Chapter 1

H.F.1. Numerikus diffferencialas es integralas hibabecslese

1.1 Software

Nehany online szoftver: Octave, (SAGE, WolframAlpha).
Octave: bevezetes, 1-30. oldalak, reszletes leiras.

1.2 Numerikus differencialas

$$f'(x^*) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x^* + \Delta x) - f(x^*)}{\Delta x},$$
$$error(\Delta x) = \left| \frac{f(x^* + \Delta x) - f(x^*)}{\Delta x} - f'(x^*) \right| = \left| \frac{f(x^* + \Delta x) - (f(x^*) + f'(x^*)\Delta x)}{\Delta x} \right|.$$

Gyakran elofordul, hogy

$$error(\Delta x) \approx c|\Delta x|^\alpha, \qquad \lim_{\Delta x \to 0} \frac{error(\Delta x)}{|\Delta x|^\alpha} = c. \tag{1.1}$$

Problema: Keresd meg (numerikusan, kozelitoleg) α-t es c-t!
Mintapelda: Legyen

$$f(x) = \tan(x), \quad x^* = 0.$$

Mennyi α es c ?

Megoldas: Itt persze tudjuk, hogy $f'(x) = 1/\cos^2(x)$, $f'(0) = 1$. Ha

$$error(\Delta x) = c|\Delta x|^\alpha$$

pontosan teljesulne, akkor

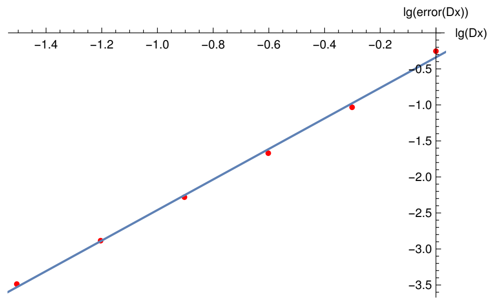
$$\log(error(\Delta x) = \log(c|\Delta x|^\alpha) = \log(c) + \alpha \log(|\Delta x|)$$

allna fenn. Tehat mit kell tennunk:

- Szamold ki a $[\log(|\Delta x|), \log(error(\Delta x)]$ koordinatakat nehany kis Δx ertekre.
- Abrazold ezeket a pontokat, majd keresd meg a rajuk legjobban illeszkedo egyenest! Ennek a meredeksege lesz α kozelitese.

Mindez esetunkben:

n	$\Delta x = 2^{-n}$	$error(\Delta x)$	$\lg(\|\Delta x\|)$	$\lg(error(\Delta x))$
0.	1.	0.557408	0.	-0.253827
1.	0.5	0.092605	-0.30103	-1.03337
2.	0.25	0.0213677	-0.60206	-1.67024
3.	0.125	0.00524109	-0.90309	-2.28058
4.	0.0625	0.00130412	-1.20412	-2.88468
5.	0.03125	0.000325648	-1.50515	-3.48725



A piros $[\log(|\Delta x|), \log(error(\Delta x)]$ pontokra legjobban illeszkedo egyenes

$$\lg(error(\Delta x)) = -0.339891 + 2.11952 \lg(|\Delta x|).$$

Vagyis a becslesunk α es c-re:

$$\alpha = 2.11952, \qquad \lg(c) = -0.339891, \quad c = 10^{-0.339891} = 0.457203.$$

Megjegyzes:

- Mivel
$$\tan(x) = x + \frac{1}{3}x^3 + \frac{2}{15}x^5 + \ldots$$
$x = 0$ korul, igy a pontos ertekek
$$c = \frac{1}{3}, \qquad \alpha = 2,$$
ahol $\alpha = 2 = 3 - 1$.
- Ez az eredmeny kisse atipikus, $x = 0$ inflexios pontja a $tan(x)$ fuggvenynek, igy nincs benne x^2 tag,
- Mivel a hiba aszimptotikus viselkedese a $\Delta x \to 0$ esetre vonatkozik, pontosabb eredmenyt kaptunk volna, ha sokkal kisebb Δx ertekek sorozatara szamoltuk volna ki a hibakat. Pl. hasznalhattuk volna az $n = 10 \ldots 15$ ertekeket.
- Az egyenes illesztesenel egyforma sullyal vettuk figyelembe a piros pontokat, de a kisebb Δx ertekekhez tartozo pontok relevansabbak.
- Ha a $\Delta x_n = 1/2^n$ sorozat helyett mas sorozatot valasztottunk volna, elvileg egeszen mas eredmenyt is kaphattunk volna. (Bar ez ebben a feladatban nem fordulna elo.)
- Eleg ritka, hogy egy numerikus modszer hibajanak az aszimptotikus viselkedese ilyen egyszeru. Altalaban az $error(\Delta x) \approx c|\Delta x|^\alpha$ tipusu becslesek helyett inkabb $error(\Delta x) \leq c|\Delta x|^\alpha$ egyenlotlensegek, vagyis felso korlatok fordulnak elo. Ekkor az "egyenes illesztes" sokkal komplikaltabb.
- Ebben a feladatban tudtuk az egzakt eredmenyt: $tan'(0) = 1$, ehhez kepest szamoltuk a hibat. Ezen tudas hianyaban kisse primitiv, de egyszeru modszer, ha $\tan'(0)$ ertekenek a legkisebb Δx eseten kapott differenciahanyadost hasznaljuk:
$$\Delta x = 2^{-5}, \quad \tan'(0) \approx \frac{\tan(0 + \Delta x) - \tan(0)}{\Delta x} = 1.00033.$$

