Fazekas István

BEVEZETÉS A NUMERIKUS MATEMATIKÁBA

mobiDIÁK könyvtár

Fazekas István

BEVEZETÉS A NUMERIKUS MATEMATIKÁBA

mobiDIÁK könyvtár

SOROZATSZERKESZTŐ

Fazekas István

Fazekas István

BEVEZETÉS A NUMERIKUS MATEMATIKÁBA

Egyetemi jegyzet
Programtervező és alkalmazott matematikusok részére
Fejlesztés alatt álló változat!

mobiDIÁK könyvtár
Debreceni Egyetem
Informatikai Kar

Lektor

Debreceni Egyetem
Lektorálás alatt!

Szerkesztő
Márkus Szilárd
Debreceni Egyetem

mobiDIÁK könyvtár
Debreceni Egyetem
Informatikai Kar
4010 Debrecen, Pf. 12
http://mobidiak.inf.unideb.hu

A mű *A mobiDIÁK önszervező mobil portál* (IKTA, OMFB-00373/2003) projekt keretében készült.

Tartalomjegyzék

I. fejezet
Bevezetés

1. A numerikus matematika feladata

A numerikus matematika célja az eredmények számszerű meghatározása. Fejlődése során önálló diszciplinává vált, amely magába foglalja a speciális numerikus módszerek kidolgozását, a módszerek elméleti elemzését és programozását. A matematika története során szinte minden nagy matematikus (és természettudós) foglalkozott ilyen módszerek kidolgozásával – például Newton, vagy Gauss –, hogy konkrét számítási eredményeket kapjanak.

A számítógépek megjelenése megváltoztatta a numerikus matematikát. A numerikus matematikai módszereket eredetileg kézi számolásra dolgozták ki, a számítógépek elterjedésével viszont új módszereket kellet megalkotni. Ráadásul számítógépekkel olyan, a korábbinál nehezebb feladatok is megoldhatók, amelyek megoldása kézi úton nehezen kivitelezhető, vagy egyáltalán nem lehetséges.

Néhány elterjedtebb programcsomag:
Derive, Maple, Mathematica, MATLAB.

A programcsomagok a matematikai számításokat részben algebrai úton, részben numerikus módszerekkel végzik. Megjegyezzük, hogy a statisztikai programcsomagok (SAS, SPSS, ...) is jelentős numerikus eszköztárral rendelkeznek.

A numerikus matematikán belül kétféle feladatcsoportot különböztethetünk meg.

1. Létezik a megoldást véges sok lépésben pontosan előállító eljárás.
   Például
   (a) lineáris egyenletrendszer megoldása;
   (b) polinom helyettesítési értékének meghatározása.
   Ekkor a cél a számítás mennyiségének csökkentése.

   Példa.
   $$\begin{aligned} p(x) &= a_0x^n + a_1x^{n-1} + ... + a_{n-1}x + a_n = \\ &= (...((a_0x + a_1)x + a_2)x + ... + a_{n-1})x + a_n. \end{aligned}$$

2. Nincs a feladat megoldására véges sok lépést igénylő pontos módszer.
   Például
   (a) ötöd- és magasabb fokú egyenletre nincs gyökképlet;
   (b) nincs zárt alakban előállítható primitív függvény:
   $$\int e^{-\frac{x^2}{2}} dx = ?$$
   Ekkor a cél közelítő módszert adni, mely véges sok lépésben előre megadott pontossággal előállítja a megoldást.

Numerikus matematikai módszereket széles körben alkalmaznak tudományos területeken (fizikában, kémiában, földrajzban, vagy akár a szociológiában, pszichológiában, közgazdaságtanban), valamint statisztikai, gazdasági, pénzügyi és mérnöki számításokhoz.

Nem csak a közelítő módszerek, hanem az elvileg pontos módszerek is általában csupán közelítő megoldást szolgáltatnak a gyakorlatban (a kiinduló adatok hibáival terheltek, kerekítési hibák, ...). Így a pontosan megoldható feladatok esetén is gyakran célszerű közelítő eljárást alkalmazni.

A közelítő eljárások néhány típusa:

- *Iteráció* : egy kezdeti értékből rekurzív eljárással kapott sorozat határértéke a keresett érték.

  Példa. Legyen $A > 0$.

$$x_0 = A,$$
$$x_{n+1} = \frac{1}{2}(x_n + \frac{A}{x_n}), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots,$$
$$x_n \to \sqrt{A}.$$

- *Algoritmizálás* : az eljárást számítógépes programmal megvalósítható alakra hozzuk.
- *Monte-Carlo módszerek* : ha nem ismert hagyományos egzakt matematikai megoldás, statisztikai jellegű módszert keresünk.

2. Hibaanalízis

Abban az esetben, ha az alapadatok közelítő jellegűek, definiálhatjuk a következő két mennyiséget.

2.1. definíció. Ha x a pontos a a közelítő érték, akkor a δa *abszolút hiba* az eltérésük felső korlátja:

$$|x-a| \le \delta a.$$

2.2. definíció. Az a érték *relatív hibája*:

$$\frac{\delta a}{|a|}.$$

2.1. Az alapműveletek örökölt hibája

Legyenek x, y a pontos, a, b a megfelelő közelítő értékek, valamint

$$|x-a| \le \delta a, \qquad \text{és} \qquad |y-b| \le \delta b.$$

Összeadásnál:

$$|(x+y)-(a+b)| \le \delta a + \delta b.$$

Kivonásnál:

$$|(x-y)-(a-b)| \le \delta a + \delta b.$$

Szorzásnál:

$$\begin{aligned} |x\cdot y - a\cdot b| &\le |xy - ay + ay - ab| \le |y||x-a| + |a||y-b| \le \\ &\le (|b|+\delta b)\delta a + |a|\delta b \approx |a|\delta b + |b|\delta a. \end{aligned}$$

Osztásnál:

$$\begin{aligned} \left|\frac{x}{y} - \frac{a}{b}\right| &= \frac{|bx - ba + ba - ya|}{|yb|} \le \\ &\le \frac{|b|\delta a + |a|\delta b}{|b|^2} \cdot \frac{1}{1-\frac{\delta b}{|b|}} \approx \frac{|a|\delta b + |b|\delta a}{|b|^2}, \end{aligned}$$

amennyiben $y \ne 0, b \ne 0$.

2.1. Példa. Két tizedes jegyre kerekített értékekkel számolva, mennyi lesz az

$$x = 1,43 \cdot 5,12 + 7,86$$

abszolút hibája?

MEGOLDÁS.

$$\begin{aligned} &\delta = 0,005 \\ &\delta x \approx 1,43 \cdot 0,005 + 5,12 \cdot 0,005 + 0,005 = 0,03775 \end{aligned}$$

□

2.2. A relatív hiba öröklődése az alapműveleteknél

Összeadásnál:

$$\frac{\delta(a+b)}{|a+b|} = \frac{\delta a + \delta b}{|a+b|} \le \frac{\delta a}{|a|},$$

amennyiben

$$\frac{\delta a}{|a|} \ge \frac{\delta b}{|b|}.$$

Ekkor ugyanis

$$|b|\delta a \ge |a|\delta b, \quad \text{ahonnan} \quad \delta a(|b|+|a|) \ge |a|(\delta b + \delta a).$$

Így

$$\frac{\delta a}{|a|} \ge \frac{\delta b + \delta a}{|b|+|a|}.$$

Tehát ha a és b azonos előjelű, akkor a relatív hiba nem nő.

Kivonásnál:

$$\frac{\delta(a-b)}{|a-b|} = \frac{\delta a + \delta b}{|a-b|}.$$

Tehát a relatív hiba tetszőlegesen nagy lehet.

Szorzásnál:

$$\frac{\delta(a\cdot b)}{|a||b|} \approx \frac{|a|\delta b + |b|\delta a}{|a|\cdot|b|} = \frac{\delta b}{|b|} + \frac{\delta a}{|a|}.$$

Tehát a relatív hibák összeadódnak.

Osztásnál:

$$\frac{\delta(\frac{a}{b})}{|\frac{a}{b}|} \approx \frac{\frac{|a|\delta b + |b|\delta a}{|b|^2}}{\frac{|a|}{|b|}} = \frac{\delta b}{|b|} + \frac{\delta a}{|a|}.$$

Tehát a relatív hibák összeadódnak.

2.2. Példa. A $\sqrt{2006} \approx 44,79$ és $\sqrt{2005} \approx 44,78$ két tizedesre kerekített értéket használva, mennyi $x = \sqrt{2006} - \sqrt{2005}$ relatív hibája?

Megoldás.

$$x = \sqrt{2006} - \sqrt{2005} \approx 0,01$$

abszolút hibája:

$$\delta = 0,005 + 0,005 = 0,01.$$

Így a relatív hiba:

$$\frac{0,01}{0,01} = 1.$$

Az

$$x = \frac{2006-2005}{\sqrt{2006}+\sqrt{2005}} \approx \frac{1}{89,57} \approx 0,0112$$

módszerrel számolva, a számláló pontos, a nevező relatív hibája :

$$0,01 : 89,57 \approx 0,00011,$$

így a tört relatív hibája $0,00011$. $\square$

2.3. Az örökölt hiba függvények esetén

Egyváltozós függvény esetén. Az egyváltozós Taylor-formula:

$$\begin{aligned} f(x) - f(a) = f'(a)(x-a) + f''(a)\frac{(x-a)^2}{2!} + ... + \\ + \frac{f^{(n-1)}(a)}{(n-1)!}(x-a)^{n-1} + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}(x-a)^n, \end{aligned}$$

ahol x a pontos, a pedig a közelítő értéket jelöli, továbbá ξ az a és az x értékek által meghatározott nyílt intervallum eleme.

Ha $f'(a)$ -hoz képest a magasabb rendű deriváltak nem túl nagyok, akkor

$$\delta f(a) \approx |(f'(a))|\, \delta a.$$

Ha $f'(a) = f''(a) = ... = f^{(k-1)}(a) = 0$, akkor $f^{(k)}(a) \neq 0$ esetén

$$\delta(f(a)) \approx \frac{\left|f^{(k)}(a)\right|}{k!} (\delta a)^k .$$

Többváltozós függvény esetén. A többváltozós Taylor-formula alapján, ha az elsőrendű parciális derivált nem nulla és a magasabb rendű parciális deriváltak nem túl nagyok:

$$f(x) - f(a) \approx \sum_{i=1}^{r} \frac{\partial f(a)}{\partial x_i}(x_i - a_i),$$

$$\delta(f(a)) \approx \sum_{i=1}^{r} \left| \frac{\partial f(a)}{\partial x_i} \right| \delta a_i.$$

2.3. Példa. $f(x, y) = x \cdot y$ esetén

$$\delta(f(a,b)) \approx |f_x(a,b)|\delta a + |f_y(a,b)|\delta b = |b|\delta a + |a|\delta b$$

a szorzás már ismert hibaképlete. □

2.4. Példa. (l. Szidarovszky [**1**], 29. o.) Legyen egy háromszögben

$$\begin{aligned} &a \approx 100, && \delta(a) = 0,1; \\ &\beta \approx 45°, && \delta(b) = 0.1° = 0.1 \cdot \frac{\pi}{180}; \\ &\gamma \approx 45°, && \delta(\gamma) = 0.1° = 0.1 \cdot \frac{\pi}{180}. \end{aligned}$$

Határozzuk meg a b oldalt és a közelítés hibáját!

Megoldás.

$$\begin{aligned}
&\sin\beta \approx \sin 45^\circ = \frac{\sqrt{2}}{2};\\
&\delta(\sin\beta) \approx |\cos\beta|\delta\beta = \frac{\sqrt{2}}{2}\cdot 0,1\cdot\frac{\pi}{180};\\
&\alpha = 180^\circ - (\beta+\gamma) \approx 90^\circ;\\
&\delta(\alpha) = 0,2\cdot\frac{\pi}{180};\\
&\delta(\sin\alpha) \approx \frac{|\sin\alpha|}{2!}(\delta\alpha)^2 = \frac{1}{2}\cdot 0,04\cdot\left(\frac{\pi}{180}\right)^2 \approx 6\cdot 10^{-6}.
\end{aligned}$$

A sinus-tétel alapján

$$\begin{aligned}
&b = \frac{a\sin\beta}{\sin\alpha} \approx \frac{100\cdot\sin 45^\circ}{\sin 90^\circ} = \frac{100\cdot\frac{\sqrt{2}}{2}}{1} \approx 70,71;\\
&\delta(a\cdot\sin\beta) \approx |a|\delta(\sin\beta) + |\sin\beta|\cdot\delta a = 100\frac{\sqrt{2}\cdot\pi}{3600} + \frac{\sqrt{2}}{2}\cdot 0,1 \approx 0,1941;\\
&\delta(b) = \frac{|a\sin\beta|\delta(\sin\alpha) + |\sin\alpha|\delta(a\sin\beta)}{|\sin^2\alpha|} \approx \frac{70,71\cdot 6\cdot 10^{-6} + 1\cdot 0,1941}{1} \approx 0,1945.
\end{aligned}$$

□

II. fejezet
Függvényközelítések

Tegyük fel, hogy az $f : [a,b] \to \mathbb{R}$ függvény csupán az $[a,b]$ intervallum $x_1, x_2, ..., x_n$ pontjaiban, az úgynevezett alappontokban adott, és itt $y_1, y_2, ..., y_n$ a megfelelő függvényértékek. Közelítsük az f függvényt polinomok segítségével.

A közelítés módjai:

1. *Interpoláció*: olyan polinomot keresünk mely, értékei az alappontokban megegyeznek az adott függvényértékekkel.
2. *Legkisebb négyzetek módszere*: adott fokszámú polinomok közül keressük azt a p polinomot, melyre
$$\sum_{k=1}^{n} [y_k - p(x_k)]^2$$
minimális.
3. *Egyenletes közelítés*: adott fokszámú p polinomok közül azt választjuk, melyre
$$\max_{1 \le k \le n} |y_k - p(x_k)|$$
minimális.

A függvények közelítése nemcsak a numerikus matematika, hanem más alkalmazott matematikai szakterületnek is alapvető feladata.

