1. előadás

Numerikus analízis

Alapfeladat

A numerikus deriválás alapfeladata az analitikusan ismeretlen vagy nehezen számolható, esetleg csak diszkrét pontokban ismert $f : D(\subseteq \mathbb{R}) \to \mathbb{R}$ függvény deriváltjának kiszámítása egy vagy több adott pontban.

Numerikus deriválás

A numerikus deriválást akkor alkalmazzák, ha az $a < x_0 < x_1 < \ldots < x_n < b$ alappontokban adottak az $y = f(x)$ függvény értékei

$$y_k = f_k = f(x_k), \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

Ekvidisztáns alappontok esetén:

$$x_k = x_0 + k \cdot h, \qquad k = 0, 1, 2, \ldots, n.$$

A numerikus deriválást úgy lehet végrehajtani, hogy az adott függvényt interpolációs polinommal közelítjük:

$$f(x) = p(x) + R(x), \qquad \text{azaz } f(x) \approx p(x)$$

és az $f(x)$ függvény deriváltját a $p(x)$ polinom deriváltjával közelítjük.

$$f^{(k)}(x) = p^{(k)}(x) + R^{(k)}(x), \; \text{azaz } f^{(k)}(x) \approx p^{(k)}(x)$$

Ha a maradék-tag deriváltjainak értéke $\left|R^{(k)}(x)\right| < \varepsilon$, akkor az $f(x)$ függvény deriváltjai az interpolációs polinom alapján kiszámíthatóak:

$$f'(x) \approx p'(x), \ldots, f^{(n)}(x) \approx p^{(n)}(x)$$

Derivált közelítése differencia hányadosokkal

Ha $f \in C^2[a,b]$ akkor megszerkeszthetjük a másodfokú Taylor-polinomot:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + h^2 f''(\xi)/2, \text{ ahol } \xi \in [x, x+h].$$

Innen

$$f(x+h) - f(x) = h \cdot f'(x) + h^2 f''(\xi)/2,$$

amiből adódik, hogy

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

A képlet hibájának nagyságrendje $O(h)$.

Derivált közelítése differencia hányadosokkal

A derivált definíciója:

$$f'(x) = \lim_{x_0 \to x} \frac{f(x_0) - f(x)}{x_0 - x}.$$

Legyen $x_0 = x + h$. Ekkor $x_0 - x = h$, és $x \to x_0$ miatt $h \to 0$.
Így az előző definíció

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

alakban írható.
Ha $f \in C^3[a,b]$ akkor a harmadfokú Taylor-polinom segítségével pontosabb közelítést kaphatunk.

Derivált közelítése differencia hányadosokkal

$$f(x+h) = f(x)+hf'(x)+h^2 f''(x)/2+h^3 f'''(\xi_1)/6, \text{ ahol } \xi_1 \in [x, x+h].$$

Hasonlóan:

$$f(x-h) = f(x)-hf'(x)+h^2 f''(x)/2-h^3 f'''(\xi_2)/6, \text{ ahol } \xi_2 \in [x-h, x].$$

Ha az első képletből kivonjuk a másodikat, akkor a következőt kapjuk:

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + h^3/6[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)],$$

amelyből adódik, hogy

$$f(x+h)-f(x-h) = 2hf'(x)-h^3 f'''(\xi_3)/3, \text{ ahol } \xi_3 \in [x-h, x+h].$$

Innen kapjuk, hogy

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Ebben az esetben a hiba $O(h^2)$.
A második derivált leggyakrabban alkalmazott képletei:

$$f''(x) \approx \frac{f(x) - 2f(x+h) + f(x+2h)}{h^2}$$
$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

A második képletet a centrális differencia formulának nevezzük.
A képletek hibájának nagyságrendje $O(h^2)$.

Lagrange interpoláció alkalmazása

Amennyiben $f(x)$-et az alappontokon átmenő

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

Lagrange-féle interpolációs polinommal közelítjük, akkor az $f(x)$ függény x-pontbeli j-edik deriváltjának közelítését az

$$f^{(j)}(x) \approx p^{(j)}(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i \cdot l_i^{(j)}(x) \tag{1}$$

összefüggés adja meg.

Lagrange interpoláció alkalmazása

Hibakorlátot is adhatunk amennyiben f elég sokszor folytonosan differenciálható $[a, b]$-n.

$$\left|f^{(j)}(x) - p^{(j)}(x)\right| \leq \sum_{i=0}^{j} \frac{j!}{(j-i)!(n+i)!} \max_{x\in[a,b]} \left|f^{(n+i)}(x)\right| \left|\omega^{(j-i)}(x)\right|, \tag{2}$$

ahol $x, x_1, x_n \in [a, b]$ és $\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2)\ldots(x - x_n)$.

Példa Lagrange interpoláció alkalmazására:

Az első derivált közelítő értéke $n = 2$ és $x_1 = x$, $x_2 = x + h$ esetén

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

Ennek a hibája $O(h)$ nagyságrendű, ha $f \in C^2[a, b]$.
Ha pedig $n = 3$ és $x_1 = x - h$, $x_2 = x$, $x_3 = x + h$, akkor

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

Ezen közelítés hibájának nagyságrendje $O\left(h^2\right)$, ha $f \in C^3[a, b]$.

