

Záróvizsga tételek

3. Numerikus módszerek

Numerikus módszerek

Nemlineáris egyenletek iterációs módszerei: fixpont iterációk, Newton iteráció. Interpoláció: Lagrange- és Newton-féle alak. Legkisebb négyzetek módszere. Numerikus integrálás: interpolációs formulák, Newton-Cotes formulák, egyszerű és összetett formulák.

1 Nemlineáris egyenletek iterációs módszerei

Eddig egyenletrendszerekkel foglalkoztunk, melyekben minden egyenlet lineáris volt. Most módszereket fogunk keresni az $f(x) = 0$ típusú egyenletek megoldására, ahol $f \in \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$. A módszerek lényege az lesz, hogy valamilyen szempont szerint egy számsorozatot állítunk elő, melyek bizonyos feltételek mellett az egyenlet gyökéhez konvergálnak.

Bolzano-tétel: Legyen $f \in C[a, b]$ és $f(a)f(b) < 0$, azaz az f függvény az a és b pontokban nem 0, valamint ellenkező előjelű. Ekkor létezik (a, b) intervallumbeli gyöke az f -nek, azaz $\exists x^* \in (a, b) : f(x^*) = 0$.

A Bolzano-tétel következménye: Ha a Bolzano-tétel feltételei mellett még f szigorúan monoton is, akkor az x^* egyértelműen létezik (hiszen f invertálható).

Brouwer-féle fixponttétel: Legyen $f : [a, b] \rightarrow [a, b]$ és $f \in C[a, b]$. Ekkor $\exists x^* \in [a, b] : x^* = f(x^*)$.

Tétel: Legyen $f : [a, b] \rightarrow [a, b]$, $f \in C^1[a, b]$ és f' állandó előjelű. Ekkor $\exists! x^* \in [a, b] : x^* = f(x^*)$.

Fixponttétel [a,b]-re: Legyen $f : [a, b] \rightarrow [a, b]$ kontrakció a q kontrakciós együtthatóval. Ekkor:

1. $\exists! x^* \in [a, b] : x^* = f(x^*)$,
2. $\forall x_0 \in [a, b] : x_{k+1} = f(x_k)$ konvergens és $x^* = \lim_{k \rightarrow \infty} x_k$,
3. $|x_k - x^*| \leq q^k |x_0 - x^*| \leq q^k (b - a)$.

p-adrendű konvergencia: Az (x_k) konvergens sorozat ($\lim_{k \rightarrow \infty} x_k = x^*$) p -adrendben konvergens, ha

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{|x_{k+1} - x^*|}{|x_k - x^*|^p} = c > 0$$

Néhány megjegyzés a fenti definícióhoz:

1. p egyértelmű és $p \geq 1$
2. $p = 1$ esetén lineáris $p = 2$ esetén kvadratikusan, $1 < p < 2$ esetén szuperlineáris

3. A gyakorlatban az $|x_{k+1} - x^*| \leq M|x_k - x^*|^p$ alakot használják, azt jelenti, hogy legalább p -adrendben konvergens.

Tétel: Tegyük fel, hogy az (x_k) sorozat konvergens, $x_{k+1} = f(x_k)$ és $f'(x^*) = f''(x^*) = \dots = f^{(p-1)}(x^*) = 0$, de $f^{(p)}(x^*) \neq 0$. Ekkor az (x_k) p -adrendben konvergens.

1.0.1 Newton-módszer

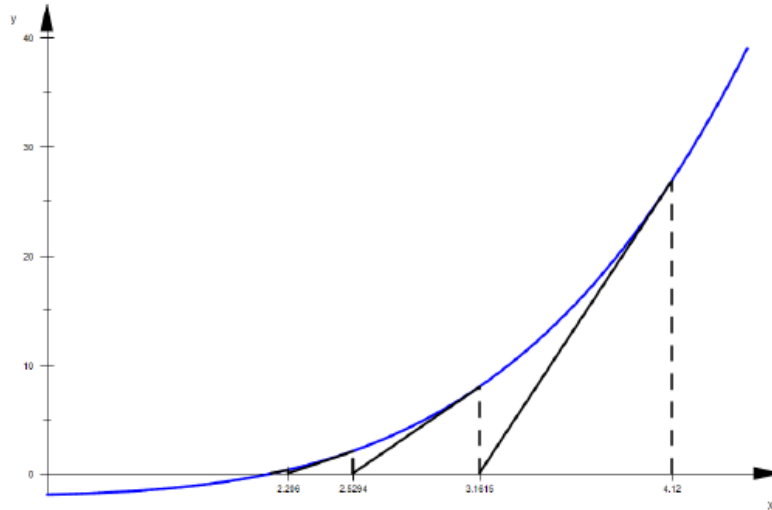


Figure 1: A Newton-módszer ötlete.

Az ábrán a legszélső, 4.12-es pontból indulunk, felvesszük a függvény ehhez a ponthoz tartozó érintőjét, majd ennek az érintőnek a gyöke lesz a következő pont, és így tovább. Általánosan, tekintsük az f függvény x_k ponthoz tartozó érintőjének egyenletét:

$$y - f(x_k) = f'(x_k)(x - x_k)$$

Mint mondtuk, az iteráció x_{k+1} . elemét az x_k -hoz tartozó érintő gyöke adja meg:

$$0 - f(x_k) = f'(x_k)(x_{k+1} - x_k) \Rightarrow -\frac{f(x_k)}{f'(x_k)} = x_{k+1} - x_k \Rightarrow x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

A fenti képlet a Newton-módszer képlete. Megjegyezhető, hogy a fenti módszer is $x_{k+1} = g(x_k)$ alakú (fixpont-iteráció).

