Numerická derivace a kvadratura

kvadratura = výpočet určitého integrálu

jednodimenzionální

- Data proložit vhodnou funkcí a tu pak derivovat/integrovat. Vhodné, jsou-li data zatížena chybami. Příklad: Shomateova rovnice

$$C^{\circ}_{pm}(T) = A + BT + CT^2 + DT^3 + E/T^2$$

- Nahradit derivace diferencemi
  – potřebujeme několik bodů v okolí
  – přesnost klesá
  Nahradit kvadraturu součtem přes vybrané body v daném intervalu – přesnost stoupe

vícedimenzionální

- parciální derivace: opakuj pro všechny proměnné/směry
- kvadratura: do cca 3D–5D, několik vnořených 1D kvadratur
  více dimenzí: Monte Carlo, Conroy

Numerická derivace

Diferenční vzorce se odvodí z Taylorova rozvoje.

První derivace:

$$\begin{aligned}\frac{f(x+h)-f(x)}{h} &= f'(x)+\frac{h}{2}f''(x)+\frac{h^2}{6}f'''(x)+\cdots\\ &= f'(x)+\mathcal{O}(h)\\ \Rightarrow \qquad f'(x) &= \frac{f(x+h)-f(x)}{h}+\mathcal{O}(h)\end{aligned}$$

$\mathcal{O}(h^n)$ znamená, že pro dostatečně malé h existuje M takové, že $|\mathcal{O}(h^n)| < M|h|^n$

Je to tedy vzorec 1. řádu v h (chyba je $\mathcal{O}(h)$ neboli řádu h).

Zpřesnění

$$f'(x)=\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h}+\mathcal{O}(h^2)$$

$$f'(x)=\frac{-f(x+2h)+8f(x+h)-8f(x-h)+f(x-2h)}{12h}+\mathcal{O}(h^4) \tag{1}$$

Derivace zprava – když známe funkci jen na jedné straně

$$f'(x)=\frac{-f(x+2h)+4f(x+h)-3f(x)}{2h}+\mathcal{O}(h^2)$$

Numerická derivace – pokračování

Stejně odvodíme vzorce pro **druhou derivaci**, nejjednodušší je

$$f''(x) = \frac{f(x+h) - 2f(x) + f(x-h)}{h^2} + \mathcal{O}(h^2)$$

Jaký krok h zvolit?

Ozn. ε = numerická přesnost: nejmenší zobrazitelné číslo > 1 v daném formátu je $1 + \varepsilon$

- 64 bit (`double`, `REAL*8`): $\varepsilon = 2^{-52} \doteq 2\cdot 10^{-16}$, dnešní standard (prakticky spíš $1\cdot 10^{-15}$)
- 80 bit (extended, `long double`, `REAL*10`): $\varepsilon = 2^{-63} \doteq 1\cdot 10^{-19}$ (vnitřně používá FPU na x86 architekturách, lze i samostatně)
- 32 bit (`float`, `REAL*4`): $\varepsilon = 2^{-23} \doteq 1\cdot 10^{-7}$ (dnes minimální zisk rychlosti – nedoporučuje se)

Pravidlo: Nejlepší h má stejnou zaokrouhlovací chybu a chybu metody.

Příklad. Jaké h je optimální v rovnici (1)?

zaokr. chyba $\propto \varepsilon/h$, chyba metody $\propto h^4$, $\Rightarrow$ $h \approx \varepsilon^{1/5} = 1\cdot 10^{-3}$

Numerická kvadratura

Numerická integrace na intervalu $[a, b]$. Předpoklad: dostatečný počet derivací je konečný v celém intervalu. Pokud není (např. $\sqrt{x}$ v intervalu $[0, 1]$), nutno řešit substitucí.