Lagrange interpoláció alkalmazása

Az

$$f'(x) \approx \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}.$$

képlet segítségével másodrendű derivált is származtatható, mégpedig szintén $O\left(h^2\right)$ hibával:

$$f''(x) \approx \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2}$$

Newton-féle interpolációs képletek alkalmazása

$$N_n(x) = f_0 + \frac{x - x_0}{h}\Delta y_0 + \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2!h^2}\Delta^2 y_0 + \ldots + \frac{(x - x_0)\ldots(x - x_n)}{n!h^n}\Delta^n y_0.$$

Ekvidisztáns pontok esetén, bevezetve a $t = \frac{x - x_0}{h}$ jelölést kapjuk, hogy $x - x_n = (t - n)h$ és

$$N_n(x) = f_0 + t\Delta y_0 + \frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 y_0 + \ldots + \frac{t(t-1)\ldots(t-(n-1))}{n!}\Delta^n y_0.$$

Az x_0, x_1, x_2, x_3, x_4 alappontok alapján az első Newton-féle interpolációs polinom differenciálásával a következő képletet kapjuk:

$$f'(x) \approx [(\Delta y_0) + (2t-1)(\Delta^2 y_0)/2 + (3t^2 - 6t + 2)(\Delta^3 y_0)/6 + (2t^3 - 9t^2 + 11t - 3)(\Delta^4 y_0)/12]/h$$

Newton-féle interpolációs képletek alkalmazása

Mivel az x_0 kezdőpontot tetszőlegesen lehet kiválasztani, ezért feltehetjük, hogy az x_0 az a pont, amelyben a derivált értékét akarjuk kiszámítani.
Figyelembe vesszük, hogy ebben a pontban $t = 0$, akkor az első Newton-féle interpolációs polinom alapján:

$$f'(x_0) \approx [(\Delta y_0) - (\Delta^2 y_0)/2 + (\Delta^3 y_0)/3 - (\Delta^4 y_0)/4 \\ + \ldots + (-1)^{n-1}(\Delta^n y_0)/n]/h$$

Ezeket a képleteket átalakíthatjuk úgy, hogy a differenciák helyett a képletek csak függvény értékeit tartalmazzák:

Newton-féle interpolációs képletek alkalmazása

$$f'(x_0) \approx [(\Delta y_0) - (\Delta^2 y_0)/2]/h = (-3y_0 + 4y_1 - y_2)/2h.$$

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\approx [(\Delta y_0) - (\Delta^2 y_0)/2 + (\Delta^3 y_0)/3]/h \\ &= (-11y_0 + 18y_1 - 9y_2 + 2y_3)/6h. \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} f'(x_0) &\approx [(\Delta y_0) - (\Delta^2 y_0)/2 + (\Delta^3 y_0)/3 - (\Delta^4 y_0)/4]/h \\ &= (-25y_0 + 48y_1 - 36y_2 + 16y_3 - 3y_4)/12h. \end{aligned}$$

A második derivált közelítésére a Newton-féle interpolációs polinom segítségével a következő képletet kapjuk:

$$f''(x_0) \approx [(\Delta^2 y_0) - (\Delta^3 y_0) + (\Delta^4 y_0) \cdot 11/12 - (\Delta^5 y_0) \cdot 5/6 + \ldots]/h^2$$

Példa a Newton-féle interpolációs képletek alkalmazására

Számítsuk ki az $y = \mathrm{sh}(2x)$ függvény $y'(x)$ és $y''(x)$ deriváltjait az $x = 0$ pontban:

x	y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$
0,00	0,00000	0,10017	0,00100	0,00101	0,00003
0,05	0,10017	0,10117	0,00201	0,00104	0,00003
0,10	0,20134	0,10318	0,00305	0,00107	
0,15	0,30452	0,10623	0,00412		
0,20	0,41075	0,11035			
0,25	0,52110				

$$y'(0) \approx [(\Delta y_0) - (\Delta^2 y_0)/2 + (\Delta^3 y_0)/3 - (\Delta^4 y_0)/4]/h$$
$$= 20 \cdot (0.10017 - 0.00050 + 0.00034 - 0.00001) = 2.0000.$$
$$y''(0) \approx [(\Delta^2 y_0) - (\Delta^3 y_0) + (\Delta^4 y_0) \cdot 11/12]/h^2$$
$$= 400 \cdot (0.00100 - 0.00101 + 0.00003) = 0.008$$

Az $y = \mathrm{sh}(2x)$ függvény analitikus differenciálásával kapjuk, hogy $y'(x) = 2\,\mathrm{ch}(2x)$ és $y''(x) = 4\,\mathrm{sh}(2x)$. Így a pontos derivált értékek: $y'(0) = 2$ és $y''(0) = 0$.

Spline interpoláció alkalmazása

Spline közelítést is használhatunk deriváltak numerikus közelítésére. Elsőrendű deriváltak előnyösen közelíthetők a harmadfokú természetes Spline-nal.
A képlet levezetése könnyű, hiszen szakaszonként egy-egy harmadfokú polinomot kell deriválni.) A közelítés hibájára $f \in C^2[a,b]$ esetén fennáll, hogy

$$\left|f'(x) - S'(x)\right| \leq K_1 \left(\max_{1 \leq i \leq n-1} h_i\right),$$

ahol $K_1 > 0$ konstans. A közelítés hibája tehát a legnagyobb részintervallum hosszával arányos. A Spline közelítéseknek van egy simító jellege is, amely mérsékeli a kerekítési, ill. adathibák negatív hatását. A Spline használata akkor előnyös, ha a derivált sok pontban szükséges.