7. előadás

Lineáris algebra numerikus módszerei

Folytonos eset

Legyen $f \in C[a,b]$és $h(x) = a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + \ldots + a_n\phi_n(x)$. Ekkor tehát az

$$\begin{aligned} F(a_1, \ldots, a_n) &= \left\| f - \sum_{i=1}^{n} a_i\phi_i \right\|_2^2 = \\ &= \int_a^b \left(f(x) - \sum_{j=1}^{n} a_j\phi_j(x) \right)^2 dx \to \min \end{aligned}$$

$(w(x) \equiv 1)$ szélsőérték-feladatot kell megoldani. Említettük, hogy a feladatnak lineárisan független alapfüggvények esetén egyértelmű megoldása van.

$$\frac{\partial F\left(a_1,\ldots,a_n\right)}{\partial a_i}=0 \quad (i=1,\ldots,n)$$

egyenletrendszer megoldására redukálódik a feladat. A parciális deriválás során használjuk ki, hogy itt a deriválás és integrálás sorrendje felcserélhető és vezessük be itt is a skalárszorzatot az

$$\langle u,v\rangle=\int_a^b u(x)v(x)dx, \qquad u,v\in C\left[a,b\right]$$

értelmezéssel. Ekkor formailag ugyanahhoz az egyenletrendszerhez jutunk, mint a diszkrét esetben. (Természetesen, választhatunk valamilyen $w(x)>0$ ($x\in[a,b]$) súlyfüggvényt itt is; most $w\left(x\right)\equiv 1$).

A Gram-mátrix ugyanúgy rosszul kondicionált lehet, mint a diszkrét esetben.

Példa

Legyen $a = 0,\ b = 1,\ w(x) \equiv 1$és $\phi_i(x) = x^{i-1}\ (i = 1, \ldots, n)$.

Határozzuk meg a Gram-mátrixot.

Megoldás:
$\phi_i(x)\,\phi_j(x) = x^{i+j-2}$, $g_{ij} = \int_0^1 x^{i+j-2}dx = 1/(i+j-1)$ és

$$G = \left[\frac{1}{i+j-1}\right]_{i,j=1}^{n},$$

ami nem más mint az ún. Hilbert-mátrix.

Ortogonális, ortonormált eset

Ha a $\langle \phi_i, \phi_j \rangle$ skalárszorzat zérust ad minden $i \neq j$ esetén, akkor itt is ortogonális függvényrendszerről beszélünk az adott $[a, b]$ intervallumon. Ha még $\langle \phi_i, \phi_i \rangle = 1$ is teljesül a szóbanforgó i indexekre, akkor ortonormált rendszer a neve. Ilyen bázisra való áttérésre folytonos esetben is van lehetőség. Például a $C[-1, 1]$, $w(x) \equiv 1$ esetén a

$$\sqrt{\frac{1}{2}} P_0, \sqrt{\frac{2n+1}{2}} P_n(x) \quad (n = 1, 2, \dots)$$

ortonormált függvényrendszer, ahol

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} \left(x^2 - 1\right)^n$$

az ún. n-edik Legendre-polinom.

Az első néhány Legendre-polinom:

$$P_0(x) = 1,\ P_1(x) = x,\ P_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2},\ P_3(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x.$$

Ha rendelkezésünkre áll egy ortonormált $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{n}$ függvényrendszer, akkor a legkisebb négyzetes approximáció meghatározásához (elvileg) csak az $a_i = \langle f, \phi_i \rangle \quad (i = 1, \ldots, n)$ ún. Fourier-együtthatókat kell kiszámolnunk.

Példa

Az $f(x) = \sqrt{x}$ függvénynek adjuk meg az egyenessel való legkisebb négyzetes közelítését az $[1,4]$ intervallumon.

Megoldás: $\phi_1(x) \equiv 1, \phi_2(x) = x$ és
$f(x) \approx h(x) = a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) = a_1 + a_2(x)$. A $[\langle\phi_j, \phi_i\rangle]_{i,j=1}^2$ együtthatómátrixot és az $[\langle f, \phi_1\rangle, \langle f, \phi_2\rangle]^T$ jobboldalt itt is kiszámolva a

$$\begin{array}{rcrcr} 3a_1 & + & 7.5a_2 & = & 4.6667 \\ 7.5a_2 & + & 30a_2 & = & 21 \end{array}$$

egyenletrendszerhez jutunk. Ezt megoldva a $\sqrt{x} \approx 0.7407 + 0.3259x$ egyenes egyenletét kapjuk.

