{\cos y} dy = \frac{e^x}{1+e^x} dx$$

egyenletet

$$\ln |\cos y| = \ln(e^x + 1) + \ln c$$

adódik, amiből az **általános** megoldás:

$$\cos y = c(e^x + 1).$$

Megoldás

A partikuláris megoldás meghatározása

Ha $x = 0$, akkor $y = 0$ és így az

$$1 = c(1+1)$$

egyenletből

$$c = \frac{1}{2}.$$

A keresett **partikuláris** megoldás:

$$\cos y = \frac{1}{2}(e^x + 1).$$

Példa

Tekintsük az

$$y'(x) + q(x)y(x) = r(x), \quad y(a) = b$$

feladat alábbi megoldását.

Legyen

$$Q(x) = \int_a^x q(t)dt.$$

Ekkor

$$y'(x)e^{Q(x)} + y(x)q(x)e^{Q(x)} = r(x)e^{Q(x)}.$$

Példa

Az előbbiek alapján

$$[y(x)e^{Q(x)}]' = r(x)e^{Q(x)},$$

tehát

$$y(x)e^{Q(x)} - b = \int_a^x r(t)e^{Q(t)} dt$$

$$y(x) = e^{-Q(x)} \left[b + \int_a^x r(t)e^{Q(t)} dt \right]$$

A megoldás

$$y(x) = e^{-Q(x)} \left[b + \int_a^x r(t) e^{Q(t)} dt \right]$$

- A fellépő integrálokat általában csak **numerikusan** lehet kiszámítani, ilyenkor **közelítőleg oldjuk meg** a differenciálegyenletet.

Néhány differenciálegyenlet megoldása a Maple segítségével

Példa

Oldjuk meg a Maple segítségével az alábbi feladatokat!

a) $y' = xy$

b) $y' = xy, \quad y(0) = 1$

c) $u'' + \omega^2 u = 0, \quad u(0) = 2, \quad u'(0) = 3$

Megoldás

a)

➤ `ODE:=diff(y(x),x)=x*y(x)`

$$ODE := \frac{d}{dx} y(x) = xy(x)$$

➤ `dsolve(ODE,y(x))`

$$y(x) = _C1 e^{\left(\frac{1}{2}x^2\right)}$$

Megoldás

b)

➤ `ODE:=diff(y(x),x)=x*y(x)`

$$ODE := \frac{d}{dx} y(x) = xy(x)$$

➤ `dsolve({ODE,y(0)=1},y(x))`

$$y(x) = e^{\left(\frac{1}{2}x^2\right)}$$

Megoldás

c)

➤ $\text{ODE} := \text{diff}(u(t), [t^2]) + \omega^2 u(t) = 0$

$$ODE := \left(\frac{d^2}{dt^2} u(t) \right) + \omega^2 u(t) = 0$$

➤ $\text{dsolve}(\{\text{ODE}, u(0)=2, D(u)(0)=3\}, u(t))$

$$u(t) = \frac{3 \sin(\omega t)}{\omega} + 2 \cos(\omega t)$$

Ellenőrzés

➤ `eval(subs(t=0,rhs(%)))`

$$u(0) = 2$$

➤ `diff(rhs(%%),t)`

$$3\cos(\omega t) - 2\sin(\omega t)\omega$$

➤ `eval(subs(t=0,%))`

$$u'(0) = 3$$

Példa

Oldjuk meg az alábbi **másodrendű differenciálegyenletet** a Maple segítségével.

$$(1 + \sin(x))^2 y'' + \cos(x) = 0$$

Megoldás

➤ `de:=(1+sin(x))^2+2*diff(y(x),x$2)+cos(x)=0;`

$$de := (1 + \sin(x))^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} y(x) \right) + \cos(x) = 0$$

➤ `dsolve(de);`

$$y(x) = \frac{\sin(x)}{\cos(x)} - \frac{1}{\cos(x)} + _C1x + _C2$$

Ellenőrizzük a megoldást!

A megoldás ellenőrzése

➤ `diff(% ,x$2);`

$$\frac{d^2}{dx^2} y(x) = \frac{2\sin(x)^3}{\cos(x)^3} + \frac{2\sin(x)}{\cos(x)} - \frac{2\sin(x)^2}{\cos(x)^3} - \frac{1}{\cos(x)}$$

➤ `simplify(%*(1+sin(x))^2);`

$$(1 + \sin(x))^2 \left(\frac{d^2}{dx^2} y(x) \right) = -\cos(x)$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Oldja meg az alábbi differenciálegyenletet a Maple segítségével.

$$y' = \sqrt{y - 2x}$$

Gyakorló feladatok

- Oldja meg az alábbi differenciálegyenletet a Maple segítségével.

$$y' = \sin(x + y)$$

Gyakorló feladatok

- Oldja meg az alábbi differenciálegyenletet a Maple segítségével

$$y' = \left(\frac{2x - y + 1}{x} \right)^2$$

Irodalomjegyzék

- Molnárka Gy. – Gergó L., Wettl F., Horváth A. – Kallós G., *A Maple V és alkalmazásai*, Springer, 1996.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Móricz Ferenc, *Differenciálegyenletek numerikus módszerei*, Polygon, Szeged, 1998.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

12. előadás

A kezdetiérték probléma
megoldásának közelítése
numerikus módszerekkel

A k-ad rendű differenciálegyenlet

Definíció. Egy k-ad rendű (explicit, közönséges) differenciálegyenleten olyan

$$y^{(k)} = F(x, y, y', \dots, y^{(k-1)})$$

alakú függvényegyenletet értünk, ahol F adott függvény.

Elsőrendű differenciálegyenlet: $k=1$.

Differenciálegyenlet megoldása

Definíció. Az $Y(x)$ függvény a differenciálegyenlet megoldása valamely $[a,b]$ intervallumon, ha $Y(x)$ (legalább) k -szor differenciálható $[a,b]$ -ben és kielégíti a differenciálegyenletet, vagyis

$$Y^{(k)}(x) = F(x, Y(x), Y'(x), \dots, Y^{(k-1)}(x)).$$

Kezdetiérték probléma

Kezdetiérték probléma (röviden: KÉP)

Definíció. *Adott az $y' = f(x, y)$ elsőrendű differenciálegyenlet és az x_0, y_0 valós számok. Határozzuk meg a differenciálegyenletnek olyan $Y(x)$ megoldását, amely értelmezve van az x_0 pont valamely környezetében és teljesíti az $Y(x_0) = y_0$ kezdeti feltételt.*

Lipschitz-feltétel

Definíció. Az $f(x, y)$ függvény az y változójában Lipschitz-feltételnek tesz eleget a

$D = \{(x, y) \mid a \leq x \leq b, c \leq y \leq d\} \subseteq \mathbb{R}^2$
halmazon, ha megadható olyan α valós konstans, hogy tetszőleges $(x, y_1), (x, y_2) \in D$ esetén

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \leq \alpha |y_1 - y_2|.$$

Megengedjük a $c = -\infty, d = \infty$ esetet is.