A statisztikában regressziószámításként nevezett terület alapvetően a legkisebb négyzetes közelítésekkel foglalkozik. Amikor az illesztendő függvény alakja sem ismert, akkor magfüggvényes becsléseket alkalmaznak. A sűrűségfüggvény becslési eljárást Parzen-Rosenblatt-féle becslésnek, a regressziós függvényét Nadaraya-Watson féle becslésnek nevezik.

A neurális hálózatok is alkalmasak függvények közelítésére. A legfontosabb – függvényközelítésre is alkalmas – hálózatok: Multilayer-Perceptron (MLP), Radial Basis Function network (RBF), Support Vector Machine (SVM).

1. Interpolációs polinomok

1.1. A Lagrange-féle interpoláció

Legyenek $x_1, x_2, ..., x_n$ az alappontok, $y_1, y_2, ..., y_n$ a hozzájuk tartozó függvényértékek.

1.1. tétel. *Pontosan egy olyan legfeljebb $(n-1)$-edfokú p polinom létezik, melyre*

$$p(x_k) = y_k, \qquad k = 1, 2, ..., n, \tag{1.1}$$

azaz, ami az alappontokban a megadott értékeket veszi fel.

Bizonyítás. Legyen

$$l_k(x) = \frac{(x-x_1)...(x-x_{k-1})(x-x_{k+1})...(x-x_n)}{(x_k-x_1)...(x_k-x_{k-1})(x_k-x_{k+1})...(x_k-x_n)}, \qquad k = 1, 2, ..., n. \tag{1.2}$$

Ekkor l_k egy $(n-1)$-edfokú polinom, melyre $l_k(x_k) = 1$, és $l_k(x_i) = 0$, ha $k \neq i$. Legyen

$$p(x) = y_i l_1(x) + \cdots + y_n l_n(x). \tag{1.3}$$

Ekkor p legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom és $p(x_k) = y_k$ $(k = 1, ..., n)$. Azaz létezik ilyen polinom.
Az egyértelműség bizonyításához legyen p és q két, a feltételeket kielégítő polinom. Ekkor $h = p - q$ legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom, melyre

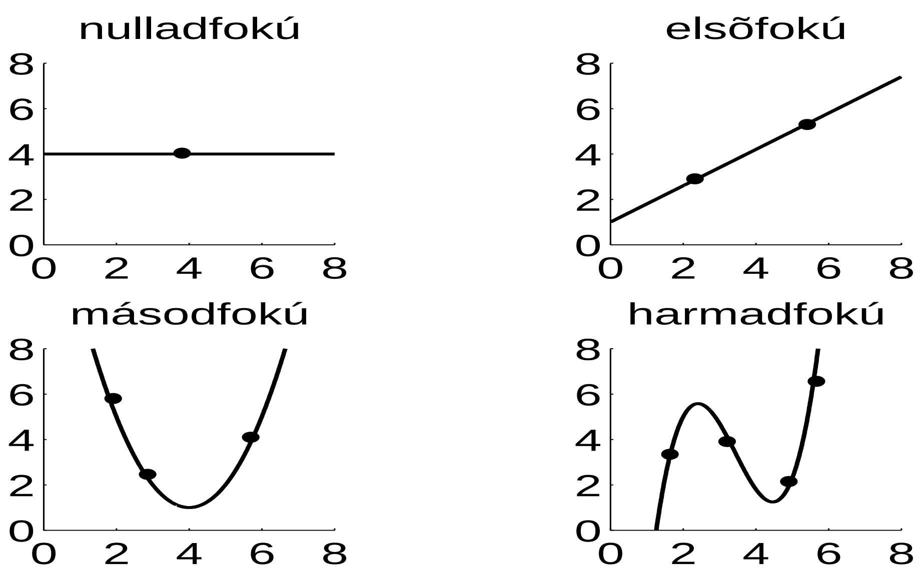
$$h(x_k) = p(x_k) - q(x_k) = 0, \qquad k = 1, ..., n.$$

Így a legfeljebb $(n-1)$-edfokú h polinomnak n különböző gyöke van, azaz $h \equiv 0$. □

1.1. megjegyzés. A fenti $l_k(x)$ polinomokat *Lagrange-féle alappolinomoknak* nevezzük.

1.2. megjegyzés. A fenti tételbeli polinomot *Lagrange-féle interpolációs polinomnak* nevezzük. Ennek alakja tehát:

$$p(x) = \sum_{i=1}^{n} y_i \left[\prod_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \right]. \tag{1.4}$$



1.1. ÁBRA. 1, 2, 3, illetve 4 pontra illesztett Lagrange-féle interpolációs polinomok

1.2. A Lagrange-féle interpoláció hibája

1.2. tétel. *Legyen $f : [a, b] \to \mathbb{R}$ n-szer differenciálható függvény, legyen p az $x_1, ..., x_n$ $\in [a, b]$, $y_1 = f(x_1), ..., y_n = f(x_n)$ pontokra illesztett Lagrange-féle interpolációs polinom. Legyen*

$$\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n).$$

Ekkor

$$f(x) - p(x) = \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x), \qquad x \in [a,b], \tag{1.5}$$

ahol $\xi \in (a,b)$, és ξ értéke x-től függ.

BIZONYÍTÁS. Ha x alappont, akkor $f(x) = p(x)$ és $\omega(0) = 0$, azaz az állítás teljesül. Legyen x az alappontoktól különböző, és legyen

$$g(z) = f(z) - p(z) - [f(x) - p(x)]\frac{\omega_n(z)}{\omega_n(x)}. \tag{1.6}$$

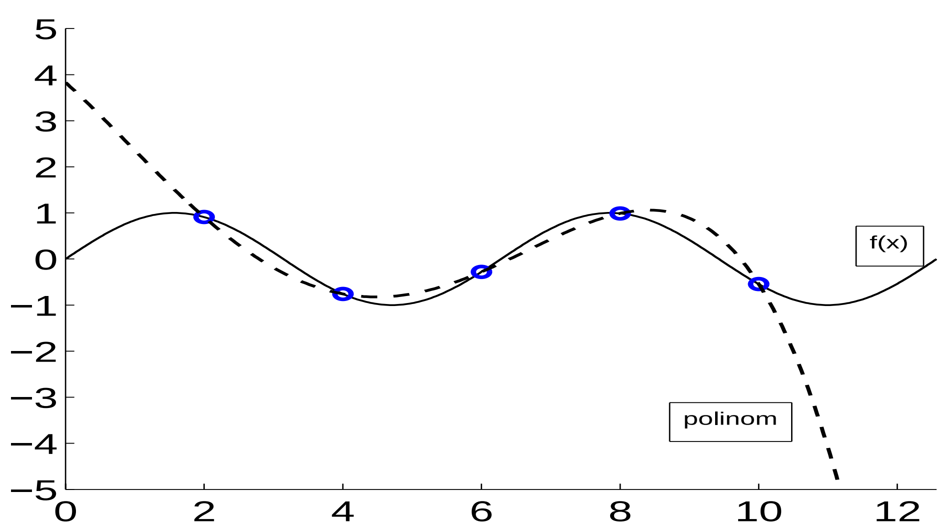
Ekkor $g(z) = 0$ a $z = x, x_1, x_2, ..., x_n$ helyeken. Tehát $g(z)$ az $[a,b]$ intervallumban $(n+1)$ helyen nulla. Rolle tétele miatt g'-nek legalább n nullhelye van (a,b)-ben. Ezt folytatva: g''-nek legalább $(n-1)$, ..., $g^{(n)}$-nek legalább 1 nullhelye van (a,b)-ben. Legyen ξ a $g^{(n)}$ nullhelye. Ekkor

$$0 = g^{(n)}(\xi) = f^{(n)}(\xi) - p^{(n)}(\xi) - [f(x) - p(x)]\frac{\omega_n^{(n)}(\xi)}{\omega_n(x)}.$$

Mivel p legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom, így $p^{(n)} \equiv 0$, és mivel ω_n 1 főegyütthatós n-edfokú polinom, így $\omega_n^{(n)} \equiv n!$. Tehát

$$0 = f^{(n)}(\xi) - [f(x) - p(x)]\frac{n!}{\omega_n(x)}.$$

□



1.2. ÁBRA. A $\sin(x)$ közelítése 5 pontra illesztett Lagrange-féle interpolációs polinommal

1.1. Példa. $\sqrt{100} = 10$, $\sqrt{121} = 11$ és $\sqrt{144} = 12$ felhasználásával határozzuk meg $\sqrt{110}$ közelítő értékét! Az alappontok: $x_1 = 100, x_2 = 121, x_3 = 144$, a fügvényértékek: $y_1 = 10, y_2 = 11, y_3 = 12$.

$$l_1(110) = \frac{(110-121)(110-144)}{(100-121)(100-144)} \approx 0,4048,$$
$$l_2(110) = \frac{(110-100)(110-144)}{(121-100)(121-144)} \approx 0,7039,$$
$$l_3(110) = \frac{(110-100)(110-121)}{(144-100)(144-121)} \approx -0,1087,$$
$$p(110) = 10 \cdot l_1(110) + 11 \cdot l_2(110) + 12 \cdot l_3(110) \approx 10,4865.$$

Valójában $\sqrt{110} \approx 10,4870.$ □

1.3. Véges differenciák

1.1. definíció. Legyenek az alappontok egymástól egyenlő távolságra (*ekvidisztáns alappontok*) . Legyen a pontok távolsága $h > 0$. Ekkor az $f(x)$ függvény

haladó differenciái:

$$\triangle^0 f(x) = f(x),$$
$$\triangle^k f(x) = \triangle^{k-1} f(x+h) - \triangle^{k-1} f(x), \quad k = 1, 2, ...;$$

retrográd differenciái:

$$\nabla^0 f(x) = f(x),$$
$$\nabla^k f(x) = \nabla^{k-1} f(x) - \nabla^{k-1} f(x-h), \quad k = 1, 2, ...;$$

centrális differenciái:

$$\delta^0 f(x) = f(x),$$
$$\delta^k f(x) = \delta^{k-1} f(x + \frac{1}{2}h) - \delta^{k-1} f(x - \frac{1}{2}h), \quad k = 1, 2, ...$$

A haladó differenciákat fogjuk vizsgálni. Jelölje a h lépésközű ekvidisztáns alappontokat $..., x_{-2}, x_{-1}, x_0, x_1, x_2...$, a megfelelő függvényértékeket $..., y_{-2}, y_{-1}, y_0, y_1, y_2...$. A haladó differenciák jelölésére a

$$\triangle y_k = y_{k+1} - y_k \tag{1.7}$$

jelölést használjuk. Ezen jelölésekkel a differenciatáblázat:

$$\begin{array}{cccc}
y_{-3} & & & \\
 & \Delta y_{-3} & & \\
y_{-2} & & \Delta^2 y_{-3} & \\
 & \Delta y_{-2} & & \\
y_{-1} & & \Delta^2 y_{-2} & \\
 & \Delta y_{-1} & & \\
y_0 & & \Delta^2 y_{-1} & \cdots \\
 & \Delta y_0 & & \\
y_1 & & \Delta^2 y_0 & \\
 & \Delta y_1 & & \\
y_2 & & \Delta^2 y_1 & \\
 & \Delta y_2 & & \\
y_3 & & &
\end{array}$$

1.3. ÁBRA. Differenciatáblázat

1.2. Példa. Az x^3 függvény $0, 1, 2, 3, 4$ alappontokhoz tartozó differenciatáblázata:

$$\begin{array}{ccccc}
0 & & & & \\
 & 1 & & & \\
1 & & 6 & & \\
 & 7 & & 6 & \\
8 & & 12 & & 0 \\
 & 19 & & 6 & \\
27 & & 18 & & \\
 & 37 & & & \\
64 & & & &
\end{array}$$

□

1.4. Differenciatáblázatok tulajdonságai

1. Egy n-edfokú p polinom $(n+1)$-edik differenciái mind nullák. Ugyanis
$$(x+h)^n - x^n = (x^n + ...) - x^n = n \cdot hx^{n-1} + ...$$
Azaz a binomiális tétel alapján látható, hogy a differencia képzése a polinom fokszámát eggyel csökkenti.
2. Ha az f függvény analitikus, és hatványsora „elég gyorsan" konvergál, akkor f n-edik differenciái nullához tartanak, midőn $n \to \infty$.
3. Polinom (analitikus fügvény) függvényértékeiben fellépő hiba továbbterjed a differenciatáblázatban, így a hiba magtalálható. Például ε nagyságú hiba terjedése az alábbi:

$$
\begin{array}{ccccc}
y & \Delta y & \Delta^2 y & \Delta^3 y & \\
 & & & & \\
0 & & & & \\
 & 0 & & & \\
0 & & 0 & & \\
 & 0 & & \varepsilon & \\
0 & & \varepsilon & & \\
 & \varepsilon & & -3\varepsilon & \\
\varepsilon & & -2\varepsilon & & \cdots \\
 & -\varepsilon & & 3\varepsilon & \\
0 & & \varepsilon & & \\
 & 0 & & -\varepsilon & \\
0 & & 0 & & \\
 & 0 & & & \\
0 & & & &
\end{array}
$$

1.4. ÁBRA. A hiba terjedése a differenciatáblázatban

Azaz a hiba a Pascal-háromszög szerint terjed.

