

Ekstrapolacja Richardsona (szacowanie błędu) dla danej, ustalonej metody

$$\text{błąd} \propto Mh^n$$

zakładając, że M jest w przybliżeniu niezależne od h

$$I = I_h + Mh^n$$

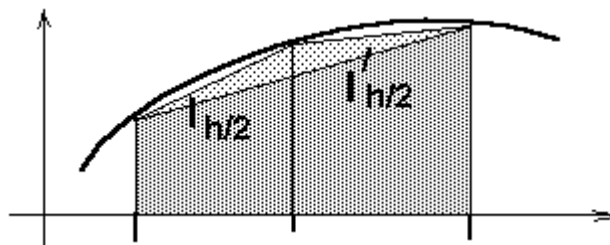
$$I = I_{h/2} + Mh^n / 2^n$$

ekstrapolowana wartość całki I

$$I_e \approx I_{h/2} + \frac{I_{h/2} - I_h}{(2^n - 1)}$$

kwadratury z adaptowanym krokiem

zaczynamy z dużym krokiem h i dzielimy $h \rightarrow h/2$
sprawdzając czy



$$|I_h - (I_{h/2} + I'_{h/2})| < \varepsilon$$

metoda Romberga

połączenie złożonej formuły (np. trapezów) z ekstrapolacją Richardsona

.....

KWADRATURA GAUSSA

optymalny wybór punktów węzłowych

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

Tw.

Jeśli $\{x_i\}_1^n$ wybrane są jako pierwiastki wielomianu P_n należącego do wielomianów ortogonalnych $\{P_k\}$ określonych na $[a, b]$, to powyższe przybliżenie jest ścisłe dla $f(x)$ będącej wielomianem stopnia nie większego niż $2n-1$ (NAWET $2n-1$);
przy czym C_i wyznaczone są (jak zwykle) przez całki ze współczynników wielomianu interpolacyjnego $\sum d_i f_i$ stopnia $n-1$ na tak określonych węzłach.

dowód

wyberzmy wielomiany ortogonalne $\{P_k\}_0^n$ Legendre'a na $[-1, 1]$ z funkcją wagową $w(x) = 1$;

$$P_n = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \quad (n = 0, 1, \dots)$$

pierwiastki wielomianu Legendre'a P_n stopnia n są X_1, X_2, \dots, X_n .

Rozważmy przybliżenie do $f(x)$ na $[-1, 1]$ na siatce X_1, \dots, X_n za pomocą wielomianu interpolacyjnego (w konstrukcji Lagrange'a):

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \approx \sum_{i=1}^n C_i f(x_i) \quad C_i = \int_{-1}^1 \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{(x - x_j)}{(x_i - x_j)} dx$$

Niech P będzie wielomianem stopnia $< 2n$, np. $2n-1$; dzieląc P przez P_n

$$P(x) = Q(x)P_n(x) + R(x)$$

gdzie $Q(x)$ jest stopnia $< n$, (i reszta $R(x)$ też jest stopnia co najwyżej $n-1$), zatem Q daje się przedstawić (ściśle) jako

$$Q(x) = \sum_{i=0}^{n-1} s_i P_i(x)$$

ponieważ wielomiany Legendre'a są z def. ortogonalne na $[a, b]$

$$\int_{-1}^1 Q(x) P_n(x) dx = \sum_{i=0}^{n-1} s_i \int_{-1}^1 P_i(x) P_n(x) dx = 0$$

a zatem

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = \int_{-1}^1 R(x) dx = \sum_{i=1}^n C_i R(x_i)$$

na mocy faktu, że $R(x)$ jest stopnia co najwyżej $n-1$.

Ponieważ jednak x_i są pierwiastkami P_n zatem

$$P(x_i) = R(x_i)$$

i ostatecznie

$$\int_{-1}^1 P(x) dx = \sum_{i=1}^n C_i P(x_i)$$

zamiana przedziałów całkowania z $[-1, 1]$ na $[a, b]$

$$\int_a^b f(x) dx = \int_{-1}^1 f\left(\frac{(b-a)t + b + a}{2}\right) \frac{(b-a)}{2} dt$$

.....

