NÜMERİK ANALİZ

Bilimsel Hesaplama Matematiği

Nuri ÖZALP

SAYISAL TÜREV ve İNTEGRAL

Sayısal Türev ve Richardson Dışkestirimi

Bir f fonksiyonunun değerleri $x_0, x_1, ..., x_n$ noktalarında verilsin.
Bu bilgi ile $f'(c)$ türevi ya da $\int_a^b f(x)dx$ integrali tahmin edilebilir mi?

- Yanıt sınırlı bir *evettir* ?

Sayısal Türev ve Richardson Dışkestirimi

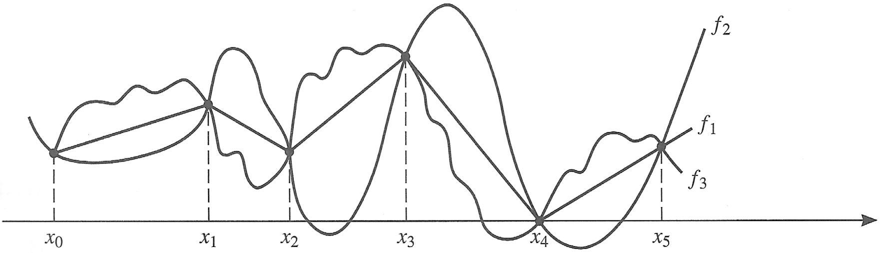
Bir f fonksiyonunun değerleri $x_0, x_1, ..., x_n$ noktalarında verilsin.
Bu bilgi ile $f'(c)$ türevi ya da $\int_a^b f(x)dx$ integrali tahmin edilebilir mi?

- Yanıt sınırlı bir *evettir* ?
- f nin bağıl olarak daha küçük bir fonksiyon ailesine ait olduğuna dair bir bilgiye sahip olmadığımız sürece, tek başına $f(x_0)$, $f(x_1)$, ... , $f(x_n)$ değerlerinden f hakkında çok fazla bilgi elde etmek imkansızdır.

Sayısal Türev ve Richardson Dışkestirimi

Bir f fonksiyonunun değerleri $x_0, x_1, ..., x_n$ noktalarında verilsin.
Bu bilgi ile $f'(c)$ türevi ya da $\int_a^b f(x)dx$ integrali tahmin edilebilir mi?

- Yanıt sınırlı bir *evettir* ?
- f nin bağıl olarak daha küçük bir fonksiyon ailesine ait olduğuna dair bir bilgiye sahip olmadığımız sürece, tek başına $f(x_0)$, $f(x_1)$, ... , $f(x_n)$ değerlerinden f hakkında çok fazla bilgi elde etmek imkansızdır.
- Örneğin, eğer f nin tüm reel değerli sürekli fonksiyonlar ailesinde olmasına izin verilirse, bu durumda $f(x_i)$ değerinin bilinmesi neredeyese kullanışsızdır.



Şekil altı noktada aynı değerleri alan üç sürekli fonksiyonu göstermektedir.

Eğer f nin en fazla n. dereceden bir polinom olduğunu biliyorsak, Kesim 6.1 (s. 308) deki interpolasyon teorisinden, f nin $n+1$ noktadaki değerleri f yi kesin olarak belirler. Bu durumda, f yi kesin olarak geri elde ederiz ve buradan $f'(c)$ ve $\int_a^b f(x)dx$ i tam bir güvenle hesaplayabiliriz. Bununla beraber, gerçekçi durumların çoğunda eldeki bilgi f yi tam olarak belirlemeye yetmez, ve eğer içerilen hatalarla ilgili bazı sınırlar da verilmemişse, f nin türevinin veya integralinin herhangi bir sayısal tahminine şüphe ile yaklaşılmalıdır.

Sayısal Türev

Bu durumları $f'(x)$ in limit tanımından doğrudan ortaya çıkan bir sayısal türev formülünü inceleyerek başlayalım:

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] \tag{1}$$

Bir lineer fonksiyon, $f(x) = ax + b$ için (1) yaklaşım formülü *kesindir*; yani, sıfırdan farklı herhangi bir h değeri için $f'(x)$ in doğru değerini verir. Formül başka durumlarda da kesin olabilir, fakat bu sadece şans eseridir. O halde, şimdi sayısal türev için verilen bu formüle ait hatayı değerlendirmeye çalışalım.