Fontos megemlíteni, hogy $f'(x_k) = 0$ esetén nem értelmezhető a módszer. A gyakorlatban $f'(x_k) \approx 0$ is probléma. Ha x^* többszörös gyök, akkor $f'(x^*) = 0$, vagyis x^* közelében $f'(x_k)$ egyre jobban közelít 0-hoz, numerikusan instabil.

Monoton konvergencia tétele: Tegyük fel, hogy $f \in C^2[a, b]$ és

1. $\exists x^* \in [a, b] : f(x^*) = 0$, azaz van gyök
2. f' és f'' állandó előjelű
3. $x_0 \in [a, b]$ legyen olyan, hogy $f(x_0)f''(x_0) > 0$, azaz $f(x_0) \neq 0$, valamint $f(x_0)$ és $f''(x_0)$ azonos előjelűek

Ekkor az x_0 -ból indított Newton-módszer monoton konvergál x^* -hoz.

Lokális konvergencia tétele: Tegyük fel, hogy $f \in C^2[a, b]$ és

1. $\exists x^* \in [a, b] : f(x^*) = 0$, azaz van gyök
2. f' állandó előjelű

3. $0 < m_1 \leq |f'(x)| (x \in [a, b])$ alsó korlát
4. $f''(x) \leq M_2 (x \in [a, b])$ felső korlát, $M := \frac{M}{2m_1}$
5. $x_0 \in [a, b] : |x_0 - x^*| < r = \min \left\{ \frac{1}{M}, |x^* - a|, |x^* - b| \right\}$

Ekkor az x_0 -ból indított Newton-módszer másodrendben konvergens, hibabecslése:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq M|x_0 - x^*|^2$$

1.0.2 Húrmódszer

Továbbra is $f(x) = 0$ megoldása a cél egy adott $[a, b]$ intervallumon. Az eljárás lényege a következő. Kezdetben $x_0 := a, x_1 := b$, majd meghúzzuk ezen pontok által képzett egyenest. Legyen x_2 a húr gyöke. Ha $f(x_2) = 0$, akkor megtaláltuk a gyököt. Ha $f(x_2) \neq 0$, akkor folytatjuk a keresést az $[x_0, x_2]$ vagy $[x_2, x_1]$ intervallumban. Ha $f(x_0)f(x_2) < 0$, akkor $[x_0, x_2]$ intervallumban folytatjuk, ha $f(x_2)f(x_1) < 0$, akkor $[x_2, x_1]$ intervallumban. Stb.

Általánosan: Legyen $x_0 := a, x_1 := b$ és $f(a)f(b) < 0$. Az $(x_k, f(x_k))$ és $(x_s, f(x_s))$ pontokon átmenő egyenesekkel közelítjük a függvényt ahol x_s -re $f(x_s)f(x_k) < 0$ és s a legnagyobb ilyen index. x_{k+1} -et a következőképpen határozhatjuk meg:

$$x_{k+1} := x_k - \frac{f(x_k)}{\frac{f(x_k) - f(x_s)}{x_k - x_s}} = x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_s)}{f(x_k) - f(x_s)}$$

Tétel: Legyen $f \in C^2[a, b]$ és

1. $f(a)f(b) < 0$
2. $M = \frac{M_2}{2m_1}$, ahol $0 < m_1 \leq |f'(x)|$ és $f''(x) \leq M_2 (x \in (a, b))$
3. $M(b - a) < 1$

Ekkor a húrmódszer konvergens, hibabecslése pedig:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq \frac{1}{M}(M|x_0 - x^*|)^{k+1}$$

1.0.3 Szelőmódszer

A szelőmódszer lényege, hogy az $(x_k, f(x_k))$ és $(x_{k-1}, f(x_{k-1}))$ pontokon átmenő egyenessel közelítjük f -et, a kapott egyenes x tengellyel vett metszéspontja (x_{k+1}) lesz a következő pont. Ez tulajdonképpen a húrmódszer $s := k - 1$ -re.

$$x_{k+1} := x_k - \frac{f(x_k)(x_k - x_{k-1})}{f(x_k) - f(x_{k-1})}$$

Tétel: Ha teljesülnek a Newton-módszer lokális konvergencia tételének feltételei, akkor a szelőmódszer konvergens $p = \frac{1+\sqrt{5}}{2}$ rendben, és hibabecslése:

$$|x_{k+1} - x^*| \leq M|x_k - x^*||x_{k-1} - x^*|$$

1.0.4 Többváltozós Newton-módszer

Most $F(x) = 0$ megoldásait keressük, ahol $F \in \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$. Tekintsük a többváltozós Newton-módszert:

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} - [F'(x^{(k)})]^{-1}F(x^{(k)})$$

ahol

$$F(x) = \begin{bmatrix} f_1(x) \\ f_2(x) \\ \dots \\ f_n(x) \end{bmatrix}, F'(x) = \begin{bmatrix} \partial_1 f_1(x) & \partial_2 f_1(x) & \dots \\ \partial_1 f_2(x) & \partial_2 f_2(x) & \dots \\ \dots & \dots & \dots \end{bmatrix}$$

Ténylegesen az $F'(x^{(k)})(x^{(k+1)} - x^{(k)}) = -F(x^{(k)})$ egyenletrendszert oldjuk meg.

