

3.1 Wzór Taylora.

Przypomnijmy tu znany wzór Taylora ze względu na jego wykorzystanie w zagadnieniach interpolacji, różniczkowania i całkowania numerycznego.

Jeśli funkcja f i jej pierwszych $n+1$ pochodnych jest ciągłych w przedziale domkniętym $[a, b]$, to dla dowolnych punktów x i $x+h$ z przedziału $[a, b]$ zachodzi

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^n \frac{h^k}{k!} f^{(k)}(x) + \frac{h^{n+1}}{(n+1)!} f^{(n+1)}(\xi),$$

gdzie punkt ξ leży pomiędzy x a $x+h$.

W powyższym wzorze $f^{(i)}$ oznacza i -tą pochodną funkcji f .

Analogiczne twierdzenie mamy dla funkcji dwu zmiennych.

Jeśli funkcja f oraz wszystkie jej pochodne cząstkowe aż do rzędu $n+1$ są ciągle w pewnym domkniętym prostokącie na płaszczyźnie a punkty (x, y) oraz $(x+h, y+k)$ leżą w tym prostokącie, to

$$f(x+h, y+k) = \sum_{i=0}^n \frac{1}{i!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^i f(x, y) + \frac{1}{(n+1)!} \left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^{n+1} f(x+\theta h, y+\theta k) \\ (0 < \theta < 1)$$

Operatory $\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^i$ działają następująco:

$$\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^0 f(x, y) = f(x, y)$$

$$\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^1 f(x, y) = \left(h \frac{\partial f}{\partial x} + k \frac{\partial f}{\partial y} \right)(x, y)$$

$$\left(h \frac{\partial}{\partial x} + k \frac{\partial}{\partial y} \right)^2 f(x, y) = \left(h^2 \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + 2hk \frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} + k^2 \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right)(x, y)$$

(funkcja i pochodne po prawej stronie obliczane są w punkcie (x, y)).

3.2 Schemat różnicowy.

W dalszych rozważaniach pomocna będzie niejednokrotnie tabela kolejnych różnic elementów danego ciągu uporządkowana w określony sposób:

y_0					
	Δy_0				
y_1		$\Delta^2 y_0$			
	Δy_1		$\Delta^3 y_0$		
y_2		$\Delta^2 y_1$		$\Delta^4 y_0$	
	Δy_2		$\Delta^3 y_1$		...
y_3		$\Delta^2 y_2$		...	
	Δy_3		...		
y_4		...			
...	...				

Kolejne kolumny tego schematu otrzymujemy przez kolejne odejmowania, np. $\Delta y_0 = y_1 - y_0$, $\Delta y_1 = y_2 - y_1$, $\Delta^2 y_0 = \Delta y_1 - \Delta y_0$, itd.

Na przykład, dla ciągu liczb $y = \{1, 0, 1, 0, 0, 1\}$ dostajemy schemat

y	Δy	$\Delta^2 y$	$\Delta^3 y$	$\Delta^4 y$	$\Delta^5 y$
1					
	-1				
0		2			
	1		-4		
1		-2		7	
	-1		3		-10
0		1		-3	
	0		0		
0		1			
	1				
1					

Schematy tego typu pomocne są w obliczeniach wykonywanych „ręcznie”, ale też przy programowaniu systematycznego obliczania pewnych wyrażeń.

3.3 Interpolacja. Interpolacja wielomianowa.

Zajmować się będziemy teraz zagadnieniem interpolacji, tzn. dobrania takiej funkcji g , że dla zadanych punktów (x_i, y_i) jest $g(x_i) = y_i$. Jeśli punkty y_i są wartościami pewnej funkcji f , to mówimy, że g interpoluje funkcję f . Interpolację stosujemy do dopasowania funkcji do tabeli punktów (np. uzyskanych z doświadczenia), ale także, aby przybliżyć funkcję „niewygodną” w zastosowaniach (np. kosztowną w obliczaniu) inną, dogodniejszą.

Sprecyzujmy jeszcze, że często mówimy o interpolacji, jeśli wartości funkcji interpolującej obliczamy wewnątrz przedziału wyznaczonego przez punkty x_i , natomiast wyznaczanie wartości tej funkcji na zewnątrz tego przedziału to ekstrapolacja (i jest to zadanie na ogół bardzo karkołomne).

