

Közelítő és szimbólikus számítások II.

Müllner Károly

<mullni@hotmail.com>

Programtervező matematikus hallgató

Szegedi Tudományegyetem Természettudományi Kar

1. Numerikus differenciálás és integrálás

Az analízisben az integrál (ha ismert az $F(x)$ primitív függvény) legegyszerűbben az

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

Newton-Leibniz szabállyal számítható. $F(x)$ meghatározása nehéz feladat, sőt sokszor (pl. $\int_a^b e^x dx$ esetében) nem elemi függvény, ezért nem is adható meg zárt alakban. Természetesen számos olyan klasszikus módszer van, amit ilyenkor alkalmazhatunk:

- az integrálandó függvény sorbafejtése, majd tagonkénti integrálása
- parciális integrálás
- helyettesítéses integrálás
- stb.

Numerikus integrálási műveletekre szükség van, ha

1. Az integrálandó függvény primitív függvényét nem lehet megadni elemi függvények segítségével
2. A primitív függvény olyan bonyolult, hogy kvadrátúra formula használata előnyösebb
3. Az integrálandó függvényt csak pontokban ismerjük, például mérések eredményeként.
4. Differenciál-egyenletek, integrál-egyenletek numerikus megoldásakor sok esetben numerikus integrálási módszerekre is szükség van.

1.1. Kvadrátúra formulák

A továbbiakban integrálon mindig **Riemann-integrált** értünk. Hogyan célszerű numerikusan közelíteni $I(f) \stackrel{\text{def}}{=} \int_a^b f(x) dx$ -et? Az integrál eredeti definíciója (Darboux- vagy Riemann-féle közelítő összegek határértéke) is azt sugallja, hogy próbálkozzunk

$$\int_a^b f(x) dx \approx Q_n(f) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$$

alakú súlyozott összegekkel. Az ilyen felépítésű $Q_n(f)$ közelítéseket a továbbiakban **kvadratúra-formuláknak**, a bennük szereplő w_i számokat a formula **súlyainak**, az x_i helyeket pedig **(kvadratúra)-alappontoknak** nevezzük. Utóbbiakról feltesszük, hogy mind az $[a, b]$ intervallumban vannak és páronként különbözőek.

1. Állítás. Az $I(\cdot)$ integrál és a $Q_n(\cdot)$ kvadratúra-formula homogén és additív leképezés, tehát tetszőleges $f(x), g(x) \in \mathcal{I}[a, b]$ -re valamint $\alpha \in \mathcal{R}$ -re

1. $I(f + g) = \int_a^b (f(x) + g(x)) dx = \int_a^b f(x) dx + \int_a^b g(x) dx = I(f) + I(g)$
2. $I(\alpha f) = \int_a^b \alpha f(x) dx = \alpha \int_a^b f(x) dx = \alpha I(f)$
3. $Q_n(f + g) = \sum_{i=1}^n w_i (f(x_i) + g(x_i)) = \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) + \sum_{i=1}^n w_i g(x_i) = Q_n(f) + Q_n(g)$
4. $Q_n(\alpha f) = \sum_{i=1}^n w_i \alpha f(x_i) = \alpha \sum_{i=1}^n w_i f(x_i) = \alpha Q_n(f)$

2. Állítás. Tetszőleges $a \leq z_1 \leq z_2 \leq \dots \leq z_m \leq b$ értékekre igaz

$$\int_a^b f(x) dx = \int_a^{z_1} f(x) dx + \int_{z_1}^{z_2} f(x) dx + \dots + \int_{z_m}^b f(x) dx$$

egyenlőség.

3. Állítás. Ha $f(x) \neq 0$ folytonos és jeltartó $[a, b]$ -n, akkor $\int_a^b f(x) dx \neq 0$.

Adott kvadratúra-formula pontosságát az $R_n(f) = I(f) - Q_n(f)$ **képlethiba** segítségével definiálhatjuk: a formula **pontos** $f(x)$ -re, ha $R_n(f) = 0$. Ha ismertek $f(x)$ analitikus tulajdonságai, deriváltjai, ezek korlátjai, akkor $R_n(f)$ könnyen becsülhető.

4. Definíció. A $Q_n(\cdot)$ kvadratúra-formula **(pontossági) rendje** az r szám, ha bármely r -ed fokú $p(x)$ polinomra pontos $R_n(p) = 0$, de olyan $r+1$ -ed fokú $q(x)$, amire már nem: $R_n(q) \neq 0$.

Ezzel ekvivalens definíció:

5. Definíció. A $Q_n(\cdot)$ kvadratúra-formula **pontossági rendje** az $r \in \mathcal{N}$ szám, ha pontos az $1, x, x^2, x^3, \dots, x^r$ hatványfüggvényekre ($R_n(x^k) = 0$) minden $0 \leq k \leq r$, de nem pontos x^{r+1} -re.

Részletesen kiírva a rend meghatározása ekvivalens a

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 + \dots + w_n &= \int_a^b dx \\ w_1 x_1 + w_2 x_2 + \dots + w_n x_n &= \int_a^b x dx \\ &\vdots \\ w_1 x_1^r + w_2 x_2^r + \dots + w_n x_n^r &= \int_a^b x^r dx \end{aligned}$$

egyenletrendszer vizsgálatával. $r + 1$ egyenletből álló algebrai egyenletrendszert írtunk fel $2n$ ismeretlenre. A rendszer megoldható, ha $r + q \leq 2n$, azaz $2n - 1$ -nél a rend nem lehet nagyobb.

6. Tétel. A $Q_n(\cdot)$ n alappontos kvadratúra-formula rendje legfeljebb $2n - 1$ lehet.

7. Bizonyítás. Tekintsük a $q(x) = (w_n(x))^2$ $2n$ -ed fokú polinomot.

$$0 < \int_a^b (w_n(x))^2 dx = I(q) \neq Q_n(q) = \sum_{i=1}^n w_i(w_n(x_i))^2 = 0.$$

tehát erre a polinomra nem pontos a formula. $\square$

1.2. Newton-Cotes formulák

Az interpolációs kvadratúra-formulák családjának talán legismertebb és legrégebben alkalmazott tagjai az úgynevezett Newton-Cotes formulák. Ezek annak a speciális esetnek felelnek meg, amikor n darab **ekvidisztáns** alapponthoz tartozó Lagrange-polinom integráljával közelítünk.

