16. Nemlineáris egyenletek megoldása I.

Eddig lényegében lineáris egyenletrendszerek megoldásával foglalkoztunk. De sokszor felvetődik az

$$f(x)=0 \tag{16.1}$$

egyenlet egy (vagy esetleg több) gyökének keresése, ahol az $f(x)\in C[a,b]$ egyváltozós függvény. Minden olyan x^* érték, amelyre $f(x^*)=0$, a (16.1) egyenlet *gyöke* vagy $f(x)$ *zérushelye*. A gyök az x^* helyen m*-edrendű*, ha $f(x)=(x-x^*)^m g(x)$, $g(x^*)\neq 0$ alakban írható. Azzal az esettel foglalkozunk, amikor a megoldás közelítése valamilyen numerikus módszer segítségével végezhető.

16.1. A gyököt tartalmazó intervallum

Ha a függvény előjelet vált: $f(a)f(b)<0$, akkor a folytonosság miatt legalább 1 gyök található $[a,b]$-ben. Ha létezik $f(x)$ első deriváltja is, és előjeltartó $[a,b]$-ben, akkor csak 1 gyök van.

Ha a függvény nem monoton, akkor $[a,b]$-t célszerű olyan részintervallumokra bontani, ahol az intervallum két végpontja között előjelváltás van. Ílymódon $f(x)$ páratlan gyökeit el tudjuk különíteni. Deriválható függvény esetén a páros gyököket kereshetjük $f'(x)$ gyökeiként, mert ekkor a párosakat páratlanná tettük, de kereshetjük $f(x)/f'(x)$ gyökeit is, amelyek mind egyszeresek.

16.2. Fixpont iteráció

Egy lehetséges eljárás, hogy megpróbáljuk az $f(x)=0$ egyenletet fixpont-egyenletté alakítani:

$$x=F(x). \tag{16.2}$$

Példa: legyen a megoldandó egyenlet: $x^2-\sin(x)=0$. Ekkor próbálkozhatunk az $x_{k+1}=\sqrt{\sin(x_k)}$ iterációval. Fixpont-egyenletet mindig tudunk készíteni, hiszen $x=x+cf(x)$ is ilyen, ahol c nemzérus állandó, de választhatunk valamely $c(x)$ függvényt is olymódon, hogy az iteráció konvergencia-tulajdonságai javuljanak. A fixpont létezéséről szól a

16.2.1 Brouwer fixponttétel[1]

Ha $F(x)$ folytonos $[a,b]$-ben és $F:[a,b]\to[a,b]$, akkor létezik fixpontja.

<u>Bizonyítás.</u> Legyen $g(x)=x-F(x)$, ekkor $g(a)\le 0$ és $g(b)\ge 0$, amiből $g(a)g(b)\le 0$. Ha itt egyenlőségjel érvényes, akkor már van egy gyök, ha pedig a $<$ jel érvényes, akkor a folytonosság miatt kell léteznie gyöknek $[a,b]$-ben. ■

16.2.2 Tétel, kontrakció

Ha $F:S\to\mathbb{R}$ folytonosan differenciálható az S zárt intervallumon és $|F'(x)|<1$, $\forall x\in S$, akkor F kontrakció.

<u>Bizonyítás.</u> A Lagrange középérték tétel alapján $x,y\in S$-re $\exists\zeta: F(x)-F(y)=F'(\zeta)(x-y)$. Térjünk át az abszolút értékre és használjuk fel, hogy $\exists|F'(x)|$ maximuma S-ben:

---

[1] A tétel többdimenziós megfogalmazása: ha a folytonos $F(x)$ függvény a gömböt önmagába képezi le, akkor van fixpontja.

többször fordul elő. De ekkor a helyzet rosszabb, az is lehetséges, hogy egyik iterációs függvény sem konvergens. Emiatt azt célszerű tennünk, hogy az x-ek előfordulását két csoportba osztjuk és x-et az egyik csoportból teljesen kifejezük. Például $3x^2-2x+\exp(2.2x)+1=0$-nél az iterációs függvényre kereshetjük a másodfokú polinom gyökeit úgy, hogy a konstans tag helyére $\exp(2{,}2x)+1$-et írunk.

16.3. A konvergencia-sebesség

Legyen az x_n sorozat konvergens, $\lim_{n\to\infty} x_n = x^*$. Jelölje $\varepsilon = x_n - x^*$ az n-edik hibát. Ekkor, ha létezik c állandó és $p \geq 1$ szám úgy, hogy

$$|\varepsilon_{n+1}| \leq c|\varepsilon_n|^p, \quad n=0,1,\ldots, \tag{16.5}$$

akkor az x_n sorozat konvergenciája p*-edrendű*. Ha

- $p=1$, akkor a konvergencia *lineáris* vagy ***elsőrendű***,
- $1<p<2$, akkor a konvergencia *szuperlineáris*,
- $p=2$, akkor *kvadratikus* vagy ***másodrendű***,
- $p=3$, akkor *köbös*, vagy ***harmadrendű***.