CAŁKI WIELOWYMIAROWE

trudności:

- np. całka 3-wymiarowa z funkcji wymagającej ~ 500 x wyznaczenia wartości w każdym wymiarze;

ilość węzłów:

~ 125 000 000

- obszar całkowania w R^N może nie być wypukły

Metoda Monte Carlo

wybierając losowo ale jednorodnie N punktów X_1, X_2, \dots, X_N - każdy punkt to N -ka w R^N , w N -wymiarowej objętości V , przybliżamy całkę

$$\int f dV \approx V \langle f \rangle \pm V \sqrt{\frac{\langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2}{N}}$$

gdzie $\langle f \rangle \equiv \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N f(x_i)$

szukając takiego obszaru W , który pokrywa V , i którego objętość daje się łatwo obliczyć, oraz takiego rozkładu punktów w W , który minimalizuje błąd

jeśli brzeg obszaru całkowania nie jest wybitnie skomplikowany, oraz
jeśli funkcja podcałkowa jest "dość" gładka
to stosujemy rozkład na wielokrotne całki 1-wymiarowe

algorytm

1. określamy dolne i górne granice dla każdej zmiennej

np. w 3 wymiarach (X,Y,Z) :

a) X_1 oraz X_2

b) dla każdego punktu siatki w X (pomiędzy X_1 i X_2)

określamy zakres Y, tj. $Y_1(X)$ oraz $Y_2(X)$

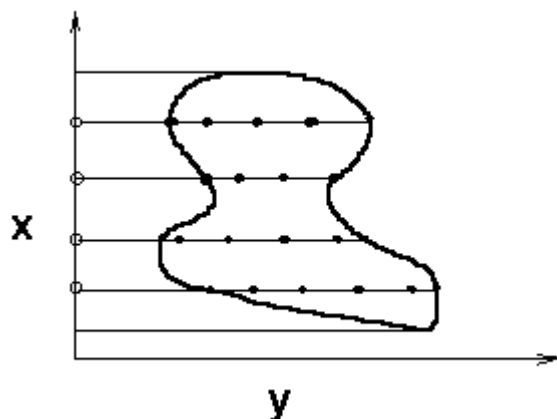
c) dolną i górną granicę Z dla każdego Y i X

$$I = \iiint dx dy dz f(x, y, z) = \int_{x_1}^{x_2} dx \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} dy \int_{z_1(x,y)}^{z_2(x,y)} dz f(x, y, z)$$

2. wykonanie każdej z tych całek 1-wymiarowych

(drugiej i trzeciej - wielokrotnie)

przykład w 2 wymiarach



uwaga – siatki w y dla różnych x nie muszą być takie same

$$G(x) = \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x, y) dy$$

$$I = \int_{X_1}^{X_2} G(x) dx$$

- pętla po punktach siatki X_i
dla każdego X_i
 - * pętla po punktach siatki Y_i - obliczająca $G(x_i)$
jako całkę 1-wymiarową w Y

NUMERYCZNE RÓŻNICZKOWANIE

- trudniejsze niż numeryczne całkowanie
- małe zaburzenie danych może prowadzić do szybko rosnących błędów przy obliczaniu wyższych pochodnych

przykład 1:

niech $Y(x)$ - różniczkowalna na $[a, b]$

zdefiniujmy

$$g(x) = Y(x) + (1/n) \sin [n^2 (x-a)]$$

n – dowolna liczba naturalna

dla dużych n, Y(x) i g(x) różnią się dowolnie mało

$$\text{dla } x \text{ w } [a, b] \quad \max | Y(x) - g(x) | \leq 1/n$$

a pochodne:

$$g'(x) = Y'(x) + n \cos [n^2 (x-a)]$$

$$\max | Y'(x) - g'(x) | = n$$

dla dużych n ta różnica jest duża

przykład 2:

przybliżmy $f(x) = e^x$ za pomocą szeregu Taylora w $x_0=0$

(do II-go rzędu)