Legyen a kiválasztott n alappont

$$a \leq x_0 < x_1 < \dots < x_{n-2} < x_{n-1} \leq b.$$

Attól függően, hogy az integrálás határai szerepelnek-e az interpolációs alappontok között, a formulák két csoportját különböztetjük meg:

(i) A **nyitott formulák** esetében a határok nem alappontok, ekkor

$$h = \frac{b-a}{n+1}, \quad a = x_0 - h, \quad b = x_{n-1} + h \quad \text{és} \quad x_i = x_0 + ih \quad 0 \leq i \leq n-1.$$

(ii) A **zárt formulák** esetében a határok is alappontok, ekkor

$$h = \frac{b-a}{n-1}, \quad a = x_0, \quad b = x_{n-1} \quad \text{és} \quad x_i = x_0 + ih \quad 0 \leq i \leq n-1.$$

Az n -edik Newton-Cotes formulát tehát a következő integrál definiálja (a $t = \frac{x-x_0}{h}$ változóval felírva)

$$\int_a^b P_n(x_0 + th) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^{n-1} \binom{t}{i} \Delta^i f_0 dx = \sum_{i=0}^{n-1} \Delta^i f_0 \int_a^b \binom{t}{i} dx,$$

Ha t szerinti integrálásra térünk át, már két különböző formulát kell felírunk.

(i) a nyitott formulák esetében az $x = x_0 + th$ helyettesítés után

$$\sum_{i=0}^{n-1} \Delta^i f_0 \int_a^b \binom{t}{i} dx = h \sum_{i=0}^{n-1} \Delta^i f_0 \int_{-1}^n \binom{t}{i} dt$$

(ii) a zárt formulák esetében szintén $x = x_0 + th$ -t helyettesítve

$$\sum_{i=0}^{n-1} \Delta^i f_0 \int_a^b \binom{t}{i} dx = h \sum_{i=0}^{n-1} \Delta^i f_0 \int_0^{n-1} \binom{t}{i} dt$$

Adott i -re az $\int \binom{t}{i} dt = \int \frac{t(t-1)\cdots(t-i+1)}{i!} dt$ integrál már könnyen számítható, átrendezés után a kapott kvadratúra-formula

$$(b-a) \sum_{i=0}^{n-1} w_i^n f(x_i^n)$$

alakban is felírható. A $(b-a)$ tényezőt azért célszerű kiemelni, mert az így definiált súlyok már nem függenek az $[a, b]$ intervallumtól, csupán a formula típusától és az n értékétől.

8. Tétel. Mind a nyitott, mind a zárt n alappontos Newton-Cotes formula súlyaira igazak az alábbi összefüggések

- (i) $\sum_{i=0}^{n-1} w_i^n = 1$, tehát a súlyok összege 1.
- (ii) $w_i^n = w_{n-1-i}^n$ bármely $0 \leq i \leq n-1$ -re, azaz a súlyok szimmetrikusak.

9. Bizonyítás. Az (i) állítás ekvivalens azzal, hogy a formula pontos az $f(x) \equiv 1$ konstans függvényre:

$$\int_a^b 1 dx = b - a = Q_n(1) = (b-a) \sum_{i=0}^{n-1} w_i^n.$$

Az (ii) állítás a formulát definiáló integrál tulajonságainak vizsgálatával bizonyítható. $\square$

10. Tétel. Ha $f(x) \in C^n[a, b]$, akkor $|R_n(f)| \leq \sigma_n h^{n+1} \|f^{(n)}\|_\infty$, ahol

$$\sigma_n = \begin{cases} \int_0^{n-1} \left| \binom{t}{n} \right| dx & \text{nyitott formula esetén,} \\ \int_{-1}^n \left| \binom{t}{n} \right| dx & \text{zárt formuláknál.} \end{cases}$$

11. Bizonyítás. Integráljuk a Newton-Cotes formulák alappól szolgáló véges differenciás Lagrange-polinom hibatagját!

$$R_n(f) = \int_a^b (f(x) - P_n(x_0 + th)) dx = \int_a^b h^n \binom{t}{n} f^{(n)}(\xi) dx,$$

amiből abszolút értéket véve a szokásos növeléssel

$$|R_n(f)| \leq \int_a^b h^n \left| \binom{t}{n} \right| |f^{(n)}(\xi)| dx \leq h^n \|f^{(n)}\|_\infty \int_a^b \left| \binom{t}{n} \right| dx.$$

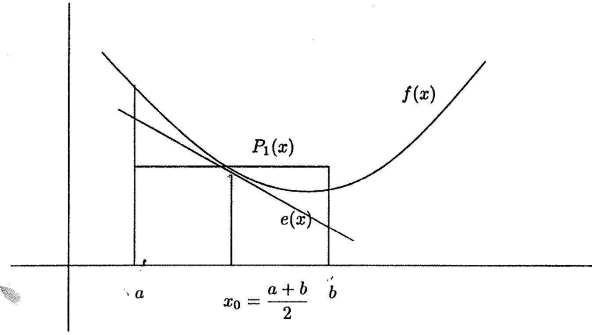
végül ha az $x = x_0 + th$ formula segítségével t szerinti integrálásra térünk át, az új határokat beírva és h -val szorozva a tételben felírt σ_n konstansokat kapjuk. $\square$

12. Következmény. A Newton-Cotes formulák rendje páros n -re $n-1$, páratlan n -re pedig n .

A nyitott formulák közül az $n = 1$ esetnek megfelelő **érintő-formulát** vizsgáljuk először. Most $h = \frac{b-a}{2}$, az egyetlen alappont $a < x_0 = \frac{a+b}{2} < b$. Az integrálást elvégezve

$$\int_a^b P_1(x_0+th)dx = h \sum_{i=0}^0 \Delta^i f_0 \int_{-1}^1 \binom{t}{i} dt = \frac{b-a}{2} f(x_0) \int_{-1}^1 1 dt = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

A módszer onnan kapta a nevét, hogy ha létezik $f'(x_0)$, akkor - az ábrán látható két derékszögű háromszög egybevágósága miatt - a $Q_1(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)$ téglalap területe megegyezik az $f(x)$ függvény $(x_0, f(x_0))$ pontokon áthaladó $e(x) = f(x_0) - f'(x_0)(x - x_0)$ érintője, az $x = a$ és $x = b$ egyenesek, valamint az X -tengely által határolt trapéz területével.