A p szám jellemzi az iterációs módszer konvergenciájának sebességét. Ha például $p=2$, akkor ez nagyjából azt jelenti, hogy lépésenként az értékes jegyek száma megduplázódik.

A fixpont iteráció nem rendelkezik ezzel a sebességgel. Megmutatjuk, hogy $p=1$, azaz a konvergenciája elsőrendű, amennyiben $|F'(x^*)| \neq 0$. Ugyanis

$$|\varepsilon_{n+1}| = |x_{n+1}-x^*| = |F(x_n)-F(x^*)| \leq q|x_n-x^*| = q|\varepsilon_n|. \tag{16.6}$$

Ha $F'(x^*)=0$, akkor a konvergencia magasabb rendű. Erre vonatkozik a következő

16.3.1 Tétel

*Legyen F valós függvény: $F(S)\subset S\subset\mathbb{R}$, S zárt. Tegyük fel, $F\in C^m(S)$ és $F^{(k)}(x^*)=0$, $k=1,2,\cdots,m-1$. Ekkor az F által meghatározott iteráció konvergencia-sebessége $p=m$-**edrendű**.*

<u>Bizonyítás.</u> Az x^* körüli Taylor-polinom m-edrendű maradéktaggal

$$F(x)=F(x^*)+F'(x^*)(x-x^*)+\ldots+\frac{F^{(m-1)}(x^*)}{(m-1)!}(x-x^*)^{m-1}+\frac{F^{(m)}(\xi_x)}{m!}(x-x^*)^m$$

ahol a feltevés szerint az első, második, … , $m-1$-edik derivált eltűnik. Helyettesítsük $x=x_n$-et, vegyük figyelembe, hogy $x^*=F(x^*)$ és $x_{n+1}=F(x_n)$, ezzel

$$x_{n+1}-x^* = \frac{F^{(m)}(\xi_x)}{m!}(x_n-x^*)^m,$$

ahonnan

$$|\varepsilon_{n+1}| = \frac{|F^{(m)}(\xi_x)|}{m!}|x_n-x^*|^m \leq \frac{M_m}{m!}|\varepsilon_n|^m, \quad n=0,1,\ldots$$

ahol $M_k=\max_{x\in S}|F^{(k)}(x)|$. Innen látható, a konvergencia m-edrendű. ■

Az igen népszerű negyedrendű Runge-Kutta módszer negyedrendben konzisztens és stabil, vagyis negyedrendű konvergens módszer:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f(x_n + h/2, y_n + hk_1/2), \\ k_3 &= f(x_n + h/2, y_n + hk_2/2), \\ k_4 &= f(x_n + h, y_n + hk_3), \\ y_{n+1} &= y_n + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4). \end{aligned} \tag{20.15}$$

A Runge-Kutta módszerek lokális hibája:

$$g_n = y(x_n) - y(x_{n-1}) - h\sum_{j=1}^{s} c_j k_j(x_{n-1}, y(x_{n-1}), h), \quad n = 1, \ldots, N, \tag{20.16}$$

ahol $k_j(x_{n-1}, y(x_{n-1}), h)$ azt jelenti, hogy a k_j sorozatot a pontos $y(x_{n-1})$ értékkel indítva számoljuk végig. Egy adott rend eléréséhez a lokális hibát sorbafejtjük és a paramétereket úgy választjuk, hogy a tagok minél magasabb rendig eltűnjenek.

20.5. Lineáris többlépéses módszerek

Ezek is az Euler-módszer általánosításának tekinthetők. Az s-lépéses módszer általános alakja:

$$\sum_{k=0}^{s} \alpha_k y_{i+k} = h\sum_{k=0}^{s} \beta_k f_{i+k}, \quad f_{i+k} = f(x_{i+k}, y_{i+k}) \tag{20.17}$$

ahol α_k, β_k, $k = 0, 1, \ldots, s$ adottak, $\alpha_s = 1$ valamint $|\alpha_0| + |\beta_0 \neq 0|$ teljesül. Például az Euler-módszerre $s = 1$, $\alpha_0 = -1$, $\alpha_1 = 1$, $\beta_0 = 1$, $\beta_1 = 0$. A módszer indításához az y_0 értékén túl kellenek még az $y_1, y_2, \ldots, y_{s-1}$ értékek. Ha $\beta_s = 0$, akkor a módszer *explicit* és könnyen számolható. Ha $\beta_s \neq 0$, akkor a módszer implicit és a következő y_{i+s} érték az adódó nemlineáris egyenletből számítandó. Vegyük észre, az explicit módszernél minden lépésben egy új $f(x, y)$ típusú függvény-kiértékelés kell, (mivel a többi már korábbról megvan), ugyanakkor az implicit módszernél még ügyes esetben is legalább 2-3 kiértékelésre szükség van. A mondottakat két egyszerű példán szemléltejük.