Başlangıç noktamız Taylor Teoremi'nin aşağıdaki formudur:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2} f''(\xi) \tag{2}$$

Burada ξ, x ile $x+h$ arasındaki açık aralıkta bir noktadır. (2) eşitliğinin geçerli olması için, f ve f' nün x ve $x+h$ arasındaki kapalı aralıkta sürekli olmaları ve f'' nün de karşılık gelen açık aralıkta var olması gereklidir. (2) eşitliğinin yeniden düzenlenmesi

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] - \frac{h}{2} f''(\xi) \qquad (3) \\ &= \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] + \mathcal{O}(h) \end{aligned}$$

verir.

Örnek

Eğer $f(x) = \cos x$ türevini $x = \pi/4$ te $h = 0.01$ ile hesaplamak için Formül (1) kullanılırsa, yanıt ne olur ve duyarlılığı nedir?

Çözüm

Bir hesap makinesi kullanarak

$$f'(x) \approx \frac{1}{h}\left[f(x+h) - f(x)\right] \quad \begin{aligned} &= \frac{1}{0.01}\left[0.70000\,0476 - 0.707106781\right] \\ &= -0.71063051 \end{aligned}$$

buluruz. (3) den: $\left|\frac{h}{2}f''(\xi)\right| = 0.005\left|\cos\xi\right| \leq 0.005\pi/4 < \xi < \pi/4 + h$ *gerçeğini ve böylece* $\left|\cos\xi\right| < 0.70710\,7$ *eşitsizliğini kullanarak daha güçlü bir sınır elde edebiliriz. Bu bize* $0.00353\,55$ *sınırını verir. Gerçek hata ise*

$$-\sin\frac{\pi}{4} + 0.71063\,051 = 0.00352\,3729$$

dur. ■

(3) eşitliğindeki $-(h/2)f''(\xi)$ terimi **kesme hatası** olarak adlandırılır. Bu, ortaya çıkan hatadır, çünkü türevlemenin belli bir aşamasında, bir Taylor serisi kesilmektedir. Buradaki durumda, (1) yaklaşım formülü

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \cdots$$

serisi kesilerek aşağıdaki gibi elde edilmiştir:

$$f(x+h) \approx f(x) + hf'(x)$$

Kesme hatası ve yuvarlama hatası (1) formülünün ve diğer benzerlerinin kullanımında eşit önemde rol oynarlar.

Eşitlik (3) gözden geçirildiğinde, $f'(x)$ i duyarlı hesaplamak için, h adım uzunluğunun küçük olmak zorunda olduğu görülür. Bu nedenle, şimdi h nın bir değerler dizisiyle sıfıra doğru yaklaştığı ve karşılık gelen $f'(x)$ e yaklaşımların hesaplandığı bir deneme yapalım. $f(x) = \tan^{-1} x$ seçelim ve $x = \sqrt{2}$ noktasını kullanalım. Sonuç $\sqrt{2}$ de $1/3$ olup, $f'(x) = (x^2 + 1)^{-1}$ olmalıdır. Bu amaca yönelik algoritma aşağıdadır:

$f(x) := \tan^{-1} x$
girdi $s \leftarrow \sqrt{2}$; $h \leftarrow 1$; $M \leftarrow 26$
$F_1 \leftarrow f(s)$
$k = 0$ **dan** M **ye döngü**
    $F_2 \leftarrow f(s+h)$
    $d \leftarrow F_2 - F_1$
    $r \leftarrow d/h$
    çıktı k, h, F_2, F_1, d, r
    $h \leftarrow h/2$
döngü sonu