1.3. Példa. Hol a hiba?

$$
\begin{array}{cccc}
y & \Delta y & \Delta^2 y & \Delta^3 y \\
 & & & \\
1 & & & \\
 & 3 & & \\
4 & & 2 & \\
 & 5 & & 0 \\
9 & & 2 & \\
 & 7 & & -1 \\
16 & & 1 & \\
 & 8 & & 3 \\
24 & & 4 & \\
 & 12 & & -3 \\
36 & & 1 & \\
 & 13 & & 1 \\
49 & & 2 & \\
 & 15 & & 0 \\
64 & & 2 & \\
 & 17 & & \\
81 & & &
\end{array}
$$

24 helyett 25 a jó függvényérték. □

1.5. A Fraser-diagram

Legyen $t = \frac{x-x_0}{h}$.

$$
\begin{array}{cccc}
y & \Delta y & \Delta^2 y & \Delta^3 y \\
\vdots & & & \\
y_{-3} & & & \\
\binom{t+2}{0} & \Delta y_{-3} & & \\
y_{-2} & \binom{t+2}{1} & \Delta^2 y_{-3} & \\
\binom{t+1}{0} & \Delta y_{-2} & \binom{t+2}{2} & \Delta^3 y_{-3} \\
y_{-1} & \binom{t+1}{1} & \Delta^2 y_{-2} & \binom{t+2}{3} \\
\binom{t}{0} & \Delta y_{-1} & \binom{t+1}{2} & \Delta^3 y_{-2} \\
y_0 & \binom{t}{1} & \Delta^2 y_{-1} & \binom{t+1}{3} \\
\binom{t-1}{0} & \Delta y_0 & \binom{t}{2} & \Delta^3 y_{-1} \\
y_1 & \binom{t-1}{1} & \Delta^2 y_0 & \binom{t}{3} \\
\binom{t-2}{0} & \Delta y_1 & \binom{t-1}{2} & \Delta^3 y_0 \\
y_2 & \binom{t-2}{1} & \Delta^2 y_1 & \\
\binom{t-3}{0} & \Delta y_2 & & \\
y_3 & & & \\
\vdots & & &
\end{array}
$$

1.5. ÁBRA. A Fraser-diagram

Definíció szerint

$$\binom{s}{i} = \frac{s(s-1)\cdots(s-i+1)}{i(i-1)\cdots 1}.$$

Mivel x_0 és k rögzített, így $\binom{t+i}{j}$ az x-nek j-edfokú polinomja. Ha $x = x_k$, akkor $\binom{t+i}{j} = \binom{k+i}{j}$.

A Fraser-diagram alapján az alábbi módon állíthatunk elő interpolációs polinomokat:

1. Az első oszlop egyik eleméből indulunk ki, és mindig egy él mentén haladunk tovább.
2. Leírjuk a kiinduló függvényértéket, ezután minden jobbra haladó út megtételekor hozzáadjuk a végpontbeli differencia és az
   (a) alatta lévő binomiális együttható (jobbra felfelé haladó út esetén),
   (b) fölötte lévő binomiális együttható (jobbra lefelé haladó út esetén)
   szorzatát.
   A balra haladó utak esetén az előzőek negatívját adjuk hozzá.

Néhány nevezetes interpolációs polinomhoz tartozó út és képlet.

Newton I. képlete (y_0-tól jobbra le a $\triangle^n y_0$-ig):

$$y_0 + \binom{t}{1} \triangle y_0 + \binom{t}{2} \triangle^2 y_0 + \cdots + \binom{t}{n} \triangle^n y_0.$$

Newton II. képlete (y_0-tól jobbra fel $\triangle^n y_{-n}$-ig):

$$y_0 + \binom{t}{1} \triangle y_{-1} + \binom{t+1}{2} \triangle^2 y_{-2} + \cdots + \binom{t+n-1}{n} \triangle^n y_{-n}.$$

Gauss I. képlete (y_0-tól jobbra le-fel):

$$y_0 + \binom{t}{1} \triangle y_0 + \binom{t}{2} \triangle^2 y_{-1} + \binom{t+1}{3} \triangle^3 y_{-1} + \binom{t+1}{4} \triangle^4 y_{-2} + \dots$$

Gauss II. képlete (y_0-tól jobbra fel-le):

$$y_0 + \binom{t}{1} \triangle y_{-1} + \binom{t+1}{2} \triangle^2 y_{-1} + \binom{t+1}{3} \triangle^3 y_{-2} + \binom{t+2}{4} \triangle^4 y_{-2} + \dots$$

Nem közvetlenül a Fraser-diagramból adódó képletek.

Stirling képlete (y_0-ból kiinduló Gauss I. és Gauss II. számtani közepe):

$$y_0 + \frac{t}{2} (\triangle y_0 + \triangle y_{-1}) + \frac{1}{2} \left[\binom{t}{2} + \binom{t+1}{2} \right] \triangle^2 y_{-1} + \dots$$

Bessel képlete (y_0-ból induló Gauss I. és az y_1-ből induló Gauss II. számtani közepe):

$$\frac{1}{2}(y_0 + y_1) + \left[\binom{t}{1} - \frac{1}{2} \right] \triangle y_0 + \frac{1}{2} \binom{t}{2} \left[\triangle^2 y_0 + \triangle^2 y_1 \right] + \dots$$

1.3. tétel. *Bármilyen kezdőpontból kiindulva bármilyen úton is jutunk el ugyanahhoz a differenciához, mindig algebrailag egyenértékű képleteket nyerünk. Ez pedig olyan Lagrange-féle interpolációs polinommal ekvivalens, ami ugyanazokra az alappontokra támaszkodik, amelyekből az út végén levő differencia származtatható.*

Bizonyítás.

1. Egy útszakasz oda és vissza való megtételénél az adalék tagok összege nulla.

2. Ha valamelyik függvényértékből kiindulva egy elsőrendű differencián át a szomszédos függvényértékekhez érünk, akkor az út első két tagja elhagyható:

$$\begin{tikzcd}
y_i & \binom{t-i}{1} \\
 & \Delta y_i \arrow[ul] \\
y_{i+1} \arrow[ur] & \binom{t-i-1}{1}
\end{tikzcd}$$

$$y_{i+1} + \binom{t-i-1}{1} \triangle y_i - \binom{t-i}{1} y_i =$$
$$= y_{i+1}(1 + (t-i-1) - (t-i)) + y_i(-(t-i-1) + (t-i)) = y_i.$$

3. Elemi rombuszon körbemenve, a négy tag összege nulla:

$$\begin{tikzcd}
 & \Delta^j y_{i-1} \arrow[dr] & \binom{t-i+1}{j+1} \\
\Delta^{j-1} y_i \arrow[ur] & \binom{t-i}{j} & \Delta^{j+1} y_{i-1} \arrow[dl] \\
 & \Delta^j y_i \arrow[ul] & \binom{t-i}{j+1}
\end{tikzcd}$$

$$\triangle^j y_{i-1} \cdot \binom{t-i}{j} + \triangle^{j+1} y_{i-1} \left[\binom{t-i+1}{j+1} - \binom{t-i}{j+1} \right] - \triangle^j y_i \binom{t-i}{j} =$$
$$= \binom{t-i}{j} \left(\triangle^j y_{i-1} + \triangle^{j+1} y_{i-1} - \triangle^j y_i \right) = 0,$$

ugyanis $\triangle^{j+1} y_{i-1} = \triangle^j y_i - \triangle^j y_{i-1}$.

4. Bármilyen zárt út adalékainak összege zérus. Hiszen a zárt utak adalékai felbonthatók elemi rombuszok adalékainak összegére.
5. A Fraser-diagramból nyert képletek függetlenek a kezdőponttól és az úttól, csak a végponttól függenek. Jelöljön ugyanis I és J két utat. A kezdőpontjaik 0 összegű utakkal összeköthetők, így azok azonosnak tekinthetők. $I - J$ zárt út, adalékainak összege 0, így I és J adalékainak összege egyenlő.
6. Newton I. formulája ekvivalens egy Lagrange-féle interpolációs polinommal.

$$N(t) = \sum_{j=0}^{n} \binom{t}{j} \triangle^j y_0 = \sum_{j=0}^{n} \binom{t}{j} \sum_{k=0}^{j} (-1)^{j-k} \binom{j}{k} y_k =$$
$$= \sum_{k=0}^{n} y_k \left[\sum_{j=k}^{n} (-1)^{j-k} \binom{j}{k} \binom{t}{j} \right].$$

Mivel Newton I. képlete legfeljebb n-edfokú polinom és az $y_0, y_1, \dots, y_n$ függvényértékekre támaszkodó $\triangle^n y_0$ differenciánál végződik, így elegendő belátni, hogy N az x_k alappontokban éppen y_k $(k = 0, 1, \dots, n)$. A $t = \frac{x - x_0}{h}$-ba beírva x helyett x_k-t, $t = k$ adódik. Tehát be kell látni, hogy y_k együtthatója $t = k$ esetén 1, $t \neq k$ esetén pedig 0.

(a) Ha $k > t$, akkor $\binom{t}{j}$ értéke $j \geq k > t$ miatt 0-val egyenlő, így y_k együtthatója 0.

(b) $k = t$ esetén $\binom{t}{j}$ értéke $j \geq k = t$ miatt 0, kivéve $j = k = t$ esetét, ekkor $(-1)^{k-k}\binom{k}{k}\binom{k}{k} = 1$ az y_k együtthatója.

(c) $k < t$ esetén, mivel $n \geq t$ és $\binom{t}{j} = 0$, ha $j > t$

$$\sum_{j=k}^{n} (-1)^{j-k} \binom{j}{k} \binom{t}{j} = \sum_{j=k}^{t} (-1)^{j-k} \binom{j}{k} \binom{t}{j} =$$

$$= \sum_{j=k}^{t} (-1)^{j-k} \binom{t}{k} \binom{t-k}{j-k} = \binom{t}{k} \sum_{l=0}^{t-k} (-1)^l \binom{t-k}{l} =$$

$$= \binom{t}{k} (1-1)^{t-k} = 0.$$

A második lépésben kihasználtuk, hogy

$$\frac{j!}{k!(j-k)!} \cdot \frac{t!}{j!(t-j)!} = \frac{(t-k)!}{(j-k)!(t-j)!} \cdot \frac{t!}{k!(t-k)!}. \qquad \square$$

1.4. Példa. Legyenek az alappontok és függvényértékek a következő 1.4 ábrán lévő táblázat első két oszlopában szereplő értékek:

	x_i	y_i	Δy_i	$\Delta^2 y_i$	$\Delta^3 y_i$	$\Delta^4 y_i$
			$\binom{t}{1}$			
x_0	0	0		$\binom{t}{2}$		
			1		$\binom{t}{3}$	
x_1	1	1		6		$\binom{t}{4}$
			7		6	
x_2	2	8		12		0
			19		6	
x_3	3	27		18		
			37			
x_4	4	64				

1.6. ÁBRA. Egy konkrét Fraser-diagram részlete

Határozzuk meg a $0,5$ helyen a közelítő függvényértéket!

MEGOLDÁS. Elkészítjük a differenciáltáblázatot és a Fraser-diagramot. A táblázat elején Newton I. képletét érdemes használni:

$$\begin{aligned}
&y_0 + \binom{t}{1} \cdot \triangle y_0 + \binom{t}{2} \cdot \triangle^2 y_0 + \cdots = \\
&= 0 + 0,5 \cdot 1 + \frac{0,5 \cdot (-0,5)}{1 \cdot 2} \cdot 6 + \frac{0,5 \cdot (-0,5) \cdot (-1,5)}{1 \cdot 2 \cdot 3} \cdot 6 + \binom{0,5}{4} \cdot 0 = \\
&= 0,5 - 3 \cdot 0,5^2 + 1,5 \cdot 0,5^2 = 0,5 \cdot (1 - 1,5 \cdot 0,5) = 0,5 \cdot 0,25 = 0,125 \qquad \square
\end{aligned}$$

1.3. megjegyzés. Mivel az interpoláció hibájában

$$\Omega_n = \max_{x \in [a,b]} (x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

szerepel, így az x-ben a függvényértéket olyan interpolációs polinommal célszerű meghatározni, mely az x-hez legközelebbi alappontokra épül.

1.6. Az Aitken-módszer

Rekurzív módszer a Lagrange-polinomok helyettesítési értékének kiszámítására (ha egyre több alappontot vonunk be).

Legyen $p_{n_1,\dots,n_k}$ az $x_{n_1}, \dots, x_{n_k}$ alappontokhoz tartozó Lagrange-polinom. Nyilván

$$p_{12}(x) = \frac{1}{x_2 - x_1} \begin{vmatrix} y_1 & x_1 - x \\ y_2 & x_2 - x \end{vmatrix}.$$

A rekurziós formula

$$p_{12\dots kn}(x) = \frac{1}{x_n - x_k} \begin{vmatrix} p_{12\dots k-1,k}(x) & x_k - x \\ p_{12\dots k-1,n}(x) & x_n - x \end{vmatrix}.$$

Nyilván $p_{1\dots kn}(x_k) = y_l$, ha $l = 1, \dots, k, n$. Ez pedig igazolja, hogy a formula tényleg az $x_1, \dots, x_k, x_n$ alappontokhoz tartozó Lagrange-féle interpolációs polinom.