Középpontszabály. Explicit, 2-lépéses módszer, a centrális differenciahányadosból származtatható:

$$y_{n+1} = y_{n-1} - 2hf_n, \quad n = 1, 2, \ldots, N \tag{20.18}$$

tehát $\alpha_0 = -1$, $\alpha_1 = 0$, $\alpha_2 = 1$, $\beta_0 = 0$, $\beta_1 = -2$, $\beta_2 = 0$. Bebizonyítható, hogy a módszer másodrendben konzisztens és stabil, ha f a második változójában eleget tesz a Lipschitz-feltételnek. A középpontszabály indításához legalább másodrendűen pontos y_1 értéket kell előállítani, amit megtehetünk valamely Runge-Kutta vagy Taylor-polinomos módszerrel, különben a másodrendű konvergencia nem lesz igaz.

Trapézszabály. Ez implicit módszer. Úgy származtatható, hogy a differenciálegyenletet átírjuk integrál alakba és a jobb oldalon keletkező integrált a trapézmódszerrel közelítjük:

$$y_{n+1} = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f_{n+1}), \quad n = 0, 1, \ldots, N-1. \tag{20.19}$$

így $s = 1$, $\alpha_0 = -1$, $\alpha_1 = 1$, $\beta_0 = \beta_1 = 1/2$. Itt a következő pont előállításához meg kell oldanunk y-ra az

$$y = y_n + \frac{h}{2}(f_n + f(x_n + h, y)) = F(y)$$

16.4.3 Tétel, monoton konvergencia

Legyen $f \in C^2[a,b]$, $f(x^*) = 0$, $x^* \in [a,b]$, az $f'(x), f''(x)$ deriváltak ne váltsanak előjelet $[a,b]$-ben, továbbá az $x_0 \in [a,b]$ kezdőpontra teljesüljön $f(x_0)f''(x_0) > 0$. Ekkor a Newton-módszer konvergens és az általa készített x_n sorozat monoton módon tart az x^* zérushelyhez.

Bizonyítás. A Newton-módszer (16.10) formulája szerint az összes iterált a gyöktől vagy jobbra, vagy balra helyezkedik el, mert f''/f' előjele állandó. A (16.7) formulából x^*-ot levonva

$$\varepsilon_{n+1} = \varepsilon_n - f(x_n)/f'(x_n) \tag{16.11}$$

következik. Az $f(x_0)f''(x_0) > 0$ feltétel miatt $f''(x_0)/f'(x_0)$ és $f(x_0)/f'(x_0)$ előjele megegyezik. Emiatt, ha (16.10)-ben $\varepsilon_1 > 0$, akkor $f''(x_0)/f'(x_0)$ pozitív és (16.11)-ben ε_0 kissebítve van és az összes további lépésben $\varepsilon_n > 0$ kisebbedik. Hasonlóan kapjuk, hogy $\varepsilon_1 < 0$ esetén az összes további $\varepsilon_n < 0$ nagyobbodik, tehát az ε_n-ek vagy felülről vagy alulról monoton módon tartanak 0-hoz. ■

Következmény. A (16.9) formula mutatja, hogyha a szelőmódszert úgy indítjuk, hogy $x_0, x_1 \in [a,b]$, ε_0 ε_1 és $f''(x_0)/f'(x_0)$ előjele megegyezik, akkor a tétel feltételei mellett a szelőmódszer is monoton konvergens sorozatot állít elő, mert a formulájában szereplő osztott differencia mindig helyettesíthető egy intervallum-beli deriválttal, aminek az előjele $[a,b]$-ben állandó.

16.4.4 Tétel, lokális konvergencia

Legyen $f \in C^2[a,b]$, $f(x^*) = 0$, $f'(x) \neq 0$, $x, x^* \in [a,b]$, és az $x_0 \in [a,b]$ kezdőpontra teljesüljön

$$|x_0 - x^*| < \frac{2\min_{[a,b]}|f'(x)|}{\max_{[a,b]}|f''(x)|} = \frac{1}{M}. \tag{16.12}$$

Ilyen x_0-ból indítva a Newton-Raphson módszer konvergál x^*-hoz. A szelőmódszer konvergál, ha x_0 mellett x_1 is kielégíti a (16.12) feltételt.