KÉP egyértelmű megoldhatósága

Tétel. *Legyen $f(x, y)$ folytonos az $S = \{(x, y) \mid a \leq x \leq b, -\infty \leq y \leq \infty\} \subseteq \mathbb{R}^2$ halmazon, tegyen eleget az y változójában Lipschitz-feltételnek S -en. Ekkor bármely $x_0 \in [a, b]$ és $y_0 \in \mathbb{R}$ esetén pontosan egy $Y(x)$ függvény létezik, hogy*

- a) $Y(x)$ folyt. diff. bármely $x \in [a, b]$*
- b) $Y'(x) = f(x, Y(x))$, bármely $x \in [a, b]$*
- c) $Y(x_0) = y_0$.*

Megjegyzés

- Az előbbi tételben szereplő feltételek **elegendőek** a megoldhatósághoz.
- A Lipschitz-feltétel teljesülése a gyakorlatban csak nehezen ellenőrizhető, így hasznosak az olyan észrevételek, amelyeknek ez konklúziója.

A Lipschitz-feltételről

Tétel. *Ha az S halmazon létezik az $f(x, y)$ függvény $\frac{\partial f}{\partial y}$ parciális deriváltja, továbbá ez a derivált folytonos és korlátos S -en, akkor $f(x, y)$ az y változójában Lipschitz-feltételnek tesz eleget S -en.*

Megjegyzés

- Ha nem a teljes S -en, hanem csak valamely korlátos, zárt D részhalmazon korlátos az y szerinti parciális derivált, a KÉP akkor is megoldható, de az $Y(x)$ megoldás általában nem a teljes $[a, b]$ intervallumon, hanem csak az x_0 pont bizonyos környezetében lesz értelmezve.

A KÉP megoldásáról

Példa. Az alábbi KÉP

$$Y(x) = \frac{1}{1-x}$$

megoldása csak az 1-nél kisebb valós számokra definiált.

$$y' = y^2$$

$$y(0) = 1$$

Megjegyzés

- A továbbiakban **feltesszük**, hogy a tekintett KÉP teljesíti az egyértelmű megoldhatóságról kimondott tétel feltételeit.
- A differenciálegyenletek **klasszikus elmélete** számos elegáns módszert kínál speciális KÉP osztályok megoldására.
- Vannak könnyen definiálható KÉP feladatok, ahol a megoldás **elemi függvényekkel nem írható fel**.

A KÉP megoldásáról

Példa. Az alábbi KÉP a 0 környezetében egyértelműen megoldható, de **a pontos megoldás nem elemi függvény**, így véges lépésben, pontosan nem határozható meg és pontosan nem írható le (véges eszközökkel).

$$y' = x + x^2 + y^2$$

$$y(0) = 1$$

A KÉP megoldásáról

- Nem ismert „általános” matematikai módszer tetszőleges KÉP megoldására, így mind elméleti szempontból, mind a gyakorlat számára fontosak a **közelítő eljárások**.
- Két eljárással foglalkozunk (Taylor-sor módszer, fokozatos közelítések módszere), amelyek segítségével a pontos megoldást alkalmas **közelítő függvényekkel** lehet közelíteni.

Taylor-sor módszer

Taylor-sor módszer

Tegyük fel, hogy $Y(x)$ $n+1$ -szer differenciálható az $[a,b]$ intervallumon. Ekkor $Y(x)$ az n -ed fokú Taylor-polinomjával közelíthető.

$$Y(x) = Y(x_0) + \frac{Y'(x_0)}{1!} (x - x_0) + \frac{Y''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \dots + \frac{Y^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n + \frac{Y^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} (x - x_0)^{n+1}$$

Taylor-sor módszer

A pontos megoldás helyett, tekintsük annak az alábbi n -ed fokú polinommal való közelítését:

$$y_n(x) = \\ = Y(x_0) + \frac{Y'(x_0)}{1!} (x - x_0) + \frac{Y''(x_0)}{2!} (x - x_0)^2 + \dots + \frac{Y^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n$$

Ha $Y(x)$ x_0 körül konvergens hatványsorba fejthető, akkor $y_n(x) \rightarrow Y(x)$ ha $n \rightarrow \infty$.

Taylor-sor módszer

- Hogyan határozhatók meg az $y_n(x)$ -ben szereplő deriváltak, hiszen nem ismerjük az $Y(x)$ megoldást?
- A KÉP ismeretében a szükséges deriváltak előállíthatók a differenciálegyenlet mindkét oldalának deriválásával, majd a kapott képletekbe az x_0 érték behelyettesítésével. Ez az eljárás a Taylor-sor módszer.

Taylor-sor módszer

- A KÉP definíciója alapján

$$Y(x_0) = y_0$$

- Mivel

$$Y'(x) = f(x, Y(x))$$

az $x = x_0$ helyen

$$Y'(x_0) = f(x_0, Y(x_0)) = f(x_0, y_0)$$

Taylor-sor módszer

- Az előző eredmények szerint

$$\begin{aligned} Y''(x) &= \frac{d}{dx} f(x, Y(x)) = \\ &= \frac{\partial f(x, Y(x))}{\partial x} + \frac{\partial f(x, Y(x))}{\partial y} Y'(x) \end{aligned}$$

tehát

$$\begin{aligned} Y''(x_0) &= \frac{\partial f(x_0, Y(x_0))}{\partial x} + \frac{\partial f(x_0, Y(x_0))}{\partial y} Y'(x_0) = \\ &= \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial x} + \frac{\partial f(x_0, y_0)}{\partial y} f(x_0, y_0) \end{aligned}$$