A számolási séma:

$x_i - x$	$p_i(x) = y_i$					
$x_1 - x$	$p_1(x)$					
$x_2 - x$	$p_2(x)$	$p_{12}(x)$				
$x_3 - x$	$p_3(x)$	$p_{23}(x)$	$p_{123}(x)$			
$x_4 - x$	$p_4(x)$	$p_{34}(x)$	$p_{234}(x)$	$p_{1234}(x)$		
$\vdots$						
$x_{n-1} - x$	$p_{n-1}(x)$	$p_{n-2,n-1}(x)$	$p_{n-3,n-2,n-1}(x)$	$p_{n-4,n-3,n-2,n-1}(x) \cdots$		
$x_n - x$	$p_n(x)$	$p_{n-1,n}(x)$	$p_{n-2,n-1,n}(x)$	$p_{n-3,n-2,n-1,n}(x)$	$\cdots$	$p_{12\dots n}(x)$

1.7. ÁBRA. Az Aitken-módszer számolási sémája

1.7. Hermite-interpoláció

1.4. tétel. *Ha az* $x_1, x_2, \dots, x_m$ *alappontokban adottak a deriváltak is:*

$$f(x_j), f'(x_j), \dots, f^{(p_j-1)}(x_j), \qquad j = 1, 2, \dots, m,$$
$$p_1 + p_2 + \dots + p_m = n + 1,$$

akkor egyértelműen megadható olyan legfeljebb n-edfokú P polinom, melyre

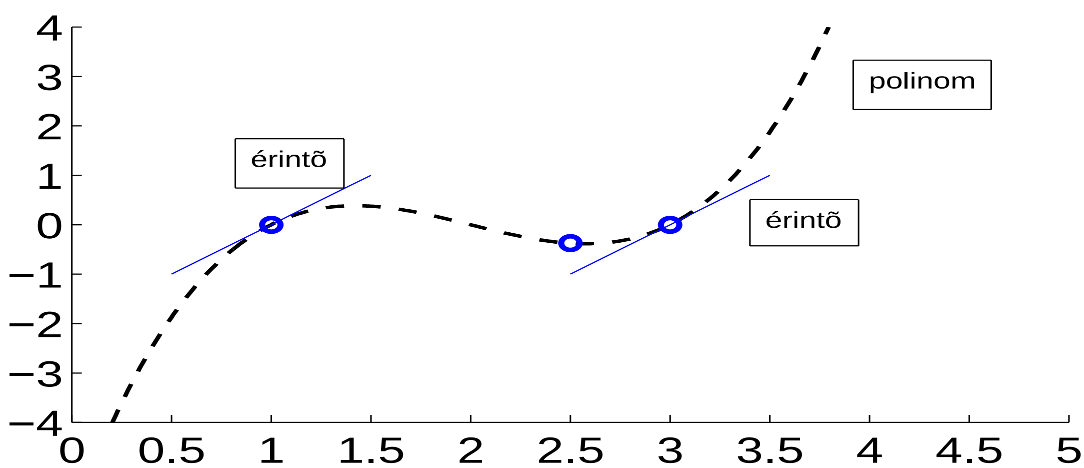
$$P_n^{(s)}(x_j) = f^{(s)}(x_j), \qquad s = 0, 1, \dots, p_j - 1,$$
$$j = 1, 2, \dots, m.$$

Bizonyítás.

$$P(x) = a_0 x^n + \dots + a_n$$

polinom esetén az $a_0, \dots, a_n$ ismeretlen együtthatókra a fenti feltételek egy $(n+1) \times (n+1)$-es lineáris egyenletrendszert határoznak meg. $f(x) \equiv 0$ esetén ez nyilván megoldható. Másrészt a megoldás mindig egyértelmű, ha van, hiszen ha P és Q két megoldás, akkor $P - Q$ olyan legfeljebb n-edfokú polinom, amelynek x_j p_j-szeres gyöke, azaz $P - Q$-nak $n + 1$ gyöke lenne, így $P - Q \equiv 0$.

A fentiek miatt a homogén egyenletrendszer is egyértelműen oldható meg, tehát a det $\neq 0$, így az inhomogén is megoldható. □



1.8. Ábra. 3 alappont, 2 alappontban adott derivált értékek esetén az Hermite-féle interpolációs polinom

2. Egyenletes közelítések

2.1. Az egyenletes közelítés kiszámítása

Legyenek $x_1, x_2, \ldots, x_N$ az alappontok, $y_1, y_2, \ldots, y_N$ a hozzájuk tartozó függvényértékek. Keresünk olyan legfeljebb n-edfokú p polinomot, amelyre

$$\max_{1\le k\le N} |y_k - p(x_k)|$$

minimális. Jelölje ezt a minimumot E_n.

Ismeretes, hogy ha H legalább $(n+1)$ pontból álló korlátos zárt halmaz, $f : H \to \mathbb{R}$ folytonos, akkor egyértelműen létezik legfeljebb n-edfokú, f-et egyeneletesen legjobban közelítő polinom.

Továbbá, ha H legalább $(n+2)$ pontból áll, akkor H-ból kiválasztható olyan $x_1, \ldots, x_{n+2}$ pontrendszer, melynek tagjain az $f-p$ különbség felváltva $+E_n$, illetve $-E_n$.

Tegyük fel, hogy $H = \{x_1, \ldots, x_{n+2}\}$ és adjuk meg a p polinomot. Az előzőekből

$$f(x_k) - p(x_k) = (-1)^{k+1} sE_n, \qquad k = 1, 2, \ldots, n+2, \quad s = \pm 1.$$

Innen

$$(-1)^{k+1} sE_n + c_0 + c_1 x_k + \cdots + c_n x_k^n = f(x_k), \qquad k = 1, 2, \ldots, n+2.$$

Ezen lineáris egyenletrendszer mátrixos alakban

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & x_1 & x_1^2 & x_1^n \\ -1 & 1 & x_2 & x_2^2 & x_2^n \\ \vdots & & & & \\ (-1)^{n-1} & 1 & x_{n+2} & x_{n+2}^2 & x_{n+2}^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} sE_n \\ c_0 \\ c_1 \\ \vdots \\ c_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_{n+2}) \end{pmatrix}.$$

Innen Cramer-szabállyal:

$$sE_n = \frac{D_f}{D} = \frac{f(x_1)D_1 - f(x_2)D_2 + \cdots + (-1)^{n-1} f(x_{n+2}) D_{n+2}}{D_1 + \cdots + D_{n+2}},$$

ahol D_k az $x_1, \ldots, x_{k-1}, x_{k+1}, \ldots, x_{n+2}$ pontokra épülő Vandermonde-determináns. Ha sE_n pozitív, akkor $s = +1$, egyébként $s = -1$. Így

$$p(x_k) = f(x_k) - (-1)^{k+1} sE_n, \qquad k = 1, \ldots, n+2.$$

Innen p Lagrange-interpolációval megadható.

Ha H véges sok pontból áll, akkor bármely pont $(n+2)$-esre elvégezzük az előbbit, és az lesz a keresett polinom, melyre E_n minimális.

2.2. A Bernstein–polinomok

A Csebisev–egyenlőtlenség egy speciális alakja gyors bizonyítást kínál Weierstrass tételére. Legyen S_n (n, p) paraméterű binomiális eloszlású, $q = 1-p$. Ekkor $\mathbb{E}(S_n/n) = p$ és $\mathbb{D}^2(S_n/n) = pq/n$, így a Csebisev–egyenlőtlenségből

$$P\left(\left|\frac{S_n}{n} - p\right| \geq \varepsilon\right) \leq \frac{pq}{n\varepsilon^2} \leq \frac{1}{4n\varepsilon^2}. \tag{2.1}$$

Legyen $f : [0,1] \to \mathbb{R}$ folytonos függvény. Az f–hez tartozó n–edik Bernstein–polinomnak a

$$B_n(p) = \sum_{k=0}^{n} f\left(\frac{k}{n}\right)\binom{n}{k} p^k q^{n-k}$$

polinomot nevezzük. (Lássuk be, hogy $B_n(p)$ legfeljebb n–edfokú polinom!) S_n és a Bernstein-polinom kapcsolatát a nyilvánvaló

$$\mathbb{E} f(S_n/n) = B_n(p)$$

összefüggés fejezi ki.

Mivel f korlátos zárt intervallumon folytonos, így egyenletesen folytonos és korlátos. Tehát létezik $M \in \mathbb{R}$, hogy $|f(x)| \leq M$ bármely $x \in [0,1]$–re, továbbá tetszőleges $\varepsilon > 0$ esetén létezik $\delta > 0$, hogy $|f(x) - f(y)| \leq \varepsilon$, hacsak $|x - y| \leq \delta$. Ezek alapján

$$\begin{aligned}
|f(p) - B_n(p)| &= \left|\sum_{k=0}^{n}\left[f(p) - f\left(\frac{k}{n}\right)\right]\binom{n}{k} p^k q^{n-k}\right| \leq \\
&\leq \sum_{\{k\,:\,|p-k/n|\leq\delta\}} \left|f(p) - f\left(\frac{k}{n}\right)\right| \binom{n}{k} p^k q^{n-k} + \\
&+ \sum_{\{k\,:\,|p-k/n|>\delta\}} \left|f(p) - f\left(\frac{k}{n}\right)\right| \binom{n}{k} p^k q^{n-k} \leq \\
&\leq \varepsilon + 2M \sum_{\{k\,:\,|p-k/n|>\delta\}} \binom{n}{k} p^k q^{n-k}.
\end{aligned}$$

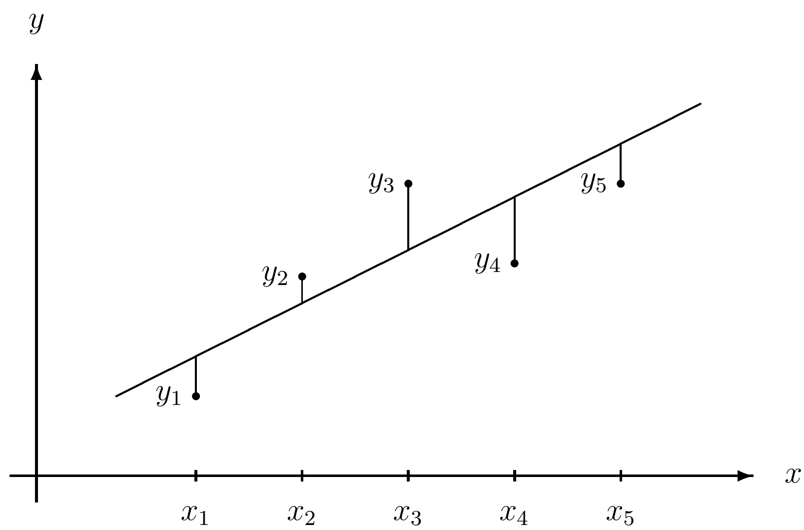
A (2.1) egyenlőtlenség miatt a második tag felülről becsülhető $2M/(4n\delta^2)$ –tel. Ily módon megkaptuk Weierstrass tételét:

$$\lim_{n\to\infty} \max_{0\leq p\leq 1} |f(p) - B_n(p)| = 0.$$

3. Legkisebb négyzetes közelítések

3.1. Egyenes illesztése

3.1. Példa. Valamely fizikai mennyiségre végezzünk méréseket az $x_1, \ldots, x_5$ alappontokban. Az eredményeket jelölje $y_1, \ldots, y_5$. Ábrázoljuk az összetatozó értékpárokat koordinátarendszerben, és illesszünk a pontokra egyenest!



3.1. ÁBRA. 5 mérési pontra illesztett egyenes

Az általános feladat. Az $(x_1, y_1), \ldots, (x_n, y_n)$ pontokra illesszünk egyenest. (Itt y_i lehet az $f(x_i)$ függvényérték, de lehet az $f(x_i) + \varepsilon_i$ hibával terhelt megfigyelés is.) Jelölje $ax + b$ az illesztendő egyenest, és határozzuk meg az a és a b értékét úgy, hogy a

$$G(a, b) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - (ax_i + b))^2 \tag{3.1}$$

négyzetösszeg minimális legyen. Ez a legkisebb négyzetek elve.

A fenti kétváltozós függvény minimumát deriválással határozzuk meg.

$$\begin{cases} 0 = \frac{\delta G}{\delta a} = 2 \sum (y_i - (ax_i + b)) (-x_i), \\[2ex] 0 = \frac{\delta G}{\delta b} = 2 \sum (y_i - (ax_i + b)) (-1). \end{cases}$$

Ebből

$$\begin{cases} \sum y_i x_i - a \sum x_i^2 - b \sum x_i = 0, \\[2ex] \sum y_i - a \sum x_i - b \cdot n = 0. \end{cases}$$

Vezessük be az alábbi jelöléseket:

$$\overline{y} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i, \qquad \overline{x} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i,$$

$$s_y^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i^2 - \overline{y}^2,$$

$$s_x^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2 = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \overline{x}^2,$$

$$\rho_{xy} = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} (y_i - \overline{y})(x_i - \overline{x}) = \frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} y_i x_i - \overline{x}\,\overline{y}.$$

Ezek alapján a fenti egyenletrendszer:

$$\begin{cases} \rho_{xy} + \overline{x}\,\overline{y} - a\,(s_x^2 + \overline{x}^2) - b\overline{x} = 0, \\ \\ \overline{y} - a\overline{x} - b = 0. \end{cases}$$

Innen

$$b = \overline{y} - a\overline{x},$$

és

$$\rho_{xy} + \overline{x}\,\overline{y} - a\left(s_x^2 + \overline{x}^2\right) - \overline{x}\,\overline{y} + a\overline{x}^2 = 0.$$

Így

$$a = \frac{\rho_{xy}}{s_x^2}, \qquad b = \overline{y} - \frac{\rho_{xy}}{s_x^2}\overline{x}.$$

A G második deriváltjából álló mátrix:

$$2 \cdot \begin{pmatrix} \sum_{i=1}^{n} x_i^2 & \sum_{i=1}^{n} x_i \\ \\ \sum_{i=1}^{n} x_i & n \end{pmatrix}.$$

Ezen mátrix első főminora $\sum_{i=1}^{n} x_i^2$. A második főminora $n\sum_{i=1}^{n} x_i^2 - \left(\sum_{i=1}^{n} x_i\right)^2 = n\sum_{i=1}^{n} (x_i - \overline{x})^2$. Tehát – ha van két különböző x_i alappont – mindkét főminor pozitív. Azaz a mátrix pozitív definit. Tehát az előző a és b érték minimumhelyet határoz meg.

A kapott közelítés

$$y \approx \frac{\rho_{xy}}{s_x^2}x + \overline{y} - \frac{\rho_{xy}}{s_x^2}\overline{x},$$

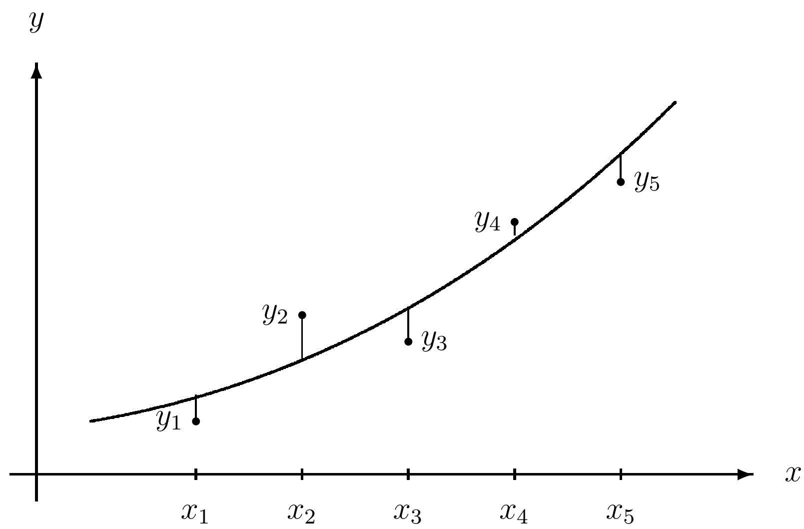
illetve szimmetrikus formában:

$$\frac{y - \overline{y}}{s_y} \approx \frac{\rho_{xy}}{s_x s_y} \cdot \frac{x - \overline{x}}{s_x}.$$

Az egyenes illesztést a statisztikában lineáris regressziónak nevezik. A legutolsó „egyenlet" statisztikai jelentése: az y változó $\frac{y-\overline{y}}{s_y}$ standardizáltja és az x változó $\frac{x-\overline{x}}{s_x}$ standardizáltja közötti legjobb lineáris összefüggés esetén az együttható a $\frac{\rho_{xy}}{s_x s_y}$ korrelációs együttható.

