

Záróvizsga tételsor

3. Numerikus módszerek

Ancsin Ádám

Numerikus módszerek

Iterációs módszerek: Lineáris egyenletrendszerekre és nemlineáris egyenletekre. Interpoláció: Lagrange-, Hermite- Spline interpoláció. Legkisebb négyzetek módszere.

1 Iterációs módszerek

1.1 Lineáris egyenletrendszerek iterációs módszerei

A lineáris egyenletrendszert (LER) vektorsorozatokkal közelítjük, törekedve a minél gyorsabb konvergenciára. Az iterációs módszereknek a lényege az $Ax = b \iff x = Bx + c$ átalakítás. Ilyen alak létezik, sőt nem egyértelmű, hanem sokféle lehet, és a különböző átalakítások szolgáltatják a különféle iterációs módszereket.

Definíció (kontrakció): Az $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ függvény kontrakció, ha $\exists 0 \leq q < 1 : \forall x, y \in \mathbb{R}^n :$

$$\|F(x) - F(y)\| \leq q\|x - y\|$$

A q értéket kontrakciós együtthatónak nevezzük.

Banach-féle fixponttétel: Legyen $F : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ kontrakció a q kontrakciós együtthatóval. Ekkor a következő állítások igazak:

1. $\exists! x^* \in \mathbb{R}^n : x^* = f(x^*)$. Azt mondjuk, hogy x^* az f függvény fixpontja.
2. $\forall x^{(0)} \in \mathbb{R}^n$ kezdőérték esetén az $x^{(k+1)} = f(x^{(k)})$ sorozat konvergens, és $\lim_{k \rightarrow \infty} x^{(k)} = x^*$.
3. $\|x^{(k)} - x^*\| \leq \frac{q^k}{1-q} \|x^{(1)} - x^{(0)}\|$.
4. $\|x^{(k)} - x^*\| \leq q^k \|x^{(0)} - x^*\|$.

Vegyük észre, hogy az $Ax = b \iff x = Bx + c$ átírással megteremtettük a kapcsolatot a Banach-féle fixponttétellel, hisz most az $F(x) = Bx + c$ függvény fixpontját keressük. A fenti felírásban B -t átmenetmátrixnak nevezzük.

Tétel (elégséges feltétel a konvergenciára): Ha a LER B átmenetmátrixára $\|B\| < 1$, akkor tetszőleges $x^{(0)}$ -ból indított $x^{(k+1)} := Bx^{(k)} + c$ iteráció konvergál az $Ax = b$ LER megoldásához.

Tétel (Szükséges és elégséges feltétel a konvergenciára): Tetszőleges $x^{(0)}$ -ból indított $x^{(k+1)} := Bx^{(k)} + c$ iteráció konvergál az $Ax = b$ LER megoldásához $\iff \varrho(B) < 1$, ahol $\varrho(B) = \max_{1 \leq i \leq n} |\lambda_i(B)|$ a B mátrix spektrálsugara.

1.1.1 Jacobi-iteráció

Tekintsük az $A \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix $L + D + U$ felbontását, ahol L a mátrix szigorú alsó része, U a szigorú felső része, D pedig a diagonális része. Ennek segítségével konstruáljuk meg a következő átírást:

$$Ax = b \iff (L + D + U)x = b \iff Dx = -(L + U)x + b \iff x = -D^{-1}(L + U)x + D^{-1}b$$

A Jacobi-iteráció átmenetmátrixa tehát $B_J = -D^{-1}(L + U)$, maga az iteráció pedig:

$$x^{(k+1)} := -D^{-1}(L + U)x^{(k)} + D^{-1}b$$

Koordinátás alakban felírva:

$$x_i^{(k+1)} := -\frac{1}{a_{ii}} \left[\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} - b_i \right] \quad (i = 1, \dots, n)$$

Tétel: Ha az A mátrix szigorúan diagonálisan domináns a soraira, akkor $\|B_J\|_\infty < 1$ (azaz konvergens a módszer).

Tétel: Ha az A mátrix szigorúan diagonálisan domináns az oszlopaira, akkor $\|B_J\|_1 < 1$ (azaz konvergens a módszer).

