Numerické metody a statistika

Radek Kučera

VŠB-TU Ostrava

2016-2017

Numerické integrování

Geometrický význam integrálu – definice

- určitý integrál představuje velikost plochy:

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \lim_{\substack{\Delta x_j \to 0 \\ m \to \infty}} \sum_{j=1}^{m} f(\xi_j)\Delta x_j$$

- klasická definice: limita částečných součtů
- částečný součet lze použít jako numerickou metodu
- předpoklad: funkce f je dostatečně hladká
- připomenutí: neurčitý integrál (primitivní funkce) je metoda výpočtu určitého integrálu

$$F(x) = \int f(x)\,dx \qquad\qquad F'(x) = f(x)$$

- Newton-Leibnitzova formule: $I = F(b) - F(a)$

Jednoduché vzorce

- Newton-Cotesovy: vzniknou integrací interpolačního polynomu
- odvození pomocí Lagrangeova tvaru IP:

$$p_n(x) = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) l_i(x), \quad l_i(x) \text{ polynomy Lagr. báze}$$

  pro uzly $a \leq x_0 < x_1 < \cdots < x_n \leq b$
- integrací dostaneme:

$$I \approx \int_a^b p_n(x)\, dx = \sum_{i=1}^{n} f(x_i) w_i, \quad \text{kde } w_i = \int_a^b l_i(x)\, dx$$

  jsou integrační váhy

1) Obdélníkové pravidlo

$$I_{obd} = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

- obrázek
- odvození:

$$p_0(x) = f\left(\frac{a+b}{2}\right), \quad l_0(x) = 1, \quad w_0 = \int_a^b 1\, dx = b - a$$

2) Lichoběžníkové pravidlo

$$I_{lich} = \frac{b-a}{2}\left(f(a) + f(b)\right)$$

- obrázek
- odvození:

$$p_1(x) = f(a)l_0(x) + f(b)l_1(x), \quad l_0(x) = \frac{x-b}{a-b}, \; l_1(x) = \frac{x-a}{b-a}$$

$$w_0 = \int_a^b \frac{x-b}{a-b}\,dx = \frac{b-a}{2} = w_1$$

3) Simpsonovo pravidlo

$$I_{Sim} = \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$

- obrázek
- odvození:

$$p_2(x) = f(a)l_0(x) + f\left(\frac{a+b}{2}\right)l_1(x) + f(b)l_2(x)$$

$$w_0 = \int_a^b \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)}\,dx = \frac{b-a}{6}$$

$w_1 = 4w_0, \; w_2 = w_0$

Složené vzorce

- Newton-Cotesovy vzorce odvozené z polynomů vyššího stupně nedávají dobré výsledky
- z jednoduchých vzorců se proto sestavují vzorce složené
- analogie částečných součtů

$$I = \int_a^b f(x)\,dx = \sum_{j=1}^{m} \int_{x_{j-1}}^{x_j} f(x)\,dx$$

  $a = x_0 < x_1 < \cdots < x_m = b$, $h = x_j - x_{j-1}$ je krok
- integrály za sumou aproximujeme jednoduchými vzorci

- složené obdélníkové pravidlo

$$I_{SO} = h \sum_{j=1}^{m} f\left(\frac{x_{j-1} + x_j}{2}\right)$$

- složené lichoběžníkové pravidlo

$$I_{SL} = \frac{h}{2}\left(f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{m-1} f(x_j) + f(x_m)\right)$$

- složené Simpsonovo pravidlo, pro $m = 2k$ (sudé)

$$I_{SS} = \frac{h}{6}\left(f(x_0) + 4\sum_{j=1}^{k} f(x_{2j-1}) + 2\sum_{j=1}^{k-1} f(x_{2j}) + f(x_m)\right)$$

Analýza chyby

- $I(h)$ označuje přibližnou hodnotu integrálu počítanou pro krok h
- platí: $I(h) \to I, \quad$ pro $h \to 0$
- jak rychle (jaký je řád diskretizace)?

Věta

Nechť má funkce f na $\langle a, b \rangle$ spojitou 2. resp. 4. derivaci. Platí:

$$
\begin{aligned}
I - I_{obd} &= \frac{f''(\xi)}{24}(b-a)^3 \\
I - I_{lich} &= -\frac{f''(\xi)}{12}(b-a)^3 \\
I - I_{Sim} &= -\frac{f^{(4)}(\xi)}{90}(b-a)^5
\end{aligned}
$$

Důkaz: Použijeme vzorec pro interpolační chybu:

$$f(x) - p_1(x) = \frac{f''(\bar{\xi})}{2}(x-a)(x-b)$$

$$I - I_{lich} = \frac{f''(\xi)}{2}\int_a^b (x-a)(x-b)\,dx = \frac{f''(\xi)}{2}(b-a)^3\frac{-1}{6}$$