1. ábra. Az $\int_a^b f(x) dx$ integrál közelítése érintőformulával

Az $R_1(f)$ képlethiba vizsgálatához tegyük fel, hogy $f(x) \in C^2[a, b]$. Az x_0 körüli Taylor-polinomot felírva

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(\alpha)}{2}(x - x_0)^2$$

alkalmas $\alpha \in [a, b]$ -vel. Mindkét oldalt integrálva

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b (f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0))dx + \int_a^b \frac{f''(\alpha)}{2}(x - x_0)^2 dx.$$

A jobb oldali első integrál az érintő alatti területet adja, s ezért előbbi megjegyzés szerint megegyezik $Q_1(f)$ -fel. Így tehát

$$R_1(f) = I(f) - Q_1(f) = \int_a^b \frac{f''(\alpha)}{2}(x - x_0)^2 dx.$$

Mivel $(x - x_0)^2$ jeltartó $[a, b]$ -n, az integrálszámítás középtértéktételéből következik, hogy az utóbbi integrál így is számítható:

$$\frac{f''(\gamma)}{2} \int_a^b (x - x_0)^2 dx = \frac{(b - a)^3}{24} f''(\gamma)$$

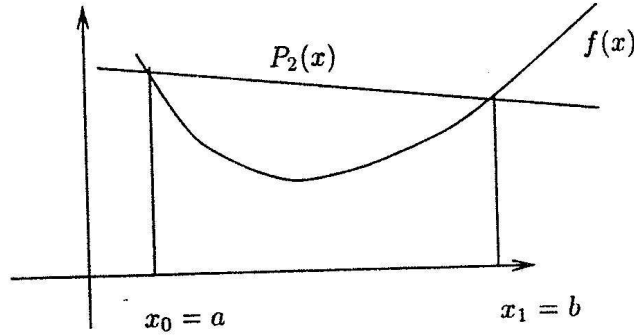
valamely $\gamma \in [a, b]$ -vel. A teljes, hibataggal kiegészített érintőformula tehát:

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) f\left(\frac{a + b}{2}\right) + \frac{(b - a)^3}{24} f''(\gamma).$$

A zárt formulák közül az első az $n = 2$ esetnek megfelelő **trapéz-formula**. Ekkor $h = b - a$, az alappontok $a = x_0 < x_1 = b$. Az integrálást elvégezve

$$\begin{aligned} \int_a^b P_2(x_0 + th) dx &= h \sum_{i=0}^1 \Delta^i f_0 \int_0^1 \binom{t}{i} dt \\ &= (b - a) \left\{ f(x_0) \int_0^1 1 dt + \Delta f_0 \int_0^1 \binom{t}{1} dt \right\} \\ &= (b - a) \left\{ f(x_0) + \frac{1}{2} \Delta f_0 \right\} \\ &= (b - a) \left(\frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b) \right) \end{aligned}$$

A trapézformula képlethibájának vizsgálatához ismét tegyük fel, hogy $f(x) \in \mathcal{C}^2[a, b]$.



2. ábra. Az $\int_a^b f(x) dx$ integrál közelítése trapézformulával

A megfelelő Lagrange-polinom hibatagját integrálva

$$R_2(f) = \int_a^b \frac{(x - x_0)(x - x_1)}{2} f''(\sigma) dx. \quad (\sigma \in [a, b]).$$

Most rögtön alkalmazhatjuk a középértéktételt, hiszen $(x - x_0)(x - x_1)$ jeltartó $[a, b]$ -n. Vagyis van olyan $\delta \in [a, b]$, hogy

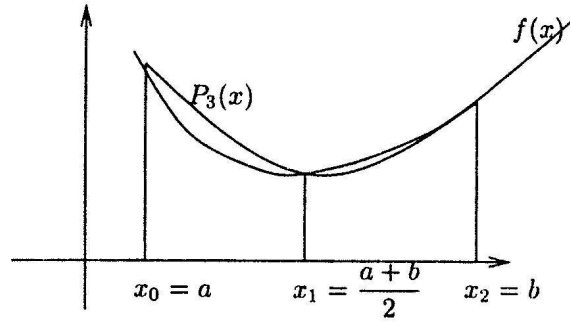
$$R_2(f) = \frac{f''(\delta)}{2} \int_a^b (x - x_0)(x - x_1) dx = -\frac{(b - a)^3}{12} f''(\delta).$$

A teljes, hibataggal kiegészített trapézformula alakja tehát:

$$\int_a^b f(x) dx = (b - a) \left(\frac{1}{2} f(a) + \frac{1}{2} f(b) \right) - \frac{(b - a)^3}{12} f''(\delta).$$