3.2. Függvények illesztése a legkisebb négyzetek elve alapján

3.2. Példa. Illesszünk parabolát 5 mérési pontra!



3.2. ÁBRA. 5 mérési pontra illesztett parabola

A parabolát $c_0 + c_1x + c_2x^2$ alakban keressük.

Az általános feladat. Legyen ismert az $f : \mathbb{R} \to \mathbb{R}$ függvény értéke az $x_1, \ldots, x_n$ alappontokban: $f(x_i) = y_i,\ i = 1, \ldots, n$. Közelítsük f-et a $\Phi(x) = \sum_{k=0}^{m} c_k\phi_k(x)$ alakú függvénnyel, ahol $\phi_0, \phi_1, \ldots, \phi_m$ adott függvények, $c_0, c_1, \ldots, c_m$ pedig meghatározandó együtthatók. Polinommal való közelítés esetén $\phi_0(x) = 1$, $\phi_1(x) = x$, $\ldots$, $\phi_m(x) = x^m$. Trigonometrikus polinommal való közelítés esetén $\phi_0(x) = 1$, $\phi_1(x) = \sin x$, $\phi_2(x) = \cos x$, $\ldots$.

A c_k együtthatókat a legkisebb négyzetek elve alapján a

$$G(c) = \sum_{i=1}^{n} (y_i - \Phi(x_i))^2 \tag{3.2}$$

minimalizálásával határozzuk meg.

Jelölések:

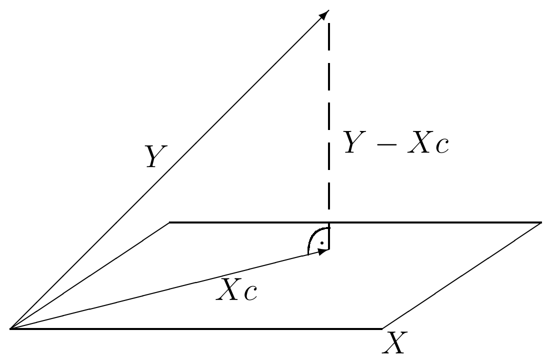
$$Y = \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix}, \quad X = \begin{pmatrix} \phi_0(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \vdots & & \\ \phi_0(x_n) & \cdots & \phi_m(x_n) \end{pmatrix}, \quad c = \begin{pmatrix} c_0 \\ \vdots \\ c_m \end{pmatrix}. \tag{3.3}$$

Ekkor

$$G(c) = \|Y - Xc\|^2.$$

Azaz az Y vektorhoz keressük az X oszlopvektorai lineáris kombinációi közül a hozzá legközelebbit. Ismeretes, hogy a legközelebbi vektor éppen Y merőleges vetülete az

X oszlopai által generált altérre. Azaz $Y - Xc$ merőleges az X oszlopai alterére: $Y - Xc \perp X$.



3.3. ÁBRA. Az Y vektor merőleges vetlete az X oszlopai által kifeszített altérre

A merőlegességi relációk éppen az $X^\top (Y - Xc) = 0$ egyenletrendszert adják. Innen az

$$X^\top X c = X^\top Y \tag{3.4}$$

ún. *normálegyenlet* c megoldásai a keresett együtthatók. Ha $X^\top X$ invertálható, akkor

$$c = \left(X^\top X\right)^{-1} X^\top Y.$$

$X^\top X$ nem mindig invertálható, de a normálegyenletnek mindig van (esetleg több) megoldása.

3.1. feladat. Legyen $X^\top X$ invertálható. Lássuk be, hogy $X\left(X^\top X\right) X^\top$ az X oszlopai által generált altérre való merőleges vetítés mátrixa.

3.2. feladat. Lássuk be, hogy $X^\top X$ akkor és csak akkor invertálható, ha X oszlopai függetlenek!

MEGOLDÁS. Ha X oszlopai függőek, akkor $\exists a \neq 0$, hogy $Xa = 0$. Így $X^\top X a = 0$.

Megfordítva, ha $X^\top X$ nem invertálható, akkor $\exists a \neq 0$, hogy $X^\top X a = 0$. Így $0 = a^\top X^\top X a = \|Xa\|^2$, azaz $Xa = 0$. □

3.1. megjegyzés. $X^\top X$ az X oszlopvektorainak Gram-mátrixa.

3.3. Lineáris algebra: altértől való távolság

3.1. tétel. *Legyen f eleme, G pedig altere egy végesdimenziós euklideszi térnek. Ekkor létezik (egyértelműen) olyan $v_0 \in G$, hogy*

$$\|f - v_0\| = \min_{v \in G} \|f - v\|. \tag{3.5}$$

Erre az elemre

$$f - v_0 \perp v, \qquad \forall v \in G. \tag{3.6}$$

v_0-at nevezzük az f merőleges vetületének, $(f - v_0)$-at pedig ortogonális komplementerének.

Bizonyítás. Először belátjuk: (3.5)$\Rightarrow$(3.6).

Tegyük fel indirekt, hogy $\exists v_1 \in G$, melyre

$$\langle f - v_0, v_1 \rangle = c \neq 0.$$

Feltehetjük, hogy $\|v_1\| = 1$. Ekkor $v_2 = v_0 + cv_1$ vektor G-beli és erre

$$\|f - v_2\|^2 = \langle f - v_0 - cv_1, f - v_0 - cv_1 \rangle = \|f - v_0\|^2 - 2\langle f - v_0, cv_1 \rangle + \|cv_1\|^2 = \\ = \|f - v_0\|^2 - c^2 < \|f - v_0\|^2.$$

Azaz $v_2 \in G$ közelebb lenne f-hez, mint v_0. Ez ellentmondás.

Legyen $u_1, \ldots, u_l$ bázisa G-nek. Ekkor v_0-at $v_0 = c_1 u_1 + \cdots + c_l u_l$ alakban kell keresni. (3.6) pedig éppen akkor teljesül, ha $f - v_0 \perp u_i$, $i = 1, \ldots, l$. Ezek a relációk éppen $\langle f - v_0, u_i \rangle = 0$, $i = 1, \ldots, l$, azaz

$$\begin{cases} c_1 \langle u_1, u_1 \rangle + \cdots + c_l \langle u_1, u_l \rangle = \langle u_1, f \rangle \\ \vdots \\ c_1 \langle u_l, u_1 \rangle + \cdots + c_l \langle u_l, u_l \rangle = \langle u_l, f \rangle \end{cases}.$$

Ennek az egyeneltrendszernek a mátrixa éppen az $u_1, \ldots, u_l$ bázis Gram-mátrixa. Ez nem elfajuló, így egyértelmű megoldás van. Ezen $c_1, \ldots, c_l$-lel képzett $v_0 = c_1 u_1 + \ldots, c_l u_l$ az egyetlen G-beli elem, melyre (3.6) teljesül.

Belátjuk, hogy erre a v_0-ra tényleg teljesül (3.5). Legyen $v = v_0 + \widetilde{v} \in G$ tetszőleges. Ekkor

$$\|f - v\|^2 = \|f - v_0 - \widetilde{v}\|^2 = \|f - v_0\|^2 + \|\widetilde{v}\|^2 > \|f - v_0\|^2,$$

ha $\widetilde{v} \neq 0$. (Kihasználtuk, hogy $\widetilde{v} \in G$, és így $f - v_0 \perp \widetilde{v}$.) □

3.2. tétel. *Az $u_1, \ldots, u_l$ vektorrendszer*

$$U = \begin{bmatrix} \langle u_1, u_1 \rangle, \ldots, \langle u_1, u_l \rangle \\ \vdots \\ \langle u_l, u_1 \rangle, \ldots, \langle u_l, u_l \rangle \end{bmatrix}$$

Gram-mátrixa akkor és csak akkor nem elfajuló, ha $u_1, \ldots, u_l$ lineárisan függetlenek.

Bizonyítás. Ha $u_1, \ldots, u_l$ függőek, akkor valamely $c_1, \ldots, c_l$ (nem mind 0) számokra $c_1 u_1 + \cdots + c_l u_l = 0$. De ekkor U oszlopai $c_1, \ldots, c_l$ együtthatókkal képzett lineáris kombinációja 0, azaz U elfajuló.

Megfordítva, tegyük fel, hogy U elfajuló. Ekkor valamely $c_1, \ldots, c_l$ (nem mind 0) számokkal U oszlopaiból a 0 vektor kikombinálható.

Legyen $f = c_1 u_1 + \cdots + c_m u_m$. Ekkor

$$\|f\|^2 = \langle f, f \rangle = \left\langle \sum c_i u_i, \sum c_j u_j \right\rangle = \sum_j c_j \underbrace{\sum_i c_i \langle u_i, u_j \rangle}_{=0} = 0,$$

mert $Uc = 0$. Így $f = 0$ vektor. Azaz $u_1, \ldots, u_l$ nemtriviális lineáris kombinációja 0, tehát $u_1, \ldots, u_l$ függő rendszer. □

3.4. Közelítés polinommal

3.2. megjegyzés. Speciális eset. Polinommal való közelítés esetén $\phi_k(x) = x^k$, $k = 0, \dots, m$. Ekkor

$$X = \begin{pmatrix} 1 & x_1 & \dots & x_1^m \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ 1 & x_n & & x_n^m \end{pmatrix}.$$

Legyen $S_k = \sum_{i=1}^n x_i^k$. Ekkor a normálegyenlet:

$$\begin{cases} S_0 c_0 + S_1 c_1 + \dots + S_m c_m = M_0 \\ \vdots \\ S_m c_0 + S_{m+1} c_1 + \dots + S_{2m} c_m = M_m \end{cases}$$

alakú.

Legyenek speciálisan az $x_1, \dots, x_n$ alappontok a $[0,1]$-ben ekvidisztásak. Ekkor nagy n esetén

$$S_k = \sum_{i=1}^n x_i^k \approx n \int_0^1 x^k \, dx = \frac{n}{k+1}.$$

Így a normálegyenlet mátrixa

$$X^\top X \approx n \begin{pmatrix} 1 & \frac{1}{2} & \frac{1}{3} & \dots & \frac{1}{m+1} \\ \vdots & & & & \\ \frac{1}{m+1} & & \dots & & \frac{1}{2m+1} \end{pmatrix}.$$

Az $\frac{1}{n}\left(X^\top X\right)$ mátrix inverzének nagy m esetén nagyon nagyok az elemei (a mátrix gyengén meghatározott). Az inverz számolásakor a hiba nagyon megnő (l. Móricz [**2**], 298. o.).

Ortogonalizálás. Tegyük fel, hogy az $1, x, x^2, \dots$ lineáris kombinációjával közelítünk. Használjuk a fenti rendszer $q_0, q_1, q_2, \dots$ (Schmidt-féle) ortogonalizáltját. Erre

$$q_0(x) \equiv 1$$

$$q_{k+1} \perp q_l \quad (l \le k), \quad \text{és} \quad q_k \in \mathcal{L}\left\{1, x, \dots, x^k\right\}.$$

A fentiekből:

$$q_{k+1} = \lambda_0 q_0 + \dots + \lambda_k q_k + x^{k+1} \perp q_0, q_1, \dots, q_k.$$

Ezekből az ortogonalitási relációkból:

$$\lambda_i \langle q_i, q_i \rangle + \left\langle x^{k+1}, q_i \right\rangle = 0, \qquad i = 0, 1, \dots, k.$$

Innen a λ_i együtthatók kifejezhetőek.

(Megjegyezzük, hogy a fenti belső szorzat az alappontokra nézve értendő:

$$\langle q_i, q_j \rangle := \sum_{l=1}^n q_i(x_l) q_j(x_l).)$$

Ha a q_i ortogonalizált polinomok már kész vannak, akkor az $f \approx c_1 q_0 + \dots + c_m q_m$ közelítésben az együtthatók, az $\langle f - (c_0 q_0 + \dots + c_m q_m), q_i \rangle = 0$ ortogonalitási reláció alapján, $\langle f, q_i \rangle - c_i \langle q_i, q_i \rangle = 0$-ból számolhatóak.

Az előny, hogy az egyre magasabb fokú q_i-ket egyenként lehet bevonni, az előző együtthatók újraszámolása nélkül. Addig vonunk be újabb q_m-et, amíg a

$$\|f - (c_0 q_0 + \cdots + c_m q_m)\|^2$$

jelentősen csökken.

III. fejezet
Közelítő differenciálás és integrálás

1. Közelítő differenciálás

Közelítsük az $f(x)$ függvényt az $x_1, ..., x_n$ alappontokra épülő p Lagrange-féle interpolációs polinommal. A közelítés hibája:

$$f(x) - p(x) = \frac{\omega_n(x)}{n!} f^{(n)}(\xi), \tag{1.1}$$

ahol ξ az x-től függ és $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$.

1.1. tétel. *Ha az $x_1, ..., x_n, x$ pontokat tartalmazó $[a, b]$ intervallumban az f függvény $(n + j)$-szer folytonosan differenciálható, akkor*

$$\frac{1}{n!} \frac{d^j}{dx^j} f^{(n)}(\xi(x)) = \frac{1}{(n+j)!} f^{(n+j)}(\eta_j), \tag{1.2}$$

ahol $\eta_j \in [a, b]$.