Szczególne znaczenie ma interpolacja wielomianami i nią się będziemy zajmować. Zadanie, które chcemy rozwiązać jest następujące: dane jest $n+1$ punktów x_i (zwanych węzłami interpolacji) i wartości y_i w tych punktach. Chcemy znaleźć wielomian p możliwie najniższego stopnia, taki że

$$p(x_i) = y_i \text{ dla } i = 0, \dots, n$$

Jeśli liczby x_i są parami różne, to istnieje dokładnie jeden wielomian stopnia co najwyżej n spełniający powyższy warunek.

Wielomianu takiego można szukać w postaci

$$p_k(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + \dots + c_k(x - x_0)(x - x_1)\dots(x - x_{k-1})$$

Jest to wzór interpolacyjny Newtona. W bardziej zwartej postaci zapisuje się go następująco

$$p_k(x) = \sum_{i=0}^k c_i \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j).$$

Współczynniki w powyższym wzorze da się wyrazić przez tzw. ilorazy różnicowe:

$$c_k = f[x_0, x_1, \dots, x_k]$$

$$f[x_i] = f(x_i) = y_i, \quad f[x_0, x_1] = \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}$$

Ilorazy wyższych rzędów wyznacza się rekurencyjnie:

$$f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{k-1}, x_k] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}, \dots, x_k] - f[x_i, x_{i+1}, \dots, x_{k-1}]}{x_k - x_i}.$$

Wystarczy do tego znajomość węzłów x_i oraz wartości y_i (czyli $f[x_i]$). Najprościej tworzyć odpowiednią tabelę:

x_0	$f[x_0]$			
		$f[x_0, x_1]$		
x_1	$f[x_1]$		$f[x_0, x_1, x_2]$	
		$f[x_1, x_2]$		$f[x_0, x_1, x_2, x_3]$
x_2	$f[x_2]$		$f[x_1, x_2, x_3]$	
		$f[x_2, x_3]$		
x_3	$f[x_3]$			

Współczynniki wielomianu w tabeli zostały pogrubione.

Inna postać wielomianu interpolacyjnego zadana jest wzorem interpolacyjnym Lagrange'a.

$$p(x) = \sum_{i=0}^n y_i l_i(x)$$

We wzorze tym l_k są wielomianami zależnymi jedynie od węzłów x_i , ale nie od wartości y_i w tych węzłach. Zadane są wzorem

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}.$$

Ponieważ wielomian interpolacyjny określony jest jednoznacznie, oba wzory określają ten sam wielomian (choć zauważenie tego wymaga pracy przy przekształceniach).

Inną metodą znalezienia wielomianu jest poszukiwanie współczynników przy kolejnych potęgach x

$$p(x) = a_0 + a_1x + \dots + a_nx^n$$

Prowadzi to do układu $n+1$ równań liniowych:

$$\begin{bmatrix} 1 & x_0 & \cdots & x_0^n \\ 1 & x_1 & \cdots & x_1^n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & \cdots & x_n^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} y_0 \\ y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$

Macierz tego układu nazywana jest macierzą Vandermonde'a. Szukane współczynniki można znaleźć rozwiązując układ. Nie jest to jednak metoda zalecana.

3.4 Zjawisko Rungego.

Wydawać by się mogło, iż im gęściej rozmieszczone są węzły interpolacji, tym lepszy będzie jej efekt. Otóż okazuje się, że nie jest to prawdą. Przy równoodległych węzłach obserwuje się często oscylacyjne zachowanie funkcji interpolującej na krańcach przedziału, w którym prowadzi się interpolację. Oscylacje te narastają wraz ze zwiększaniem liczby węzłów. Jest to tzw. zjawisko Rungego, a klasycznym przykładem jest interpolacja funkcji

$$\frac{1}{1+25x^2}$$

równo rozmieszczonymi węzłami w przedziale $[-1,1]$ (patrz ćwiczenia).

Jeśli istnieje możliwość doboru węzłów, to w przedziale $[-1,1]$ powinno się wybierać węzły zadane wzorem

$$x_j = \cos\left(\frac{2j-1}{2k}\pi\right), \quad j = 1, \dots, k$$

Węzły te są zerami wielomianu Czebyszewa odpowiedniego stopnia (patrz dalej) i nazywa się je węzłami Czebyszewa. Ich użycie pozwala znacznie zredukować występowanie zjawiska Rungego. Węzły Czebyszewa są węzłami optymalnymi do interpolacji w przedziale $[-1,1]$.