Octave kod:

```
clear
# ez egy megjegyzes, comment
jmin = 0;
jmax = 5;
for j = jmin : jmax
  i = j - jmin + 1;
  n(i) = j;
  dx(i) = 2.0^(-j);
  error(i) = ...    #folytatas a kov. sorban, cont.next line
   abs( (tan(0.0+dx(i))-tan(0.0))/(dx(i)) - 1/(cos(0.0))^2 );
  lgDx(i) = log10(dx(i));
  lgErrorDx(i) = log10(error(i));
end;

pf = polyfit( lgDx, lgErrorDx, 1 )
display("alpha, c:")
display ([pf(1), 10^pf(2)])

for i = 1 : jmax -jmin + 1
  linepoints(i) = pf(1) * lgDx(i) + pf(2);
end;

graphics_toolkit ("gnuplot")
plot( lgDx,linepoints,  lgDx,lgErrorDx,"o" );
```

Feladatok:

1. Vegezd el ugyanezt az analizist a kovetkezo fuggvenyek eseteben:

$$\tan(x),\ x^* = 1, \qquad \ln(x),\ x^* = 3, \qquad \lg(x),\ x^* = 10, \qquad \sqrt[3]{|x|^4},\ x^* = 0,$$
$$\sqrt[4]{|x|^3},\ x^* = 0, \qquad x^2 \ln(|x|),\ x^* = 0.$$

   Az utolso ket eset kisse trukkosebb, mint az elso negy.

2. Ismeteld meg az elozo feladat elso harom esetet, ha $\Delta x_n = 2^{-n}$, de $n = 0 \dots 15$ vagy $n = 10 \dots 15$.

3. Ismeteld meg az elso feladat elso harom esetet, ha $\Delta x_n = 1/(n^3 + 1)$ es $n = 0 \dots 5$.

4. Ismeteld meg az elso feladat elso harom esetet, ha $\Delta x_n = 2^{-n}$ es $n = 0 \dots 5$, de most tegy ugy, mintha nem ismerned $f'(x^*)$ egzakt erteket.

5. Szamold ki $\tan'(0) = 1$ numerikus kozeliteset, ha $\Delta x_n = 2^{-n}$, de $n = 10 \dots 64$. Milyen n-re lesz az a legpontosabb a kozelites? Hol bukhat meg az az elv, hogy "minel kisebb Δx, annal jobb" ?

6. Ismeteld meg a mintapeldat ugy, hogy a derivaltnak a kovetkezo kozeliteset hasznaljuk:

$$f'(x^*) = \lim_{\Delta x \to 0} \frac{f(x^* + \Delta x) - f(x^* - \Delta x)}{2\Delta x}.$$

1.3 Euler modszer

1.3.1 Numerikus integralas

Problema: Legyen

$$y'(t) = f(t), \quad y(0) = 0.$$

Mennyi $y(1)$?

Megoldas:

$$y(1) = 0 + \int_0^1 f(s)\, ds.$$

A tovabbi feladatokban alkalmazzuk az Euler modszert $y(1)$ kiszamitasara, ami esetunkben egy primitiv numerikus integralasi eljaras:

$$y_0 = 0,\ y_{i+1} = y_i + f(i \cdot \Delta x)\, \Delta x, \quad \Delta x = 1/N,\ y_N \approx y(1)$$

$$y(1) = \int_0^1 f(s)\, ds \approx y_N = \sum_{i=0}^{N-1} f(i \cdot \Delta x)\, \Delta x, \quad \Delta x = 1/N.$$

A tovabbiakban annak az allitasnak szeretnenk ertelmet adni, hogy az eljaras hibaja $O(\Delta x^\alpha)$, $\alpha = 1$, vagyis letezik olyan c, hogy ha $|\Delta x|$ elegendoen kicsi, akkor

$$error(\Delta x^\alpha) = |y_N - y(1)| \le c|\Delta x|^\alpha.$$

(Lasd Nagy O jeloles.) Ezekben a feladatokban a hiba aszimptotikus viselkedese komplikaltabb mint (1.1), ezert beerjuk azzal, hogy lerajzoljuk a $[\log(|\Delta x|), \log(error(\Delta x)]$ pontokat, majd szabad szemmel keresunk valami esszeru becslest c, α-ra.