Példa

Itt is áttérhetnénk ortonormált rendszerre. Nem nehéz belátni, hogy a $\phi_1^*(x) \equiv \frac{1}{\sqrt{3}}$ és a $\phi_2^*(x) = \frac{2}{3}(x - 2.5)$ függvények ortonormált rendszert alkotnak az $[a, b] = [1, 4]$ intervallumon. Az

$$f(x) \approx h^*(x) = a_1^* \phi_1^*(x) + a_2^* \phi_2^*(x)$$

közelítést használva a normál egyenletrendszer együtthatómátrixa az egységmátrix és az eredmény természetesen ugyanaz az egyenes, mint amit az előbb már megkaptunk.

Megjegyzés

Az $f \in C\,[a, b]$ függvények körében az L_2-norma mellett többféle norma is fontos szerepet játszik a gyakorlatban. Ezek közül az egyik a Csebisev-norma. A Csebisev-norma értelmezése

$$\|f\|_C = \max_{x \in [a,b]} |f(x)|\,,$$

a Csebisev-féle approximációs feladat pedig adott f függvény és H függvényhalmaz esetén: $h \in H$ és

$$\|f - h\|_C = \max_{x \in [a,b]} |f\,(x) - h(x)| \to \min$$

Megjegyzés folytatása

A feladat megoldását az f legjobb egyenletes approximációjának nevezzük (természetesen az adott intervallumon és az adott H mellett). Az elnevezést az indokolja, hogy a $\max_{x\in[a,b]} |f(x) - h(x)|$ egyben az elkövetett hibának egy, az $[a, b]$-n x-től független – tehát egyenletes – korlátja.
A lineáris Csebisev-approximációra nem ismeretes olyan általános megoldási módszer, mint az L_2-normában való közelítésre.

Az interpoláció alapfeladatát a következőképpen fogalmazhatjuk meg.

Definíció

Ismerjük egy $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ függvény

$$a \leq x_1 < x_2 < \ldots < x_n \leq b$$

pontokban felvett értékeit, azaz az $y = f(x)$

$$y_i = f(x_i) \quad (i = 1, \ldots, n)$$

függvényértékeket. Az $f(x)$ függvényt, amely lehet a teljes $[a, b]$ intervallumon vagy csak $\{x_i\}_{i=1}^{n}$ pontokban ismert, egy olyan, általában könnyen számítható $h(x)$ függvénnyel közelítjük (vagy helyettesítjük), amelyre fennáll, hogy

$$y_i = h(x_i) \quad (i = 1, \ldots, n).$$

Definíció

Az $\{x_i\}_{i=1}^n$ pontokat **interpolációs alappontoknak**, a feltételt **interpolációs feltételnek** vagy **interpolációs alap-egyenletrendszernek** nevezzük.
Az interpolációs feltétel teljesülése esetén azt reméljük, hogy a

$$h(x) = h\left(x; \{x_i\}_{i=1}^n, \{y_i\}_{i=1}^n\right)$$

interpoláló függvény az (x_i, x_{i+1}) intervallumokban jól közelíti az $f(x)$ függvényt.

Ezen a feltételen kívül további feltétel(eke)t is előírhatunk. Például, ha ismerjük az f függvény deriváltjait is az alappontokban, akkor megkövetelhetjük az

$$f'(x_i) = h'(x_i) \quad (i = 1, \ldots, n)$$

teljesülését is. A szóba jöhető $h(x)$ függvények H halmazának megválasztásától és a feltétel esetleges kibővítésétől függően beszélünk különböző típusú interpolációkról.

Definíció

Ha a $h(x)$ függvénnyel $f(x)$-et az (x_1, x_n) intervallumon kívül közelítjük, akkor **extrapolációról** beszélünk.