Példa

Közelítsük az alábbi KÉP megoldását a Taylor-sor módszerrel

$$y' = 1 - x + y$$

$$y(0) = 1$$

Példa

$$Y(0) = 1 \quad Y'(x) = 1 - x + Y(x)$$

$$Y'(0) = 1 - x_0 + Y(x_0) = 2$$

$$Y''(x) = -1 + Y'(x) = -1 + (1 - x + Y(x))$$

$$Y''(0) = 1$$

$$y_2(x) = 1 + 2x + \frac{1}{2}x^2$$

Fokozatos közelítések módszere

Fokozatos közelítések módszere

Ha $Y(x)$ a KÉP megoldása, tehát

$$Y'(x) = f(x, Y(x))$$

$$Y(x_0) = y_0$$

akkor mindkét oldal integrálásával

vagyis

$$\int_{x_0}^x Y'(t) dt = \int_{x_0}^x f(t, Y(t)) dt$$

$$Y(x) = y_0 + \int_{x_0}^x f(t, Y(t)) dt.$$

Fokozatos közelítések módszere

Vezessük be a Φ függvényt, amely az $[a,b]$ intervallumon (legalább) egyszer folytonosan differenciálható függvények $C^1[a,b]$ terét képezi le önmagába az alábbi képletnek megfelelően:

$$\Phi(z(x)) \stackrel{def}{=} \int_{x_0}^x f(t, z(t)) dt.$$

Fokozatos közelítések módszere

Ekkor

$$\Phi(Y(x)) = Y(x)$$

vagyis a KÉP $Y(x)$ megoldása a Φ leképezés fixpontja.

Alapötlet: Próbáljunk a fixpont-iterációnál megismerthez hasonló közelítő eljárást alkalmazni!

Fokozatos közelítések módszere

Legyen

$$y_0(x) \equiv y_0$$

majd határozzuk meg az $y_n(x)$ közelítő
függvényeket az alábbi formulával:

$$y_n(x) \stackrel{\text{def}}{=} y_0 + \int_{x_0}^x f(t, (y_{n-1}(t))) dt \quad n = 1, 2, \dots$$

A fokozatos közelítések módszerét, szokták
Picard-féle módszernek is nevezni.

Példa

Közelítsük az alábbi KÉP megoldását a fokozatos közelítések módszerével.

$$y' = x + y^2$$

$$y(0) = 1$$

Példa

Fokozatos közelítések $y_0(x) \equiv 1$

módszere:

$$y_n(x) = 1 + \int_0^x t + (y_{n-1}(t))^2 dt \quad n = 1, 2, \dots$$

Tehát

$$y_1(x) = 1 + \int_0^x t + 1 dt = \left[\frac{t^2}{2} + t \right]_0^x = 1 + x + \frac{x^2}{2}$$

$$y_2(x) = 1 + \int_0^x t + \left(1 + t + \frac{t^2}{2} \right)^2 dt = \dots = 1 + x + \frac{3}{2}x^2 + \frac{2}{3}x^3 + \frac{1}{4}x^4 + \frac{1}{20}x^5$$

$$y_3(x) = 1 + \int_0^x t + (y_2(x))^2 dt = \dots$$

A KÉP megoldásának közelítése numerikus módszerekkel

A KÉP megoldásának közelítése

- Véges sok x_k helyen az $Y(x)$ pontos megoldás helyettesítési értékeit közelítő $y_k \approx Y(x_k)$ mennyiségeket határozzunk meg.
- Állandó h lépésközzel próbálunk közelítéseket előállítani az adott intervallumon.

$p+1$ lépéses módszerek

- Célszerű olyan módszerekkel dolgozni, amelyek csak rögzített számú előző közelítés tárolását igénylik.
- Olyan rekurzív képletekre van szükség, amelyek segítségével az előző $p+1$ darab y_k közelítés segítségével előállítható az újabb y_{n+1} érték ($p+1$ lépéses módszerek).

$$y_{n+1} = \Phi(y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-p})$$

Megjegyzések

- Ha a Φ függvény nem függ y_{n+1} -től, akkor **explicit** (vagy extrapolációs) módszerről, az ellenkező esetben **implicit** (vagy interpolációs) módszerről beszélünk.
- Legegyszerűbb a $p=0$ eset:

$$y_{n+1} = \Phi(y_{n+1}, y_n)$$

akkor **1 lépéses módszereket** kapunk, ezek közül legismertebbek a **Runge-Kutta** módszerek.

Megjegyzések

- $p \geq 1$ esetén a módszer elindításához szükségünk van az $y_0, y_1, \dots, y_p$ kezdőértékekre.
- Az y_0 érték adott a KÉP definíciójából, a többieket meghatározhatjuk pl. a Taylor-sor módszerrel vagy alkalmas 1 lépéses módszerrel.

Lokális hiba

Definíció. Az $y_{n+1} = \Phi(y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-p})$ képlettel adott közelítő módszer lokális, vagy lépésenkénti hibája:

ahol

$$T_{n+1}(h) \stackrel{\text{def}}{=} Y(x_{n+1}) - y_{n+1}^*$$

$$y_{n+1}^* \stackrel{\text{def}}{=} \Phi(Y(x_{n+1}), Y(x_n), \dots, Y(x_{n-p})).$$

A módszer rendje

- A módszer **rendje** r , ha $T_{n+1}(h) = O(h^{r+1})$ minden az egyértelműséget biztosító tétel feltételeit teljesítő KÉP esetén.
- A módszer rendje pontosan akkor lesz r , ha a módszer pontos eredményt ad minden olyan KÉP esetén, melynek megoldása legfeljebb r -ed fokú polinom.

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Közelítse a következő KÉP megoldását a **Taylor-sor módszerrel**.

$$y' = x^2 - y$$

$$y(0) = 1$$

$$[a, b] = [0, 1]$$

Pontos megoldás:

$$Y(x) = -e^{-x} + x^2 - 2x + 2$$

Gyakorló feladatok

- Írjon Maple eljárást a KÉP Taylor-sor módszerrel történő közelítő megoldására.

Gyakorló feladatok

- Közelítse a következő KÉP megoldását a **fokozatos közelítések** módszerével.

$$y' = x^2 - y$$

$$y(0) = 1$$

$$[a, b] = [0, 1]$$

Pontos megoldás:

$$Y(x) = -e^{-x} + x^2 - 2x + 2$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Móricz Ferenc, *Differenciálegyenletek numerikus módszerei*, Polygon, Szeged, 1998.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

13. előadás
Lineáris többlépéses
módszerek

Problémafelvetés

Tekintsük az alábbi kezdetiérték problémát (KÉP):

$$y' = f(x, y)$$

$$y(x_0) = y_0.$$

Határozzuk meg az $Y(x)$ pontos megoldás numerikus közelítését.