2 Interpoláció

A gyakorlatban sokszor felmerül olyan probléma, hogy egy többségében ismeretlen (csak néhány pontbeli érték ismert) vagy nagyon költségesen kiszámítható függvénnyel kellene egy megadott intervallumon dolgoznunk. Ekkor például azt tehetjük, hogy néhány pontban kiszámítjuk a függvény értékét, majd keresünk olyan egyszerűbben számítható függvényt, amelyik illeszkedik az adott pontokra. Ezután az intervallum bármely további pontjában az illesztett függvény értékeit használjuk, mint az eredeti függvény értékeinek a közelítéseit. Ilyen egyszerűbben kiszámolható függvények pl. a polinomok (polinom interpoláció).

Példa alkalmazásra: Animáció készítésénél nem szeretnénk minden egyes képkockát saját magunk elkészíteni, hanem csak bizonyos képkockákat, ún. kulcskockákat. A köztes képkockákon az egyes objektumok helyzetét szeretnénk a számítógéppel kiszámíttatni (például szeretnénk, hogy ha egy objektum egyenes vonalú, egyenletes mozgást végezne két adott pozíció között).

2.1 Polinom interpoláció

2.1.1 A polinom interpoláció feladata

Legyenek adva $n \in \mathbb{N}$ és az $x_k \in \mathbb{R}, k = 0, 1, \dots, n$ különböző számok, az ún. interpolációs alappontok, valamint az $f(x_k), k = 0, 1, \dots, n$ számok, az ismert függvényértékek. Keressük azt a legfeljebb n -edfokú p_n polinomot ($p_n \in P_n$), amelyre:

$$p_n(x_k) = f(x_k) \quad k = 0, 1, \dots, n$$

Azaz a keresett polinom az interpolációs alappontokban a megadott függvényértékeket veszi fel.

Tétel: A fenti interpolációs feladatnak egyértelműen létezik megoldása.

2.1.2 Lagrange-interpoláció

Az interpolációs polinom kiszámolására explicit képletet ad a Lagrange-interpoláció.

Lagrange-alappolinomok: Adott $n \in \mathbb{N}$ és $x_k \in \mathbb{R}, k = 0, 1, \dots, n$ különböző alappontokra a Lagrange-alappolinomokat a következőképpen definiáljuk:

$$l_k(x) = \frac{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x - x_j)}{\prod_{\substack{j=0 \\ j \neq k}}^n (x_k - x_j)}$$

$k = 0, 1, \dots, n$ esetén.

Az alappontok mind n -edfokú polinomok, és a következő tulajdonsággal rendelkeznek:

$$l_k(x_j) = \begin{cases} 1 & \text{ha } j = k \\ 0 & \text{ha } j \neq k \end{cases}$$

Tétel: Az interpolációs feladat megoldása az alábbi polinom, amelyet az interpolációs polinom Lagrange-alakjának hívunk:

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^n f(x_k) l_k(x)$$

A továbbiakban jelölje $[a, b]$ az x_0, x_1, \dots, x_n alappontok által kifeszített intervallumot.

A Lagrange-interpoláció hibája: Ha $f \in C^{n+1}[a, b]$, akkor $\forall x \in [a, b]$ esetén

$$|f(x) - L_n(x)| \leq \frac{M_{n+1}}{(n+1)!} |\omega_n(x)|$$

ahol $\omega_n(x) = \prod_{i=0}^n (x - x_i)$, valamint $M_k = \max_{[a,b]} |f^{(k)}(x)|$.

Egyenletes konvergencia: Legyen $f \in C^\infty[a, b]$ és legyen adva egy $[a, b]$ intervallumbeli alappontrendszer sorozata: $x_k^{(n)}$, $k = 0, 1, \dots, n$, $n = 0, 1, 2, \dots$. Legyen L_n az $x_0^{(n)}, \dots, x_n^{(n)}$ alappontrendszerre illesztett Lagrange-interpolációs polinom ($n = 0, 1, 2, \dots$). Ekkor ha $\exists M > 0$ úgy, hogy $M_n \leq M^n \forall n \in \mathbb{N}$, akkor az L_n sorozat egyenletesen konvergál az f függvényhez.

Marcinkiewicz tétele: Minden $f \in C[a, b]$ esetén létezik a fenti módon definiált alappontrendszer úgy, hogy $\|f - L_n\|_\infty \rightarrow 0$.

Faber tétele: Minden a fenti módon definiált alappontrendszer esetén van olyan $f \in C[a, b]$ függvény, hogy $\|f - L_n\|_\infty \not\rightarrow 0$.

Osztott differencia: Legyenek adva az $x_k \in [a, b]$, $k = 0, 1, \dots, n$ különböző alappontok. Az $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ függvénynek a megadott alappontrendszerre vonatkozó elsőrendű osztott differenciái

$$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{x_{i+1} - x_i}$$

a magasabb rendű osztott differenciákat rekurzívan definiáljuk. Tegyük fel, hogy a $k-1$ rendű osztott differenciák már definiálva lettek, akkor a k -adrendű osztott differenciák az alábbiak:

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_{i+k}] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$$

Látható, hogy a k -adrendű osztott differencia $k+1$ alappontra támaszkodik.