Numerikus integrálás. Euler módszer

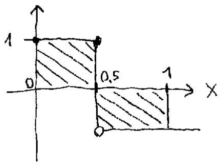
Mintapélda:

$$f(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x \le 1/2 \\ -1, & \text{ha } x > 1/2 \end{cases}$$

Mennyi $\int_0^1 f(x)\,dx$? Mennyi ennek a numerikus approximációja?

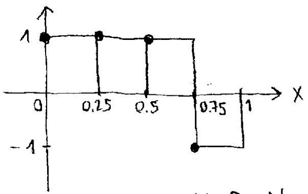
Megoldás:

$$\int_0^1 f(x)\,dx = 0$$



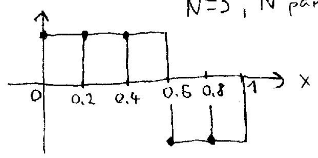
Numerikus approximáció:

$N=4$, N páros



$$\int_0^1 f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{4-1} f\left(i\cdot\frac{1}{4}\right)\cdot\frac{1}{4} = \left(1+1+1+(-1)\right)\cdot\frac{1}{4} = 2\cdot\frac{1}{4}$$

$N=5$, N páratlan



$$\int_0^1 f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{5-1} f\left(i\cdot\frac{1}{5}\right)\cdot\frac{1}{5} = \left(1+1+1+(-1)+(-1)\right)\cdot\frac{1}{5} = \frac{1}{5}$$

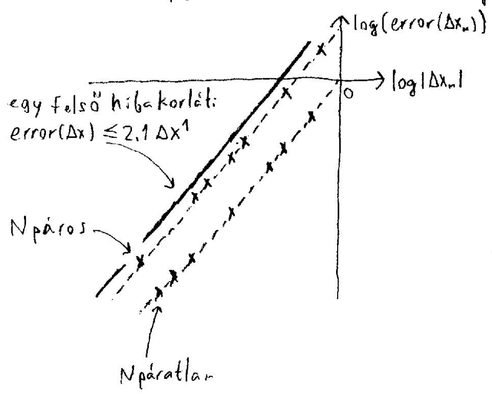
Tehát a hiba: $error(\Delta x) = error(1/N) = \begin{cases} 2\cdot\Delta x, & \text{ha } N \text{ páros} \\ 1\cdot\Delta x, & \text{ha } N \text{ páratlan} \end{cases}$

A hiba aszimptotikus viselkedése:

$$error(\Delta x) \le 2\cdot\Delta x^1 = c\cdot\Delta x^\alpha$$

Általában persze nincs egzakt képlet $error(\Delta x)$-re, viszont számítógéppel kiszámíthatjuk néhány $\Delta x_n = \frac{1}{N_n}$ értékre.

Ha elkészítjük a $\log|\Delta x_n| \leftrightarrow \log error(\Delta x_n)$ grafikont, vajon le lehet-e olvasni a grafikonról c és α értékeit?

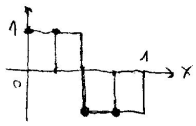


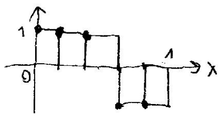
Esetünkben NEM a pontokra "legjobban" illeszkedő egyenest keressük, hanem egy olyan egyenest, ami fölé nem kerülhet adatpont. Ezt általában nem lehet egyenes illesztéssel direkt módon megkeresni.

Mintapélda variáns:

Legyen $f(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x < 1/2 \\ -1, & \text{ha } x \geq 1/2 \end{cases}$. Ismételd meg a mintapélda lépéseit, és rajzold le a $\log|\Delta x_n| \longleftrightarrow \log(error(\Delta x_n))$ grafikont!