Bizonyítás. Az első lépéstől kezdve van kontrakció, ha (16.9) vagy (16.10) alapján

$$\left|\varepsilon_0 \frac{f''(\xi)}{2f'(\eta)}\right| \le |x_0 - x^*| \frac{\max_{[a,b]}|f''(x)|}{2\min_{[a,b]}|f'(x)|} < 1.$$

Az állítás innen átrendezéssel adódik. A szelőmódszernél a második lépéshez még ε_1-re is meg kell követelnünk ugyanezt a feltételt. ■

A fentiek alapján a Newton-Raphson módszernél megbecsüljük az $n+1$-edik hibát. Bevezetve a $d_k = M|\varepsilon_k|$ jelölést

$$d_{n+1} = M|\varepsilon_{n+1}| \le M^2\varepsilon_n^2 \quad \to \quad d_{n+1} \le d_0^{2^n} \quad \to \quad |\varepsilon_{n+1}| \le (M\varepsilon_0)^{2^n}. \tag{16.13}$$

16.4.5 Tétel, szelőmódszer konvergencia-sebessége

A 16.4.4 Tétel feltételei mellett az x_0, x_1 kezdőpontokból indítva a szelőmódszer $p = (1+\sqrt{5})/2 \approx 1{,}62$ aszimptotikus sebességgel konvergál x^*-hoz.

Bizonyítás. Most

$$|\varepsilon_{n+1}| \le M|\varepsilon_n||\varepsilon_{n-1}|$$

érvényes (16.9) alapján, ahol M ugyanaz, mint (16.12)-ben. Ismét a $d_k = M|\varepsilon_k|$ jelöléssel

20.1.9 Tétel, numerikus módszer konvergenciája

Ha egy numerikus módszer stabil és p-edrendben konzisztens, akkor p-edrendben konvergens.

Bizonyítás. Ha $x=0$, akkor a tétel igaz. Ha $x\in(0,1]$, legyen $h=x/n$, $x_n=x$ $\forall n$-re. Először a stabilitás, majd a konzisztencia definícióját felhasználva

$$|e_i|\le K\left(|e_0|+\sum_{j=1}^{n}|g_j|\right)\le K\sum_{j=1}^{n}ch^{p+1}\le$$
$$\le Kcnh^{p+1}\le Kc(nh)h^p\le(Kc)h^p,$$

ahol $e_0=y(x_0)-y_0=0$. Ezzel p-edrendű konvergencia-sebességre jutottunk. ■

20.2. Az Euler-módszer vizsgálata

Látjuk, az Euler-módszerre a konzisztenciát és stabilitást kéne megmutatni ahhoz, hogy a konvergenciát igazoljuk.

20.2.1 Tétel, konzisztencia

Az Euler-módszer elsőrendben konzisztens, vagyis $g_i=O(h^2)$ teljesül, ha a megoldás kétszer folytonosan differenciálható.

Bizonyítás. Tekintsük a lokális hibát az i-edik pontban és $y(x_{i+1})$-et fejtsük sorba az x_i hely körül:

$$g_i=y(x_{i+1})-y(x_i)-hf(x_i,y(x_i))=$$
$$=y(x_i)+hy'(x_i)+\frac{h^2}{2!}y''(\xi_i)-y(x_i)-hy'(x_i),$$

emiatt

$$|g_i|=\frac{h^2}{2!}|y''(\xi_i)|\le\|y''\|_\infty\frac{h^2}{2!},$$

tehát $p+1=2$, $p=1$, elsőrendű a konzisztencia. ■

20.2.2 Tétel

Az Euler-módszer stabil, ha f eleget tesz a máasodik változója szerint a Lipschitz-feltételnek.

Bizonyítás. Vegyük az i-edik pontban a lokális hiba képletét, a módszer képletét és vonjuk ki őket egymásból:

$$y(x_{i+1})=y(x_i)+hf(x_i,y(x_i))+g_i \qquad /(+)$$
$$y_{i+1}=y_i+hf(x_i,y_i) \qquad /(-)$$
$$e_{i+1}=e_i+h[f(x_i,y(x_i))-f(x_i,y_i)]+g_i$$

Mivel f eleget tesz a Lipschitz-feltételnek:

$$|e_{i+1}|\le|e_i|+h|f(x_i,y(x_i))-f(x_i,y_i)|+|g_i|\le|e_i|(1+hL)+|g_i|.$$

Fejtsük vissza a rekurziót e_0-ig:

A számlálóban lévő osztott differenciát átalakítjuk, kihasználva, hogy $f[x^*,x^*]=0$ és az alappontok sorrendje az osztott differenciákban tetszőleges: $f[x_0,x_1]=f[x_0,x_1]-f[x_1,x^*]+f[x_1,x^*]-f[x^*,x^*]=$ $=\varepsilon_0 f[x_0,x_1,x^*]+\varepsilon_1 f[x_1,x^*,x^*]$. Beírva a fenti formulába és közös nevezőre hozva:

$$\varepsilon_3=\frac{\varepsilon_0\left(f[x_0,x_1,x_2]-f[x_0,x_1,x^*]\right)+\varepsilon_1\left(f[x_0,x_1,x_2]-f[x_1,x^*,x^*]\right)}{2f[x_0,x_1,x_2]}.$$

