MTA SZTAKI

A közelitő számitások néhány problémájáról

Gergely József

1. Mérési adatok kiértékelése közben gyakran találkozunk olyan feladatokkal, amelyekben pontatlan mérési adatokat kell kiértékelnünk. A pontatlanságok mérési hibából, müszereink pontatlanságából, sokszor pedig véletlen tényezők hatására lépnek fel. A hibák sokszor még a legnagyobb precizitás mellett sem kerülhetők el, a hibák kiküszöbölhetetlenek.

A kiértékelések valamilyen összefüggésnek, a jellemzők valamilyen szabályszerü viselkedésének, vagy valamelyik jellemző számértékének meghatározására szolgálnak. Bár tudjuk, hogy méréseink hibákkal terheltek, mégis szeretnénk a lehető legjobb eredményt nyerni belőlük. Ez sokszor nehéz feladatok elé állitja a szakembert, de sokszor elvileg sem kaphatunk kellő pontos eredményt. Az előadásban néhány ilyen tipikus, rosszul meghatározott, ugynevezett "inkorrekt kitüzésü" feladatot tárgyalok. Rámutatok az ilyen feladatok megoldási nehézségeire, és az ugynevezett "regularizációs" módszert szemléltetem néhány inkorrekt kitüzési feladat esetén.

2.1 Numerikus differenciálás, inkorrekt kitüzésü feladat. Szemléletesen ez a következőt jelenti. Legyen közelitőleg ismert az $y = f(x)$ függvény táblázatosan az $x = x_i = x_o + ih$ pontokban, $i = 0, 1, \dots$ (a függvényértékek pontatlanok).

Legyen $y_i = f(x_i) \pm \varepsilon$. Képezzük a különbségi hányadosokat

$$y_i' = \frac{y_{i+1} - y_i}{h} = \frac{f(x_{i+1}) - f(x_i)}{h} \pm \frac{2\varepsilon}{h}$$

A különbségi hányadosnak sokkal nagyobb a relativ hibája, mint a függvényértékeknek.

A numerikus differenciálás inkorrektsége differenciálható függvényekkel is jól szemléltethető. Legyen $u_1(x)$ differenciálható függvény és differenciálhányadosa $z_1(x) = u_1'(x)$.

Tekintsük az $u_2(x) = u_1(x) + \varepsilon \sin \omega x$ függvényt (ahol ε kis pozitiv szám, ω tetszőleges), ami ugyancsak differenciálható. Az $u_3(x) = u_2(x) - u_1(x) = \varepsilon \sin \omega x$ legnagyobb értéke ε lehet, tetszőleges ω esetén. De az

$$u_3'(x) = u_2'(x) - u_1'(x) = \omega\, \varepsilon \cos \omega x$$

felvehet tetszőleges nagy értéket, ha ω elég nagy. Vagyis az $u_1(x)$ és az $u_2(x)$ közelsége nem biztositja a differenciálhányadosaik közelségét.

2.2 A Fourier sorfejtés numerikus végrehajtása inkorrekt kitüzésü feladat. Ennek kimutatásához legyen az $f_1(x)$ függvény Fourier sora

$$f_1(x) = \sum_{n=0}^{\infty} a_n \cos nx \, .$$

Tegyük fel, hogy az együtthatók meghatározásánál elkövettük az $\frac{\varepsilon}{n}$ nagyságu kis hibákat, és állitsuk elő a

$$c_n = a_n + \frac{\varepsilon}{n}\,, \qquad n \geqq 1, \qquad c_0 = a_0$$

együtthatóju Fourier sort

$$f_2(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n \cos nx \, .$$

Az *együtthatók eltérése mérhető a*

$$\delta' = \sqrt{\sum_{n=0}^{\infty} (c_n - a_n)^2} = \varepsilon \sqrt{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}} = \varepsilon' \sqrt{\frac{\pi^2}{6}}$$

számmal, ami tetszőlegesen kicsi, ha az ε számot kicsinek választjuk. Ennek ellenére a függvények különbsége

$$f_2(x) - f_1(x) = \varepsilon \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \cos nx$$

az $x = 0$ pontban tetszőlegesen nagy lehet, hiszen a sor divergens.

2.3 A numerikus szürés feladata is nem korrekt kitüzésü feladat. Ennek vizsgálatával a (2)-ben foglalkoztunk. A szürési feladatok, mint (2)-ben tárgyaltuk az

$$\int_a^b K(x, s)\, z(s)\, ds = u(x)$$

tipusu elsőfaju Fredholm tipusu integrálegyenlet megoldását igényli /u(x) és K(x,s) ismert függvények, z(s) a keresett függvény/, ami nem korrekt kitüzésü feladatra vezet.

2.4 Lineáris egyenletrendszerek megoldása gyakran vezethet inkorrekt kitüzésü feladatra, ha az egyenletrendszer együttható mátrixa közel szinguláris. Ugyanis ekkor a mátrix determinánsa kicsi lesz, és ez a megoldás kifejezésében a nevezőben szerepel. Ha az együtthatómátrix pontatlanul ismert, akkor a determináns értéke is pontatlan, a hibák alakulásától függően zérus körül ingadozó, hol negativ, hol pozitiv értéket vesz fel. Ennek reciproka viszont (ami a megoldásban szorzóként szerepel) $-\infty$ és $+\infty$ közt bármilyen szám lehet. Vagyis a megoldás teljesen határozatlanná válik.