Numerikus közelítés

Tekintsük a pontos megoldás numerikus közelítését az $[x_0, x_0 + \beta]$ intervallum h lépcsőközű beosztásához tartozó

$$x_0 < x_1 < \dots < x_n < x_{n+1} < \dots < x_0 + \beta$$

pontjaiban a következő formula szerint:

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= \Phi(y_{n+1}, y_n, y_{n-1}, \dots, y_{n-p}) = \\ &= \sum_{k=0}^p a_k y_{n-k} + h \sum_{k=-1}^p b_k y'_{n-k}. \quad n = p, p+1, \dots \end{aligned}$$

Megjegyzések

- Lineáris $p+1$ lépéses módszert definiáltunk
- Az alábbi képletben szereplő a_k és b_k konstansok a módszerre jellemző állandók, y'_{n-k} pedig az $f(x_{n-k}, y_{n-k})$ értéket jelölő rövidítés. (Tehát ez **nem deriválást** jelent itt!)

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^p a_k y_{n-k} + h \sum_{k=-1}^p b_k y'_{n-k}$$

Megjegyzések

- Ha $p \geq 1$ a módszer elindításához szükségünk van megfelelő $y_0, y_1, \dots, y_p$ **kezdőértékekre**.
- A módszer **explicit**, ha $b_{-1} = 0$, ellenkező esetben **implicit** módszert kapunk.

Karakterisztikus polinomok

Bevezetve az $a_{-1} \stackrel{\text{def}}{=} -1$ együtthatót a módszerhez természetes módon hozzárendelhető az *első*

$$Q(z) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=-1}^p a_k z^{p-k}$$

és a *második*

$$R(z) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_{k=-1}^p b_k z^{p-k}$$

karakterisztikus polinom.

A módszer rendje

- A módszer rendje pontosan akkor lesz r , ha a módszer a_k, b_k paramétereivel teljesülnek a

$$\sum_{k=-1}^p (-k)^j a_k + j \sum_{k=-1}^p (-k)^{j-1} b_k = 0 \quad j = 0, 1, \dots, r$$

egyenlőségek (ez egy lin. rend.), de a $j = r + 1$ esetben már

$$\sum_{k=-1}^p (-k)^{r+1} a_k + (r+1) \sum_{k=-1}^p (-k)^r b_k \neq 0.$$

Maximális rendű módszer

- Ha maximális rendű módszert szeretnénk a $2p+3$ paramétert meghatározhatjuk az előbbi **lineáris egyenletrendszer** megoldásával.
- A maximális rend implicit formula esetén $2p+2$, explicit formula esetén $2p+1$ lehet.
- **Nem feltétlenül célszerű** a rend maximalizálására törekedni, egyéb tulajdonságok fontosabbak lehetnek.

Konzisztencia

- A módszer **konzisztens**, ha a rendje legalább 1.
- A lineáris $p+1$ lépéses módszer akkor és csak akkor konzisztens, ha

$$Q(1) = 0$$

és

$$Q'(1) + R(1) = 0.$$

Stabilitás

- A módszer **stabilis**, ha a $Q(z)$ első karakterisztikus polinom minden z_i gyöke az egységkörben van,

$$|z_i| \leq 1$$

és az egységkör határán lévő gyökök egyszeresek, vagyis ha $Q(z_i) = 0$ és $|z_i| = 1$, akkor $Q'(z_i) \neq 0$.

A lineáris $p+1$ lépéses módszerek főtétele

Tétel. *A lineáris $p+1$ lépéses módszer akkor és csak akkor konvergens, ha konzisztens és stabilis.*

A tétel segítségével pusztán algebrai módszerekkel (a két karakterisztikus polinom vizsgálatával) meghatározhatók a módszer legfontosabb jellemzői.

Dahlquist-féle korlátok

Tétel. *Minden stabilis lineáris $p+1$ lépéses módszer r rendjére igaz, hogy*

a) $r \leq k + 2$, ha k páros

b) $r \leq k + 1$, ha k páratlan

c) $r \leq k$, ha $b_{-1} \leq 0$ (például explicit módszereknél).

Lineáris $p+1$ lépéses módszerek levezetése

A $p+1$ lépéses módszerek

- Maximális rendű $p+1$ lépéses módszereket kaphatunk, ha az a_k, b_k paramétereket ismeretleneknek tekintve megoldjuk a megfelelő lineáris egyenletrendszert.
- Egyszerűbben is célhoz érhetünk, ha helyette a **numerikus differenciálás**ra vagy **integrálás**ra levezetett képleteket felhasználva konstruálunk ilyen módszereket.

Numerikus differenciálási képletek alkalmazása

- Egyváltozós függvény első deriváltjának közelítése egy adott pontban ($h = x_{n+1} - x_n$):

$$g'(x_n) = \frac{g(x_{n+1}) - g(x_n)}{h} - \frac{h}{2} g''(\xi)$$

- Ha a KÉP pontos megoldására $g(x) = Y(x)$ alkalmazzuk ezt a közelítést, akkor

$$Y'(x_n) = \frac{Y(x_{n+1}) - Y(x_n)}{h} - \frac{h}{2} Y'''(\xi).$$

$$\xi \in [x_n, x_{n+1}]$$

Euler módszer

- Az előbbi felírást átrendezve kapjuk, hogy

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + hY'(x_n) + \frac{h^2}{2}Y''(\xi)$$

- A lineáris 1 lépéses módszer, amelyet a

$$y_{n+1} = y_n + hy'_n$$

formula definiál, egy 1 rendű, explicit 1 lépéses módszer (Euler módszer).

Emlékeztetőül: y'_n nem derivált, hanem $y'_n \stackrel{\text{def}}{=} f(x_n, y_n)$.

Példa

Tekintsük az alábbi KÉP megoldását.

$$y' = y$$

$$y(0) = 1$$

$$[a, b] = [0, 1].$$

A pontos megoldás:

$$Y(x) = e^x$$

Példa

Az előbbi feladatra alkalmazva az Euler-módszert, az

$$\begin{aligned} y_{n+1} &= y_n + hf(x_n, y_n) = \\ &= y_n + hy_n = (1+h)y_n \end{aligned}$$

képlettel közelítünk.