A számláló első két tagja továbbírva $\varepsilon_0\varepsilon_2 f[x_0,x_1,x_2,x^*]$. A utolsó két tag átalakítása kicsit hosszabb: $\varepsilon_1\left(f[x_0,x_1,x_2]-f[x_0,x_1,x^*]+f[x_0,x_1,x^*]-f[x_1,x^*,x^*]\right)=\varepsilon_1\varepsilon_2 f[x_0,x_1,x_2,x^*]+\varepsilon_0\varepsilon_1 f[x_0,x_1,x^*,x^*]$.
Ezekkel

$$\varepsilon_3=\frac{(\varepsilon_0+\varepsilon_1)\varepsilon_2 f[x_0,x_1,x_2,x^*]}{2f[x_0,x_1,x_2]}+\frac{\varepsilon_0\varepsilon_1 f[x_0,x_1,x^*,x^*]}{2f[x_0,x_1,x_2]}.$$

Legyen $\delta_2=\max\{|\varepsilon_0|,|\varepsilon_1|,|\varepsilon_2|\}$ és

$$M=\frac{\max\limits_{x\in[a,b]}|f^{(3)}(x)|}{2\min\limits_{x\in[a,b]}|f''(x)|}. \tag{16.17}$$

Felhasználva, hogy az osztott differenciák kifejezhetők a nekik megfelelő rendű deriváltakkal, kapjuk:

$$|\varepsilon_3|\le\frac{3}{2}\delta_2^2\frac{2!}{3!}2M=\delta_2^2M. \tag{16.18}$$

Így $|\varepsilon_3|$ biztosan kisebb a három megelőző ε abszolút maximumánál, ha $\delta_2 M<1$, vagy másképp $\delta_2<1/M$. Tehát a kapott módszer biztosan konvergens, ha a három induló pont a minimumhely $1/M$-sugarú környezetében van.

16.6. Gyakorlatok

1. Bizonyítsuk be, hogyha $f\in C^1[a,b]$, $f(a)f(b)<0$ és $f'(x)$ nem vált előjelet $[a,b]$-ben, akkor ott az $f(x)$ függvénynek csak egy gyöke van.
2. A fixponttétel alkalmazásával mutassuk meg, hogy a $\cos x-4x+2=0$, $x\in\mathbb{R}$ egyenletnek egy zérushelye van és x-et $4x$ felől kifejezve a fixpont iteráció minden kezdőértékre konvergens!
3. Az előző feladatban a gyök milyen környezetéből konvergál biztosan a Newton-iteráció?
4. Oldjuk meg az $f(x)=1/x-a=0$ egyenletet Newton-iterációval! Milyen kezdőértékekre van konvergencia? A kapott formula érdekesége, hogy nincs benne osztás, aminek régebben külön jelentősége volt az osztás műveletével nem rendelkező gépi aritmetikákban.
5. Oldjuk meg az $f(x)=x^2-a=0$, $a>0$ egyenletet Newton-iterációval és tisztázzuk a konvergenciát!
6. Az előző feladat megoldása alapján készítsünk módszert $a^{1/k}$ meghatározására, ahol a pozitív valós szám.
7. Mutasssuk meg, hogy a 16.4.3 Tételt módosíthatjuk úgy, hogy az $f(x_0)f''(x_0)>0$ feltételt elhagyjuk és helyette azt követeljük meg, hogy az első lépés után $x_1\in[a,b]$.
8. Mutassuk meg, hogy az $F(x_n)=x_n-\dfrac{(f(x_n))^2}{f(x_n)-f(x_n-f(x_n))}$ iteráció konvergenciája másodrendű!

20. Közönséges differenciálegyenletek

20.1. Alapfogalmak

Az

$$F(x, y, y', y'', \ldots, y^{(m)}) = 0 \tag{20.1}$$

alakú egyenletet *közönséges differenciálegyenletnek* nevezzük, ahol keresendő az $y = y(x)$ függvény, mely a fenti kifejezésben deriváltjaival együtt szerepel. Ha y m-szer differenciálható $[0,1]$-ben és kielégíti (20.1)-et, akkor y egy *megoldás*. Ismeretes, a differenciálegyenleteknek sok megoldásuk van. A megoldást úgy tudjuk *egyértelművé* tenni, hogy a peremen még feltételeket teszünk a függvény vagy deriváltjainak értékére. Ha ezen feltételek mindegyike a kezdőpontban (általánosabban fogalmazva: csak egy pontban) van megadva, akkor *kezdetiérték feladatról* beszélünk, ha pedig több ponthoz kapcsolódnak a feltételek, akkor *peremérték feladatunk* van.