W przypadku przedziału innego niż $[-1,1]$ można wykonać odpowiednie podstawienie: np. jeśli $x \in [-1,1]$ to podstawiając $t = \frac{1}{2}(a+b) + \frac{1}{2}(b-a)x$ otrzymujemy $t \in [a, b]$.

Gdy nie ma możliwości wyboru węzłów, można rozważyć interpolację funkcjami sklejanymi lub zastosowanie aproksymacji (patrz dalsze podrozdziały).

3.5 Wzory interpolacyjne dla równoodległych węzłów.

W interpolacji niekoniecznie interesuje nas postać wielomianu interpolacyjnego. Często chcemy tylko na podstawie wartości funkcji w węzłach znaleźć jej wartości pomiędzy węzłami. Oczywiście, jeśli znajdziemy wielomian interpolacyjny, to łatwo obliczymy jego wartości dla żądanych punktów. Można je jednak obliczyć bez znajdowania wielomianu.

W takim przypadku często mamy do czynienia z interpolacją w równo rozmieszczonych węzłach. Jeśli kolejne węzły są odległe o h :

$$x_i = x_0 + ih$$

to można pokazać, że zachodzi wzór interpolacyjny Newtona dla węzłów równoodległych:

$$f(x_0 + ph) = f_0 + \sum_{j=1}^m \Delta^j f_0 \frac{p(p-1)\dots(p-j+1)}{j!} + h^{m+1} f^{(m+1)}(\xi) \frac{p(p-1)\dots(p-m)}{(m+1)!}$$

Potrzebne wartości $\Delta^j f_0$ obliczamy ze schematu różnicowego typu:

x_{-2}	f_{-2}				
		Δf_{-2}			
x_{-1}	f_{-1}		$\Delta^2 f_{-2}$		
		Δf_{-1}		$\Delta^3 f_{-2}$	
x_0	f_0		$\Delta^2 f_{-1}$		$\Delta^4 f_{-2}$
		Δf_0		$\Delta^3 f_{-1}$	
x_1	f_1		$\Delta^2 f_0$		
		Δf_1			
x_2	f_2				

(Punkt, w którym chcemy wyznaczyć wartość funkcji znajduje się między x_0 a x_1 .)
 Potrzebne współczynniki w tym schemacie znajdują się na przekątnej. Można też utworzyć wzory korzystające z różnic znajdujących się na tym samym poziomie co f_0 i f_1 , np.

$$f(x_0 + ph) \approx f_0 + \frac{p}{1!} \Delta f_0 + \frac{p(p-1)}{2!} \Delta^2 f_{-1} + \frac{(p+1)p(p-1)}{3!} \Delta^3 f_{-1} + \\ + \frac{(p+1)p(p-1)(p-2)}{4!} \Delta^4 f_{-2} + \dots$$

lub

$$f(x_0 + ph) \approx f_0 + \frac{p}{1!} \Delta f_0 + \frac{p(p-1)}{2!} \Delta^2 f_0 + \frac{p(p-1)(p-2)}{3!} \Delta^3 f_{-1} + \\ + \frac{(p+1)p(p-1)(p-2)}{4!} \Delta^4 f_{-1} + \dots$$

Są to wzory Newtona-Gaussa.

3.6 Interpolacja odwrotna.

Interpolację odwrotną stosujemy przy rozwiązaniu następującego problemu: mamy tablicę wartości funkcji $f(x)$, chcemy rozwiązać równanie $f(x) = c$, c jest pomiędzy $f(x_0)$ a $f(x_1)$ dla pewnych x_0 i x_1 w naszej tablicy.

Najzupełniej ogólnie mając tablicę wartości x_i i $f(x_i) = y_i$ możemy przestawić kolumny i potraktować je jako tablicę y_i i $g(y_i) = x_i$ gdzie g jest funkcją odwrotną do f . Metodą opisaną w 3.3 wyznaczamy teraz wielomian interpolacyjny dla g , po czym możemy obliczyć jego wartość $g(c)$.

Jeśli punkty x_i w tablicy są równoodległe o wartość h (jak to często ma miejsce np. gdy korzystamy z tablic matematycznych), to możemy postąpić inaczej. Korzystamy ze wzoru interpolacyjnego dla punktów równoodległych, np. wzoru interpolacyjnego Newtona z 3.5.