Lineáris eset

Ekkor tehát a H függvényhalmaz ismert $\phi_i : [a, b] \to \mathbb{R}$ $(i = 1, \ldots, n)$ függvények valamennyi lineáris kombinációja, tehát a $h(x)$ függvény alakja

$$h(x) = a_1\phi_1(x) + a_2\phi_2(x) + \ldots + a_n\phi_n(x) = \sum_{i=1}^{n} a_i\phi_i(x).$$

A ϕ_i függvényeket **alapfüggvényeknek**, másképpen **bázisfüggvényeknek** nevezzük. Az ismeretlen $a_1, \ldots, a_n$ együtthatókat az interpolációs feltételből határozhatjuk meg. Tehát az alábbi egyenleteknek kell teljesülni:

$$\begin{array}{rcl} a_1\phi_1(x_1) + a_2\phi_2(x_1) + \ldots + a_n\phi_n(x_1) & = & f(x_1), \\ \ldots & \vdots & \ldots \\ a_1\phi_1(x_n) + a_2\phi_2(x_n) + \ldots + a_n\phi_n(x_n) & = & f(x_n). \end{array}$$

Ez egy lineáris egyenletrendszer az ismeretlen $a_1, \ldots, a_n$ együtthatókra nézve. Tömörebb felírása érdekében vezessük be a következő jelöléseket:

$$B = [\phi_j(x_i)]_{i,j=1}^n, a = [a_1, \ldots, a_n]^T, \text{ és } c = [f(x_1), \ldots, f(x_n)]^T.$$

A feltétel alakja így

$$Ba = c.$$

Ha $\det(B) \neq 0$, akkor az egyenletrendszernek pontosan egy megoldása van: $a = B^{-1}c$.

A gyakorlatban sokféle $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^{n}$ bázisfüggvényt alkalmaznak. Az egyik legfontosabb a

$$\phi_1(x) = 1, \phi_2(x) = x, \ldots, \phi_n(x) = x^{n-1}$$

függvényrendszer. Ekkor beszélünk **Lagrange-féle interpolációról**.

Az interpolációs feladat mátrixa ez esetben

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

az ún. Vandermonde-féle mátrix, amely a

$$\det(B) = \prod_{1 \le i < j \le n} (x_j - x_i)$$

összefüggés miatt nemszinguláris. Tehát a Lagrange-féle interpolációs feladatnak egyértelmű megoldása van.

További fontos esetek

- A trigonometrikus interpolációt a

$$\begin{aligned}\phi_1(x) &= 1,\\ \phi_2(x) &= \sin x,\ \phi_3(x) = \cos x, \ldots,\\ \phi_{2k}(x) &= \sin(kx), \phi_{2k+1}(x) = \cos(kx)\end{aligned}$$

$(k = 1, \ldots, (n-1)/2)$ függvényrendszer, ahol $n = 2k + 1$, $[a, b] = [-\pi, \pi]$.

- Az exponenciális interpolációt a

$$\phi_i(x) = e^{\lambda_i x} \quad (i = 1, \ldots, n, \lambda_1 < \lambda_2 < \ldots < \lambda_n)$$

függvényrendszer definiálja.

További fontos esetek

- Racionális törtfüggvényeket használ a

$$\phi_i(x) = 1/(q_i + x) \quad (i = 1, \ldots, n,\ 0 < q_1 < \ldots < q_n)$$

függvényrendszer. Itt fel kell tennünk, hogy $x + q_1 > 0$. Ez könnyen teljesül, ha $x \in [a, b]$ és $a + q_1 > 0$.

Megjegyzés

Nem minden $\{\phi_i(x)\}_{i=1}^n$ függvényrendszer és $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$ alappontok esetén van megoldása, illetve egyértelmű megoldása a lineáris interpolációs feladatnak.

Példa

Legyen $\phi_1(x) = 1$, $\phi_2(x) = x^2$, $x_1 = -1$, $x_2 = 1$, $f(x_1) = y_1$, $f(x_2) = y_2$.
Ekkor

$$B = \begin{bmatrix} 1 & (-1)^2 \\ 1 & 1 \end{bmatrix}, \quad \det(B) = 0,$$

így, ha $y_1 = y_2$, akkor végtelen sok megoldása van a feladatnak, egyébként pedig egyáltalán nincs.

Definíció

Legyenek a bázisfüggvények:

$$\phi_1(x) = 1, \phi_2(x) = x, \ldots, \phi_n(x) = x^{n-1}$$

és legyenek adottak az $x_1 < x_2 < \ldots < x_n$ alappontok és az $y_i = f(x_i)$ $(i = 1, \ldots, n)$ függvényértékek. Határozzuk meg azt a legfeljebb $(n-1)$-ed fokú

$$p(x) = a_0 + a_1 x + \ldots + a_{n-1} x^{n-1}$$

polinomot, amelyre teljesül a

$$y_i = p(x_i) \quad (i = 1, \ldots, n)$$

interpolációs feltétel.