Implicit Euler módszer

- Közelítsük az $x = x_{n+1}$ helyen a deriváltat:

$$g'(x_{n+1}) = \frac{g(x_{n+1}) - g(x_n)}{h} - \frac{h}{2} g''(\eta)$$

- A pontos megoldásra alkalmazva megkapjuk az 1 rendű 1 lépéses implicit Euler módszert

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

Numerikus kvadrátúra formulák alkalmazása

- Trapéz-formula

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} g(x) dx = \frac{h}{2} (g(x_n) + g(x_{n+1})) - \frac{h^3}{12} g''(\sigma)$$

- Alkalmazva a fenti közelítést

$$\int_{x_n}^{x_{n+1}} Y'(x) dx = \frac{h}{2} (Y'(x_n) + Y'(x_{n+1})) - \frac{h^3}{12} Y'''(\sigma)$$

Numerikus kvadrátúra formulák alkalmazása

- $Y'(x)$ primitív függvénye $Y(x)$, így

$$Y(x_{n+1}) - Y(x_n) = \frac{h}{2} (Y'(x_n) + Y'(x_{n+1})) - \frac{h^3}{12} Y'''(\sigma)$$

Átrendezés után

$$Y(x_{n+1}) = Y(x_n) + h \left(\frac{1}{2} Y'(x_{n+1}) + \frac{1}{2} Y'(x_n) \right) - \frac{h^3}{12} Y'''(\sigma)$$

Numerikus kvadrátúra formula alkalmazása

- Egy 2 rendű 1 lépéses módszert kaptunk:

$$y_{n+1} = y_n + h \left(\frac{1}{2} y'_{n+1} + \frac{1}{2} y'_n \right)$$

A Simpson-formula alkalmazása

- Simpson-formula

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} g(x)dx = \frac{2h}{6} (g(x_{n-1}) + 4g(x_n) + g(x_{n+1})) - \frac{h^5}{90} g^{(4)}(\theta)$$

- Alkalmazva a fenti közelítést

$$\int_{x_{n-1}}^{x_{n+1}} Y'(x)dx = \frac{2h}{6} (Y'(x_{n-1}) + 4Y'(x_n) + Y'(x_{n+1})) - \frac{h^5}{90} Y^{(5)}(\theta)$$

A Simpson-formula alkalmazása

- A bal oldal helyébe $Y(x_{n+1}) - Y(x_{n-1})$ -et helyettesítve és átrendezve:

$$\begin{aligned} Y(x_{n+1}) &= \\ &= Y(x_{n-1}) + h \left(\frac{1}{3} Y'(x_{n+1}) + \frac{4}{3} Y'(x_n) + \frac{1}{3} Y'(x_{n-1}) \right) - \frac{h^5}{90} Y^{(5)}(\theta) \end{aligned}$$

Simpson-formula alkalmazása

- Az alábbi 4 rendű implicit 2 lépésű módszert kaptuk:

$$y_{n+1} = y_{n-1} + h \left(\frac{1}{3} y'_{n+1} + \frac{4}{3} y'_n + \frac{1}{3} y'_{n-1} \right)$$

Megjegyzések

- További numerikus differenciálás formulák felhasználásával számos ismert módszert lehet még levezetni.
- További Newton-Cotes formulából is levezethető még számos $p+1$ lépéses módszer.
- Ha **nyitott** Newton-Cotes formulákat használunk, akkor $p+1$ lépéses **explicit** módszer adódik.

Megjegyzés

- Mivel az interpolációs kvadratura formulákat alkalmas interpolációs polinomok integrálásával kaptuk, észrevehetjük, hogy az előző két levezetés általánosítható: vegyünk az $Y'(x)$ derivált alkalmas interpolációs polinomját, s az $\int_{x_{n-p}}^{x_{n+1}} Y'(x) dx$ integrált közelítsük az interpolációs polinom integráljával.

Lineáris $p+1$ lépéses módszerek gyakorlati alkalmazása

Gyakorlati alkalmazás

- Hogyan határozható meg az

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

formulából y_{n+1} ?

- Ha a KÉP jobb oldalán álló $f(x, y)$ függvény nem lineáris y változójában, akkor minden lépésben egy nemlineáris egyenletet kell megoldani az y_{n+1} ismeretlenre.

Példa

Tekintsük az alábbi KÉP megoldását!

$$y' = xy^2$$

$$y(0) = 1$$

$$[a, b] = [0, 1].$$

A pontos megoldás:

$$Y(x) = -\frac{2}{x^2 - 2}.$$

Példa

Ha alkalmazzuk az előbbi KÉP esetén a módszert, az y_1 -et az

$$y_1 = \frac{h^2}{2} + \frac{h^2}{2} (y_1)^2$$

másodfokú egyenlet megoldásával kapjuk.

Itt használhatjuk a megoldóképletet, de megmutatható az is, hogy a jobboldali függvény kontrakció, és alkalmazható a fixpontiteráció a megoldás közelítésére.

A formula átírása

- A módszert az eredeti

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^p a_k y_{n-k} + h \sum_{k=-1}^p b_k y'_{n-k}$$

forma helyett célszerű

$$y_{n+1} = \sum_{k=0}^p (a_k y_{n-k} + h b_k y'_{n-k}) + h b_{-1} f(x_{n+1}, y_{n+1})$$

alakban felírni, és alkalmas $y_{n+1}^{[0]}$ kezdőérték után y_{n+1} -et az alábbi iterációval közelíteni:

$$y_{n+1}^{[k+1]} = \sum_{k=0}^p (a_k y_{n-k} + h b_k y'_{n-k}) + h b_{-1} f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[k]})$$

Prediktor-korrektor módszerek

- Mivel az implicit módszerek kedvező stabilitási tulajdonságokat mutatnak, de használatukhoz (a fixpontiteráció elindításához) ismernünk kell y_{n+1} valamely közelítését, a gyakorlatban egy explicit és egy implicit formulákban álló páros módszereket, ún. **prediktor-korrektor** módszereket alkalmaznak.

Prediktor-korrektor módszerek

- Az explicit formulát, a prediktort csak az $y_{n+1}^{[0]}$ **kezdőérték** előállítására használják, s a korrektorral végzett néhány fixpont-iterációs lépéssel **javítják** ezt a kiinduló értéket.
- Csak **néhány lépést** érdemes kiszámolni, $k=1,2$ általában elegendő.
- **Azonos rendű** formulákat érdemes párosítani.