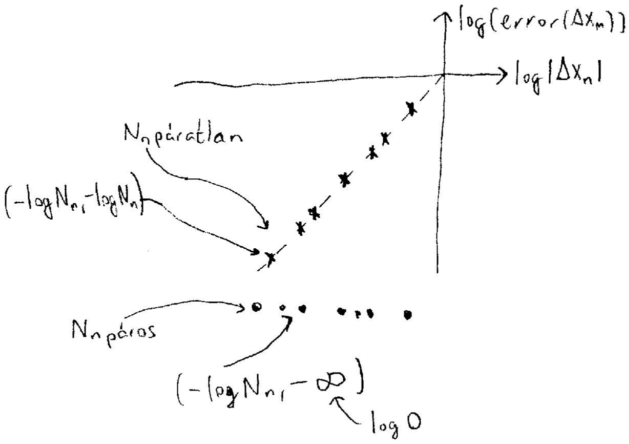
Megoldás: N = 4 N = 5





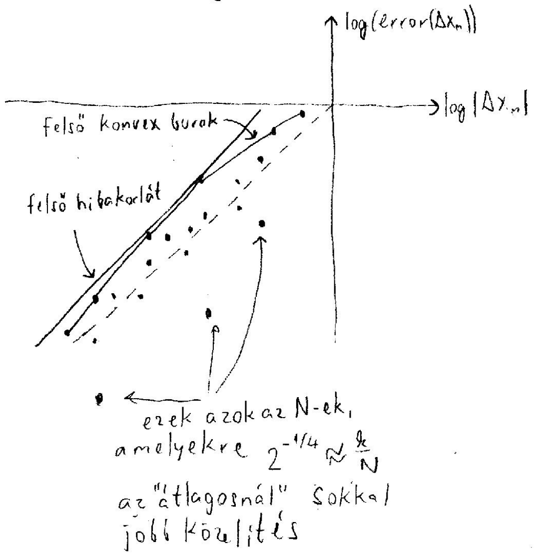
$error(1/4) = 0$ $error(1/5) = 1/5$

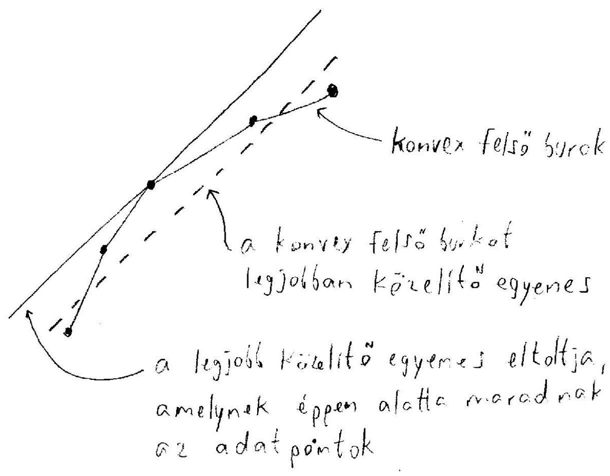
$$error(\Delta x) = error(1/N) = \begin{cases} 0, & \text{ha } N \text{ páros} \\ 1/N, & \text{ha } N \text{ páratlan} \end{cases}$$



Itt az also $(\log(1/N_n), \log 0) = (-\log N_n, -\infty)$ végtelenben levő pontok csak szimbolikusan vannak ábrázolva, mindenesetre az "egyenes illesztés"-nek nem igazán lenne értelme ebben az esetben.

Tipikusan a $\log \Delta x \longleftrightarrow \log error$ grafikon olyasmi lesz, mint amit pl. az $f(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x \leq 1/\sqrt[4]{2} \\ 0, & \text{ha } x > 1/\sqrt[4]{2} \end{cases}$. Itt a hiba attól függene, hogy milyen jól lehet $2^{-1/4}$-et $\frac{k}{N}$ racionális számmal közelíteni.





Feladatok:

(1) $\int_0^1 f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} f(i\cdot\Delta x)\,\Delta x$, ahol $\Delta x = 1/N$.

Számold ki: $error(\Delta x) = \left| \int_0^1 f(x)\,dx - \sum_{i=0}^{N-1} f(i\cdot\Delta x)\cdot\Delta x \right|$ -t a következő függvényekre néhány N_n értékre:

(a) $f(x) = \begin{cases} 1, & \text{ha } x \leq 2^{-1/4} \\ 0, & \text{ha } x > 2^{-1/4} \end{cases}$, $N = n^2$, $n = 3, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10$

(b) $f(x) = \begin{cases} 0, & \text{ha } x \leq 2^{-1/4} \\ 2^{-1/4}, & \text{ha } x > 2^{-1/4} \end{cases}$

(c) $f(x) = \sin(\pi x^2)$.