Bizonyítás. Legyen x nem alappont. $j = 1$ esetén bizonyítjuk, $j > 1$-re hasonló a bizonyítás. Legyen $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$. Ekkor

$$\omega_n'(x) = \sum_{i=1}^{n} (x - x_1) \cdots (x - x_{i-1})(x - x_{i+1}) \cdots (x - x_n). \tag{1.3}$$

Ebből $\omega_n'(x_k) = (x_k - x_1) \cdots (x_k - x_{k-1})(x_k - x_{k+1}) \cdots (x_k - x_n)$. Ez alapján az $l_k(x) = \prod_{i \neq k} \frac{(x - x_i)}{x_k - x_i}$ Lagrange-féle alappolinomra

$$l_k(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - x_k)\omega_n'(x_k)}. \tag{1.4}$$

Válasszuk $[a, b]$-ben egy újabb x_{n+1} alappontot. Ekkor

$$\omega_{n+1}(x) = (x - x_{n+1})\omega_n(x), \quad \omega_{n+1}'(x) = \omega_n(x) + (x - x_{n+1})\omega_n'(x). \tag{1.5}$$

Innen

$$\omega_{n+1}'(x_j) = \begin{cases} \omega_n(x_{n+1}), & \text{ha} \quad j = n + 1; \\ (x_j - x_{n+1})\omega_n'(x_j), & \text{ha} \quad j < n + 1. \end{cases} \tag{1.6}$$

A Lagrange-interpoláció

$$\begin{aligned} f(x) &= p(x) + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \omega_n(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) l_k(x) + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \omega_n(x) = \\ &= \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)\omega_n(x)}{(x - x_k)\omega_n'(x_k)} + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \omega_n(x). \end{aligned} \tag{1.7}$$

(1.7)-et az $(n + 1)$-re felírva:

$$\begin{aligned} f(x) = &\sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)\omega_n(x)(x - x_{n+1})}{(x - x_k)(x_k - x_{n+1})\omega_n'(x_k)} + \\ &+ \frac{f(x_{n+1})\omega_n(x)(x - x_{n+1})}{(x - x_{n+1})\omega_n(x_{n+1})} + \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x). \end{aligned}$$

Ebből átrendezéssel

$$\frac{\frac{f(x)}{\omega_n(x)} - \frac{f(x_{n+1})}{\omega_n(x_{n+1})}}{x - x_{n+1}} = \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{(x-x_k)(x_k - x_{n+1})\omega_n'(x_k)} + \frac{f^{(n+1)}(\eta)}{(n+1)!}.$$

Ha $x_{n+1} \to x$, akkor a bal oldal $\frac{d}{dx}\left[\frac{f(x)}{\omega_n(x)}\right]$-hez tart. A jobb oldalon x_{n+1}-hez tartozik $\eta(x_{n+1}) \in [a,b]$. Ezen η-k sorozatából (midőn x_{n+1} egy sorozaton át tart x-hez) a Bolzano-Weierstrass-tétel alapján kiválasztható konvergens részsorozat. Erre a konvergens részsorozatra a határátmenet:

$$\frac{d}{dx}\frac{f(x)}{\omega_n(x)} = \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{-(x-x_k)^2\omega_n'(x_k)} + \frac{f^{(n+1)}(\eta_1)}{(n+1)!}.$$

Másrészt (1.7)-et $\omega_n(x)$-szel osztva és deriválva:

$$\frac{d}{dx}\frac{f(x)}{\omega_n(x)} = \sum_{k=1}^{n} \frac{f(x_k)}{-(x-x_k)^2\omega_n'(x_k)} + \frac{d}{dx}\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}.$$

A két utolsó képletből

$$\frac{d}{dx}\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} = \frac{1}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\eta_1).$$

Ezzel a tételt beláttuk, ha x nem alappont.

Ha x alappont, akkor x-et nem alappontok szorzatával közelítjük, és a folytonosságot használjuk. □

Határozzuk meg az $f(x)$ függvény deriváltjainak közelítő értékét a Lagrange-féle interpolációs polinom segítségével! Legyen f $(n+j)$-szer folytonosan differenciálható.

$$f(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) l_k(x) + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x).$$

j-szer deriválva:

$$f^{(j)}(x) = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) l_k^{(j)}(x) + \frac{d^j}{dx^j}\left[\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x)\right]. \tag{1.8}$$

A Leibniz-formulát és az előző tételt használva:

$$\begin{aligned} f^{(j)}(x) &= \sum_{k=1}^{n} f(x_k) l_k^{(j)}(x) + \sum_{i=0}^{j} \binom{j}{i} \frac{d^i}{dx^i}\frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} \cdot \frac{d^{j-i}}{dx^{j-i}}\omega_n(x) = \\ &= \underbrace{\sum_{k=1}^{n} f(x_k) l_k^{(j)}(x)}_{\text{a derivált közelítő értéke}} + \underbrace{\sum_{i=0}^{j} \binom{j}{i} \frac{f^{(n+i)}(\eta_i)}{(n+i)!}\omega_n^{(j-i)}(x)}_{\text{a közelítés hibája}}. \end{aligned} \tag{1.9}$$

Legyenek most az x_k alappontok ekvidisztánsak, és alkalmazzuk Newton I. képletét!

$$f(x) = f(x_0 + th) \approx \sum_{k=0}^{n} \binom{t}{k} \triangle^k y_0,$$

ahol $t = \frac{x-x_0}{h}$. Ebből $\frac{dt}{dx} = \frac{1}{h}$, így

$$f^{(j)}(x) \approx \frac{d^j}{dt^j}\sum_{k=0}^{n}\binom{t}{k} \triangle^k y_0 \cdot \frac{1}{h^j} = \frac{1}{h^j}\sum_{k=j}^{n}\frac{d^j}{dt^j}\binom{t}{k}\triangle^k y_0, \tag{1.10}$$

mivel $\binom{t}{k}$ t-nek k-adfokú polinomja, így $k < j$ esetén a j-edik deriváltja 0.

Speciálisan, $j = n$ esetén

$$f^{(n)}(x) \approx \frac{1}{h^n}\frac{d^n}{dt^n}\binom{t}{n} \triangle^n y_0 = \frac{1}{h^n} \triangle^n y_0, \tag{1.11}$$

hiszen $\binom{t}{n} = \frac{1}{n!}t^n + \ldots$, ezért ennek t szerinti n-edik deriváltja 1.

1.1. Példa. $n = 1$ esetén

$$f'(x) \approx \frac{\triangle y_0}{h} = \frac{y_1 - y_0}{h}.$$

$n = 2$ esetén

$$f''(x) \approx \frac{\triangle^2 y_0}{h^2} = \frac{\triangle y_1 - \triangle y_0}{h^2} = \frac{y_2 - 2y_1 + y_0}{h^2}.$$

2. Közelítő integrálás

2.1. Newton-Cotes-formulák

Legyen f az $[a,b]$-n n-szer differenciálható, ekkor a Lagrange-féle interpoláció:

$$f(x) = p(x) + \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x). \tag{2.1}$$

Használjuk ezt a formulát az integrál közelítésére:

$$\int_a^b f(x)dx = \underbrace{\int_a^b p(x)dx}_{\text{az integrál közelítése}} + \underbrace{\int_a^b \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!}\omega_n(x)dx}_{\text{a közelítés hibája}}. \tag{2.2}$$

Ez alapján a Newton-Cotes-formula:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b \sum_{k=1}^{n} f(x_n)l_k(x)dx = \sum_{k=1}^{n} f(x_k)\underbrace{\int_a^b l_k(x)dx}_{A_k}. \tag{2.3}$$

Itt $l_k(x)$ a k-adik Lagrange-alappolinom.

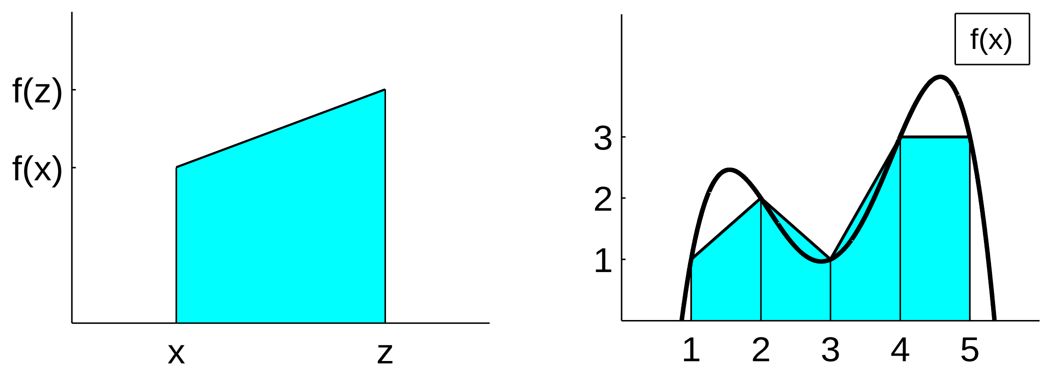
Az A_k mennyiségek csak az alappontok megválasztásától függenek. Megjegyezzük, hogy a Newton-Cotes-formulák pontosak a legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinomokra. (Ha az intervallum végpontjai alappontok, akkor zárt Newton-Cotes-formuláról beszélünk.)

2.1. megjegyzés. (2.3) az *egyszerű Newton-Cotes-formula*. Amikor az $[a,b]$ intervallumot részekre bontjuk, és a részintervallumokon adódó egyszerű formulákat összegezzük, az *összetett Newton-Cotes-formulához* jutunk.

2.2. A trapéz formula

Legyen az $[a, b]$ ekvidisztáns beosztása

$$a = x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n = b, \qquad h = \frac{b-a}{n}. \tag{2.4}$$



2.1. ÁBRA. Egyszerű és összetett trapéz formula

A trapéz formula a Newton-Cotes-formulából két alappont választásával adódik:

$$\begin{aligned}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)dx &\approx \sum_{i=1}^{2} f(x_{k-1+i}) \int_{x_k}^{x_{k+1}} l_i(x)dx = \\ &= f(x_k)\int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{x-x_{k+1}}{x_k-x_{k+1}}dx + f(x_{k+1})\int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{x-x_k}{x_{k+1}-x_k}dx = \\ &= \frac{h}{2}\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right].\end{aligned} \tag{2.5}$$

Ez az *egyszerű trapéz formula.*
A részintervallumokon vett közelítések összege az *összetett trapéz formula*:

$$\int_a^b f(x)dx \approx h\left[\frac{1}{2}f(x_0)+f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_{n-1})+\frac{1}{2}f(x_n)\right] = t_n. \tag{2.6}$$

Az egyes részintervallumokon a közelítés hibája:

$$\int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{f''(\xi_k)}{2!}\omega_2(x)dx = \int_{x_k}^{x_{k+1}} \frac{f''(\xi_k)}{2}(x-x_k)(x-x_{k+1})dx = h^3\int_0^1 \frac{f''(\xi_k)}{2}t(t-1)dt,$$

ahol $t = \frac{x-x_k}{h}$. Így – mivel $t(t-1)$ előjeltartó – az integrálszámítás középérték tételéből:

$$h^3\int_0^1 \frac{f''(\xi_k)}{2}t(t-1)dt = -\frac{h^3 f''(\eta_k)}{12}. \tag{2.7}$$

A t_n *trapéz formula hibája* a részintervallumokon adódó hibák összege:

$$\delta_{t_n} = -\sum_{k=0}^{n-1} \frac{h^3 f''(\eta_k)}{12} = \frac{-h^3}{12} \sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k).$$

Így Darboux tételéből (a derivált minden közbülső értéket felvesz):

$$\delta_{t_n} = \frac{-h^3}{12} n f''(\eta) = -\frac{\left(\frac{b-a}{n}\right)^3}{12} n f''(\eta) = -\frac{(b-a)^3}{12n^2} f''(\eta), \tag{2.8}$$

ahol $\eta \in (a, b)$.

2.3. Az érintő formula

Az érintő formulát a Newton-Cotes-formulából a következő módon kapjuk. Legyenek $y_1, ..., y_n$ az $[a, b]$ intervallumot n egyenlő részre osztó intervallumok felezőpontjai.

ÁBRA

Alkalmazzuk a Newton-Cotes-formulát egy részintervallumra: $l_k(x) \equiv 1$ az aktuális Lagrange-alappolinom. A kapott mennyiségeket adjuk össze:

$$\int_a^b f(x)dx \approx e_n = h\left[f(y_1) + f(y_2) + \cdots + f(y_n)\right]. \tag{2.9}$$

A hibája:

$$\delta_{e_n} = \frac{-(b-a)^3 f''(\xi)}{24n^2}, \qquad \text{ahol} \quad \xi \in (a, b). \tag{2.10}$$

Az érintő formula nyílt formula: az intervallum végpontjai nem osztópontok.

2.4. A Simpson-formula

Bontsuk az $[a, b]$ intervallumot n (páros) egyenlő részre. Az osztópontok: $a = x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n = b$.