32-bitlik bir bilgisayardan alınan bazı çıktılar aşağıda gösterilmiştir:

k	h	F_2	F_1	d	r
4	0.62×10^{-1}	0.97555 095	0.95531 660	0.02023 435	0.32374 954
12	0.24×10^{-3}	0.95539 796	0.95531 660	0.00008 136	0.33325 195
20	0.95×10^{-6}	0.95531 690	0.95531 660	0.00000 030	0.31250 000
24	0.60×10^{-7}	0.95531 666	0.95531 660	0.00000 006	1.00000 000
26	0.15×10^{-7}	0.95531 660	0.95531 660	0.00000 000	0.00000 000

Her bir satırda $F_2 - F_1$ in farkı olarak d hesaplanmakta ve d/h oranı olarak da r hesaplanmaktadır. **Çıkarma sadeleşmesi** nedeniyle, sonunda $d = 0$ ve $r = 0$ oluncaya kadar, d gittikçe daha az sayıda anlamlı rakama sahip olur. r nin en iyi değeri $k = 12$ iken elde edilir, ve eğer dört desimal noktaya yuvarlanırsa, dört doğru rakama sahiptir. k nın bu değerinde, d nin dört duyarlı rakama sahip olduğuna dikkat edelim. k arttıkça, d deki duyarlı rakamların sayısı azalır, ve r nin d den daha fazla duyarlı rakama sahip olamayacağına kuşku yoktur. Böylece, h küçük iken, yuvarlama hatası daha duyarlı değerler elde etmemize engel olur. d de daha fazla duyarlılığa sahip olmak için F_1 ve F_2 de daha fazla duyarlılık gereklidir ve bu da temel hesaplarda yüksek duyarlılık gerektirir. Çoklu duyarlılık kullanabiliriz veya hesaplarımızı daha büyük kelime uzunluklu makinelerde yapabiliriz. Yanıtların daha kötüleştiği adım, kullanılan özel makinedeki kelime uzunluğuna (veya daha net olarak, birim yuvarlama hatasına) bağlı olacaktır.

Hata $\mathcal{O}(h)$ olduğundan dolayı, (3) formülü çok güçlü sayılmaz. Daha üstün bir formül

$$f'(x) \approx \frac{1}{2h}\left[f(x+h) - f(x-h)\right] \tag{4}$$

dır. Bu, Taylor Teoreminin iki ifadesi kullanılarak bulunur:

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_1) \tag{5}$$

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{h^2}{2}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(\xi_2) \tag{6}$$

Bu eşitliklerin birini diğerinden çıkarıp, yeniden düzenlersek

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{1}{2h}\left[f(x+h) - f(x-h)\right] - \frac{h^2}{12}\left[f'''(\xi_1) + f'''(\xi_2)\right] && (7) \\ &= \frac{1}{2h}\left[f(x+h) - f(x-h)\right] - \frac{h^2}{6}f'''(\xi) && (8) \end{aligned}$$

elde ederiz. Bu sonuç daha tatminkardır, çünkü hatada h^2 terimini içerir. Fakat, hatanın f''' terimini içerdiğine dikkat edelim. Bu hata terimi, eğer f''' mevcut ise uygulanabilirdir.

İkinci türev için önemli bir formül (5) ve (6) eşitliklerine bir terim daha ekleyip, altalta toplayarak elde edilir. Düzenleme yapıldıktan sonra biraz önceki yöntem uygulanırsa, $\xi \in (x-h, x+h)$ olmak üzere

$$f''(x) = \frac{1}{h^2}\left[f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)\right] - \frac{h^2}{12} f^{(4)}(\xi) \tag{9}$$

bulunur. Bu formül ikinci basamaktan diferensiyel denklemlerin nümerik çözümlerinde sıklıkla kullanılır.