Rajzold le a $\log|\Delta x| \leftrightarrow \log(error(\Delta x))$ ábrát!
Becsüld meg c, α-t!

(2) Ismételd meg az előző feladatot, ha a numerikus közelítése az integrálnak

$$\int_0^1 f(x)dx \approx \left(\frac{1}{2}f(0) + \frac{1}{2}f(1) + \sum_{i=1}^{N-1} f(i\cdot\Delta x)\right)\cdot\Delta x .$$

Miért hívják ez trapéz módszernek?

(3) Ismételd meg az első feladatot, ha

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} f\left(\left(i+\tfrac{1}{2}\right)\Delta x\right)\cdot\Delta x$$

Mi lenne ennek a módszernek egy ésszerű magyar neve?

1.3.2 Euler modszer

Mintapelda: Legyen

$$y(0) = 0, \quad y'(t) = f(t) = |t - 0.5| = \begin{cases} 0.5 - t, & \text{if } t \leq 0.5, \\ t - 0.5, & \text{if } t \geq 0.5. \end{cases}$$

Mennyi $y(1)$ numerikus kozelitese, ha $\Delta t = 1/11$? Mennyi $y(1)$ hibaja?

Megoldas: Octave kod:

```
clear;

function ydot = f (y,t)
  if (t>=0.5)
    ydot = t - 0.5;
  else
    ydot = -(t - 0.5);
  endif
endfunction

N = 11;
dt = 1/N;
t = 0;
y = 0;

intf01 = 0;
for i = 0 : N-1
  intf01 = intf01 + f(y,t) * dt;
  t = t + dt;
endfor
error = abs(intf01-1/4);

display(intf01)
display(error)
```

- Szkript nem kezdodhet *function*-nal! Itt ezt biztositja *clear*.
- Persze hasznalhattuk volna az *abs* fuggvenyt az $if\ldots$ helyett.
- Az egzakt 1/4 integralt konnyu kiszamolni, Octave tud numerikusan integralni, vagy megkerdezhetjuk WolframAlpha-t:

  ```
  integrate |t-0.5| from 0 to 1
  ```

"Feladat": Legyen

$$y'(t) = f(t, y(t)), \quad y(0) = y_0.$$

Mennyi $y(1)$ numerikus kozelitese? A numerikus megoldasnal hogyan fugg a hiba a lepeskoztol?

"Megoldas":

A tovabbi feladatokban alkalmazzuk az Euler modszert $y(1)$ kiszamitasara, ami esetunkben egy primitiv numerikus iteracios eljaras:

$$y_0 = y_0, \quad y_{i+1} = y_i + f(i \cdot \Delta x)\, \Delta x, \quad \Delta x = 1/N, \quad y_N \approx y(1)$$

Feladat 1: Oldd meg az elozo "Feladatot" a kovetkezo fuggvenyek eseteben, felteve, hogy $y(0) = 1$:

$$1. \quad f(t,y) = ty, \quad y(1) = \exp(1^2/2),$$
$$2. \quad f(t,y) = y - y^2, \quad y(1) = \frac{2e^{2\cdot 1}}{1 + e^{2\cdot 1}},$$
$$3. \quad f(t,y) = t - y, y(1) = 2e^{-1} + 1 - 1,$$
$$4. \quad f(t,y) = -y^2, y(1) = 1/(1+1).$$

Szamold ki a kozelito erdmenyt es annak a hibajat, ha

$$\Delta t = 1/10, \;\; 1/50, \;\; 1/100.$$

Feladatok 2: Oldd meg az elozo Feladatok 1.-et a Heun fele kozelitest hasznalva!
Feladatok 3: Oldd meg a Feladatok 1.-et a kovetkezo harmadrendu Rung-Kutta fele kozelitest hasznalva!

$$k_1 = f(t_n, y_n),$$

$$
\begin{aligned}
k_2 &= f(t_n + 1/2 \cdot \Delta t, y_n + 1/2 \cdot k_1 \Delta t),\\
k_3 &= f(t_n + 2/3 \cdot \Delta t, y_n + 2/3 \cdot k_2 \Delta t),\\
y_{n+1} &= y_n + (1/4 \cdot k_1 + 3/4 \cdot k_3)\Delta t.
\end{aligned}
$$

Feladatok 4: Feladatok 1.-ben $y(1)$ egzakt referencia erteke is meg volt adva. Milyen mertekben befolyasolna a $\Delta t = 1/10,\ \ 1/50$ esetekben mert hibat, ha a pontos ertek helyett a $\Delta t = 1/100$ esetben mert erteket hasznalnank?