Milne módszere

A Simpson-formulából levezetett korrektorral és a hozzá választott megfelelő prediktorral kapjuk **Milne módszerét**:

$$y_{n+1}^{[0]} = y_{n-3} + \frac{4h}{3} (2y'_n - y'_{n-1} + 2y'_{n-2})$$

$$y_{n+1}^{[k+1]} = y_{n-1} + \frac{h}{3} (y'_{n-1} + 4y'_n) + f(x_{n+1}, y_{n+1}^{[k]})$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Közelítse a következő KÉP megoldását a megadott intervallumon valamelyik prediktor-korrektor formulával.
Próbálkozzon a $h=0.01$ lépésközzel, ha szükséges, válasszon megfelelő lépésközt.

$$y' = e^{-x} - y$$

$$y(0) = 1$$

$$[a, b] = [0, 5].$$

Pontos megoldás:

$$Y(x) = (x + 1)e^{-x}$$

Gyakorló feladatok

- Közelítse a következő KÉP megoldását a megadott intervallumon valamelyik prediktor-korrektor formulával.
Próbálkozzon a $h=0.01$ lépésközzel, ha szükséges, válasszon megfelelő lépésközt.

$$y' = 2xy^2$$

$$y(0) = 1$$

$$[a, b] = [0, 0.95].$$

Pontos megoldás:

$$Y(x) = \frac{1}{1-x^2}$$

Gyakorló feladatok

- Közelítse a következő KÉP megoldását a megadott intervallumon valamelyik prediktor-korrektor formulával.
Próbálkozzon a $h=0.01$ lépésközzel, ha szükséges, válasszon megfelelő lépésközt.

$$y' = \sqrt{1 - y^2}$$

$$y(0) = 0$$

$$[a, b] = [0, 1.55].$$

Pontos megoldás:

$$Y(x) = \sin(x)$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Móricz Ferenc, *Differenciálegyenletek numerikus módszerei*, Polygon, Szeged, 1998.

Közelítő és szimbolikus számítások haladóknak

14. előadás

Másodrendű egyenletek
peremérték-problémája

Elsőfajú peremérték feladat

Definíció. Elsőfajú peremérték feladat
másodrendű differenciálegyenletre:

$$y'' = f(x, y, y')$$

$$y(a) = A$$

$$y(b) = B$$

ahol $f(x, y, y')$ adott függvény, a, b, A, B adott számok és $a < b$.

Alapfeladat

- Keresendő olyan $Y(x)$ függvény, amely folytonos a zárt $[a,b]$ intervallumon, kétszer differenciálható a nyitott (a,b) intervallumon és amelyre

$$Y''(x) = f(x, Y(x), Y'(x))$$
$$x \in (a, b)$$

$$Y(a) = A$$
$$Y(b) = B.$$

- A peremérték feladatnak nem mindig létezik megoldása, és annak unicitása sem garantált.

Példa

Tekintsük az alábbi peremérték feladatot.

$$y'' + y = 1$$

$$y(0) = 0$$

$$y(\pi) = 0$$

Megoldás

$$\begin{array}{ll} y'' + y = 1 & \text{A másodrendű differenciál-} \\ y(0) = 0 & \text{egyenlet általános megoldása:} \\ y(\pi) = 0 & Y(x) = C_1 \cos(x) + C_2 \sin(x) + 1 \end{array}$$

A peremfeltételekből adódó egyenletrendszer:

$$\begin{array}{l} C_1 + 1 = 0 \\ -C_1 + 1 = 0 \end{array}$$

Nincs megoldás.

Példa

Tekintsük az alábbi peremérték feladatot.

$$y'' + y = 0$$

$$y(0) = 0$$

$$y(\pi) = 0$$

Megoldás

$$\begin{array}{ll} y'' + y = 0 & \text{A másodrendű differenciál-} \\ y(0) = 0 & \text{egyenlet általános megoldása:} \\ y(\pi) = 0 & Y(x) = C_1 \cos(x) + C_2 \sin(x) \end{array}$$

A peremfeltételekből adódó egyenletrendszer:

$$\begin{array}{l} C_1 = 0 \\ -C_1 = 0 \end{array}$$

A peremérték feladat megoldása (C_2 **tetsz.**):

$$Y(x) = C_2 \sin(x)$$

Példa

Tekintsük az alábbi peremérték feladatot.

$$y'' + y = \gamma$$

$$y(0) = A$$

$$y\left(\frac{\pi}{2}\right) = B$$

Megoldás

$$y'' + y = \gamma$$

$$y(0) = A$$

$$y\left(\frac{\pi}{2}\right) = B$$

A másodrendű differenciálegyenlet általános megoldása:

$$Y(x) = C_1 \cos(x) + C_2 \sin(x) + \gamma$$

A peremfeltételekből adódó egyenletrendszer:

$$C_1 + \gamma = A$$

$$C_2 + \gamma = B$$

Egyértelmű a megoldás.

Másod- és harmadfajú peremérték feltételek

- Másodfajú peremérték feltétel

$$y'(a) = A$$

$$y'(b) = B$$

- Harmadfajú peremérték feltétel

$$\alpha y(a) + \beta y'(a) = A$$

$$\gamma y(b) + \delta y'(b) = B$$

ahol

$$\alpha^2 + \gamma^2 \neq 0$$

$$\beta^2 + \delta^2 \neq 0.$$

Nemlineáris peremérték feladat

Definíció. Nemlineáris peremérték feladat
elsőrendű differenciálegyenlet rendszerre:

$$y' = f(x, y)$$

ahol

$$y \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad f(x, y) \stackrel{\text{def}}{=} \begin{bmatrix} f_1(x, y) \\ f_2(x, y) \\ \vdots \\ f_n(x, y) \end{bmatrix} \text{ (folyt.)}$$

Nemlineáris peremérték feladat

$$\begin{array}{ll} g_1(y_1(a), y_2(a), \dots, y_n(a)) = 0 & g_{r+1}(y_1(b), y_2(b), \dots, y_n(b)) = 0 \\ \vdots & \vdots \\ g_r(y_1(a), y_2(a), \dots, y_n(a)) = 0 & g_n(y_1(b), y_2(b), \dots, y_n(b)) = 0 \end{array}$$

ahol $f_1(x, y), f_2(x, y), \dots, f_n(x, y)$ adott $(n+1)$ változós függvények, $g_1(y), \dots, g_n(y)$ adott n változós függvények, $a < b$ és $1 \leq r < n$ adott számok.