A differenciálegyenlet *lineáris*, ha y és deriváltjainak lineáris kombinációja szerepel (20.1)-ben és a differenciálegyenlet *explicit* alakú, ha a legmagasabb derivált explicit módon kifejezhető:

$$y^{(m)} = f(x, y, y', \ldots). \tag{20.2}$$

Világos, minden lineáris differenciálegyenlet ebbe a kategóriába tartozik, és a gyakorlatban előforduló nemlineáris differenciálegyenletek zöme is ilyen. A továbbiakban explicit első-rendű differenciálegyenletek megoldásának numerikus közelítéseivel fogunk foglalkozni, amikor kezdetiérték feladatról van szó. Ekkor a kezdeti értékprobléma

$$y(0) = y_0, \quad y' = f(x, y), \quad x \in [0,1], \tag{20.3}$$

ahol $f : \mathbb{R}^2 \to \mathbb{R}$, x_0 és y_0 adottak, és keressük azt az $y : [0,1] \to \mathbb{R}$ függvényt, amely felveszi x_0-ban az y_0 értéket és az egyenletet kielégíti. Az egyszerűség kedvéért szoritkozunk a $[0,1]$ intervallumra, hiszen tudjuk, az $[a,b]$ intervallum lineáris transzformációval ide átvihető. A megoldás létezésére és egyértelműségére vonatkozik a következő tétel, melyet bizonyítás nélkül idézünk.

20.1.1 Tétel, a kezdetiérték feladat egyértelműsége

Ha f folytonos egy $(x, y) \in [0,1] \times [c,d]$ téglán és f a második változója szerint eleget tesz a Lipschitz-feltételnek, azaz létezik L:

$$|f(x, y_1) - f(x, y_2)| \le L|y_1 - y_2|, \quad \forall x \in [0,1], \; y_1, y_2 \in [c,d], \tag{20.4}$$

akkor a kezdetiérték feladatnak egyértelmű megoldása van.

A numerikus eljárás során a megoldást az $x_n = nh$ osztópontokban közelítjük, ahol $h = 1/N$ és a numerikus közelítést x_n-ben y_n-nel jelöljük. Természetesen azt szeretnénk, hogy y_n minél közelebb legyen a pontos értékhez, $y(x_n)$-hez.

20.1.2 Az Euler-módszer

Ez a legegyszerűbb módszer, amit a differencia-hányadosból származtatunk a következő közelítő érték előállítására:

$$\frac{y_{n+1} - y_n}{h} = f(x_n, y_n) \;\to\; y_{n+1} = y_n + hf(x_n, y_n). \tag{20.5}$$

17.2. A húrmódszer (regula falsi)

Itt csak annyi az eltérés az intervallumfelezés módszerétől, hogy nem az intervallum közepét vesszük, hanem az $(a_n, f(a_n))$ és $(b_n, f(b_n))$ pontokra illesztett egyenes, más névvel: *húr* zérushelye a következő közlítés:

$$x_{n+1} = a_n - f(a_n)\frac{b_n - a_n}{f(b_n) - f(a_n)}. \tag{17.2}$$

Megfelelő feltételek mellett bizonyítható, hogy a húrmódszer konvergencája lineáris, így nem gyorsabb, mint az intervallumfelezés. Még az is megeshet, hogy annál lassúbb. Ez történik például olyan esetben, amikor a függvény értékei az x-tengelyhez közel vannak és az egyik végponthoz (a_n vagy b_n) nagyon közeli a gyök.

17.3. A Newton-iteráció többváltozós esetben

Legyen $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}^n$ egy n-változós leképezés, amelynek keressük azt a vektorát, amelyre $f(x) = 0$. Tételezzük fel a differenciálhatóságot, ekkor az $x_k \in \mathbb{R}^n$ körüli sorfejtésből közelítve

$$f(x_k) + f'(x_k)(x - x_k) = 0, \tag{17.3}$$

ahol most $f'(x) = \left[\partial f_i(x)/\partial x_j\right] \in \mathbb{R}^{n \times n}$ mátrix – a rendszer un. Jacobi-mátrixa - , amelyről feltesszük, hogy invertálható. (17.3)-et x-re megoldva a következő iterációt kapjuk:

$$x_{k+1} = x_k - \left[f'(x_k)\right]^{-1} f(x_k). \tag{17.4}$$

Ha van megoldás és elég közel vagyunk hozzá, akkor remélhetjük, hogy a többváltozós Newton-iteráció konvergens lesz.

A módszer azt követeli meg, hogy minden lépésben elkészítsük a deriváltak mátrixát és megoldjunk vele egy lineáris egyenletrendszert. Mivel ez nagyon munkaigényes lehet, szokás alkalmazni a következő egyszerűsítést: Elkészítjük az $f'(x_k) = LU$ faktorizációt és utána az egyszerűbb

$$x_{k+1} = x_k - (LU)^{-1} f(x_k) \tag{17.5}$$

iterációt alkalmazzuk. Ez 1-dimenzióban annak felel meg, hogy lépésenként a derivált értékét nem változtatjuk. Az ilyen módszereket kvázi-Newton módszereknek nevezzük.