1.1.2 Csillapított Jacobi-iteráció

Továbbra is a Jacobi-iterációval foglalkozunk, csak egy plusz ω paraméter bevezetésével próbáljuk finomítani a módszert. Tekintsük a $Dx = -(L + U)x + b$ egyenletet, valamint a triviális $Dx = Dx$ egyenletet. Ezeket rendre szorozzuk meg ω , illetve $1 - \omega$ értékekkel, majd adjuk össze a két egyenletet:

$$Dx = (1 - \omega)Dx - \omega(L + U)x + \omega b$$

Szorozzuk D^{-1} -zel:

$$x = (1 - \omega)Ix - \omega D^{-1}(L + U)x + \omega D^{-1}b \iff x = ((1 - \omega)I - \omega D^{-1}(L + U))x + \omega D^{-1}b$$

Ez alapján $B_{J(\omega)} = (1 - \omega)I - \omega D^{-1}(L + U)$ és $c_J(\omega) = \omega D^{-1}b$.

Észrevehető, hogy $\omega = 1$ esetén pont a Jacobi-iterációt kapjuk vissza.

Koordinátás alakban felírva:

$$x_i^{(k+1)} = (1 - \omega)x_i^{(k)} - \frac{\omega}{a_{ii}} \left[\sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^n a_{ij} x_j^{(k)} - b_i \right] \quad (i = 1, \dots, n)$$

Tétel: Ha $J(1)$ konvergens, akkor $\omega \in (0, 1)$ -re $J(\omega)$ is az.

1.1.3 Gauss-Seidel iteráció

Egy másik lehetséges iteráció konstruálásának az ötlete a következő:

$$Ax = b \iff (L + D + U)x = b \iff (L + D)x = -Ux + b \iff x = -(L + D)^{-1}Ux + (L + D)^{-1}b$$

Ez az ötlet szüli a Gauss-Seidel iterációt, vagyis:

$$x^{(k+1)} := -(L + D)^{-1}Ux^{(k)} + (L + D)^{-1}b$$

Az iteráció átmenetmátrixa tehát $B_S = -(L + D)^{-1}U$. A koordinátás alak felírásához kicsit átírjuk az iterációt:

$$(L + D)x^{(k+1)} = -Ux^{(k)} + b$$

$$Dx^{(k+1)} = -Lx^{(k+1)} - Ux^{(k)} + b$$

$$x^{(k+1)} = -D^{-1}[Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} - b]$$

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{1}{a_{ii}} \left[\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} - b_i \right] \quad (i = 1, \dots, n)$$

Megjegyzés: Az implementáció során elég egyetlen x vektort eltárolni, és annak a komponenseit sorban felülírni, ugyanis láthatjuk, hogy az első $i-1$ komponenst már az "új", $x^{(k+1)}$ vektorból vesszük.

Tétel: Ha A szigorúan diagonálisan domináns

1. a soraira, akkor $\|B_S\|_\infty \leq \|B_J\|_\infty < 1$.
2. az oszlopaira, akkor $\|B_S\|_1 \leq \|B_J\|_1 < 1$.

Azaz a Gauss-Seidel is konvergens, és legalább olyan gyors, mint a Jacobi.

1.1.4 Relaxációs módszer

A relaxációs módszer lényegében a csillapított Gauss-Seidel iterációt jelenti. Ennek megkonstruálásához tekintsük az $(L + D)x = -Ux + b$ és $Dx = Dx$ egyenleteket. Ezeket rendre szorozzuk meg ω , illetve $1 - \omega$ értékekkel, majd adjuk össze a két egyenletet:

$$(D + \omega L)x = (1 - \omega)Dx - \omega Ux + \omega b$$

$$x = (D + \omega L)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U]x + \omega(D + \omega L)^{-1}b$$

Az iteráció tehát: $x^{(k+1)} = (D + \omega L)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U]x^{(k)} + \omega(D + \omega L)^{-1}b$, ahol az átmenetmátrix: $B_{S(\omega)} = (D + \omega L)^{-1} [(1 - \omega)D - \omega U]$. A koordinátás alak felírásához itt is átírjuk kicsit az iterációt:

$$(D + \omega L)x^{(k+1)} = (1 - \omega)Dx^{(k)} - \omega Ux^{(k)} + \omega b$$

$$Dx^{(k+1)} = -\omega Lx^{(k+1)} - \omega Ux^{(k)} + \omega b + (1 - \omega)Dx^{(k)}$$

$$x^{(k+1)} = -\omega D^{-1} [Lx^{(k+1)} + Ux^{(k)} - b] + (1 - \omega)x^{(k)}$$

$$x_i^{(k+1)} = -\frac{\omega}{a_{ii}} \left[\sum_{j=1}^{i-1} a_{ij} x_j^{(k+1)} + \sum_{j=i+1}^n a_{ij} x_j^{(k)} - b_i \right] + (1 - \omega)x_i^{(k)} \quad (i = 1, \dots, n)$$

Vegyük észre, hogy $\omega = 1$ esetén a Gauss-Seidel iterációt kapjuk.