Ha adott egy interpoláció alappontrendszer függvényértékekkel, akkor a hozzá tartozó osztott differenciákat az alábbi táblázat szerint érdemes elrendezni, és ez az elrendezés egyúttal a kiszámolást is segíti.

x_0	$f(x_0)$					
x_1	$f(x_1)$	$f[x_0, x_1]$				
x_2	$f(x_2)$	$f[x_1, x_2]$				
\vdots	\vdots					
x_k	$f(x_k)$	$f[x_{k-1}, x_k]$	\dots	$f[x_0, x_1, \dots, x_k]$		
\vdots	\vdots					
x_{n-1}	$f(x_{n-1})$	$f[x_{n-2}, x_{n-1}]$	\dots	$f[x_{n-1-k}, x_{n-k}, \dots, x_{n-1}]$	\dots	$f[x_0, x_1, \dots, x_{n-1}]$
x_n	$f(x_n)$	$f[x_{n-1}, x_n]$	\dots	$f[x_{n-k}, x_{n-k+1}, \dots, x_n]$	\dots	$f[x_1, x_2, \dots, x_n]$ $f[x_0, x_1, \dots, x_n]$

Az interpolációs polinom Newton-alakja: Az interpolációs polinom az alábbi alakban felírható:

$$N_n(x) = f(x_0) + \sum_{k=1}^n f[x_0, x_1, \dots, x_k] \omega_{k-1}(x)$$

ahol $\omega_j(x) = (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_j)$. Ezt az alakot az interpolációs polinom Newton-alakjának hívjuk.

2.1.3 Hermite-interpoláció

Az előbbi interpolációs feladatot a következőképpen általánosíthatjuk. Legyenek adva az egyes alappontokban a függvényértékek mellett a függvény derivált értékei is valamely rendig bezárólag. Ekkor olyan polinomot keresünk, amelyik deriváltjaival együtt illeszkedik a megadott értékekre, vagyis:

Legyenek adva $n, m_0, m_1, \dots, m_n \in \mathbb{N}$ és az $x_j \in \mathbb{R}, j = 0, 1, \dots, n$ interpolációs alappontok, valamint az $f^{(k)}(x_j)$ $k = 0, 1, \dots, m_j - 1, j = 0, 1, \dots, n$ függvény- és derivált értékek. Legyen $m = \sum_{j=0}^n m_j$. Keressük azt a legfeljebb $(m-1)$ -edfokú p_{m-1} polinomot, melyre:

$$p_{m-1}^{(k)}(x_j) = f^{(k)}(x_j) \quad k = 0, 1, \dots, m_j - 1, \quad j = 0, 1, \dots, n$$

Megjegyzések:

1. Ha $m_j = 2, j = 0, 1, \dots, n$, akkor a feladatot Hermite-Fejér-féle interpolációnak nevezzük. Ekkor minden alappontban a függvény- és az első derivált érték adott. A keresett polinom pedig legfeljebb $(2n+1)$ -edfokú.
2. Ha $m_j = 1, j = 0, 1, \dots, n$, akkor a Lagrange-interpolációt kapjuk vissza.

Osztott differencia ismétlődő állapotokra: Ha x_k j -szer szerepel:

$$f[x_k, \dots, x_k] = \frac{f^{(j)}(x_k)}{j!}$$

Tétel: A Hermite-féle interpolációs polinom egyértelműen létezik.

A Hermite interpolációs polinom előállítás: Könnyen felírható a Newton-féle formában. Csak annyit kell tennünk, hogy kiindulunk az alappontok és a függvényértékek táblázatával és legyártjuk az osztott differenciák táblázatát. Az az egyetlen különbség most, hogy az x_j alappontot m_j -szer soroljuk fel.

Hermite-interpoláció hibája: Ha $f \in C^m[a, b]$, akkor $\forall x \in [a, b]$:

$$|f(x) - H_{m-1}(x)| \leq \frac{M_m}{m!} |\Omega_m(x)|$$

ahol $\Omega_m(x) = (x - x_0)^{m_0} (x - x_1)^{m_1} \dots (x - x_n)^{m_n}$

3 Legkisebb négyzetek módszere

Gyakorlati feladatok során adódik a következő probléma. Egy elsőfokú függvényt mérünk bizonyos pontokban, de a mérési hibák miatt ezek nem lesznek egye egyenesen. Ekkor olyan egyenest keresünk, amelyik az alábbi értelemben legjobban illeszkedik a megadott mérési ponthalmazra.

Legyenek adva az $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, m$ mérési pontok. Keressük azt a $p_1(x) = a + bx$ legfeljebb elsőfokú polinomot, amelyre a

$$\sum_{i=1}^m (y_i - p_1(x_i))^2 = \sum_{i=1}^m (y_i - a - bx_i)^2$$

kifejezés minimális. Ez azt jelenti, hogy azt az egyenes keressük, amelyre a függvényértékek hibáinak négyzetösszege minimális.

Az általános feladat az alábbi.

Adottak az $m, n \in \mathbb{N}$, ahol $m \gg n$ és $(x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, m$ mérési pontok, ahol az x_i alappontok különbözők. Keressük azt a $p_n(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$ legfeljebb n -edfokú polinomot, melyre a

$$\sum_{i=1}^m (y_i - p_n(x_i))^2$$

kifejezés minimális.