17.4. Polinomok gyökei

A polinomok gyökeinek meghatározása talán leggyakrabban a mátrixok sajátértékeinek keresésekor jön elő, de ekkor nem érdemes a hatványösszeg alakot használni, mert a lineáris algabrai algoritmusok numerikusan előnyösebb megoldásokat kínálnak. Valóban magasabbfokú polinomok esetén a hatványösszeg reprezentáció

$$p(x) = \sum_{i=0}^{n} a_i x^i \tag{17.6}$$

nem előnyös, mert gépi számként ábrázolva az együtthatók n növekedésével egyre bizonytalanabb információt nyújtanak a gyökök pontos értékéről. Példának álljon itt Wilkinson kisérlete, aki az 1,2,...,19,20 gyökökkel rendelkező huszadfokú polinomot (17.6) alakban előállította, majd visszaszámolta a gyököket. Az eredmény annyira más volt, hogy több komplex gyökpárt is kapott. A jelenséget magyarázza a gyökök és együtthatók összefüggése: például a nulladfokú tag a gyökök szorzata: 20!, aminek a pontos ábrázolására messzi nem elegendő 15 decimális jegy. Így a gépi számábrázolás folytán sok fontos információ elvész.

19.2.1 Következmény

Az a_i együtthatók pozitívak.

Bizonyítás. Tudjuk, $l_i(x_j)=l_i^2(x_j)=\delta_{ij}$, ahol δ_{ij} a Kronecker-delta, $l_i^2(x)\geq 0$ és $l_i^2(x)\in\mathcal{P}_{2n}$, következésképp a Gauss-kvadratúra pontos :

$$0<\int l_i^2\alpha=G_n(l_i^2)=\sum_{j=0}^{n}a_i l_i^2(x_j)=a_i.$$

Az $f(x)=1$ függvény integrálásával most a következőt kapjuk az együtthatók összegére:

$$\sum_{i=0}^{n}a_i=\int\alpha=\mu_0,\quad \mu_i=\int x^i\alpha,$$

ahol μ_0 a nulladik momentum. Vegyük észre, ez egyenlő $b-a$-val, ha a súlyfüggvény 1.

19.2.2 Tétel, Gauss-kvadratúra hibaformulája

Legyen $f\in C^{2n+2}[a,b]$ és $G_n(f)=\sum_{k=0}^{n}a_k f(x_k)$, ahol az alappontok $p_{n+1}(x)$ gyökei. Akkor

$$I(f)-G_n(f)=\frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{(2n+2)!}(p_{n+1},p_{n+1}), \tag{19.2}$$

itt $p_{n+1}(x)$ 1-főegyütthatós ortogonális polinom.

Bizonyítás. Hermite-Fejér interpolációból (amikor az interpolációban a függvényértékek és az első deriváltak vesznek részt) kapjuk a következő hiba-előállítást:

$$f(x)=H_{2n+1}(x)+\frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\underbrace{(x-x_0)^2(x-x_1)^2\ldots(x-x_n)^2}_{=p_{n+1}^2(x)}.$$

Innen az integrálás középérték-tételének alkalmazásával

$$I(f)-G_n(f)=\int_a^b\frac{f^{(2n+2)}(\xi_x)}{(2n+2)!}\underbrace{p_{n+1}^2(x)}_{\geq 0}\alpha(x)dx$$

nyerjük az állítást, mert $H_{2n+1}(x)$-re a Gauss-kvadratúra pontos. ■

Megadunk néhány 1-főegyütthatós ortogonális polinomot:

Név	$[a,b]$	$\alpha(x)$	μ_0	α_{n+1}	β_n	p_0	p_1	p_2
Legendre	$[-1,1]$	1	2	0	$n^2/(4n^2-1)$	1	x	$x^2-1/3$
Csebisev	$[-1,1]$	$\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	π	0	1/4, de $\beta_1=1/2$	1	x	$x^2-1/2$
Laguerre	$[0,\infty]$	e^{-x}	1	$2n+1$	n^2	1	$x-1$	x^2-4x+2
Hermite	$[-\infty,\infty]$	e^{-x^2}	$\sqrt{\pi}$	0	$n/2$	1	x	$x^2-1/2$

Abban az esetben, amikor minden gyök valós és egyszeres, akkor az Eulidészi algoritmus olyan polinomsorozatot készít, amely *Sturm-sorozat tulajdonságú*. Legyen az a helyen a sorozat előjelváltásainak száma $V(a)$, a b helyen pedig $V(b)$, ekkor megmutatható, hogy az $[a,b]$ intervallumban a gyökök száma $V(b)-V(a)$.

17.5. Gyakorlatok

1. Készítsük el a (17.9) osztás algoritmusát!
2. Adjuk meg a $4x^5-3x^4+6x^3-5x^2-8x+2$ polinom gyökeit tartalmazó körgyűrűt!

$$-\frac{h^5}{90}\sum_{k\ \text{pdan}} f^{(4)}(\eta_k) = -\frac{(b-a)^5}{180m^4}\left(\frac{\sum f^{(4)}(\eta_k)}{m/2}\right) = -\frac{(b-a)^5}{180m^4} f^{(4)}(\eta), \qquad (18.16)$$

mivel a Darboux-tulajdonság miatt van egy η, amelyre a negyedik derivált az átlagértéket felveszi.