Egy $2h$ (ahol $h = \frac{b-a}{n}$) hosszú részintervallumban a végpontokra és az intervallum középpontjára alkalmazva a Newton-Cotes-formulát:

$$\int_{x_0}^{x_2} f(x)dx \approx \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)\right]. \tag{2.11}$$

Ez az *egyszerű Simpson-formula.*

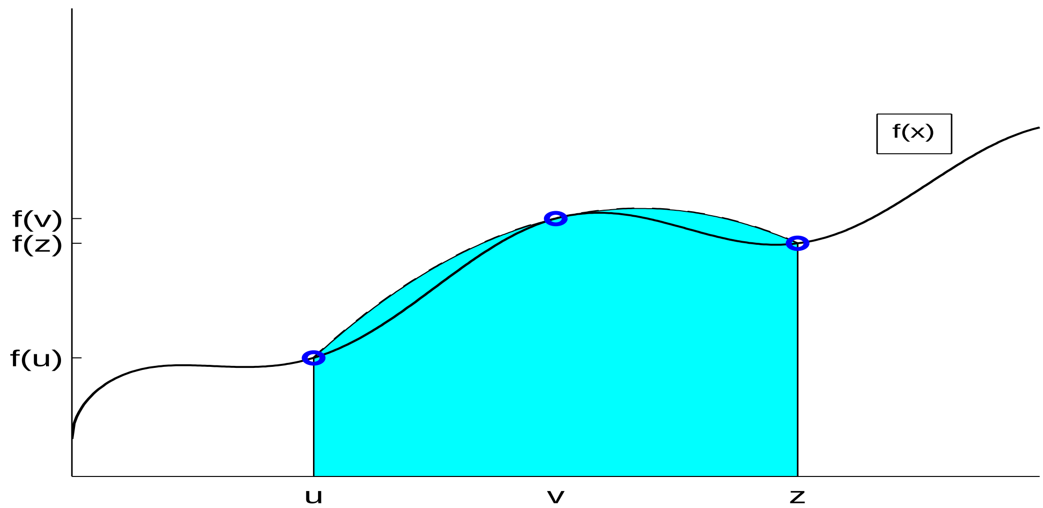
Ezek összege az *összetett Simpson-formula*:

$$\int_a^b f(x)dx \approx s_n = \tag{2.12}$$

$$= \frac{h}{3}\left[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)\right].$$

A Simpson-formula hibája:

$$\delta_{s_n} = \frac{-(b-a)^5 f^{(4)}(\xi)}{180n^4}, \qquad \xi \in [a, b]. \tag{2.13}$$



2.2. ÁBRA. A Simpson-formula

2.1. feladat. Legyen $f : [a, b] \to \mathbb{R}$, legyen $L_3(x)$ az f függvényhez az $a, \frac{a+b}{2}, b$ alappontokon illesztett Lagrange-féle interpolációs polinom. Legyen

$$H_4(x) = L_3(x) + K \cdot (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)(x-b),$$

ahol

$$K = \left[(b-a)f'\left(\frac{a+b}{2}\right) + [f(a) - f(b)]\right] \Big/ \frac{(a-b)^3}{4}.$$

(a) Ekkor $H_4(x)$ olyan Hermite-féle interpolációs polinom, amelyre $H_4'\left(\frac{a+b}{2}\right) = f'\left(\frac{a+b}{2}\right)$. (Az alappontokban H_4 értékei megegyeznek f megfelelő értékével.)

(b) Ha f 4-szer differenciálható, akkor az interpoláció hibájára: $\exists \xi \in (a, b)$, hogy

$$f(x) = H_4(x) + (x-a)\left(x - \frac{a+b}{2}\right)^2 (x-b)\frac{f^{(4)}(\xi)}{24}.$$

(c) Bizonyítsuk be, hogy H_4 integrálja éppen az egyszerű Simpson-formulát adja.

(d) Az előző (b) és (c) pont segítségével lássuk be, hogy az egyszerű Simpson-formula maradéktagjára: $\exists \eta \in (a, b)$, hogy

$$R = -\left(\frac{b-a}{2}\right)^5 \frac{f^{(4)}(\eta)}{90}.$$

(e) Lássuk be, hogy az összetett Simpson-formula maradéktagja

$$-\frac{f^{(4)}(\xi)(b-a)^5}{180n^4},$$

ahol $\xi \in [a, b]$.

Megoldás.

(a) H_4 értékei az $a, \frac{a+b}{2}, b$ pontokban nyilván megegyeznek f megfelelő értékeivel. Az első derivált:

$$H_4'\left(\frac{a+b}{2}\right) = f(a)\frac{\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)} + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\frac{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)+\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}+$$

$$+ f(b)\frac{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)}{(b-a)\left(b-\frac{a+b}{2}\right)} + K\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right) =$$

$$= \frac{f(a)}{a-b} + f\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot 0 + \frac{f(b)}{b-a} - K\left(\frac{a-b}{2}\right)^2 = \frac{f(a)-f(b)}{a-b}+$$

$$+\left(\frac{a-b}{2}\right)^2\left[-(f(a)-f(b))\frac{4}{(a-b)^3} + f'\left(\frac{a+b}{2}\right)\cdot\frac{4}{(a-b)^2}\right] =$$

$$= f'\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

(b) Legyen $\omega(x) = (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)$.
Legyen x nem alappont, legyen

$$g(z) = f(z) - H_4(z) - (f(x)-H_4(x))\frac{\omega(z)}{\omega(x)}.$$

Ekkor $g(z)=0$ a $z=x, z=a, z=\frac{a+b}{2}$ és $z=b$ helyeken. Rolle tétele miatt $g'(z)\equiv 0$ a fenti pontok közötti 3 helyen (legyenek ezek x_1, x_2 és x_3).
$g'(z)$ a definíció miatt 0 az $x_4=\frac{a+b}{2}$ helyen is. Mivel ezen x_1, x_2, x_3, x_4 értékeke különbözőek, így $g''(z)=0$ legalább 3 különböző, $g'''(z)=0$ legalább 2 különböző, $g^{(4)}(z)=0$ legalább egy helyen.

$$0 = g^{(4)}(\xi) = f^{(4)}(\xi) + 0 - [f(x)-H_4(x)]\frac{4!}{\omega(x)}.$$

Ezzel az állítást beláttuk, ha x nem alappont. Ha x alappont, akkor az állítás $0=0$-ba megy át.

(c) H_4 tagjainak integrálja:

$$A_1 = \int_a^b \frac{\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)}{\left(a-\frac{a+b}{2}\right)(a-b)}dx.$$

$x = a + t(b-a)$ helyettesítéssel

$$A_1 = \int_0^1 \frac{\left[t(b-a)+\frac{a-b}{2}\right]\left[t(b-a)+(a-b)\right]}{\frac{a-b}{2}(a-b)}(b-a)dt =$$

$$= (b-a)\int_0^1 \underbrace{(2t-1)(t-1)}_{2t^2-3t+1}dt = (b-a)\left[\frac{2t^3}{3}-\frac{3t^2}{2}+t\right]_0^1 = \frac{b-a}{6}.$$

$$A_2 = \int_a^b \frac{(x-a)(x-b)}{\left(\frac{a+b}{2}-a\right)\left(\frac{a+b}{2}-b\right)}dx = (b-a)\int_0^1 2t\cdot 2(1-t)dt = \frac{4(b-a)}{6}.$$

$$A_3 = \frac{b-a}{6}.$$

$$\int_a^b (x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)(x-b)dx = (b-a)^4\int_0^1 t\left(t-\frac{1}{2}\right)(t-1)dt = 0$$

miatt

$$\int_a^b H_4(x)dx = \int_a^b L_3(x)dx = f(a)A_1 + f\left(\frac{a+b}{2}\right)A_2 + f(b)A_3 =$$
$$= \frac{b-a}{6}\left\{f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right\}.$$

(d) Az egyszerű Simpson-formula hibája éppen a fenti interpolációs polinom maradéktagjának integrálja:

$$R = \int_a^b \left[(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\right]\frac{f^{(4)}(\xi)}{24}dx.$$

Lévén a szögletes zárójelben lévő függvény előjeltartó, a Darboux-tulajdonságot felhasználva található olyan $\eta \in [a,b]$, melyre

$$R = \frac{f^{(4)}(\eta)}{24}\int_a^b \left[(x-a)\left(x-\frac{a+b}{2}\right)^2(x-b)\right].$$

$x = a + t(b-a)$ helyettesítéssel

$$R = \frac{f^{(4)}(\eta)}{24}\int_0^1 t\left(t-\frac{1}{2}\right)^2(t-1)dt\cdot(b-a)^5 =$$
$$= \frac{f^{(4)}(\eta)}{24\cdot 4}\underbrace{\int_0^1\left(4t^4-8t^3+5t^2-t\right)dt}_{-\frac{1}{30}}(b-a)^5 = -\frac{f^{(4)}(\eta)}{90}\left(\frac{b-a}{2}\right)^5.$$

(e) Az összetett Simpson-formula hibája:

$$\delta_{s_n} = -\left(\frac{b-a}{n}\right)^5\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}}\frac{f^{(4)}(\eta_i)}{90} = -\frac{(b-a)^5}{n^5}\cdot\frac{1}{90}\cdot\frac{n}{2}\cdot\underbrace{\frac{2}{n}\cdot\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}}f^{(4)}(\eta_i)}_{f^{(4)}(\xi)\text{ a Darboux-tul. miatt}} =$$
$$= -\frac{(b-a)^5}{180}f^{(4)}(\xi)\cdot\frac{1}{n^4}.$$

3. Gauss-kvadratúrák

3.1. A Legendre-polinomok

3.1. definíció. Legyen $P_0(x) \equiv 1$; továbbá $n \geq 1$ esetén

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

A $P_n(x)$ függvényt n-edik *Legendre-polinom*nak nevezzük, a fenti képletet pedig *Rodrigues-formulá*nak.

3.1. megjegyzés. $(x^2-1)^n$ $2n$-edfokú polinom, így n-edik deriváltja n-edfokú polinom, azaz $P_n(x)$ n-edfokú polinom.

3.1. tétel. (a) *$P_n(1) = 1$;*

(b) *P_n-nek $[-1,1]$-ben pontosan n gyöke van;*

(c) *P_n eleget tesz az*

$$(1-x^2)y'' - 2xy' + n(n+1)y = 0$$

differenciálegyenletnek;

(d) *$m \neq n$ esetén*

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx = 0;$$

(e) *ha q legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom, akkor*

$$\int_{-1}^{1} q(x)p_n(x)\,dx = 0;$$

(f) *ha P pontosan n-edfokú polinom, és bármely legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinomra*

$$\int_{-1}^{1} q(x)P(x)\,dx = 0,$$

akkor P a P_n Legendre-polinom konstansszorosa.

Bizonyítás.

(a) Legyen $u = (x-1)^n$ és $v = (x+1)^n$. Ekkor a Leibniz-szabály alapján:

$$\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n = (u \cdot v)^{(n)} = u^{(n)}v + \binom{n}{1} u^{(n-1)}v^{(1)} + \cdots + uv^{(n)}.$$

$u = (x-1)^n$ deriváltjai $k < n$-ig $(x-1)$-et tényezőként tartalmazzák, így $x = 1$ helyen 0-k.

$$\frac{d^n}{dx^n}(x^2-1)^n_{|x=1} = u^{(n)}v_{|x=1} = n!2^n.$$

(b) Az $y = (x^2-1)^n$-nek -1 és $+1$ n-szeres gyöke. A Rolle-tétel alapján y' -nek $(-1,1)$-ben van gyöke; de -1 és 1 is gyöke. Így y''-nek $(-1,1)$-ben van két gyöke, de -1 és 1 is gyöke. Folytatva: $y^{(n-1)}$-nek -1 és $+1$, valamint $(-1,1)$-ben $(n+1)$ gyöke. Ezért a Rolle-tétel szerint $y^{(n)}$-nek $(-1,1)$-ben n különböző gyöke van.

(c) $y = (x^2-1)^n$ jelöléssel:

$$y' = n(x^2-1)^{n-1}\cdot 2x.$$

Ezt (x^2-1)-gyel szorozva:

$$(x^2-1)y' = 2nxy.$$

Ebből $(n+1)$-szeri differenciálással

$$y^{(n+2)}(x^2-1) + \binom{n+1}{1}y^{(n+1)}2x + \binom{n+1}{2}y^{(n)}\cdot 2 =$$
$$= 2ny^{(n+1)}x + 2n\binom{n+1}{1}y^{(n)}.$$

Ebből

$$(1-x^2)y^{(n+2)} - 2xy^{(n+1)} + n(n+1)y^{(n)} = 0.$$

$\frac{1}{n!2^n}$-nel szorozva és $P_n = \frac{1}{n!2^n}y^{(n)}$ összefüggést felhasználva:

$$(1-x^2)P_n''(x) - 2xP_n'(x) + n(n+1)P_n(x) = 0.$$

(d) A fenti differenciálegyenletből:

$$\left[(1-x^2)P_n'(x)\right]' + n(n+1)P_n(x) = 0.$$

$P_m(x)$-szel szorozva és integrálva:

$$\int_{-1}^{1}\left[(1-x^2)P_n'(x)\right]' P_m(x)\,dx + n(n+1)\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx = 0.$$

Parciálisan integrálva az első tagot:

$$\underbrace{\left[(1-x^2)P_n'(x)P_m(x)\right]_{-1}^{1}}_{=0} - \int_{-1}^{1}(1-x)^2P_n'(x)P_m'(x)\,dx.$$

Így

$$\int_{-1}^{1}(1-x^2)P_n'(x)P_m'(x)\,dx - n(n+1)\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx = 0.$$

n és m szerepét felcserélve, a két egyenletet egymásból kivonva:

$$[n(n+1)-m(m+1)]\underbrace{\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)\,dx}_{=0} = 0.$$

(e) Mivel P_k pontosan k-adfokú polinom, így minden legfeljebb $(n-1)$-edfokú q polinom előáll

$$q(x) = \sum_{k=0}^{n-1} c_kP_k(x)$$

alakban. Ezért

$$\int_{-1}^{1} q(x)P_n(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n-1} c_k\int_{-1}^{1} P_k(x)P_n(x)\,dx = 0.$$

(f) Mivel P és P_n pontosan n-edfokú polinom, így alkalmas c konstans érték esetén

$$q(x) = P(x) - cP_n(x)$$

legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom. Ekkor

$$\int_{-1}^{1} [P(x) - cP_n(x)]^2 \, dx = \int_{-1}^{1} [P(x) - cP_n(x)] \, q(x) \, dx =$$
$$= \underbrace{\int_{-1}^{1} P(x)q(x) \, dx}_{=0} - c \underbrace{\int_{-1}^{1} P_n(x)q(x) \, dx}_{=0} = 0.$$

Azaz $P(x) - cP_n(c) \equiv 0$. □

3.2. Speciális Gauss-kvadratúrák

Mivel teteszőleges $[a, b]$ intervallum lineáris transzformációval átvihető $[-1, 1]$-be, így foglalkozhatunk csupán $[-1, 1]$ fölötti intergálokkal.

Ha az alappontok a P_n Legendre-polinom gyökei, akkor az ehhez tartozó Newton-Cotes-formulát *Gauss-féle integrálképlet*nek (kvadratúrának) nevezzük.

3.2. tétel. (a) *A Gauss-féle kvadratúra tetszőleges, legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinom esetén az integrál pontos értékét szolgáltatja.*

(b) *Ez az egyetlen ilyen tulajdonságú Newton-Cotes-formula.*

(c) *$2n$-edfokú polinomok esetén már a Gauss-képlet sem pontos.*

Bizonyítás.