A **Simpson-formula** esetében $n = 3$, $h = \frac{b-a}{2}$, az alappontok $a = x_0 < x_1 = \frac{a+b}{2} < x_2 = b$. tehát a $P_3(x)$ Lagrange-polinom alatti területtel közelítünk. $P_3(x)$ képe - az elfajult eseteiktől eltekintve - parabola, vagyis a parabolaív alatti területet számítjuk. A megfelelő integrálokat felírva

$$\begin{aligned} \int_a^b P_3(x_0 + th) dx &= h \sum_{i=0}^2 \Delta^i f_0 \int_0^2 \binom{t}{i} dt \\ &= \frac{b-a}{2} \left\{ f(x_0) \int_0^2 1 dt + \Delta f_0 \int_0^2 \binom{t}{1} dt + \Delta^2 f_0 \int_0^2 \binom{t}{2} dt \right\} \\ &= \frac{b-a}{2} \left\{ 2f(x_0) + 2\Delta f_0 + \frac{1}{3}\Delta^2 f_0 \right\} \\ &= (b-a) \left(\frac{1}{6} f(a) + \frac{4}{6} f(a+h) + \frac{1}{6} f(b) \right). \end{aligned}$$



3. ábra. Az $\int_a^b f(x) dx$ integrál közelítése Simpson-formulával

A képlethiba levezetéséhez tegyük fel, hogy $f(x) \in C^4[a, b]$. A formulát definiáló $P_3(x)$ interpolációs polinom képlethibájában szereplő $\omega_3(x) = (x - x_0)(x - x_1)(x - x_2)$ tényező nem jeltartó, ezért az érintőformulához hasonló kerülőutat

választunk.

A $H_4(x_i) = f(x_i)$ $i = 0, 1, 2$ és a $H'_4(x_1) = f'(x_1)$ feltételek segítségével meghatározott $H_4(x)$ Hermite-féle interpolációs polinom egyértelműen előállítható

$$H_4(x) = P_3(x) + \alpha\omega_3(x)$$

alakban. Mindkét oldalt integrálva

$$\int_a^b H_4(x)dx = \int_a^b P_3(x)dx + \int_a^b \alpha\omega_3(x)dx = \int_a^b P_3(x)dx$$

mivel $\omega_3(x)$ a középső x_1 alapontra nézve páratlan függvény, s emiatt $[a, b]$ -n vett integrálja 0. Ez viszont azt jelenti, hogy

$$\begin{aligned} R_3(f) &= \int_a^b (f(x) - P_3(x))dx = \int_a^b (f(x) - H_4(x))dx \\ &= \int_a^b \frac{(x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)}{4!} f^{(4)}(\beta) dx. \end{aligned}$$

A legutolsó integrálban szereplő polinom már jeltartó, ismét alkalmazható a középértéktétel:

$$R_3(f) = \frac{f^{(4)}(\mu)}{4!} \int_a^b (x-x_0)(x-x_1)(x-x_2)dx = -\frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\mu).$$

A teljes Simpson-formula:

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a) \left(\frac{1}{6}f(a) + \frac{4}{6}f(a+h) + \frac{1}{6}f(b) \right) - \frac{(b-a)^5}{2880} f^{(4)}(\mu).$$

Az elméleti eredmények azt mutatják, hogy nagy n értékhez tartozó Newton-Cotes formulákat nem érdemes használni (már csak az öröklött hiba miatt sem). viszont nagy $[a, b]$ intervallumon integrálva különösen erősen oszcilláló $f(x)$ esetében a "kicsi formulák", például a trapéz- vagy Simpson-formula képlethibája még elfogadhatóan nagy lehet. Ebből a dilemmából a kiutat az úgynevezett *kvadratúra-szabályok* vagy *összetett kvadratúra-formulák* jelentik. Az alapötlet igen egyszerű: osszuk be $[a, b]$ -t "elég kicsi" részintervallumokra, az egyes részintervallumokon az integrált közelítsük alkalmas kvadratúra-formulákkal, majd adjuk össze a kapott részeredményeket, s ezt vegyük $I(f)$ közelítésének.

Az egyszerűség kedvéért legtöbbször ekvidisztáns részintervallumokból álló beosztást veszünk, s minden részintervallumon azonos típusú formulával közelítünk. Ha az előbbieken tárgyalt Newton-Cotes formulákra alkalmazzuk ezt az ötletet és m darab $h = (b-a)/m$ hosszúságú ekvidisztáns részintervallumra osztjuk $[a, b]$ integrálási intervallumot, akkor a következő kvadratúra-szabályokat kapjuk.

A képlethibával kiegészített érintőszabály:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= h \left\{ f(a + \frac{h}{2}) + f(a + \frac{3h}{2}) + \cdots + f(b - \frac{h}{2}) \right\} + \frac{b-a}{24} h^2 f''(\bar{\gamma}) \\ &= E_m(f) + \frac{(b-a)^3}{24m^2} f''(\bar{\gamma}).\end{aligned}$$

A képlethibával kiegészített trapézszabály:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= h \left\{ \frac{1}{2}f(a) + f(a+h) + \cdots + f(b-h) + \frac{1}{2}f(b) \right\} - \frac{(b-a)}{12} h^2 f''(\bar{\delta}) \\ &= T_m(f) - \frac{(b-a)^3}{12m^2} f''(\bar{\delta})\end{aligned}$$

Ha az $[a, b]$ intervallumon az $f''(x)$ derivált "nem nagyon változik", érvényes a gyakorlatban jól alkalmazható egyszerű közelítő hibabecslés:

$$T_{2m}(f) \approx \frac{1}{3}(T_{2m}(f) - T_m(f))$$

A képlethibával kiegészített Simpson-szabály:

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x)dx &= h \left\{ \frac{1}{6}f(z_0) + \frac{4}{6}f(z_0 + \frac{h}{2}) + \frac{2}{6}f(z_0 + h) + \cdots + \frac{1}{6}f(z_m) \right\} - \frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\bar{\mu}) \\ &= S_m(f) - \frac{b-a}{2880} h^4 f^{(4)}(\bar{\mu})\end{aligned}$$

Az $[a, b]$ intervallumon "nem nagyon változó" az $f^{(4)}(x)$ derivált esetén itt is egyszerű közelítő hibabecslés érvényes:

$$S_{2m}(f) \approx \frac{1}{15}(S_{2m}(f) - S_m(f))$$

1.3. Ortogonális polinomrendszerek és Gauss-kvadratúra

Az $f(x)$ függvény rögzített $[a, b]$ intervallumhoz és rögzített $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó

$$I(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)dx$$

integrálját továbbra is $I(f) \approx \sum_{i=1}^n w_i f(x_i)$ alakú kvadratúra-formulával próbáljuk közelíteni. Maga a formula tehát explicit módon nem tartalmazza $\rho(x)$ -et, bár a súlyok és az alappontok választása függ(het) tőle. A $\rho(x)$ súlyfüggvényen továbbra is az $[a, b]$ intervallumon értelmezett nemnegatív, nem azonosan 0, $[a, b]$ -n (impropriusan) Riemann-integrálható és (a, b) -n folytonos függvényt értünk.