A feladat megoldásához tekintsük annak egy átfogalmazását.

Vegyük a $p_n(x_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, m$ egyenletrendszert. Ez a rendszer az ismeretlen a_i együtthatókra nézve lineáris, mégpedig túlhatározott, amelynek az A mátrixa egy téglalap alakú Vandermonde-mátrix $A \in \mathbb{R}^{m \times (n+1)}$, a $b \in \mathbb{R}^m$ jobb oldali vektora pedig a függvényértékekből adódik:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_1 & x_1^2 & \dots & x_1^n \\ 1 & x_2 & x_2^2 & \dots & x_2^n \\ 1 & x_3 & x_3^2 & \dots & x_3^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_m & x_m^2 & \dots & x_m^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_m \end{bmatrix}$$

Ezen jelölésekkel a minimalizálandó kifejezés $\|Az - b\|_2^2$, ahol $z = [a_0, a_1, \dots, a_n]^T$ a keresett együtthatók vektora. A feladat megoldását a Gauss-féle normálegyenletek adják:

$$A^T A z = A^T b$$

A fenti LER-t kell megoldani z -re.

n=1 eset: Ekkor a feladatot gyakran lineáris regresszióknak is hívjuk. Ebben az esetben

$$A^T A = \begin{bmatrix} m & \sum_{i=1}^m x_i \\ \sum_{i=1}^m x_i & \sum_{i=1}^m x_i^2 \end{bmatrix}, A^T b = \begin{bmatrix} \sum_{i=1}^m y_i \\ \sum_{i=1}^m x_i y_i \end{bmatrix}, z = \begin{bmatrix} b \\ a \end{bmatrix}$$

4 Numerikus integrálás

1. Határozatlan integrál

Határozatlan integrál alatt az

$$\int f(x) = F(x)dx$$

kifejezést értjük, ahol $F'(x) = f(x)$. Ez tehát nem más, mint a deriválás “megfordítása”. Itt $F(x)$ -et primitív függvénynek nevezzük. Természetesen ha létezik $f(x)$ integrálja, akkor végtelen sok létezik, ugyanis $F(x) + c$, $c \in \mathbb{R}$ is $f(x)$ integrálja lesz, hiszen a konstans deriváltja mindig nulla.

2. Határozott integrál

A határozott integrál célja az, hogy egy adott $f(x)$ függvénynek adott $[a, b]$ intervallumon szeretnénk a görbe alatti (előjeles) területét kiszámítani. Ezt Riemann integrállal is közelíthetjük, melynek lényege, hogy az $[a, b]$ intervallumon korlátos $f(x)$ függvényen az $[a, b]$ tartományt n részre osztjuk úgy, hogy:

$$a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b.$$

Legyen

$$m_j = \inf\{f(x) \mid x \in [x_{j-1}, x_j]\}, \text{ és}$$

$$M_j = \sup\{f(x) \mid x \in [x_{j-1}, x_j]\}.$$

Ilyenkor a

$$l_p = \sum_{j=1}^n m_j(x_j - x_{j-1})$$

képlet definiálja a Riemann-féle alsó közelítő összeget, a

$$u_p = \sum_{j=1}^n M_j(x_j - x_{j-1})$$

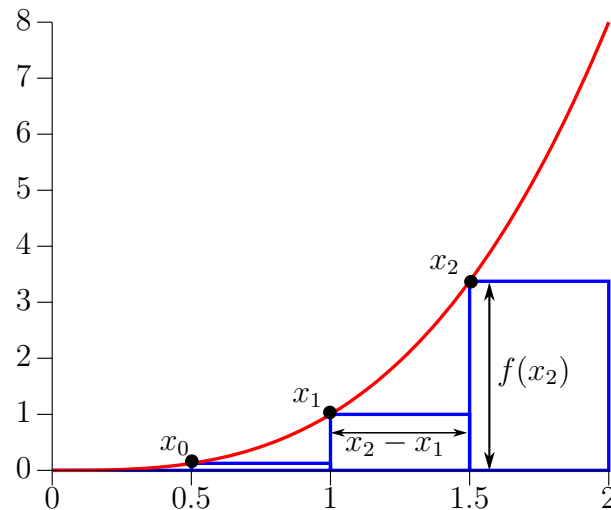
pedig a Riemann-féle felső közelítő összeget. Figyeljük meg, hogy ezek a közelítő összegek függvényt téglalapok segítségével közelíti, ahol a téglalap magassága m_j vagy M_j , a szélessége pedig $(x_j - x_{j-1})$ (és igen, előjelesen).

A Darboux-féle alsó integrál az l_p -k supremuma, azaz

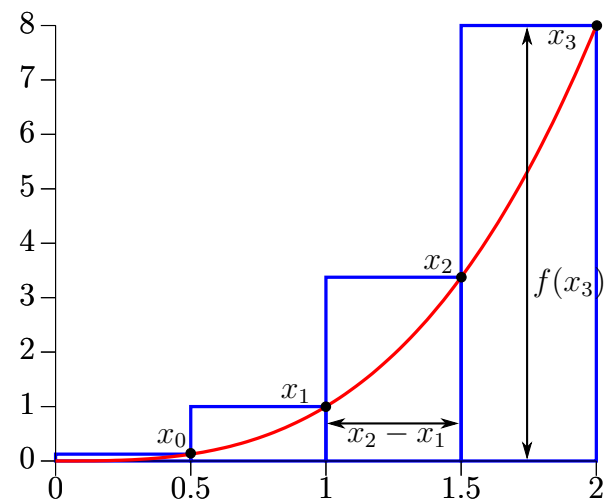
$$\underline{I} = \sup\{l_p \mid p \text{ partíció}\},$$

valamint a Darboux-féle felső integrál a

$$\overline{I} = \inf\{u_p \mid p \text{ partíció}\}.$$



1. Ábra.: A Riemann alsó közelítő összeg ábrázolása.