Obecný vzorec:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum w_i f(x_i), \quad x_i \in [a, b]$$

Metody:

- ekvidistantní argumenty (Newton–Cotes):
  – uzavřené: používají $f(a)$, $f(b)$
  – otevřené: body jen uvnitř intervalu
- neekvidistantní argumenty (Gauss): obvykle efektivnější (pro složitou funkci a máme-li data v libovolných bodech)

Nevlastní intervaly:

- vhodná substituce převádějící interval na konečný
- speciální metody

Typicky se interval rozdělí na kratší intervaly a vhodná metoda se aplikuje v každém z nich

Newtonovy–Cotesovy vzorce

Lichoběžníkové pravidlo:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\big[f(a)+f(b)\big] + \mathcal{O}((b-a)^2)$$

S více dělícími body:

$$\int_a^b f(x)dx = \left[\frac{f(a)}{2} + f(a+h) + f(a+2h) + \cdots + \frac{f(b)}{2}\right] h + \mathcal{O}(h^2), \quad h = \frac{b-a}{n}$$

Obdélníkový vzorec (otevřený): 2× přesnější než lichoběžník

$$\int_a^b f(x)dx = (b-a)\big[f((a+b)/2)\big] + \mathcal{O}((b-a)^2)$$

Simpsonovo pravidlo:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{6}\big[f(a)+4f((a+b)/2)+f(b)\big] + \mathcal{O}((b-a)^4)$$

Výpočet řádu a chyby: z důvodu linearity stačí pro funkce 1, x, x^2, ...

Příklad. Ověřte, že Simpsonovo pravidlo přesně integruje 1, x, x^2, x^3, avšak již ne x^4, a proto je řád chyby $\mathcal{O}(h^4)$

Gaussova kvadratura

Dvoubodový vzorec 4. řádu (poloviční chyba a o bod méně ve srovnání se Simpsonem):

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{2}\left[f\left(\frac{a+b}{2} - \frac{a-b}{2\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{a-b}{2\sqrt{3}}\right)\right] + O((b-a)^4)$$

Čtyřbodový vzorec 8. řádu (chyba $\mathcal{O}(h^8)$) s dobrou numerickou stabilitou:

```
double Gauss8(double (*f)(double),double a,double b,int n)
// int[a,b] f(x) dx using 4-point Gauss quadrature with n subintervals
{
  const double
    q1=0.4305681557970262876 12, // sqrt((15+sqrt(120))/140)
    q2=0.1699905217924281324 01, // sqrt((15-sqrt(120))/140)
    w=0.1739274225687269286 87; // 1/4-sqrt(5/864)
  double h=(b-a)/n;
  double w1=h*w, w2=h/2-w1;
  double h1=h*q1, h2=h*q2;
  int i;
  double sum=0,x;

  for (i=0; i<n; i++) {
    x=h*(i+0.5)+a;
    sum+=(f(x-h1)+f(x+h1))*w1+(f(x-h2)+f(x+h2))*w2;
  }
  return sum;
}
```

Richardsonova extrapolace

Vzorce pro derivace a integrály mají často chybu tvaru (liché členy jsou nulové)

$$S = S(h) + Ah^n + Bh^{n+2} + \cdots \qquad n \text{ je obv. sudé}$$

Obecně můžeme mít

$$S = S(h) + Ah^n + Bh^{n+1} + \cdots$$

Zpřesnění:

$$S = \frac{2^n \overbrace{S(h/2)}^{S_2(h/2)} - S(h)}{2^n - 1} + \begin{cases} \mathcal{O}(h^{n+2}) \\ \mathcal{O}(h^{n+1}) \end{cases}$$

V procesu můžeme pokračovat (s dvojicí $S_2(h/4)$ a $S_2(h/2)$), atd.

Pozor, proces selže, nejsou-li splněny předpoklady, totiž že funkce má konečných dost derivací v celém intervalu!

Příklad. Ukažte, že jeden krok Richardsonovy extrapolace lichoběžníkové metody je ekvivalentní Simpsonově metodě.