Niech nasze szukane x spełnia

$$x = x_0 + ph$$

Mamy wtedy

$$c = f(x_0 + ph) = f_0 + p\Delta f_0 + \frac{1}{2} p(p-1)\Delta^2 f_0 + \frac{1}{6} p(p-1)(p-2)\Delta^3 f_0 + \dots$$

Po przekształceniu możemy przepisać tę zależność w postaci

$$p = \varphi(p),$$

gdzie

$$\varphi(p) = \frac{1}{\Delta f_0} \left(c - f_0 - \frac{1}{2} p(p-1)\Delta^2 f_0 - \frac{1}{6} p(p-1)(p-2)\Delta^3 f_0 - \dots \right)$$

Równanie to rozwiązujemy iteracyjnie jako pierwsze przybliżenie przyjmując

$$p_0 = \frac{c - f_0}{\Delta f_0}$$

a następnie obliczając kolejne przybliżenia

$$p_i = \varphi(p_{i-1}).$$

3.7 Interpolacja funkcjami sklejanymi.

Załóżmy, że mamy $n+1$ węzłów $x_0, x_1, \dots, x_n$ uporządkowanych w kolejności $x_0 < x_1 < \dots < x_n$. Funkcję sklejaną stopnia k nazywamy taką funkcję S , która w każdym z przedziałów $[x_i, x_{i+1}]$ jest wielomianem stopnia co najwyżej k oraz ma ciągłą $(k-1)$ pochodną w $[x_0, x_n]$. Innymi słowy funkcję S skleamy na granicach przedziałów z wielomianów odpowiedniego stopnia dbając o ciągłość odpowiedniej pochodnej.

Szczególnie często używane są funkcje sklepane stopnia trzeciego (sześciennne). Szukamy zatem takiej funkcji, która w każdym z przedziałów jest wielomianem stopnia trzeciego, jest ciągła i ma ciągłą pierwszą i drugą pochodną.

Mamy n przedziałów, czyli potrzebujemy znaleźć n wielomianów stopnia 3 – razem $4n$ współczynników. S_i to wielomian interpolujący w przedziale $[x_i, x_{i+1}]$.

Ciągłość funkcji w $n-1$ punktach sklejenia oznacza

$$S_{i-1}(x_i) = y_i = S_i(x_i) \text{ dla } i = 1, \dots, n-1$$

Mamy stąd $2n - 2$ warunków na współczynniki.

Następne 2 dostajemy z wartości funkcji w skrajnych punktach:

$$S_1(x_0) = y_0 \text{ oraz } S_n(x_{n+1}) = y_{n+1}.$$

Ciągłość pierwszej pochodnej w punktach sklejenia

$$S'_{i-1}(x_i) = S'_i(x_i) \text{ dla } i = 1, \dots, n-1$$

daje kolejnych $n - 1$ warunków i tyle samo dostajemy z ciągłości drugiej pochodnej

$$S''_{i-1}(x_i) = S''_i(x_i) \text{ dla } i = 1, \dots, n-1$$

Razem mamy $4n - 2$ warunki. Ponieważ jest $4n$ współczynników, oznacza to 2 stopnie swobody przy ich wyznaczaniu. Jednym ze sposobów ich wykorzystania jest przyjęcie, że druga pochodna w skrajnych punktach jest równa 0

$$S''_1(x_0) = S''_n(x_{n+1}) = 0$$

Daje to tzw. naturalne funkcje sklepane.

Wartości współczynników daje się wyznaczyć z pewnego układu równań liniowych wynikającego z powyższych warunków.

Funkcje sklepane pozwalają dopasować gładką krzywą do punktów interpolacji, stąd ich angielska nazwa *splines* (*cubic splines* dla funkcji sklepanych sześciennych) pochodząca od *spline* – amerykańskiego krzywika dającego się wyginać.

3.8 Aproksymacja średniokwadratowa wielomianami ortogonalnymi.

W rozdziale 1.1 wprowadziliśmy pojęcie przestrzeni liniowej z iloczynem skalarnym. Otóż przestrzeń taką tworzą funkcje ciągłe w pewnym przedziale $[a, b]$ a iloczyn skalarny dwu funkcji f i g określony jest następująco

$$(f, g) = \int_a^b f(x)g(x)w(x)dx,$$

$w(x)$ jest funkcją wagową. Dwie funkcje f i g są ortogonalne, jeśli $(f, g) = 0$.