Meghatározandók az alábbi függvények:

$$y_1 = y_1(x), y_2 = y_2(x), \dots, y_n = y_n(x).$$

Lineáris peremérték feladat

Definíció. Lineáris peremérték feladat
elsőrendű lineáris differenciálegyenlet
rendszerre:

$$y' = A(x)y + f(x)$$

$$Cy(a) = c$$

$$Dy(b) = d$$

ahol

$$y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix} \quad f(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \vdots \\ f_n(x) \end{bmatrix} \quad c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_n \end{bmatrix} \quad d = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_n \end{bmatrix}$$

adott vektorok, (folyt.)

Lineáris peremérték feladat

$$A(x) = \begin{bmatrix} a_{11}(x) & a_{12}(x) & \cdots & a_{1n}(x) \\ a_{21}(x) & a_{22}(x) & \cdots & a_{2n}(x) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1}(x) & a_{n2}(x) & \cdots & a_{nn}(x) \end{bmatrix} \quad C = \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdots & c_{1n} \\ c_{21} & c_{22} & \cdots & c_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ c_{r1} & c_{r2} & \cdots & c_{rn} \end{bmatrix}$$

$$D = \begin{bmatrix} d_{11} & d_{12} & \cdots & d_{1n} \\ d_{21} & d_{22} & \cdots & d_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ d_{n-r,1} & d_{n-r,2} & \cdots & d_{n-r,n} \end{bmatrix} \quad \begin{array}{l} \text{adott mátrixok, } \text{rang}(C)=r, \\ \text{rang}(D)=n-r, \text{ a} < \text{b}, 1 \leq r < n \end{array}$$

Meghatározandók az alábbi függvények:

$$y_1 = y_1(x), y_2 = y_2(x), \dots, y_n = y_n(x).$$

Elsőfajú peremérték feladat másodrendű lineáris differenciálegyenletre

A továbbiakban az alábbi speciális feladattal foglalkozunk:

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x)$$

$$y(a) = A$$

$$y(b) = B$$

ahol $p(x), q(x), r(x)$ adott függvények és $a < b$
 A, B adott számok.

Visszavezetés KÉP-re

- Az előbbi peremérték feladat megoldását (amennyiben megoldható) elvileg **vissza-vezethetjük** két KÉP megoldására.

Tekintsük az alábbi KÉP-t:

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x)$$

$$y(a) = A$$

$$y'(a) = 0 \text{ (például)}$$

Legyen ennek megoldása: $Y_1(x)$.

Visszavezetés KÉP-re

Tekintsük az

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = 0$$

társított homogén differenciálegyenlethez az alábbi KÉP-t:

$$y(a) = 0$$

$$y'(a) = 1 \text{ (például)}$$

Legyen ennek megoldása $Y_2(x)$.

Visszavezetés KÉP-re

A peremérték feladat megoldását az alábbi alakban keressük:

$$Y(x) = Y_1(x) + \alpha Y_2(x).$$

Az $Y(x)$ kielégíti a másodrendű lineáris differenciálegyenletet, az $y(a) = A$ peremfeltétel teljesül, a $y(b) = B$ peremfeltétel pedig akkor teljesül, ha

$$\alpha = \frac{B - Y_1(b)}{Y_2(b)}.$$

A véges differenciák módszere

A véges differenciák módszere

A módszer lényege: a differenciálhányadosokat **véges differenciákkal** közelítjük.

Tekintsük az $[a,b]$ intervallum ekvidisztáns beosztását:

$$x_k = a + kh \qquad h = \frac{b - a}{n + 1}$$

$$(k = 0, 1, \dots, n + 1)$$

A véges differenciák módszere

Tegyük fel, hogy az

$$y'' + p(x)y' + q(x)y = r(x)$$

$$y(a) = A$$

$$y(b) = B$$

peremérték feladat egyértelműen megoldható és az $Y(x)$ megoldás elegendően sokszor differenciálható az (a,b) intervallumon.

A véges differenciák módszere

Az x_k pont körüli Taylor formula szerint

$$Y_{k+1} \stackrel{\text{def}}{=} Y(x_k + h) = Y_k + hY'_k + \frac{h^2}{2}Y''_k + \frac{h^3}{6}Y^{(3)}(\xi_{k1})$$

$$Y_{k-1} \stackrel{\text{def}}{=} Y(x_k - h) = Y_k - hY'_k + \frac{h^2}{2}Y''_k - \frac{h^3}{6}Y^{(3)}(\xi_{k2})$$

ahol

$$Y_k \stackrel{\text{def}}{=} Y(x_k), \quad Y'_k \stackrel{\text{def}}{=} Y'(x_k), \quad Y''_k \stackrel{\text{def}}{=} Y''(x_k)$$

$$\xi_{k1} \in (x_k, x_{k+1}) \quad \text{és} \quad \xi_{k2} \in (x_{k-1}, x_k).$$

A véges differenciák módszere

Az előbbiek alapján

$$Y_{k+1} - Y_{k-1} = 2hY'_k + \frac{h^3}{6} \left(Y^{(3)}(\xi_{k1}) + Y^{(3)}(\xi_{k2}) \right)$$

$$Y'_k = \frac{Y_{k+1} - Y_{k-1}}{2h} - \frac{h^2}{6} Y^{(3)}(\xi_k)$$

ahol $\xi_k \in (x_{k-1}, x_{k+1})$.

$$Y'_k \approx \frac{Y_{k+1} - Y_{k-1}}{2h} \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

A véges differenciák módszere

Ha pontosabb formulákból indulunk ki

$$Y_{k+1} = Y_k + hY'_k + \frac{h^2}{2}Y''_k + \frac{h^3}{6}Y_k^{(3)} + \frac{h^4}{24}Y^{(4)}(\xi_{k1})$$

$$Y_{k-1} = Y_k - hY'_k + \frac{h^2}{2}Y''_k - \frac{h^3}{6}Y_k^{(3)} + \frac{h^4}{24}Y^{(4)}(\xi_{k2})$$

akkor levezethető, hogy

$$Y''_k = \frac{Y_{k+1} - 2Y_k + Y_{k-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12}Y^{(4)}(\xi_k)$$

ahol $\xi_k \in (x_{k-1}, x_{k+1})$.