A Riemann-integrálra vonatkozó ismert tételekből adódnak az alábbi észrevételek, melyeket gyakran alkalmazunk különböző levezetésekénél.

13. Állítás. Ha a $\rho(x)$ súlyfüggvény megfelel az előző kikötéseknek, akkor

- (i) ha $f(x)$ integrálható $[a, b]$ -n, akkor az $I(f) = \int_a^b f(x)\rho(x)dx$ integrál is létezik,
(ii) ha $f(x) \neq 0$ folytonos és jeltartó $[a, b]$ -n, akkor $I(f) \neq 0$.

Természetesen minen $p(x)$ polinomra is igaz a két előző megállapítás.

Most azt próbáljuk meghatározni, hogy melyek a "legjobb" kvadratura-formulák, mennyi lehet a rendjük maximálisan ($r \leq 2n - 1$). Az adott $[a, b]$ intervallumhoz és $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó maximális rendű kvadratura-formulákat Gauss-féle kvadratura-formuláknak nevezzük.

14. Tétel. Az $[a, b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó tetszőleges n alappontos Q_n interpolációs kvadratura-formula rendje akkor és csak akkor $2n - 1$, ha bármely legfeljebb $n - 1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra

$$\int_a^b p(x)\omega_n(x)\rho(x) dx = 0. \quad (1)$$

Látni fogjuk, hogy a (1)-el ekvivalens feltételek a Gauss-kvadratura hasznos jellemzését adják. Ezek további vizsgálatához a legkényelmesebb elméleti hátteret egy alkalmas lineáris belsőszorzat-tér bevezetése nyújtja. Átfogalmazva a (1) tételt:

15. Tétel. Az $[a, b]$ intervallumhoz és a $\rho(x)$ súlyfüggvényhez tartozó tetszőleges n alappontos Q_n interpolációs kvadratura-formula rendje akkor és csak akkor $2n - 1$, ha az alappontjaival felírt $\omega_n(x)$ n -ed fokú polinom ortogonális bármely legfeljebb $n - 1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra.

Az ortogonális polinomok gyökeinek tulajdonságaiból már következik a fejezet elején felvetett kérdésre adott válasz. Optimális ($2n - 1$ -ed rendű) kvadratura-formulát kapunk, ha a $p_n(x)$ polinom zérushelyeihez tartozó interpolációs kvadratura-formulát vesszük. Az ilyen Gauss-kvadraturák tulajdonságait a következő tételben foglaltuk össze:

16. Tétel. Tetszőlegesen rögzített $[a, b]$ intervallum, $\rho(x)$ súlyfüggvény és $1 \leq n$ természetes szám esetén a Q_n Gauss-kvadratura

- (i) egyértelműen létezik és rendje $2n - 1$,
(ii) alappontjai a $p_n(x)$ n -edik ortogonális polinom $x_1, x_2, \dots, x_n$ gyökei, súlyait

$$w_i = \int_a^b \frac{p_n(x)}{(x - x_i)p'_n(x_i)} \rho(x) dx \quad (2)$$

integrálok adják,

- (iii) $w_j > 0$ bármely $1 \leq j \leq n$ -re, azaz a Gauss-kvadratura pozitív,
(iv) ha $f(x) \in C^{2n}[a, b]$, akkor

$$R_n(f) = I_n(f) - Q_n(f) = \frac{f^{2n}(\eta)}{(2n)!} \int_a^b (p_n(x))^2 \rho(x) dx$$

valamely $\eta \in [a, b]$ értékkel.

17. Tétel. A Gauss-kvadratura w_j súlyait úgy is megkaphatjuk, hogy az x_j alappontokat behelyettesítjük a $p_0(x), p_1(x), \dots, p_{n-1}(x)$ ortogonális polinomokba és megoldjuk a

$$\sum_{j=1}^n w_j p_i(x_j) = \begin{cases} \langle p_0, p_0 \rangle & \text{ha } i = 0 \\ 0 & \text{ha } 1 \leq i \leq n-1 \end{cases}$$

lineáris egyenletrendszert.

18. Bizonyítás. A megoldandó rendszert részletesebben kiírva:

$$\begin{aligned} w_1 + w_2 + \dots + w_n &= \langle p_0, p_0 \rangle \\ w_1 p_1(x_1) + w_2 p_1(x_2) + \dots + w_n p_1(x_n) &= 0 \\ &\vdots \\ w_1 p_{n-1}(x_1) + w_2 p_{n-1}(x_2) + \dots + w_n p_{n-1}(x_n) &= 0 \end{aligned}$$