Geometriailag azt jelenti, hogy illesszünk a sík n darab különböző x koordinátájú pontjára egy legfeljebb $(n-1)$-ed fokú polinomot.

A Lagrange-féle interpolációs polinom létezését és egyértelműségét már beláttuk. A polinom többféle ekvivalens alakban is felírható. Különösen fontos azonban a Lagrange-féle előállítás. Legyen

$$l_i(x) = \prod_{k=1, k\neq i}^{n} \frac{x - x_k}{x_i - x_k} \quad (i = 1, \ldots, n)$$

az i-edik **Lagrange-féle alappolinom**. Ekkor az interpolációs polinom előáll

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i l_i(x)$$

alakban.

Ennek igazolására vegyük észre, hogy

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

és így teljesül, hogy:

$$p(x_j) = \sum_{i=1}^{n} y_i l_i(x_j) = y_j l_j(x_j) = y_j \quad (j = 1, \dots, n).$$

Tehát

$$f(x) \approx h(x) = p(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i l_i(x).$$

A Lagrange-alappolinommal való előállítás lehetőséget ad a megoldás egyértelmű létezésének közvetlen belátására is, anélkül, hogy a mátrix determinánsát ismernénk. A létezést konkrétan mutatja az előző felírás, ha pedig volna egy másik $q(x)$ legfeljebb $(n-1)$-ed fokú polinom is, mely teljesíti a feltételeket, akkor a $p(x)-q(x)$ polinomnak minden alappont zérushelye lenne. Mivel $p(x)-q(x)$ is legfeljebb $(n-1)$-ed fokú polinom, nem lehet n darab zérushelye, csak ha $p(x) \equiv q(x)$.

A Lagrange-féle interpolációs polinom hibájára vonatkozik a következő tétel:

Tétel

Ha $f \in C^n[a,b]$, $[x_1, x_n] \subseteq [a,b]$ és $x^* \in [a,b]$, akkor

$$f(x^*) - p(x^*) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x^* - x_1)(x^* - x_2)\dots(x^* - x_n),$$

ahol $\xi = \xi(x^*)$ az x^* és az x_1, x_n pontok által kifeszített intervallumban van.

Bizonyítás

Ha van olyan i, hogy $x^* = x_i$,akkor állításunk triviális. Egyébként legyen

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)\dots(x - x_n)$$

és tekintsük a következő segédfüggvényt:

$$W(x) = f(x) - p(x) - [f(x^*) - p(x^*)]\frac{\omega(x)}{\omega(x^*)}.$$

A $W(x) \in C^n[a, b]$ függvénynek van $n + 1$ zérushelye: $x^*, x_1, \dots, x_n$.

Bizonyítás

A Rolle–tétel miatt $W(x)$ bármely két zérushelye között a $W'(x)$ deriváltfüggvénynek is van zérushelye. Ezért $W'(x)$-nek legalább n zérushelye van. Hasonlóképpen okoskodva belátható, hogy $W''(x)$-nek legalább $n-1$, $W^{(3)}(x)$-nek legalább $n-2$ zérushelye van, és így tovább. Végül $W^{(n)}(x)$-nek is van legalább egy zérushelye, amit jelöljön ξ. Minthogy $p^{(n)}(x) \equiv 0$ és $\omega^{(n)}(x) \equiv n!$, ezért

$$W^{(n)}(\xi) = f^{(n)}(\xi) - [f(x^*) - p(x^*)]\frac{n!}{\omega(x^*)} = 0,$$

ahonnan átrendezéssel kapjuk a tétel állítását.

A tételt a következő formában szoktuk alkalmazni, az $x \in [a, b]$-beli hiba becslésére.

Tétel

Legyen M_n az n-edik derivált abszolútértékének egy felső korlátja, azaz

$$\left|f^{(n)}(x)\right| \le M_n \qquad (x \in [a, b]).$$

Ekkor

$$|f(x) - p(x)| \le \frac{M_n}{n!} \left|(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)\right| \le \frac{M_n}{n!}(b - a)^n.$$

Megjegyzés

A második egyenlőtlenség általában sokkal durvább becslést ad, mint az első. Előnye, hogy x-től független, egyenletes korlátot ad a hibára a teljes $[a, b]$-n.

Példa

Hány ekvidisztáns alappontban kell megadnunk a $\sin x$ függvény táblázatát a $\left[0, \frac{\pi}{2}\right]$ intervallumon ahhoz, hogy a közbülső pontokban lineáris Lagrange-interpolációt használva az elkövetett hiba legfeljebb $\varepsilon = 10^{-4}$ legyen?