Véges differenciák módszere

- Az előbbi összefüggések alapján tehát

$$Y'_k \approx \frac{Y_{k+1} - Y_{k-1}}{2h} \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

$$Y''_k \approx \frac{Y_{k+1} - 2Y_k + Y_{k-1}}{h^2} \quad (k = 1, 2, \dots, n)$$

Véges differenciák módszere

Lássuk, hogyan oldhatjuk meg a tekintett peremérték feladatot közelítőleg a **véges differenciák módszerével**.

Mivel $Y(x)$ kielégíti a differenciálegyenletet az (a,b) intervallum minden pontjában, így

$$Y_k'' + p_k Y_k' + q_k Y_k = r_k$$

ahol

$$p_k \stackrel{\text{def}}{=} p(x_k), \quad q_k \stackrel{\text{def}}{=} q(x_k), \quad r_k \stackrel{\text{def}}{=} r(x_k).$$

Véges differenciák módszere

Alkalmazva a korábban levezetett képleteket:

$$r_k = \frac{Y_{k+1} - 2Y_k + Y_{k-1}}{h^2} - \frac{h^2}{12} Y^{(4)}(\xi_{k1}) + \\ + p_k \frac{Y_{k+1} - Y_{k-1}}{2h} - p_k \frac{h^2}{6} Y^{(3)}(\xi_{k2}) + q_k Y_k$$

ahol

$$\xi_1, \xi_2 \in (x_{k-1}, x_{k+1}).$$

Véges differenciák módszere

Az előbbiek alapján, így $(k = 1, 2, \dots, n)$

$$\begin{aligned} & -\left(1 - \frac{h}{2} p_k\right) Y_{k-1} + (2 - h^2 q_k) Y_k - \left(1 + \frac{h}{2} p_k\right) Y_{k+1} = \\ & = -h^2 r_k - \frac{h^4}{12} Y^{(4)}(\xi_{k1}) - p_k \frac{h^4}{6} Y^{(3)}(\xi_{k2}). \end{aligned}$$

Hagyjuk el a jobb oldal két utolsó tagját, így a közelítő megoldás értékeire lineáris egyenleteket kapunk.

Véges differenciák módszere

A kapott lineáris egyenletek: $(k = 1, 2, \dots, n)$

$$-\left(1 - \frac{h}{2} p_k\right) y_{k-1} + (2 - h^2 q_k) y_k - \left(1 + \frac{h}{2} p_k\right) y_{k+1} = -h^2 r_k.$$

Ha ehhez hozzávesszük az

$$y_0 = A, \quad y_{n+1} = B$$

peremfeltételeket, akkor egy $n \times n$ -es lineáris egyenletrendszert kapunk.

Véges differenciák módszere

- Megmutatható, hogy az előbbi lineáris egyenletrendszer **egyértelműen** megoldható. (Együtthatómátrixa olyan tridiagonális mátrix, amely gyengén diagonálisan domináns és irreducibilis is, feltéve, hogy $q(x) \leq 0$ és a h lépésköz elég kicsi.)

A célzás módszere

Célzás módszere

- A kapott lineáris egyenletrendszer megoldására használhatjuk az ún. **célzás módszerét** (shooting method).
- A célzás módszere annak az eljárásnak a megfelelője a differenciaegyenlet rendszerre, amellyel a peremérték feladatot visszavezettük a KÉP-re.

Célzás módszere

Először az

$$y_0^1 \stackrel{\text{def}}{=} A, y_1^1 \stackrel{\text{def}}{=} 0$$

$$-\left(1 - \frac{h}{2} p_k\right) y_{k-1}^1 + (2 - h^2 q_k) y_k^1 - \left(1 + \frac{h}{2} p_k\right) y_{k+1}^1 = -h^2 r_k.$$

rekurzióval meghatározzuk az

$$y_2^1, y_3^1, \dots, y_{n+1}^1$$

értékeket.

Célzás módszere

Másodszor az

$$y_0^2 \stackrel{\text{def}}{=} 0, y_1^2 \stackrel{\text{def}}{=} 1$$

$$-\left(1 - \frac{h}{2} p_k\right) y_{k-1}^2 + (2 - h^2 q_k) y_k^2 - \left(1 + \frac{h}{2} p_k\right) y_{k+1}^2 = 0$$

rekurzióval meghatározzuk az

$$y_2^2, y_3^2, \dots, y_{n+1}^2$$

értékeket.

Célzás módszere

A lineáris egyenletrendszer megoldását

$$y_k \stackrel{def}{=} y_k^1 + \alpha y_k^2$$

alakban keressük, ahol α -t abból a feltételből határozzuk meg, hogy a jobboldali peremfeltételnek is teljesülnie kell, vagyis $k=n+1$ esetén

$$y_{n+1}^1 + \alpha y_{n+1}^2 = B.$$

Gyakorló feladatok

Gyakorló feladatok

- Közelítse az alábbi peremérték-probléma megoldását a $[0,1]$ intervallumon a véges differenciák módszerével.

$$-y''(x) + \frac{1}{2}(y(x) + x + 1)^3 = 0$$

$$y(0) = 0$$

$$y(1) = 0$$

Gyakorló feladatok

- Oldja meg közelítőleg az alábbi peremérték-problémát a véges differenciák módszerével az

$$x_0 = 0, \quad x_k = x_0 + kh, \quad x_n = \frac{\pi}{2}, \quad h = \frac{\pi}{2n}$$

beosztás segítségével.

$$y''(x) - y(x) = 0$$

$$y(0) = 1$$

$$y\left(\frac{\pi}{2}\right) = 1$$

Gyakorló feladatok

- Bizonyítsa be, hogy az alábbi peremérték-problémának bármely $\alpha \neq 0$ -ra tetszőleges (α, β) esetén végtelen sok megoldása van.

$$y'' = y^3$$

$$y(0) = 0$$

$$y(\alpha) = \beta$$

Irodalomjegyzék

- John H. Mathews, *Numerical Methods for Mathematics, Science, and Engineering*, Second Edition, Prentice Hall, Englewood Cliffs, 1992.
- Mihálykó Csaba – Virágh János, *Közelítő és szimbolikus számítások. Feladatgyűjtemény*, Typotex, 2011.
- Móricz Ferenc, *Differenciálegyenletek numerikus módszerei*, Polygon, Szeged, 1998.