A rendszer együtthatómátrixa,

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ p_1(x_1) & p_1(x_2) & \dots & p_1(x_n) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ p_{n-1}(x_1) & p_{n-1}(x_2) & \dots & p_{n-1}(x_n) \end{pmatrix}$$

nem szinguláris, hiszen $\mathbf{P}^T$ a $\{p_0(x), p_1(x), \dots, p_{n-1}(x)\}$ függvényrendszernek az $x_1, x_2, \dots, x_n$ alappontokhoz tartozó Haar-mátrixa. Tehát egyértelműen létezik a $\mathbf{w}^T = (w_1, w_2, \dots, w_n)$ megoldás. A Gauss-kvadratura egyértelműsége miatt ezután elég azt megmutatni, hogy tetszőleges legfeljebb $2n-1$ -ed fokú $p(x)$ polinomra

$$\int_a^b p(x) \rho(x) dx = \sum_{j=1}^n w_j p(x_j).$$

$p(x)$ -en $p_n(x)$ -szel euklideszi osztást végezve:

$$p(x) = q(x)p_n(x) + r(x) \quad \text{és } \partial q, \partial r \leq n-1.$$

Ezért $r(x)$ egyértelműen kifejezhető $r(x) = \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i p_i(x)$ alakban is. Az integrálást elvégezve

$$\begin{aligned} \int_a^b p(x) \rho(x) dx &= \int_a^b q(x) \rho(x) dx + \int_a^b r(x) \rho(x) dx \\ &= \langle q, p_n \rangle + \langle r, p_0 \rangle \\ &= 0 + \left\langle \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i p_i, p_0 \right\rangle \\ &= \alpha_0 \langle p_0, p_0 \rangle. \end{aligned}$$

A kvadratura-formulát alkalmazva

$$\begin{aligned}
 Q_n(p) &= \sum_{j=1}^n w_j p(x_j) = \sum_{j=1}^n w_j q(x_j) p_n(x_j) + \sum_{j=1}^n w_j r(x_j) \\
 &= 0 + \sum_{j=1}^n w_j \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i p_i(x_j) \\
 &= \sum_{i=0}^{n-1} \alpha_i \sum_{j=1}^n w_j p_i(x_j) \\
 &= \alpha_0 \sum_{j=1}^n w_j p_0(x_j) = \alpha_0 \langle p_0, p_0 \rangle,
 \end{aligned}$$

tehát a formula pontos $p(x)$ -re. $\square$

Végül megemlítjük, hogy elképzelhető a gauss-formulákon alapuló kvadratura-szabályok is, de ezek használata elég nehézkes, mivel mind az alappontok, mind a súlyok értéke függ(het) az integrálási intervallumoktól. Ilyen célokra legfeljebb a $\rho(x) \equiv 1$ súlyfüggvényhez tartozó *Legendre-Gauss formulákat* szokás alkalmazni.

1.4. Numerikus differenciálás

A numerikus differenciálás szinte minden ma használatos formulájához úgy jutunk, hogy egy interpolációs formulát differenciálunk.

Legyenek adva valamely $f(x)$ függvény értékei a páronként különböző $x_1, x_2, \dots, x_n$ alappontokban, és legyen $x \in [a, b]$, ahol

$$a = \min\{x_1, x_2, \dots, x_n\} \quad b = \max\{x_1, x_2, \dots, x_n\}.$$

Feladatunk tüzük ki az $f^{(k)}(x)$ derivált meghatározását, ahol k természetes szám. Ekkor egyszerűen úgy járhatunk el, hogy először meghatározzuk az $n - 1$ -ed fokú $L_n(x)$ Lagrange-féle interpolációs polinomot valamely, számunkra előnyös formula segítségével, majd a szóban forgó formulát k -szor differenciáljuk és az

$$f^{(k)}(x) \approx L_n^{(k)}(x)$$

értéket vesszük a derivált közelítő értékének.

Tekintsük például az

$$\begin{aligned}
 L_n(x) &= f(x_1) + (x - x_1)f(x_1, x_2) + (x - x_1)(x - x_2)f(x_1, x_2, x_3) + \dots \\
 &\quad + (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_{n-1})f(x_1, x_2, \dots, x_n)
 \end{aligned}$$

Newton-féle interpolációs formulát. Ez felírható úgy is, hogy

$$f(x) = L_n(x) + \omega_n(x)f(x, x_1, x_2, \dots, x_n), \quad (3)$$

ahol

$$\omega_n(x) = (x - x_1)(x - x_2) \cdots (x - x_n).$$

Az írásmód egyszerűsítése végett vezessük be az $x - x_i = a_i$ ($i = 1, 2, \dots, n$) jelölést. Differenciáljuk x szerint (3) egyenlőség mindkét oldalát:

$$\begin{aligned} f'(x) &= f(x_1, x_2) + (a_1 + a_2)f(x_1, x_2, x_3) + \\ &+ (a_1a_2 + a_1a_3 + a_2a_3)f(x_1, x_2, x_3, x_4) + \\ &\vdots \\ &+ (a_1a_2 \cdots a_{n-1} + a_1a_2 \cdots a_{n-3}a_{n-1} + \cdots + a_2a_3 \cdots a_{n-1})f(x_1, x_2, \dots, x_n) + \\ &+ \frac{d\omega_n(x)}{dx}f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) + \omega_n(x)\frac{f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx}. \end{aligned}$$

Eszerint az $f'(x)$ derivált közelítését

$$\begin{aligned} L'_n(x) &= f(x_1, x_2) + (a_1 + a_2)f(x_1, x_2, x_3) + \\ &+ (a_1a_2 + a_1a_3 + a_2a_3)f(x_1, x_2, x_3, x_4) + \\ &\vdots \\ &+ (a_1a_2 \cdots a_{n-1} + a_1a_2 \cdots a_{n-3}a_{n-1} + \cdots + a_2a_3 \cdots a_{n-1})f(x_1, x_2, \dots, x_n), \end{aligned}$$

míg a maradéktagot az

$$R'_n(x) = \frac{d\omega_n(x)}{dx}f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) + \omega_n(x)\frac{f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx}.$$

kifejezés szolgáltatja. A jobb oldalon a második tag egyszerűsíthető, mivel az értelmezés szerint

$$\begin{aligned} \frac{f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx} &= \lim_{x' \rightarrow x} \frac{f(x', x_1, x_2, \dots, x_n) - f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{x' - x} \\ &= \lim_{x' \rightarrow x} f(x', x, x_1, x_2, \dots, x_n) = f(x, x, x_1, x_2, \dots, x_n). \end{aligned}$$