Iloczyn skalarny określa normę euklidesową

$$(f, f) = \|f\|^2.$$

Zadanie aproksymacji średniokwadratowej jest następujące.

Chcemy przybliżyć funkcję f ciągłą w przedziale (a, b) jako kombinację liniową

$$f^*(x) = \sum_{i=0}^n c_i \varphi_i(x)$$

$n+1$ danych funkcji $\varphi_0, \varphi_1, \dots, \varphi_n$. Współczynniki dobieramy tak, aby ważona norma euklidesowa błędu $f^* - f$ była jak najmniejsza, tzn. by wyrażenie

$$\|f^* - f\|^2 = \int_a^b |f^*(x) - f(x)|^2 w(x) dx$$

było jak najmniejsze.

Jeśli funkcje φ_i są liniowo niezależne, to zadanie aproksymacji średniokwadratowej ma jedyne rozwiązanie

$$f^* = \sum_{i=0}^n c_i^* \varphi_i,$$

a jego współczynniki spełniają równania normalne:

$$\sum_{i=0}^n (\varphi_i, \varphi_j) c_i^* = (f, \varphi_j) \quad j = 0, \dots, n$$

Jeśli funkcje φ_i tworzą układ ortogonalny, to obliczenie współczynników się upraszcza. Dane są one wtedy wzorami

$$c_i^* = \frac{(f, \varphi_i)}{(\varphi_i, \varphi_i)}, \quad i = 0, \dots, n$$

Bardzo ważne w aproksymacji średniokwadratowej są zatem rodziny wielomianów ortogonalnych.

Prawdopodobnie najważniejsze z nich są wielomiany Czebyszewa określone w $[-1, 1]$ wzorem

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x)$$

Dla początkowych n są to:

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_2(x) = 2x^2 - 1, \quad T_3(x) = 4x^3 - 3x, \quad T_4(x) = 8x^4 - 8x^2 + 1$$

Wielomiany Czebyszewa spełniają wzór rekurencyjny

$$T_0(x) = 1$$

$$T_1(x) = x$$

$$T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

Są one ortogonalne dla iloczynu skalarnego z wagą $(1-x^2)^{-1/2}$:

$$(f, g) = \int_{-1}^1 f(x)g(x)(1-x^2)^{-1/2} dx$$

$$(T_i, T_j) = \begin{cases} 0 & (i \neq j) \\ \frac{1}{2}\pi & (i = j \neq 0) \\ \pi & (i = j = 0) \end{cases}$$

Wielomian T_n na n zer w $[-1, 1]$ danych wzorem

$$x_i = \cos \frac{2i+1}{n} \frac{\pi}{2} \quad i = 0, \dots, n-1$$

Jak już wspomniano, zera wielomianów Czebyszewa wyznaczają optymalne węzły dla interpolacji wielomianowej w $[-1,1]$.

W aproksymacji średniokwadratowej w $[-1,1]$ z funkcją wagową $w(x) = 1$ używa się wielomianów Legendre'a określonych wzorem

$$P_0(x) = 1, \quad P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n$$

Spełniają one wzór rekurencyjny:

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ P_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{n+1} x P_n(x) - \frac{n}{n+1} P_{n-1}(x) \end{aligned}$$

Dla początkowych n są to

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \quad P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x),$$

Wielomiany Legendre'a są w $[-1,1]$ ortogonalne z wagą równą 1, czyli dla iloczynu skalarnego

$$\begin{aligned} (f, g) &= \int_{-1}^1 f(x)g(x)dx \\ (P_i, P_j) &= \begin{cases} 0 & (i \neq j) \\ \frac{2}{2i+1} & (i = j) \end{cases} \end{aligned}$$

3.9 Różniczkowanie numeryczne.

Zastanówmy się, jak znając wartości funkcji f w różnych punktach znaleźć wartość jej pochodnych w zadanym punkcie.

Dla pierwszej pochodnej oszacowanie możemy uzyskać z ilorazu różnicowego użytego w jej definicji:

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

Możemy zapytać, jaki jest błąd tego oszacowania. Uzyskamy go z wzoru Taylora. Jeśli $f'(x)$ jest ciągła w $[x, x+h]$ a $f''(x)$ istnieje w $(x, x+h)$ to

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(\xi),$$

punkt ξ leży między x a $x+h$.