2. Ábra.: A Riemann felső közelítő összeg ábrázolása.

Az f függvény akkor Riemann integrálható, ha $\underline{I} = \overline{I}$, és ilyenkor

$$\int_a^b f(x)dx = \underline{I}.$$

Egy adott intervallumon értelmezett függvény határozott integrálja egy szám, amely a függvény görbéje és az x -tengely által adott intervallumon közrezárt területet adja meg előjelesen. Gyakran használt kiszámítási módja a Newton-Leibniz formula, amely szerint a határozott integrál felírható:

$$\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a).$$

3. Numerikus integrálás

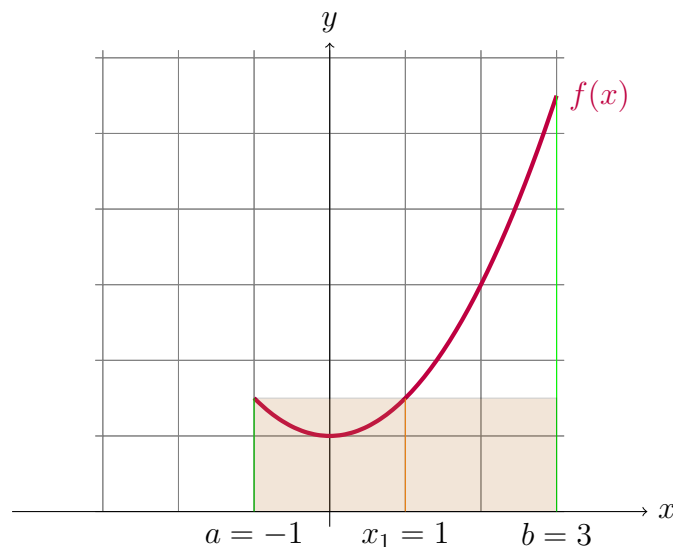
Numerikus integrálás során a feladat a fenti formula közelítése, tehát egy f függvény határozott integrálját akarjuk közelíteni az $[a, b]$ intervallumon. Abból indulunk ki, hogy az f függvény határozatlan integrálját (ha van neki egyáltalán) nem ismerjük, viszont adott x -re az $f(x)$ függvényértéket ki tudjuk (legalább közelítően) számolni.

3.1 Kvadrátúra-formulák

Egy *kvadrátúra-formula* az f függvény határozott integráljára az $[a, b]$ intervallumon a következőképpen néz ki:

- Kiszámítunk x_1, \dots, x_n ún. *alappontokat* (az adott formulától függ, hogy ezek konkrétan hol helyezkednek el az intervallumon belül, és n értéke is a formulától függ), melyekre $a \leq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leq b$.
- Meghatározunk minden x_i alapponthoz egy w_i *súlyt* (ez megint csak az adott formulától függ, hogy hogyan).
- A kvadrátúra-formula értéke $Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$, azaz az alappontokon felvett függvényértékek w_i szerint súlyozott összege.

Például kvadrátúra-formulára egy lehetőség, hogy csak egy alappontot veszünk, az $x_1 = \frac{a+b}{2}$ felezőpontot és a hozzá rendelt w_1 súly az intervallum mérete, $b - a$ lesz. Azaz, $(b - a)f(\frac{a+b}{2})$ egy kvadrátúra-formula. Grafikusan ábrázolva:



A képen látható függvényre ez a kvadrátúra-formula a színes téglalap területét adja, hiszen ez egyenlő $(b - a)$ (ez a téglalap alapjának a hossza) szorozva $f(\frac{a+b}{2})$ -vel (ez pedig a téglalap magassága).

Ennek a módszernek a neve *téglalap-szabály*, és ez a legegyszerűbb kvadratura-formula, de számos másik is létezik.

3.2 Interpolációs kvadratura-formulák

Észrevehetjük, hogy a téglalap-szabály alkalmazásakor veszünk egy x_1 alappontot a megadott intervallumban (ebben a szabályban az alappont az intervallum felezőpontja lesz), majd arra illesztünk egy polinomot (egy alappont esetében az illesztett polinom nulladfokú, vagyis konstans), és ennek a polinomnak a (könnyen számítható) határozott integrálját vesszük.

A módszer azért gyors, mert a polinom integrálását előre elvégezzük, és a szükséges szorzókat fogják tárolni a *súlyok*, amikkel az alappontokat súlyozzuk be. Pl. a téglalap-szabálynál az $[a, b]$ intervallumon az $x_1 = \frac{a+b}{2}$, $y_1 = f(x_1)$ pontra illesztett nulladfokú (konstans) polinom képlete $y = f(x_1)$, ennek határozott integrálja az $[a, b]$ intervallumon $f(x_1)(b-a)$, így kaptuk meg a $w_1 = (b-a)$ súlyt.