Megoldás. Vezessük be a $h = x_{i+1} - x_i$ jelölést. A

$$|f(x) - p(x)| \leq \frac{M_n}{n!} |(x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n)| \leq \frac{M_n}{n!}(b - a)^n.$$

alapján olyan h-t keresünk, melyre $(M_2 h^2)/2 \leq 10^{-4}$. Mivel $(\sin x)'' = -\sin x$, választhatjuk az $M_2 = 1$ értéket. Ezzel $h \leq \sqrt{2}/100$, $n \geq \frac{\pi}{2h}$ miatt $n \geq 112$ adódik.

Példa

Ha viszont a hibakorlátot az

$$|f(x) - p(x)| \leq \frac{M_2}{2} \max |(x - x_i)(x - x_{i+1})|$$

becslésből közvetlenül vezetjük le szélsőérték számítással, akkor az élesebb,

$$|f(x) - p(x)| \leq \frac{M_2 h^2}{8}$$

eredményt kapjuk. Ez alapján kiderül, hogy $n = 28$ pont is elég.

Az interpolációs eljárásoktól elvárjuk, hogy a pontok számának növelése esetén a közelítés hibája csökken. Ez azonban nem minden esetben van így, amint azt Runge kimutatta az $f(x) = 1/(1+x^2)$ függvénynek az $[a, b] = [-5, 5]$ intervallumon, egyre növekvő fokszámú Lagrage interpolációs polinommal való közelítésével.

Példa: Tegyük fel, hogy az $y_i = f(x_i)$ függvény értékeket ε_i hibával ismerjük $(i = 1, \ldots, n)$. Ekkor az elméleti

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x)$$

Lagrange-interpolációs polinom helyett a perturbált

$$\tilde{p}(x) = \sum_{i=1}^{n} (f(x_i) + \varepsilon_i) l_i(x)$$

polinommal számolunk.

A kettő eltérésére teljesül, hogy

$$\begin{aligned}\delta\left(p\left(x\right)\right) &= \left|\tilde{p}(x)-p(x)\right| = \left|\sum_{i=1}^{n}\varepsilon_i l_i(x)\right| \leq \\ &\leq \sum_{i=1}^{n}\left|\varepsilon_i\right|\left|l_i(x)\right| \leq \left(\max_{1\leq i\leq n}\left|\varepsilon_i\right|\right)\sum_{i=1}^{n}\left|l_i(x)\right|.\end{aligned}$$

Ez a becslés pontos. Igazolható, hogy

$$\sum_{i=1}^{n}\left|l_i(x)\right| > \frac{2}{\pi}\log n + c,$$

ahol c konstans. Ha n elég nagy, akkor a $\delta\left(p\left(x\right)\right)$ perturbációs hiba is nagy lesz.
A divergencia és numerikus instabilitás miatt sok esetben – mint már említettük – más típusú interpolációs eljárásokat használunk.

Példa

Közelítsük másodfokú függvénnyel az $f(x) = \cos(\frac{\pi}{2}x)$ függvényt a $[-1, 1]$ intervallumon az $x_1 = -1, x_2 = 0, x_3 = 1$ pontokra támaszkodva.

Megoldás:

Ekkor $f(x) \approx p(x) = A_1 + A_2 x + A_3 x^2$. Az együtthatókra felírható az

$$\begin{aligned} A_1 - A_2 + A_3 &= 0 \\ A_1 &= 1 \\ A_1 + A_2 + A_3 &= 0 \end{aligned}$$

egyenletrendszer. Innen $p(x) = 1 - x^2$.

Példa

Természetesen ugyanezt kapjuk az $l_i(x)$ Lagrange-függvényekkel is. Az előállítás szerint most $f(x_1) = f(x_3) = 0$ miatt elég az $l_2(x)$-t meghatározni, ez $1 - x^2$, ami jelen esetben a $p(x)$ polinommal megegyezik.

A közelítés hibáját

$$h \le \frac{M_3}{3!} \max_{-1 \le x \le 1} |(x+1)x(x-1)|$$

becsli, ahol M_3 az $|f'''(x)|$ maximuma, jelen esetben $\pi^3/8$. Szélsőérték-számítással adódik, hogy

$$\max_{-1 \le x \le 1} |(x+1)x(x-1)| = \frac{8}{27},$$

azaz $h \le \pi^3/216 \simeq 0.15$.