Věta

Nechť má funkce f na $\langle a, b\rangle$ spojitou 2. resp. 4. derivaci. Platí:

$$\begin{aligned} |I - I_{SO}| &\leq C_1 h^2, \quad C_1 > 0 \\ |I - I_{SL}| &\leq C_2 h^2, \quad C_2 > 0 \\ |I - I_{SS}| &\leq C_3 h^4, \quad C_3 > 0 \end{aligned}$$

$$|I - I_{SL}| = |\sum_{i=1}^{m} -\frac{f''(\xi_i)}{12}h^3| \leq \frac{h^3}{12}\sum_{i=1}^{m}|f''(\xi_i)| \leq \frac{h^3}{12}Mm = \frac{b-a}{12}Mh^2$$

Výpočet integrálu pro zadanou přesnost

- pro dané ε požadujeme: $|I - I(h)| \leq \varepsilon$
- dvojný přepočet: připomíná iterační metodu
- vypočítáme $I(2h)$ a $I(h)$

$$|I(h) - I(2h)| \leq \varepsilon \quad \begin{cases} \text{platí, výsledek je} \quad I(h) = I \pm \varepsilon \\ \text{neplatí, zmenšíme krok} \quad h := h/2 \end{cases}$$

- vylepšením je Richardsonova extrapolace: pomocí informace o řádu formule se odvodí přesnější vzorce (viz skriptum)

Numerické derivování

Geometrický význam derivace – definice

- derivace představuje směrnici tečny:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}$$

- zlomek za limitou představuje směrnici sečny
- lze ho použít pro numerický výpočet derivace
- předpoklad: funkce f je dostatečně hladká
- alternativa k výpočetu derivace pomocí algebraických postupů

Vzorce a jejich odvození

- přehled vzorců

$$
\begin{aligned}
f'(x) &\approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h} && (1)\\
&\approx \frac{f(x)-f(x-h)}{h} \\
&\approx \frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} && (2)\\
f''(x) &\approx \frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} && (3)
\end{aligned}
$$

- vzorce lze odvodit derivací interpolačního polynomu

Odvození (1)

- použijeme Newtonův tvar IP pro uzly $t_0 = x$, $t_1 = x + h$

$$p_1(t) = f(x) + f[x+h, x](t - x) \quad \Rightarrow \quad p_1'(t) = f[x+h, x]$$

- dosadíme $t = x$

$$p_1'(x) = \frac{f(x+h) - f(x)}{h} \approx f'(x)$$

Odvození (3) a (2)

- Newtonův tvar IP pro uzly $t_0 = x - h$, $t_1 = x$, $t_2 = x + h$

$$p_2(t) = f(x-h)+f[x-h, x](t-x+h)+f[x-h, x, x+h](t-x+h)(t-x)$$

- první a druhá derivace

$$\begin{aligned} p_2'(t) &= f[x-h, x] + f[x-h, x, x+h](2t - 2x + h) \\ p_2''(t) &= 2f[x-h, x, x+h] \end{aligned}$$

- dosadíme $t = x$

$$\begin{aligned} p_2''(x) &= 2\,\frac{\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f(x)-f(x-h)}{h}}{2h} \\ &= \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} \end{aligned}$$

$$
\begin{aligned}
p_2'(x) &= \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{\frac{f(x+h)-f(x)}{h} - \frac{f(x)-f(x-h)}{h}}{2h}\, h \\
&= \frac{f(x) - f(x-h)}{h} + \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{2h^2}\, h \\
&= \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}
\end{aligned}
$$

Věta (o diskretizační chybě)

Nechť má funkce f v okolí bodu x spojitou spojitou 2. resp. 3. derivaci. Platí:

$$\begin{aligned} p_1'(x) - f'(x) &= h\,\frac{f''(\xi)}{2} \\ p_2'(x) - f'(x) &= h^2\,\frac{f^{(3)}(\xi)}{3} \\ p_2''(x) - f''(x) &= h^2\,\frac{f^{(4)}(\xi)}{12} \end{aligned} \tag{4}$$

Důkaz (5): Z Taylorova polynomu

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

vyjádříme první derivaci.

Příklad (s překvapivým výsledkem)

- vypočteme přibližnou hodnotu 1. derivace podle vzorce (1) pro

$$f(x) = \sin x, \quad x = 1$$

- přesná hodnota na 4 destinná místa

$$f'(1) = \cos 1 = 0.5403$$

- pro $h = 0.01$

$$f'(1) \approx \frac{\sin 1.01 - \sin 1}{0.01} = \frac{0.8468 - 0.8415}{0.01} = 0.53$$

- pro $h = 0.001$

$$f'(1) \approx \frac{\sin 1.001 - \sin 1}{0.001} = \frac{0.8420 - 0.8415}{0.001} = 0.5$$

Celková chyba při numerickém derivování

- součet diskretizační a zaokrouhlovací chyby

$$
\begin{aligned}
E(h) &= e(h) + z(h) \\
&= Ch + \frac{2\kappa}{h}
\end{aligned}
$$

- graf $E(h) =$ přímka + hyperbola
- důsledek: velmi malý krok h dává špatné výsledky

Souhrn

- jednoduché vzorce, Newton-Cotesovy
- složené vzorce
- analýza chyby
- řád vzorců
- výpočet pro zadanou přesnost
- numerický výpočet derivace

Zdroj

- skripta Numerické metody
- str. 113–131