Ennek alapján

$$R'_n(x) = \frac{d\omega_n(x)}{dx}f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) + \omega_n(x)f(x, x, x_1, x_2, \dots, x_n),$$

vagy ha felhasználjuk az osztott differenciák és a deriváltak közötti kapcsolatot kifejező összefüggéseket, akkor azt kapjuk, hogy

$$R'_n(x) = \frac{d\omega_n(x)}{dx} \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} + \omega_n(x) \frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!},$$

ahol $\xi, \xi_1 \in (a, b)$. Az interpoláció $x_1, x_2, \dots, x_n$ alappontjaiban a jobboldal második tagja eltűnik, és a maradéktag kifejezése egyszerűbbé válik. Ezután még

egyszer differenciáljuk x szerint (3) mindkét oldalát

$$\begin{aligned} f''(x) &= 2f(x_1, x_2, x_3) + 2(a_1 + a_2 + a_3)f(x_1, x_2, x_+, x_4) + \\ &\quad \vdots \\ &\quad + 2(a_1 a_2 \cdots a_{n-3} + a_1 a_2 \cdots a_{n-4} a_{n-2} + \cdots + a_3 a_4 \cdots a_{n-1})f(x_1, x_2, \dots, x_n) + \\ &\quad + \frac{d^2 \omega_n(x)}{dx^2} f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) + 2 \frac{d\omega_n(x)}{dx} \frac{df(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx} + \\ &\quad + \omega_n(x) \frac{d^2 f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx^2}. \end{aligned}$$

Innen a második derivált közelítése az

$$\begin{aligned} L_n''(x) &= 2f(x_1, x_2, x_3) + 2(a_1 + a_2 + a_3)f(x_1, x_2, x_+, x_4) + \dots \\ &\quad \dots + 2(a_1 a_2 \cdots a_{n-3} + a_1 a_2 \cdots a_{n-4} a_{n-2} + \cdots + a_3 a_4 \cdots a_{n-1})f(x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned}$$

kifejezéssel történik, míg a maradéktag

$$\begin{aligned} R_n''(x) &= \frac{d^2 \omega_n(x)}{dx^2} f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) + \\ &\quad + 2 \frac{d\omega_n(x)}{dx} \frac{df(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx} + \omega_n(x) \frac{d^2 f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx^2} \end{aligned}$$

alakú lesz. A jobb oldalon a második tagot most is ugyanúgy egyszerűsíthetjük, mint fentebb. A harmadik tag egyszerűsítése céljából pedig végezzük el az alábbi átalakításokat:

$$\begin{aligned} \frac{d^2 f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx^2} &= \frac{df(x, x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx^2} = \\ &= \lim_{x' \rightarrow x} \frac{f(x', x', x_1, x_2, \dots, x_n) - f(x, x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{x' - x} = \\ &= \lim_{x' \rightarrow x} \frac{f(x', x', x_1, x_2, \dots, x_n) - f(x', x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{x' - x} \\ &\quad + \lim_{x' \rightarrow x} \frac{f(x', x, x_1, x_2, \dots, x_n) - f(x, x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{x' - x} = \\ &= \lim_{x' \rightarrow x} f(x', x', x_1, x_2, \dots, x_n) + \lim_{x' \rightarrow x} f(x', x, x_1, x_2, \dots, x_n) = \\ &= 2f(x, x, x, x_1, x_2, \dots, x_n). \end{aligned}$$

Ilyen módon a maradéktag a következő alakot veszi fel:

$$\begin{aligned} R_n''(x) &= \frac{d^2 \omega_n(x)}{dx^2} f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) + \\ &\quad + 2 \frac{d\omega_n(x)}{dx} f(x, x, x_1, x_2, \dots, x_n) + 2\omega_n(x) f(x, x, x, x_1, x_2, \dots, x_n) \end{aligned}$$

vagy

$$R_n''(x) = \frac{d^2 \omega_n(x)}{dx^2} \frac{f^{(n)}(\xi)}{n!} + 2 \frac{d\omega_n(x)}{dx} \frac{f^{(n+1)}(\xi_1)}{(n+1)!} + 2\omega_n(x) \frac{f^{(n+2)}(\xi_2)}{(n+2)!}.$$

Ha x az $x_1, x_2, \dots, x_n$ alappontok egyike, akkor a jobboldalon az utolsó tag eltűnik, és a maradéktag kifejezése ismét egyszerűsödik.

Az általános esetben azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} f^{(k)}(x) &= k! (f(x_1, x_2, \dots, x_{k+1}) + (a_1 + a_2 + \dots + a_{k+1})f(x_1, x_2, \dots, x_{k+2}) + \\ &\quad + (a_1 a_2 + a_1 a_3 + \dots + a_{k+1} a_{k+2})f(x_1, x_2, \dots, x_{k+3}) + \\ &\quad \vdots \\ &\quad + (a_1 a_2 \dots a_{n-k+1} + \dots + a_{k+1} a_{k+2} \dots a_{n-1})f(x_1, x_2, \dots, x_n)) + \\ &\quad + \frac{d^k}{dx^k} [\omega_n(x) f(x_1, x_2, \dots, x_n)] \end{aligned}$$

Megmutatható, hogy

$$\frac{d^j f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx_j} = j! f(\underbrace{x, x, \dots, x}_{(j+1)\text{-szer}}, x_1, x_2, \dots, x_n)$$