(a) Legyen f legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinom. Létezik olyan q és r legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom, hogy

$$f(x) = q(x)P_n(x) + r(x) \, .$$

Az x_k alappontokban $P_n(x_k) = 0$, így

$$f(x_k) = r(x_k) \, .$$

Másrészt

$$\int_{-1}^{1} f(x) \, dx = \int_{-1}^{1} q(x)P_n(x) \, dx + \int_{-1}^{1} r(x) \, dx = \int_{-1}^{1} r(x) \, dx \, .$$

Mivel r legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom, így erre a Newton-Cotes-formula pontos:

$$\int_{-1}^{1} f(x) \, dx = \int_{-1}^{1} r(x) \, dx = \sum_{k=1}^{n} r(x_k)A_k = \sum_{k=1}^{n} f(x_k)A_k \, .$$

(b) Legyen $x_1, \ldots, x_n$ olyan alappontrendszer, melyre a Newton-Cotes-formula $(2n-1)$-fokig pontos. Legyen $\omega_n(x) = (x - x_1) \cdots (x - x_n)$, q pedig legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom. Ekkor ωq-ra (mely legfeljebb $(2n-1)$-edfokú) a

Newton-Cotes-formula pontos.

$$\int_{-1}^{1} \omega(x) q(x)\, dx = \sum_{k=1}^{n} \underbrace{\omega(x_k)}_{=0} q(x_k) A_k = 0\,.$$

Azaz $\omega(x)$ bármely q-ra ortogonális. Így a 3.1 tétel (f) pontja miatt $\omega(x) = cP(x)$. Tehát P_n és ω gyökei ugyanazok, azaz $x_1, \ldots, x_n$ a P_n gyökei.

(c) ${P_n}^2$ pontosan $2n$-edfokú polinom, erre

$$\int_{-1}^{1} P_n^2(x)\, dx > 0\,.$$

Viszont $\sum_{k=1}^{n} P_n^2(x_k) A_k = 0$.
Azaz az integrálformula nem pontos P_n^2-re. Tetszőleges $2n$-edfokú f polinomra:

$$f = cP_n^2 + p\,,$$

ahol p fokszáma legfeljebb $(2n-1)$. Erre az integrálformula pontos, ${P_n}^2$-re nem, így f-re sem. □

3.3. tétel. *A Gauss-képletben szereplő A_k együtthatókra:*

(a) $A_k > 0 \quad (1 \leq k \leq n)$;
(b) $\sum_{k=1}^{n} A_k = 2$.

BIZONYÍTÁS.

(a) Az $l_k(x)$ alappolinomok $(n-1)$-edfokúak, így ${l_k}^2(x)$ $(2n-2)$-edfokú. Erre pontos a Gauss-formula:

$$0 < \int_{-1}^{1} l_k^2(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} l_k^2(x_i) A_i = A_k\,.$$

(b) Legyen $f(x) \equiv 1$, erre pontos a Gauss-képlet:

$$\sum_{k=1}^{n} A_k = \sum_{k=1}^{n} f(x_k) A_k = \int_{-1}^{1} f(x)\, dx = \int_{-1}^{1} 1\, dx = 2\,.$$

□

3.4. tétel. *Ha f folytonos $[-1,1]$-ben, akkor a Gauss-féle kvadratúra képletek az integrál pontos értékéhez konvergálnak, midőn $n \to \infty$.*

BIZONYÍTÁS. Legyen p n-edfokú polinom.

$$\left| \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \sum_{k=1}^{n} f(x_k) A_k \right| \leq \left| \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \int_{-1}^{1} p(x)\, dx \right| +$$

$$+ \left| \int_{-1}^{1} p(x)\, dx - \sum_{k=1}^{n} p(x_k) A_k \right| + \left| \sum_{k=1}^{n} p(x_k) A_k - \sum_{k=1}^{n} f(x_k) A_k \right| = I + II + III.$$

$$I \leq \int_{-1}^{1} |f(x) - p(x)|\, dx \leq 2E_m\,, \quad \text{ahol}\, E_m = \max_{-1 \leq x \leq 1} |f(x) - p(x)|\,.$$

Ha $m \le 2n-1$, akkor $II = 0$.

$$III \le \sum_{k=1}^{n} |p(x_k) - f(x_k)|\, A_k \le E_m \sum_{k=1}^{n} A_k = 2E_m.$$

Tehát $m \le 2n-1$ esetén

$$\left| \int_{-1}^{1} f(x)\, dx - \sum_{k=1}^{n} f(x_k) A_k \right| \le 4E_m.$$

Mivel bármely ε-hoz létezik f-et ε-nál egyenletesen jobban közelítő polinom, így E_m m növelésével tetszőlegesen kicsivé tehető. □

3.3. A Gauss-kvadratúrák általános alakja

Az $\int_a^b f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x$ integrál közelítő kiszámításával foglalkozunk. Itt $\rho(x)$ rögzítetet súlyfüggvény, azaz nemnegatív és integrálható függvény.

Közelítsük $f(x)$-et az $x_1, ..., x_n$ alappontokhoz tartozó Lagrange-féle polinommal:

$$f(x) \approx \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x)\,, \tag{3.1}$$

ahol $l_i(x)$ az i-edik Lagrange-alappolinom.

A fenti integrál közelítésére használjuk az

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} \int_a^b l_i(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x\, f(x_i) = \sum_{i=1}^{n} H_i f(x_i)$$

képletet. Itt H_i csak ρ-tól és az alappontoktól függ, de f-től nem.

Mivel a Lagrange-interpoláció pontos minden, legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinomra, így a fenti integrál közelítés is pontos minden, legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinomra.

Az $x_1, ..., x_n$ alappontok alkalmas megválasztásával pontossá tehető-e minden, legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinomra?

3.5. tétel. *A (3.1) interpolációs kvadratúra formula akkor és csak akkor pontos minden, legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinomra, ha*

$$\int_a^b \omega_n(x) Q(x) \rho(x)\,\mathrm{d}x = 0 \tag{3.2}$$

teteszőleges, legfeljebb $(n-1)$-edfokú $Q(x)$ polinomra, ahol $\omega_n(x) = (x-x_1)\cdots(x-x_n)$.

Bizonyítás.

1. Legyen (3.1) pontos minden, legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinomra. Ha $Q(x)$ legfeljebb $(n-1)$-edfokú, akkor $\omega_n(x)Q(x)$ legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinom, így erre (3.1) pontos:

$$\int_a^b \omega_n(x) Q(x) \rho(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} H_i \omega_n(x_i) Q(x_i) = 0\,,$$

lévén $\omega_n(x_i) = 0$, $i = 1, \ldots, n$.

2. Teljesüljön most (3.2). Legyen f legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinom. Ekkor

$$f(x) = \omega_n(x)Q(x) + R(x)\,, \tag{3.3}$$

ahol $Q(x)$ és $R(x)$ is legfeljebb $(n-1)$-edfokú polinom. Így (3.2) miatt:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = \underbrace{\int_a^b \omega_n(x)Q(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x}_{0} + \int_a^b R(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x\,.$$

Viszont $R(x)$-re a kvadratúra pontos:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b R(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^n H_i R(x_i)\,.$$

(3.3) alapján

$$f(x_i) = \omega_n(x_i)Q(x_i) + R(x_i) = R(x_i)\,,\ i = 1,\ldots,n\,.$$

Így az előző képletből:

$$\int_a^b f(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^n H_i f(x_i)\,.$$

□

3.4. Ortogonális polinomok

3.2. definíció. Legyen $L^2(\rho)$ azon f függvények halmaza, melyekre

$$\int_a^b f^2(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x < 0.$$

Ha f és $g \in L^2(\rho)$, akkor

$$\langle f, g\rangle = \int_a^b f(x)g(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x$$

létezik és véges. Ezt nevezzük f és g *belső szorzatá*nak.

3.1. feladat. Bizonyítsuk be, hogy $\langle f, g\rangle$ szimmetrikus, bilineáris és pozitív szemidefinit.

A továbbiakban olyan ρ függvényekre koncentrálunk, melyek esetén $\int_a^b p(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x \neq 0$ minden $p(x) \neq 0$, $[a,b]$-n előjeltartó polinomra. Tegyük fel azt is, hogy $1, x, ..., x^n \in L^2(\rho)$. Az $1, x, ..., x^n$ polinomok az $L^2(\rho)$ lineáris térben lineárisan független vektorok. Jelölje $Q_0(x) \equiv 1, Q_1(x), \ldots, Q_n(x)$ ezen vektorrendszer ortogonalizáltját. Ekkor $Q_j(x)$ j-edfokú polinom.

(3.2) szerint a kvadratúra-formula akkor és csak akkor pontos minden, legfeljebb $(2n-1)$-edfokú polinomra, ha az alappontok éppen az n-edik ortogonális polinom gyökei. De ehhez még azt is felhasználtuk, hogy ezek a gyökök (a,b)-be esnek. Azonban ezt még nem ellenőriztük.

3.6. tétel. *Ha $Q_0, Q_1, Q_2, ...$ ortogonális polinomsorozat (a,b)-ben, akkor Q_n-nek n db különböző gyöke van (a,b)-ben $(n = 0, 1, ...)$.*

Bizonyítás. Legyen $n \geq 1$. Ekkor

$$\int_a^b Q_n(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b Q_0(x)Q_n(x)\rho(x)\,\mathrm{d}x = 0$$

az ortogonalitás miatt. Ezért Q_n-nek van legalább egy előjelváltása (a,b)-ben. Jelölje $x_1, ..., x_l$ a Q_n előjelváltásait (a,b)-ben. Nyilván $l \leq n$. Belátjuk, hogy $l = n$.

$Q_n(x)(x-x_1)\cdots(x-x_l)$ polinom előjeltartó (a,b)-ben, mert minden gyöke páros multiplicitású. Ezért

$$\int_a^b Q_n(x)(x-x_1)\cdots(x-x_l)\rho(x)\,\mathrm{d}x \neq 0.$$

Ha $l < n$ lenne, akkor $Q_n(x)$ ortogonális lenne $(x-x_1)\cdots(x-x_l)$-re, azaz az előző összefüggés nem állhatna fenn. □

Az ortogonális polinomok konkrét kiszámításához szükséges az alábbi összefüggés.

3.1. állítás.

$$\int_a^b u(x)v^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x = [u(x)v^{(n-1)}(x) - u'(x)v^{(n-2)}(x) + u''(x)v^{(n-3)}(x) + \cdots + \\ + (-1)^{n-1}u^{(n-1)}(x)v(x)]_a^b + (-1)^n \int_a^b u^{(n)}(x)v(x)\,\mathrm{d}x. \tag{3.4}$$

Bizonyítás. $n = 1$-re éppen a parciális integrálás képlete.
Ha $n = 1$-re már beláttuk, akkor

$$\int_a^b u(x)v^{(n)}(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b u(x)v'^{(n-1)}(x)\,\mathrm{d}x =$$
$$= \left[u(x)v^{(n-1)}(x) - u'(x)v^{(n-2)}(x) + u''(x)v^{(n-3)}(x) - \cdots + (-1)^{n-1}u^{(n-1)}(x)v(x)\right]_a^b +$$
$$+ (-1)^{n-1}\int_a^b u^{(n-1)}(x)v'(x)\,\mathrm{d}x =$$
$$= \left[u(x)v^{(n-1)}(x) - u'(x)v^{(n-2)}(x) + u''(x)v^{(n-3)}(x) \cdots + (-1)^{n-1}u^{(n-1)}(x)v(x)\right]_a^b +$$
$$+ (-1)^{n-1}\left[u^{(n-1)}(x)v(x)\right]_a^b + (-1)^n \int_a^b u^{(n)}(x)v(x)\,\mathrm{d}x.$$

□

A speciális ortogonális polinomok ρ és $[a,b]$ alkalmas megválasztásával adódnak.

3.1. Példa. A Legendre-polinomok. Legyen $\rho(x) \equiv 1$, $[a,b] = [-1,1]$. Ekkor az ortogonális polinomok

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[(x^2-1)^n\right]. \tag{3.5}$$

A Jacobi-polinomok.

$$\rho(x) = (1-x)^\alpha(1+x)^\beta, \qquad \alpha, \beta > -1, \quad [a,b] = [-1,1].$$

Ekkor

$$P_n(x) = \frac{(-1)^n}{2^n n!}(1-x)^{-\alpha}(1+x)^{-\beta}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}\left[(1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}\right].$$

A Laguerre-polinomok. $\rho(x) = e^{-x}$, $[a,b) = [0,\infty)$,

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(x^n e^{-x}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Az Hermite-polinomok. $\rho(x) = e^{-x^2}$, $\quad (a,b) = (-\infty,\infty)$,

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x^2}\right), \qquad n = 0, 1, 2, \ldots .$$

3.2. feladat. Jelölje $P_n(x)$ a fenti Jacobi-polinomot.

1. Lássuk be, hogy $P_n(x)$ pontosan n-edfokú polinom.
   (Deriváljuk $(1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}$-et a Leibniz-szabály szerint, majd számoljuk ki P_n főegyütthatóját.)
2. $(1-x)^{\alpha+n}$ az első $(n-1)$ deriváltjával együtt 0 az $x = 1$-ben. $(1+x)^{\beta+n}$ az első $(n-1)$ deriváltjával együtt 0 az $x = 1$-ben.
3. Legyen $k \leq n$. $u(x) = P_k(x)$ és $v(x) = (1-x)^{\alpha+n}(1+x)^{\beta+n}$ választással (3.4)-et használva lássuk be, hogy P_n-ek ortogonálisak.
4. $\alpha = \beta = 0$ esetén a Jacobi-polinomok éppen a Legendre-polinomok.

Tárgymutató

Irodalomjegyzék

[1] Szidarovsky Ferenc, *Bevezetés a numerikus módszerekbe*, Közgazdasági és Jogi Könyvkiadó, Budapest, 1974.

[2] Móricz Ferenc, *Numerikus analízis, I.*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1993.

[3] Móricz Ferenc, *Numerikus analízis, II.*, Nemzeti Tankönyvkiadó, Budapest, 1993.