

# SZÁMÍTÓGÉPES ESZKÖZÖK DINAMIKUS MODELLEK VIZSGÁLATÁRA

3. hét - Numerikus módszerek integrálásra és deriválásra.

Bánhelyi Balázs

Szegedi Tudományegyetem

2012

- Tekintsük az  $f : I \rightarrow R$  folytonos és deriválható függvényt. Legyen  $x_0 \in I$  egy pont az  $I$  belsejében. Értelmezés szerint a derivált  $x_0$ -ban

$$f'(x_0) = \lim_{x \rightarrow x_0} \frac{f(x) - f(x_0)}{x - x_0}$$

vagy  $h = x - x_0$  jelöléssel:

$$f'(x_0) = \lim_{h \rightarrow 0} \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

- Numerikusan a derivált értékét a jobb oldalon szereplő törttel közelítjük meg:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

ahol  $h$  egy zéróhoz közeli érték:  $h = 10^{-3}; 10^{-4}$  (a továbbiakban  $h > 0$ ); kerülni kell a túlzottan kicsi értéket, mivel a nullával való osztás hibához vezethet.

► A

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{2h}$$

képlet hibarendje lineáris:

$$\left| f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \right| = O(h)$$

► Míg a

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

képlet négyzetes:

$$\left| f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \right| = O(h^2).$$

- ▶ Több ismeretlenes függvények esetében  $f : R^m \rightarrow R$  a parciális deriváltak kiszámítása hasonlóan történik a már ismertetett módszerekkel. Azzal a megjegyzéssel, hogy minden változót konstansnak tekintünk, kivéve azt a változót, ami szerint történik a deriválás.

$$\begin{aligned}\frac{\partial f}{\partial x_i} &= (x_1; \dots; x_m) = \\ &= \frac{f(x_1; \dots; x_i + h; \dots; x_m) - f(x_1; \dots; x_i; \dots; x_m)}{h}\end{aligned}$$

# Magasabb rendű deriváltak

- ▶ A másodrendű derivált kiszámításához kétszer alkalmazzuk az elsőrendű derivált képletét, például az első képlet kétszeri alkalmazása a következő képletet eredményezi:

$$\begin{aligned} f''(x_0) &= \frac{f'(x_0 + h) - f'(x_0)}{h} = \frac{\frac{f(x_0 + 2h) - f(x_0 + h)}{h} - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}}{h} \\ &= \frac{f(x_0 + 2h) - 2f(x_0 + h) + f(x_0)}{h^2} \end{aligned}$$

- ▶ Többismeretlenes esetben:

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 f}{\partial x_i^2}(x_1; \dots; x_m) &= \\ &= \frac{1}{h^2} (f(x_1; \dots; x_i + h; \dots; x_m) - 2f(x_1; \dots; x_i; \dots; x_m) + \\ &\quad + f(x_1; \dots; x_i - h; \dots; x_m)). \end{aligned}$$

- ▶ Ha egy  $f(x)$  függvény képlettel megadható, illetve rendelkezésre áll az őt kiszámító szubrutin, akkor a következő eljárással egyszerűen lehet a derivált értékét (nem numerikus becsléssel) meghatározni:
  - ▶ A függvény minden változója helyett használjunk olyan adat-szerkezetet, amely két valós számból áll. Az első felel meg a korábbi változó-értéknek, a második pedig egy derivált-értéknek.
  - ▶ Minden változóra ez a második valós legyen kezdetben egy. Minden, a függvény kiszámításához használt konstans új adat-szerkezetében a második érték legyen nulla.
  - ▶ Ezután csak olyan szabályokra van szükség, amelyek minden műveletre megadják a megfelelő operációt az első tagon, és a deriválási szabályoknak megfelelő lépést a második tagon.

- ▶ Például, ha  $f(x) = x_1 \cdot x_2$ , akkor a szokásos programsor  $F = X(1) \cdot X(2)$  lenne. Az automatikus differenciálás megfelelő művelete ezzel szemben

$$F(1) = X(1; 1) \cdot X(2; 1)$$

és

$$F(2) = X(1; 1) \cdot X(2; 2) + X(2; 1) \cdot X(1; 2)$$

- Általános értelemben kvadrátúra határozott integrál kiszámítását jelenti. Ha adva van egy  $f : [a; b] \rightarrow R$  folytonos függvény és  $[a; b]$  intervallum egy felosztása:  $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$ , akkor a

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

határozott integrál kiszámítható a Riemann-féle összeggel:

$$I = \lim_{n \rightarrow \infty} \sum_{i=0}^{n-1} (x_{i+1} - x_i) f(\xi_i), \text{ ahol } \xi_i \in [x_i; x_{i+1}].$$

- Numerikus kvadratura képletnek nevezzük a következő képletet:

$$\int_a^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} A_i \cdot f(x_i) + R$$

ahol az  $A_i$  együtthatók függetlenek  $f(x)$  függvénytől,  $x_i$  a csomópontok,  $R$  pedig az elkövetett hiba.

- ▶ Téglalap módszer:

$$\int_a^b f(x)dx = h(f(x_0) + \dots + f(x_{n-1})).$$

- ▶ Trapéz módszer:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} (f(x_0) + 2f(x_1) + \dots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)).$$

- ▶ Simpson módszer ( $2n$  részre osztva):

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{2} \left( f(x_0) + 4 \sum_{i=1}^n f(x_{2i-1}) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(x_{2i}) + f(x_{2n}) \right).$$

- ▶ Az említett képletek interpolációs sémákból erednek és Newton-Cotes néven ismertek. Az alábbi táblázat összehasonlítja az interpoláló polinom fokát, illetve a hibarendet:

| Módszer  | Interp. pol. fokszáma | Hibarend |
|----------|-----------------------|----------|
| Téglalap | 0                     | $O(h)$   |
| Trapéz   | 1                     | $O(h^2)$ |
| Simpson  | 2                     | $O(h^4)$ |