Általában ha egy kvadratura-formula megkapható a következő alakban:

- Meghatározzuk a módszertől függően az x_1, \dots, x_n alappontokat,
- A kvadratura-formula értéke az $(x_i, f(x_i))$ pontokra illesztett Lagrange-interpolációs polinom $[a, b]$ -n vett integrálja legyen,

akkor ezt *interpolációs kvadratura-formulának* nevezzük. Tehát a téglalap-szabály például egy interpolációs kvadratura-formula.

Ha emlékszünk, akkor az $(x_i, f(x_i))$ pontokra illesztett Lagrange-interpolációs polinom előáll a következő alakban:

$$\sum_{i=1}^n f(x_i) L_i(x),$$

ahol $L_i(x)$ az (adott x -ekhez tartozó) i -edik Lagrange-alappolinom. Ennek integrálja pedig

$$\int_a^b \sum_{i=1}^n f(x_i) L_i(x) dx = \sum_{i=1}^n \left(f(x_i) \int_a^b L_i(x) dx \right),$$

tehát egy interpolációs kvadratura-formula mindig kvadratura-formula, a $w_i = \int_a^b L_i(x) dx$ súlyok megválasztásával.

3.3 Newton-Cotes formulák

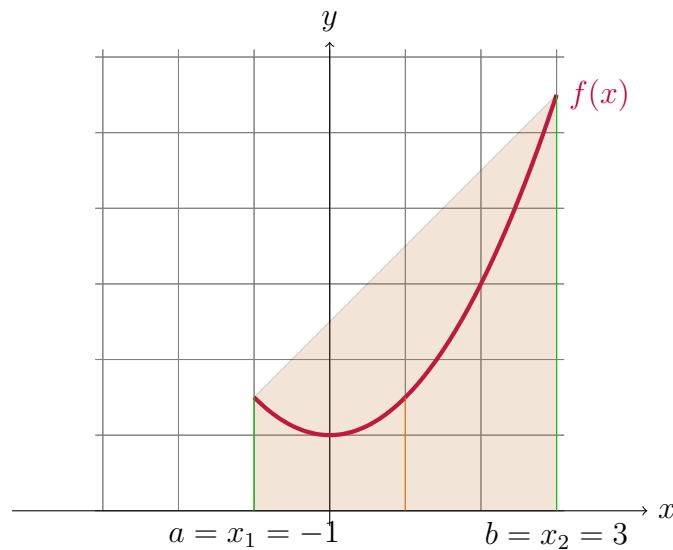
Még ha interpolációs kvadratura-formulákat is szeretnénk használni, akkor is fennáll a kérdés, hogy hogyan válasszuk meg az alappontokat? (Ha az alappontok megvannak, akkor a súlyok meghatározása egyértelmű, mert az $L_i(x)$ alappolinomokat megadják az alappontok, és a súlyok ezeknek a határozott integráljából állnak elő.)

A legegyszerűbb módszer az, ha az $[a, b]$ intervallumot *ekvidisztánsan*, vagyis egyforma méretű intervallumokra felosztjuk, és ezeknek az intervallumoknak a végpontjait választjuk alappontoknak, ezekre írjuk fel az interpolációs kvadratúra-formulát. Az ilyen alakban előálló interpolációs kvadratúra-formulákat *Newton-Cotes formuláknak* nevezzük. Ezen belül megkülönböztetünk *nyitott* és *zárt* Newton-Cotes formulákat: ha az a és a b értékek is alappontok, akkor a formula zárt, ha pedig nem, akkor nyitott formuláról beszélünk.

Például a téglalap módszernél két egyforma intervallumra osztottuk az $[a, b]$ intervallumot, és a kapott három végpont közül az a -t és a b -t nem használtuk, csak a középsőt; így a téglalap módszer másképp mondva az 1 alappontú nyitott Newton-Cotes formula.

Nyilván egy n alappontú nyitott Newton-Cotes formulánál $n + 1$ egyenlő részre kell osszuk az intervallumot, egy n alappontú zárt Newton-Cotes formulánál pedig $n - 1$ egyenlő részre.

A legegyszerűbb zárt Newton-Cotes formulának tehát két alappontja van, a és b . Két alappontra elsőfokú (lineáris) polinomot tudunk illeszteni, ahogy az ábra mutatja:



Mivel a kapott sokszög az ábrán egy trapéz, ezért a két alappontú zárt Newton-Cotes módszert hívják *trapéz-szabálynak* is. Képlete $x_1 = a$, $x_2 = b$ és $w_1 = w_2 = \frac{b-a}{2}$, azaz $(f(a) + f(b)) \frac{b-a}{2}$, melynek levezetése: az x_1, x_2 alappontokra illesztett Lagrange alappolinomok $L_1(x) = \frac{x-x_2}{x_1-x_2}$ és $L_2(x) = \frac{x-x_1}{x_2-x_1}$, azaz az $x_1 = a$, $x_2 = b$ esetben $L_1(x) = \frac{x-b}{a-b}$ és $L_2(x) = \frac{x-a}{b-a}$, nekik a határozatlan integráljuk pedig $F_1(x) = \int \frac{x-b}{a-b} dx = \frac{x^2-2bx}{2(a-b)}$, és így az L_1 Lagrange-alappolinom határozott integrálja az $[a, b]$ intervallumon

$$F_1(b) - F_1(a) = \frac{b^2 - 2b^2 - a^2 + 2ab}{2(a-b)} = \frac{-(a^2 + b^2 - 2ab)}{2(a-b)} = \frac{-(a-b)^2}{2(a-b)} = \frac{b-a}{2},$$

ez az első alapponthoz tartozó súly, a másodikhoz tartozó pedig hasonló módon az $F_2(x) =$