3. Az elmondott néhány példán kivül nagyon sok inkorrekt kitüzésü feladat ismeretes, amelyek az adatkiértékelés, a fizika különböző területéről származnak. A probléma tisztázásával sok nagy matematikus foglalkozott és matematikai iskolák alakultak ki a vizsgálatára. Ezek közül egyik legismertebb A.N.Tyohonov iskolája /ld. (1)/.

Ezzel a problémával foglalkozó matematikai iskolák érdeme, hogy a számtalan matematikai eszközökkel megfogalmazható feladatról kimutatták annak inkorrektségét, vagy bebizonyitották korrektségét. De ennél többet is tettek azáltal, hogy megoldási módszert dolgoztak ki az inkorrekt tipusu feladatok megoldására. Ez a regularizációs módszer /ld. (1)/, aminek szabatos megfogalmazása és a megoldás menete magasfoku matematikai apparátust igényel. Ezért ezt teljes általánosságában itt nem tárgyalom, csak néhány megoldást vázolok.

4.1 Az f(x) függvény numerikus differenciálása müveletének végrehajtása egyenértékü az

$$\int_0^x z(s)\,ds = f(x) - f(o)$$

elsőfaju integrálegyenlet megoldásával, ami ugyancsak inkorrekt kitüzésü feladat. Az integrálegyenlet regularizációs módszerrel való megoldása egyben a numerikus differenciálás regularizált megoldását is jelenti.

Numerikus differenciálásra más regularizált módszert találhatunk a (3) cikkben. E szerint az f(x) függvény numerikus differenciálása egyenértékü az

$$\int_{|x-y|\leq\alpha} \frac{d}{dx}\,\omega_\alpha\,(x,y)\ f(y)\ dy$$

integrál adott x helyen való kiszámitásával, ahol $\omega_\alpha\ (x,y)$ a regularizáló operátor magfüggvénye

$$\omega_\alpha(x,y) = \begin{cases} \dfrac{\exp\left\{(x-y)^2/[(x-y)^2-\alpha^2]\right\}}{\int_{-\alpha}^{\alpha}\exp[\tau^2/(\tau^2-\alpha^2)]\,d\tau}, & \text{ha } |x-y|<\alpha \\ 0, \quad \text{ha } |x-y|\geq\alpha \end{cases}$$

A (4) cikk a numerikus differenciálás regularizálásának feladatát a következőképpen fogalmazza meg.

Legyen ismert a (-1, 1)-ben folytonosan differenciálható f(x) függvény $f_\delta(x)$ közelitése, melyre $\|f_\delta(x) - f(x)\| \leq \delta$ (valamilyen normában) és legyen $q_{n+1}(x)$ az $f_\delta(x)$ -et közelitő n+1-ed foku polinom, melyre $\| f_\delta(x) - q_{n+1}(x) \| \leq \delta$. Legyen $u_\delta(x)$ a $K(u) = \| u' \|$ funkcionált a

$$\left\| \int_0^x \frac{u(t)}{1-t^2}\, dt - q_{n+1}(x) \right\| = 4\delta^2$$

feltétel mellett minimalizáló függvény és

$$p_\delta(x) = \frac{u_\delta(x)}{1-x^2} \quad .$$

Akkor a $p_\delta(x)$ polinom egyenletesen közelíti az $f'(x)$ differenciálhányadost, azaz a $(-1,\ 1)$ intervallumon igaz lesz, hogy

$$\lim_{\delta \to 0} p_\delta(x) = f'(x) \quad .$$

4.2 Az $f(x)$ függvény $\{\varphi_n(x)\}$ függvénysor szerinti Fourier sorfejtéséhez számitsuk ki a C_n együtthatókat. A C_n együtthatók, egy α regularizáló paraméter és egy bizonyos tulajdonságnak eleget tevő ξ_n számsorozat segitségével képezett

$$f_{\alpha,n} = \frac{C_n}{1+\alpha\,\xi_n}$$

együtthatókkal előállitott

$$f_\alpha(x) = \sum_{n=0}^{\infty} f_{\alpha,n}\, \varphi_n(x)$$

függvény regularizált közelitése az $f(x)$ függvénynek /ld. (1)/.

4.3 Mint már emlitettem a numerikus szürési feladat regularizációs módszerrel történő megoldásával (2)-ben foglalkoztunk.

(2) Csáki Péter, Gergely József, Czopf János: Kiváltott potenciálok szürése nemstacionárius módszerrel, NJSZT által rendezett Számitástechnikai és kibernetikai módszerek alkalmazása az orvostudományban és a biológiában gyüjteményes kiadványa, Szeged, 1975.

(3) V.V.Vaszin: Ob usztojcsivom vücsiszlenyii praizvodnoj, Zsurnal V.M. i M.F. 1973. N. 6. Moszkva.

(4) T.F.Dolgopolova, V.K.Ivanov: O csiszlennom differencirovanyii, Zsurnal Vücsiszlityelnoj mat. i. mat.fiz. 1966, Moszkva.