Ezért Leibniz szorzatdifferenciálási szabálya alapján a maradéktag kifejezése most

$$\begin{aligned} R_n^{(k)}(x) &= \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} \frac{d^j f(x, x_1, x_2, \dots, x_n)}{dx_j} \frac{d^{k-j} \omega_n(x)}{dx^{k-j}} = \\ &= \sum_{j=0}^k \frac{k!}{(k-j)!} \underbrace{f(x, x, \dots, x, x_1, x_2, \dots, x_n)}_{(j+1)\text{-szer}} \frac{d^{k-j} \omega_n(x)}{dx^{k-j}} = \end{aligned} \quad (4)$$

$$= \sum_{j=0}^k \frac{k!}{(k-j)!(n+j)!} f^{(n+j)}(\xi_j) \omega_n^{(k-j)}(x) \quad (5)$$

alakú lesz, ahol $\xi_j = \xi_j(x)$ számok valamennyien az (a, b) intervallumban fekszenek. Innen egyszerűen nyerhető, hogy

$$\left| f^{(k)}(x) - L_n^{(k)}(x) \right| \leq \sum_{j=0}^k \frac{k!}{(k-j)!(n+j)!} \max_{a \leq x \leq b} \left| f^{(n+j)}(x) \right| \left| \omega_n^{(k-j)}(x) \right|.$$

Megjegyezzük, hogy a $k = n - 1$ speciális esetben $f^{(n-1)}(x) \approx L_n^{(n-1)}(x)$ az

$$f^{(n-1)}(x) \approx (n-1)! f(x_1, x_2, \dots, x_n).$$

alakot veszi fel. Ugyanis, ha $f^{(n-1)}(x)$ folytonos és $(b-a)$ elég kicsi, akkor az $[a, b]$ intervallumban $f^{(n-1)}(\xi) \approx f^{(n-1)}(x)$.

Foglalkozunk most azzal az esettel, amikor az alappontok ekvidisztáns elhelyezkedésűek:

$$x_i - x_{i-1} = h \quad (i = 0, \pm 1, \pm 2, \dots).$$

Az $\omega_n^{(j)}(x)$ differenciálhányados $n - j$ tényezős szorzatok összege, amelyekben a tényezők mindegyike h nagyságrendű. Következésképpen $\omega_n^{(j)}(x)$ nagyságrendje $O(h^{n-j})$ lesz. Tehát az $R_n^{(k)}(x)$ hibatag (4) kifejezésének jobb oldala

$$f(x, x_1, x_2, \dots, x_n) \omega_n^{(k)}(x) + O(h^{n-k+1}) = O(h^{n-k}) \quad (6)$$

nagyságrendű. Ha az x pontban történetesen $\omega_n^{(k)}(x) = 0$, akkor elég egy pillantást vetnünk (6)-re annak megállapításához, hogy a hiba nagyságrendjében a h lépésköz hatványkitevője 1-gyel emelhető, ami a képlethiba lényegesen jobb becslését teszi lehetővé, ha csak $0 < h < 1$.

Határozzuk meg az $f''(x)$ differenciálhányad értékét az x_0 pontban, ha a páratlan számú ekvidisztáns alappont az

$$x_{-p}, x_{-p+1}, \dots, x_0, x_1, \dots, x_p$$

sorrendben vannak elrendezve. Ekkor $n = 2p + 1$ és

$$\omega_n(x) = (x - x_{-p})(x - x_{-p+1}) \dots (x - x_0)(x - x_1) \dots (x - x_p).$$

Nyilvánvaló, hogy $\omega_n(x)$ páratlan függvénye az x_0 pontra nézve. Ezért

$$\omega_n(x_0) = \omega_n''(x_0) = 0$$

és az (4) összefüggés $k = 2$ -ra az

$$f''(x_0) - L_n''(x_0) = 2f(x, x, x_{-p}, x_{-p+1}, \dots, x_p) \omega_n'(x_0)$$

alakot vesz fel. Közvetlen differenciálással kapjuk, hogy

$$\omega_n'(x_0) = (-1)^p (p!)^2 h^{2p}.$$

Következésképpen most

$$f''(x_0) - L_n''(x_0) = \frac{2(-1)^p (p!)^2}{(2p+2)!} f^{(2p+2)}(\xi) h^{2p}. \quad (7)$$

Az $L_n''(x_0)$ mennyiség kifejezhető a páros rendű f_0^{2j} differenciákkal. Differenciáljuk ugyanis kétszer a páratlan számú alappontokhoz tartozó Stirling-féle formulát. Elvégezve az

$$x = x_0 + ht \quad \frac{dt}{dx} = \frac{1}{h},$$

helyettesítést, azt kapjuk, hogy

$$\begin{aligned} \frac{d^2}{dx^2} S_{2p+1}(x_0 + ht) &= \frac{1}{h^2} \frac{d^2}{dt^2} S_{2p+1}(x_0 + ht) = \\ &= \frac{1}{h^2} \left(f_0^2 + t \mu f_0^3 + \frac{6t^2 - 1}{12} f_0^4 + \dots \right), \end{aligned}$$

ahonnan a $t = 0$ helyettesítéskor a páratlan rendű μf_0^{2j+1} differenciák kiesnek:

$$f''(x_0) \approx L_n''(x_0) = \frac{1}{h^2} \sum_{j=1}^p \frac{2(-1)^{j-1}[(j-1)!]^2}{(2j)!} f_0^{2j} \quad (8)$$

a (7) maradéktaggal.

A most levezetett (8) formula leggyakrabban használt esetei $p = 1$ -nek és $p = 2$ -nek felelnek meg:

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= \frac{1}{h^2} f_0^2 - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi), \\ f''(x_0) &= \frac{1}{h^2} \left(f_0^2 - \frac{1}{12} f_0^4 \right) + \frac{h^4}{90} f^{(6)}(\xi). \end{aligned} \quad (9)$$

Hivatkozások

1. Virágh János: *Numerikus matematika*, JATEPress 2000.
2. Virágh János: *Közelítő és szimbólikus számítások II.*, Kézirat 2008.
3. Móricz Ferenc: *Numerikus Analízis I.* Tankönyvkiadó 1977.
4. Móricz Ferenc: *Numerikus Analízis II.* Tankönyvkiadó 1976.
5. Csendes Tibor: *Közelítő és szimbólikus számítások*, Jegyzet 2005.
6. Sövegjártó András: *Numerikus Analízis II.*, ELTE Jegyzet 2004.