$\int \frac{x-a}{b-a} dx = \frac{x^2-2ax}{2(b-a)}$ határozott integrálja az $[a, b]$ intervallumon,

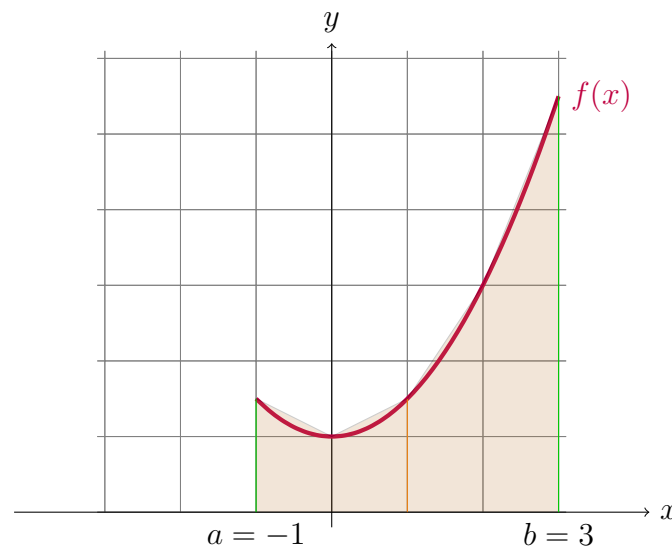
$$F_2(b) - F_2(a) = \frac{b^2 - 2ab - a^2 + 2a^2}{2(b-a)} = \frac{(b-a)^2}{2(b-a)} = \frac{b-a}{2},$$

így a második alappont w_2 súlya is $\frac{b-a}{2}$ lesz, így jön ki a trapéz-szabály képlete, még egyszer: $x_1 = a$, $x_2 = b$ és $w_1 = w_2 = \frac{b-a}{2}$.

Az utolsó „nevesített” Newton-Cotes formula a három alappontú zárt módszer, mely tehát egy másodfokú polinom határozott integráljával közelít, a három alappont pedig $x_1 = a$, $x_2 = \frac{a+b}{2}$ és $x_3 = b$. A súlyok (melyek a fentihez hasonló módon kijönnek) pedig $w_1 = w_3 = \frac{b-a}{6}$ és $w_2 = \frac{2(b-a)}{3}$. Ezt a kvadratura-formulát *Simpson-szabálynak* nevezzük.

3.4 Összetett kvadratura-szabályok

A polinommal történő interpoláció pontossága az alappontok számának növelésével nem javul szükségszerűen (attól az esettől eltekintve pl, mikor maga az $f(x)$ integrálandó függvény maga is egy polinom), háromnál több alappont esetében már általában túl „vad” a polinom. A módszerek pontosságát javítani úgy szokták, hogy az $[a, b]$ intervallumot felosztják (mondjuk) n egyforma részre, és a részekre külön-külön egy kvadratura-formulát (pl. trapéz- vagy Simpson-szabályt) alkalmaznak. Az ilyen alakban előálló kvadratura-formulákat összetett kvadratura-szabályoknak is nevezik. A következő ábra például az intervallumot 4 részre felosztó, majd a részeken egyenként trapéz-módszert alkalmazó összetett kvadratura-szabályt illusztrálja:



Ennek a kvadratura-szabálynak az alappontjai, ha n részre osztjuk az eredeti intervallumot (tehát $n+1$ alappontunk lesz), x_0, \dots, x_n , ahol $x_i = a + i \frac{b-a}{n}$ és a súlyok $w_1 = w_n = \frac{b-a}{2n}$ és $w_2 = \dots = w_{n-1} = \frac{b-a}{n}$. (Ez kijön úgy, hogy egy-egy trapézban a súlyok $\frac{b-a}{2n}$, a kis intervallumok hosszának a fele, és a két szélső pont kivételével minden alappontot kétszer kell

számolni, mert két trapézban játszanak szerepet.) Nevezik *összetett trapéz szabálynak*, vagy *trapéz módszernek* is.

Ha az n al-intervallumokon egyenként Simpson-szabályt alkalmazunk, az úgy előálló kvadratura-formulát *összetett Simpson-szabálynak*, vagy *Simpson-módszernek* nevezik: ha n intervallumra bontjuk az eredeti $[a, b]$ intervallumot, úgy (mivel minden intervallumon Simpson-szabályt alkalmazva még ezeknek a felezőpontja is bejön) lesz $2n+1$ alappontunk, x_0, x_1, \dots, x_{2n} , ekvidisztánsan elosztva, vagyis $x_i = a + i \frac{b-a}{2n}$, a súlyok pedig, ha h jelöli a $\frac{b-a}{n}$ intervallum-hosszt, akkor $w_1 = w_{2n} = \frac{h}{6}$, $w_i = \frac{h}{3}$, ha $1 < i < 2n$ páros és $w_i = \frac{2h}{3}$, ha $1 < i < 2n$ páratlan.