Örnek

$f(x) = \tan^{-1} x$ ve $x = \sqrt{2}$ olmak üzere $f'(x)$ e yaklaşmak için bir bilgisayar kullanınız. (8) eşitliğini 0 a yaklaşan h adım uzunluğu ile kullanınız. Doğru değerin 1/3 olduğunu hatırlayınız.

k	h	F_2	F_1	d	r
2	0.25	1.02972 674	0.86112 982	0.16859 692	0.33719 385
10	0.9765×10^{-3}	0.95564 199	0.95499 092	0.00065 106	0.33334 351
18	0.3815×10^{-5}	0.95531 786	0.95531 535	0.00000 250	0.32812 500
26	0.1490×10^{-7}	0.95531 660	0.95531 660	0.00000 000	0.00000 000

Çıkarma sadeleşmesi nedeniyle, h sıfıra yaklaşırken tekrar gözle görülür bir bozulma olduğunu görürüz. Çıktı bu olguyu $k = 12$ de göstermeye başlar. F_1 ve F_2 nin değerleri birbirlerine oldukça yakındır ve bunların farkı olan d çok ciddi rakam duyarlılığı kayıbına maruz kalır. Sonunda, $h \to 0^+$ iken F_1 ve F_2 nin değerleri makinede aynı olacaktır ve bir 0 değeri türev olarak hesaplanacaktır. Burada, $k = 26$ da bu durum oluşur. Bu davranış farklı kelime uzunluklu bilgisayarlarda farklı k değerlerinde görülecektir. Fonksiyonların, sadece deneysel olarak bilinen, sayısal diferensiyellenmesi riskli bir yöntemdir, çünkü verideki hatalar süreç sırasında gittikçe büyüyecektir. Bu durum, örneğin (8) eşitliğinden çok kolay görülmektedir. Eğer $f(x \pm h)$ ordinatları duyarsızken, $x \pm h$ *örneklem noktaları* duyarlı şekilde belirlenmekteyse, bu durumda ordinatlardaki hata $1/(2h)$ ile çarpılacaktır. h küçük olacağından dolayı, hataların etkisi büyük olacaktır. (Bu oluşum nümerik integralde *görülmez*.) Bu nedenle, *deneysel* verilerin sayısal türevinden kaçınılmalıdır veya çok dikkatli şekilde ele alınmalıdır.

Richardson dışkesitirimi

Şimdi, **Richardson dışkesitirimi** (ekstrapolasyonu) olarak bilinen bir yordamın bazı sayısal formüllerden daha duyarlı sonuçlar üretmek için nası kullanılabileceğini belirteceğiz. Daha yüksek terimlere genişletilmiş şekilde, (5) ve (6) formüllerini göz önüne alalım. $f(x)$ in

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} h^k f^{(k)}(x) \tag{10}$$

$$f(x-h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} (-1)^k h^k f^{(k)}(x) \tag{11}$$

Taylor serileri ile temsil edildiğini varsayalım. Eğer ikinci eşitlik birincisinden çıkarılırsa, bu durumda k nın çift değerli tüm terimleri yok olacaktır ve geriye

$$f(x+h) - f(x-h) = 2hf'(x) + \frac{2}{3!} h^3 f'''(x) + \frac{2}{5!} h^5 f^{(5)}(x) + \cdots$$

kalacaktır.

Bunun yeniden düzenlenmesi ile de

$$\begin{aligned} f'(x) &= \frac{1}{2h}\left[f(x+h)-f(x-h)\right] \\ &\quad -\left[\frac{1}{3!}h^2 f'''(x)+\frac{1}{5!}h^4 f^{(5)}(x)+\frac{1}{7!}h^6 f^{(7)}(x)+\cdots\right] \end{aligned}$$

bulunur. L, $f'(x)$ i göstermek üzere, bu eşitlik

$$L=\varphi(h)+a_2h^2+a_4h^4+a_6h^6+\cdots \tag{12}$$

formuna sahiptir. Son denklemi h yerine $h/2$ alarak yeniden yazalım:

$$L=\varphi(h/2)+a_2h^2/4+a_4h^4/16+a_6h^6/64+\cdots \tag{13}$$

Hata serisindeki lider terim a_2h^2, (12) denklemini (13) denkleminin 4 katından çıkararak, aşağıdaki gibi yok edilebilir:

$$\begin{array}{rl} L = & \varphi(h) + a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \cdots \\ 4L = & 4\varphi(h/2) + a_2 h^2 + a_4 h^4/4 + a_6 h^6/16 + \cdots \\ \hline 3L = & 4\varphi(h/2) - \varphi(h) - 3a_4 h^4/4 - 15 a_6 h^6/16 - \cdots \end{array}$$

Böylece,

$$L = \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h) - a_4 h^4/4 - 5a_6 h^6/16 - \cdots \tag{14}$$

elde ederiz. (14) eşitliği Richardson dışkestirimindeki ilk adımı meydana getirmektedir. Bu, $\varphi(h)$ ve $\varphi(h/2)$ nin basit bir bileşiminin $\mathcal{O}(h^4)$ duyarlılıkla L ye bir kestirim sağladığını göstermektedir.