Tétel: Ha a relaxációs módszer konvergens minden kezdővektorból indítva, akkor $\omega \in (0, 2)$.

Megjegyzés: Ha $\omega \notin (0, 2)$, akkor általában nem konvergens a módszer (bár adott feladat esetén előfordulhat, hogy találunk olyan kezdővektort, amelyből indítva konvergál a módszer).

Tétel: Ha A szimmetrikus és pozitív definit és $\omega \in (0, 2)$, akkor a relaxációs módszer konvergens. Ennek következménye a Gauss-Seidel iteráció konvergenciája ($\omega = 1$ eset).

Tétel: Ha A tridiagonális, akkor $\rho(B_S) = \rho(B_J)^2$, azaz a Jacobi és Gauss-Seidel iteráció egyszerre konvergens, illetve divergens.

Tétel: Ha A szimmetrikus, pozitív definit és tridiagonális, akkor a $J(1)$, $S(1)$ és $S(\omega)$ $\omega \in (0, 2)$ -re konvergens, és $S(\omega)$ -ra az optimális paraméter értéke:

$$\omega_0 = \frac{2}{1 + \sqrt{1 - \rho(B_J)^2}}$$

1.1.5 Richardson-iteráció

Legyen $p \in \mathbb{R}$. Így

$$Ax = b \iff 0 = -Ax + b \iff 0 = -pAx + pb \iff x = (I - pA)x + pb$$

Az iteráció tehát $x^{(k+1)} := (I - pA)x^{(k)} + pb$. Az átmenetmátrix: $B_{R(p)} = I - pA$. Az $r^{(k)} := b - Ax^{(k)}$ vektort maradékvektornak (reziduumvektornak) nevezzük, hiszen

$$x^{(k+1)} = x^{(k)} - pAx^{(k)} + pb = x^{(k)} + pr^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} = b - Ax^{(k+1)} = b - A(x^{(k)} + pr^{(k)}) = r^{(k)} - pAr^{(k)}$$

Tekintsük az előállítás algoritmusát: $r^{(0)} := b - Ax^{(0)}$, továbbá a fentiek miatt:

$$x^{(k+1)} := x^{(k)} + pr^{(k)}$$

$$r^{(k+1)} := r^{(k)} - pAr^{(k)}$$

Tétel: Ha A szimmetrikus, pozitív definit, a sajátértékei pedig a következők:

$$0 < m := \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \dots \leq \lambda_n =: M$$

akkor $p \in (0, \frac{2}{M})$ esetén $R(p)$ konvergens, és az optimális paraméter: $p_0 = \frac{2}{m+M}$. Továbbá igaz, hogy: $\varrho(B_{R(p_0)}) = \frac{M-m}{M+m}$.

1.2 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 kvadratikus, $1 < p < 2$ 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.

1.2.1 Newton-módszer

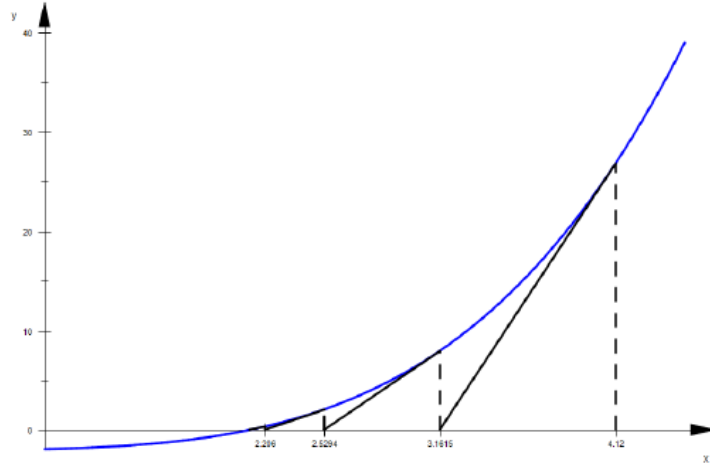


Figure 1: A Newton-módszer ötlete.

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 (fixpontiteráció).