$$g(x) = 1 + x + x^2/2$$

łatwo sprawdzić, że w $[-0.1, 0.1]$

$$\max | f(x) - g(x) | \sim 2 * 10^{-4}$$

$$\max | f'(x) - g'(x) | \sim 5 * 10^{-3}$$

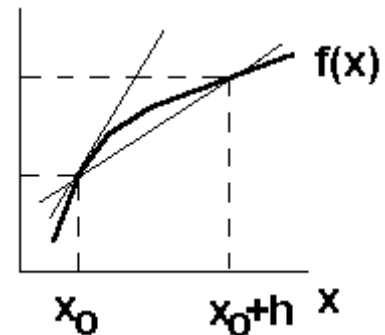
$$\max | f''(x) - g''(x) | = 0.105$$

$$\max | f'''(x) - g'''(x) | = 1$$

- szybka utrata dokładności przy wyznaczaniu wyższych pochodnych w oparciu o wartości przybliżone funkcji

najprostsza formuła

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



ze wzoru Taylora błąd $-\frac{h}{2} f''(\xi)$

(szacując błąd popełniamy większy błąd niż przy przybliżaniu samej pochodnej...)

dokładniejsza jest formuła *liniowa 3-węzłowa*

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

tu błąd jest rzędu $-\frac{h^2}{6} f'''(\xi)$

(rozwijając $f(x+h)$ i $f(x-h)$ do 3-go rzędu)

- błąd trudny do określenia - wymaga znajdowania pochodnej wyższego rzędu
- możemy zażądać wyznaczenia pochodnej nie tylko w punktach węzłowych

Formuły Lagrange'a

- obliczanie pochodnej wielomianu, którym przybliżamy funkcję w danym przedziale

$$f'(x) \approx P'(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) L'_i(x)$$

dla wielomianu stopnia $n=2$

$$L'_i(x) = \frac{2x - \left(\sum_{k \neq i} x_k\right)}{(x_i - x_0) \times \dots \times (x_i - x_n) \Big|_{\text{bez}(i)}}$$

dla tych 3 węzłów $x_i = x_0 + ih$

$$f'(x_0) = \frac{1}{h} \left[-\frac{3}{2} f(x_0) + 2f(x_1) - \frac{1}{2} f(x_2) \right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_0)$$

$$f'(x_1) = \frac{1}{h} \left[-\frac{1}{2} f(x_0) + \frac{1}{2} f(x_2) \right] + \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi_1)$$

$$f'(x_2) = \frac{1}{h} \left[\frac{1}{2} f(x_0) - 2f(x_1) + \frac{3}{2} f(x_2) \right] + \frac{h^2}{3} f^{(3)}(\xi_2)$$

**zobaczmy jak ekstrapolacja Richardsona poprawia przybliżenie;
kombinując $f(x \pm h)$ wyznaczone przez $f'(x)$ i wyższe
pochodne z szeregu Taylora**

$$f'(x) = \frac{1}{2h} [f(x+h) - f(x-h)] + a_2 h^2 + a_4 h^4 + \dots$$



to jest przybliżenie $\phi(h)$ do pochodnej funkcji $f(x)$

(pamiętamy, że wyraz a_2 pochodzi z f''' itd..)

zatem:

$$\phi(h) = f'(x) - a_2 h^2 - a_4 h^4 - \dots$$

$$\phi\left(\frac{h}{2}\right) = f'(x) - a_2 \left(\frac{h}{2}\right)^2 - a_4 \left(\frac{h}{2}\right)^4 - \dots$$

eliminując wyraz z a_2

$$f'(x) = \frac{4}{3} \phi\left(\frac{h}{2}\right) - \frac{1}{3} \phi(h) - \frac{1}{4} a_4 h^4 - \dots$$

każde ϕ wyznaczone jest za pomocą formuły tego samego rzędu (n=2) ale dla kroków h i $h/2$

a błąd zaczyna się od wyrazów rzędu h^4 , a nie jak dla niepoprawionej formuły $\sim h^2$

Pochodne wyższych rzędów

kombinując jak poprzednio $f(x \pm h)$ ze wzoru Taylora mamy

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

to jest dokładnie równe ilorazowi różnicowemu w drugim rzędzie