(14) eşitliğinde $\psi(h) = \frac{4}{3}\varphi(h/2) - \frac{1}{3}\varphi(h)$ diyelim. Bu durumda,

$$\begin{aligned} L &= \psi(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \cdots \\ L &= \psi(h/2) + b_4 h^4/16 + b_6 h^6/64 + \cdots \end{aligned}$$

olup, böylece

$$\begin{array}{rl} L = & \psi(h) + b_4 h^4 + b_6 h^6 + \cdots \\ 16L = & \psi(h/2) + b_4 h^4/16 + b_6 h^6/64 + \cdots \\ \hline 15L = & 16\psi(h/2) - \psi(h) - 3b_6 h^6/4 - \cdots \end{array}$$

buluruz. Buradan da

$$L = \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h) - b_6 h^6/20 - \cdots \tag{15}$$

elde ederiz.

Tekrar, (15) eşitliğinde $\theta(h) = \frac{16}{15}\psi(h/2) - \frac{1}{15}\psi(h)$ ve böylece

$$L = \theta(h) + c_6 h^6 + c_8 h^8 + \cdots$$

alarak aynı işlemi tekrarlayabiliriz. Böylece, yukarıdakine benzer şekilde

$$L = \frac{64}{63}\theta(h/2) - \frac{1}{63}\theta(h) - 3c_8 h^8/252 - \cdots$$

buluruz.

Aslına bakılırsa, artan duyarlılıkta formüller elde etmek için herhangi sayıda adım uygulanabilir. Şimdi **Richardson dışkestirim algoritmasında** M adıma izin veren tam algoritmayı verelim:

1. Uygun bir h (örneğin $h = 1$) seçiniz ve $M + 1$ tane

$$D(n, 0) = \varphi(h/2^n) \qquad (0 \leq n \leq M)$$

   değerini hesaplayınız.

2. $k = 1, 2, ..., M$ ve $n = k, k + 1, ..., M$ için

$$D(n, k) = \frac{4^k}{4^k - 1} D(n, k-1) - \frac{1}{4^k - 1} D(n-1, k-1) \tag{16}$$

   formülünden diğer değerleri hesaplayınız.

$D(0,0) = \varphi(h)$, $D(1,0) = \varphi(h/2)$ ve $D(1,1) = \psi(h)$ olduğuna dikkat edelim. $D(n,1)$ nicelikleri, (14) eşitliğinde h nın ardarda $h/2$ ile değiştirilmesine karşılık gelir. Benzer şekilde, $D(n,2)$ ler (15) eşitliğine karşılık gelir ve böyle devam eder. Hipotezimizden ve hesaplamalarımızdan

$$\begin{aligned} D(n,0) &= L + \mathcal{O}(h^2) \\ D(n,1) &= L + \mathcal{O}(h^4) \\ D(n,2) &= L + \mathcal{O}(h^6) \\ D(n,3) &= L + \mathcal{O}(h^8) \end{aligned}$$

$$D(n,k-1) = L + \mathcal{O}(h^{2k}) \qquad (h \to 0)$$

olduğu açıktır.

$D(n,0)$ ve $D(n,k)$ için verilen formüller bir üçgensel matris oluşturmamıza izin verir:

$$\begin{array}{ccccc}
D(0,0) & & & & \\
D(1,0) & D(1,1) & & & \\
D(2,0) & D(2,1) & D(2,2) & & \\
\vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \\
D(M,0) & D(M,1) & D(M,2) & \dots & D(M,M)
\end{array}$$