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, $M := \frac{M_2}{2m_1}$

$$5. x_0 \in [a, b] : |x_0 - x^*| < r = \min \left\{ \frac{1}{M}, |x^* - a|, |x^* - b| \right\}$$

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

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

1.2.2 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:

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

1.2.3 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:

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

1.2.4 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 allapontokra: 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 előállítása: 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 $\Omega_m(x) = (x - x_0)^{m_0} (x - x_1)^{m_1} \dots (x - x_n)^{m_n}$

2.2 Spline-interpoláció

Az eddig említett interpolációs módszerekben polinomokkal dolgoztunk. Lehetőség van arra is, hogy a megadott pontrendszerre más típusú függvényt próbáljunk illeszteni. Igen előnyös tulajdonságokkal rendelkeznek a bizonyos folytonossági előírásoknak is megfelelő, szakaszonként polinom függvények, a spline-ok.

l -edfokú spline: Legyen adott $\Omega_n = \{x_0, x_1, \dots, x_n\}$ az $[a, b]$ intervallum egy felosztása, ahol $x_0 = a, x_n = b$ és $l \in \mathbb{N}$. Az $s : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ függvény egy l -edfokú spline az Ω_n -re vonatkozóan, ha:

1. $s|_{[x_{k-1}, x_k]}$ egy l -edfokú polinom $\forall k = 1, \dots, n$
2. $s \in C^{l-1}[a, b]$, tehát a teljes intervallumon $(l - 1)$ -szer folytonosan deriválható

Jelölés: $s_l(\Omega_n)$ az Ω_n -hez tartozó l -edfokú spline-ok halmaza.

Spline-interpoláció: Legyenek adottak $x_k, f(x_k)$ értékek $k = 0, 1, \dots, n$ -re és $l \in \mathbb{N}$. Keressük azt az $s \in s_l(\Omega_n)$ spline-t, amelyre $s(x_k) = f(x_k)$. Ehhez elő kell állítanunk minden intervallumra egy l -edfokú polinomot. Ha a polinomokat az együtthatóikkal reprezentáljuk, akkor ez $n(l + 1)$ ismeretlen. Az előírt feltételek száma: $2n$ interpolációs és $(l - 1)(n - 1)$ folytonossági feltétel, hiszen csak a belső pontokban kell előírni az illető deriváltakra vonatkozó megfelelő folytonossági feltételt. Az így kapott összes feltétel darabszáma $(l + 1)n - (l - 1)$, tehát az egyértelműséghez $l - 1$ feltétel hiányzik még. Ezeket úgynevezett peremfeltételekkel adjuk meg. Pl. a harmadfokú spline-interpolációhoz 2 peremfeltétel szükséges. Ezek a következők (ezek közül elég egyet választani, mert mindegyik 2 feltételt tartalmaz):

1. Természetes peremfeltétel: $s''(a) = s''(b) = 0$.
2. Hermite-féle peremfeltétel: $s'(a) = s_a, s'(b) = s_b$, ahol s_a, s_b előre megadott számok.
3. Periodikus peremfeltétel (ekkor feltételezzük, hogy $s(a) = s(b)$ is teljesül): $s'(a) = s'(b)$ és $s''(a) = s''(b)$

Elsőfokú spline előállítása: Az elsőfokú spline előállítása triviális szakaszonkénti lineáris Lagrange-interpolációval.

Másodfokú spline előállítása: Egyetlen peremfeltétel szükséges, legyen a következő: $s'(a) = s_a$ valamilyen s_a számra. Az $[x_0, x_1]$ szakaszon Hermite-interpolációval előállítjuk azt a H_2 másodfokú polinomot,

amely megfelel az interpolációs feltételeknek és a peremfeltételnek. Az így kapott polinom x_1 -beli deriváltja meghatározott, tehát a folytonos deriválhatóság miatt az $[x_1, x_2]$ szakaszon a bal végpontban adott a derivált értéke. Ismét Hermite-interpolációt alkalmazva megkapjuk az $[x_1, x_2]$ szakaszhoz tartozó polinomot. Ezt az eljárást ismételve állíthatjuk elő a másodfokú interpolációs spline-t.

Függvény tartója: A $\text{supp}(f) := \overline{\{x \in \mathbb{R} : f(x) \neq 0\}}$ halmazt az f függvény tartójának nevezzük.

Számegyenes felosztása: $\Omega_\infty := \{\dots, x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, \dots, x_n, x_{n+1}, \dots\}$

B-spline: A $B_{l,k}, k \in \mathbb{Z}$ l -edfokú spline függvények rendszerét B-spline függvényeknek nevezzük, ha az alábbi feltételek teljesülnek:

1. $\text{supp}(B_{l,k}) = [x_k, x_{k+l+1}]$, azaz a tartója minimális
2. $B_{l,k}(x) \geq 0$
3. $\sum_{k \in \mathbb{Z}} B_{l,k}(x) = 1$

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 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 egyenest 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 $p_n(x_i) = y_i, i = 1, 2, \dots, m$ egyenletrendszer. 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

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