18.3. Példák

1) Az $\int_{-1}^{1}\frac{dx}{2+x}$ integrált az érintőszabállyal közelítjük. Hány osztópontot kell választanunk, hogy az integrált 10^{-2}-nél kisebb hibával kapjuk?

Megoldás. Azt kell biztosítani, hogy $\frac{(b-a)^3}{24m^2}M_2 \le 10^{-2}$ teljesüljön, ahol $b-a=2$ és $M_2 = 2\max_{x\in[-1,1]}\left|(2+x)^{-3}\right| = 2$. A számokat helyettesítve: $200/3 \le m^2$, így $m=9$ megfelel.

2) Határozzuk meg az A_0, A_1, A_2 paramétereket úgy, hogy a $\int_0^2 \sqrt{x} f(x)dx \approx$ $\approx I_2(f) = A_0 f(0) + A_1 f(1) + A_2 f(2)$ kvadratúra legfeljebb másodfokú polinomokra pontos legyen!

Megoldás. Két megoldás is létezik. Az egyik, hogy kiszámítjuk a kijelölt integrálokat a Lagrange-alappolinomokkal: $A_i = \int_0^2 l_i(x)\sqrt{x}dx$, ahol $\sqrt{x}$-et súlyfüggvénynek tekintjük. A másik módszer szerint felírjuk azt a lineáris egyenletrendszert, ami a pontossági követeléseket tartalmazza. A következő egyenletrendszer első sora azt fejezi ki, hogy a kvadratúra az 1 polinomra pontos, a második sor szerint az x polinomra pontos, a harmadik sor szerint pedig az x^2 polinomra pontos:

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 2 \\ 0 & 1 & 4 \end{bmatrix}\begin{bmatrix} A_0 \\ A_1 \\ A_2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_0^2 x^{1/2}dx = 4\sqrt{2}/3 \\ \int_0^2 x\cdot x^{1/2}dx = 8\sqrt{2}/5 \\ \int_0^2 x^2 x^{1/2}dx = 16\sqrt{2}/7 \end{bmatrix}.$$

Ennek a megoldása: $A_0 = \frac{8\sqrt{2}}{105}$, $A_1 = \frac{32\sqrt{2}}{35}$, $A_2 = \frac{12\sqrt{2}}{35}$.

$$a_k = (b-a)\frac{(-1)^{n-k}}{(n+2)k!(n-k)!}\int_0^{n+2}\frac{(t-1)(t-2)\ldots(t-n-1)}{t-k-1}dt = (b-a)B_{k,n}^{\text{ny}}, \qquad (18.5)$$

Az első néhány Newton-Cotes együttható:

Zárt					Nyílt			
1	1			Trapéz	1		Érintő formula	
1	4	1		Simpson	1	1		
1	3	3	1		2	-1	2	
7	32	12	32	7	11	1	1	11

A táblázatban minden sort osztani kell az együtthatók összegével, mert az együtthatók összegének 1-nek kell lenni. Például az 1 4 1 súlyok az 1/6 4/6 1/6 valódi súlyokra utalnak.

18.1.2 Tétel

$$1.\ \sum_{k=0}^{n} B_{k,n} = 1, \qquad 2.\ B_{k,n} = B_{n-k,n}. \qquad (18.6)$$

Bizonyítás. Az első állítás az $f(x)\equiv 1$ függvény integrálásából adódik, kihasználva, hogy az integrál 0-adfokú polinomra pontos. A második állítást az $y=n-t$ új változóra való áttéréssel nyerjük. ■

18.2. Néhány egyszerű integráló formula

1. Az *érintőformula* (nyílt Newton-Cotes): $n=0$, $B_{0,0}^{\text{ny}} = \frac{1}{2\cdot 1\cdot 1}\int_0^2 1\cdot dt$, tehát

$$I_0(f) = (b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right). \qquad (18.7)$$

Az érintőformula úgy is értelmezhető, hogy a függvényt $[a,b]$-ben a középponthoz húzott érintő egyenessel közelítjük, és az egyenes alatti területet vesszük. Ez mutatja, hogy legfeljebb elsőfokú polinomig pontos.

18.2.1 Tétel, érintő formula hibája

Legyen $c=(a+b)/2$, $f\in C^2[a,b]$, *ekkor az érintő formulával*

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)f(c) + \frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta), \quad \eta\in[a,b]. \qquad (18.8)$$

Bizonyítás. A c körüli sorfejtésből

$$f(x) = f(c) + (x-c)f'(c) + \frac{(x-c)^2}{2}f''(\xi_x).$$

Integráláskor az első tag adja a közelítő formulát, a második tag eredménye zérus, így elegendő a hibatagot vizsgálni:

$$R_1(f) = \frac{1}{2}\int_a^b (x-c)^2 f''(\xi_x)dx.$$