Stąd

$$f'(x) = \frac{1}{h} [f(x+h) - f(x)] - \frac{1}{2}hf''(\xi).$$

W powyższym wzorze składnik $[f(x+h) - f(x)]/h$ to przybliżenie pochodnej, które uzyskaliśmy już wyżej a $-hf''(\xi)/2$ to jego błąd. W powyższym przykładzie błąd ten zależy od h w pierwszej potęgę, zatem im mniejsze h , tym lepsze oszacowanie (jednak tylko do pewnego momentu, bo dla zbyt małych h zaczną odgrywać rolę błędy numeryczne przy obliczaniu różnicy).

Chcielibyśmy znaleźć wzory, w których błąd zależy od h w możliwie wysokiej potęgę, gdyż wtedy zmniejszając h dostajemy szybką redukcję błędów.

Skorzystajmy ponownie z wzoru Taylora, z którego mamy

$$f(x+h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{6}h^3 f^{(3)}(\xi_+)$$

i

$$f(x-h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) - \frac{1}{6}h^3 f^{(3)}(\xi_-)$$

Odejmując stronami i dzieląc przez 2 mamy

$$f'(x) = \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] - \frac{1}{12}h^2[f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)]$$

przy czym ξ_+ i ξ_- znajdują się w przedziale $(x-h, x+h)$. Przy założeniu, że trzecia pochodna funkcji f jest ciągła w tym przedziale istnieje w nim takie ξ , że $f^{(3)}(\xi) = [f^{(3)}(\xi_+) + f^{(3)}(\xi_-)]/2$ i mamy

$$f'(x) = \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] - \frac{1}{6}h^2 f^{(3)}(\xi)$$

Otrzymaliśmy zatem wzór na $f'(x)$, w którym błąd zależy od h w drugiej potęgę.

Analogiczną metodą można uzyskać wzór na numeryczne obliczanie drugiej pochodnej:

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

(z błędem zależnym od h^2) lub

$$f''(x) \approx \frac{1}{12h^2}[-f(x-2h) + 16f(x-h) - 30f(x) + 16f(x+h) - f(x+2h)],$$

dla którego błąd zależy od h^4 . Ten drugi wzór można otrzymać z pierwszego metodą ekstrapolacji opisaną niżej.

3.10 Ekstrapolacja Richardsona

Procedura ekstrapolacji służy do eliminowania kolejnych składników błędów poprzez odejmowanie wartości obliczonych dla zmienionego h .

Z wzoru Taylora

$$f(x+h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{k!} h^k f^{(k)}(x) \quad \text{ i } \quad f(x-h) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(-1)^k}{k!} h^k f^{(k)}(x)$$

Po odjęciu tych równań stronami możemy wyzerować wszystkie składniki z parzystymi potęgami k i dostać przybliżenie pierwszej pochodnej

$$f'(x) = \frac{1}{2h}[f(x+h) - f(x-h)] - \frac{1}{3!}h^2 f^{(3)}(x) - \frac{1}{5!}h^4 f^{(5)}(x) + \dots$$

Oznaczając F pierwszą pochodną a $\varphi(h)$ jej przybliżenie $[f(x+h) - f(x-h)]/2h$ otrzymujemy

$$F = \varphi(h) + a_2 h^2 + a_4 h^4 + a_6 h^6 + \dots$$

Dla małych h największym składnikiem błędów jest $a_2 h^2$.

Obliczmy przybliżenie pochodnej dla $h/2$. Mamy wtedy

$$F = \varphi(h/2) + a_2 h^2 / 4 + a_4 h^4 / 16 + a_6 h^6 / 64 + \dots$$

Jeśli to równanie pomnożymy stronami przez 4 i odejmiemy od niego poprzednie (dla kroku h), otrzymamy

$$3F = 4\varphi(h/2) - \varphi(h) - 3a_4 h^4 / 4 - 15a_6 h^6 / 16 + \dots$$

po podzieleniu przez 3 otrzymujemy ostatecznie

$$F = \frac{4}{3} \varphi(h/2) - \frac{1}{3} \varphi(h) - a_4 h^4 / 4 - 5a_6 h^6 / 16 + \dots$$

Obliczając zatem przybliżenie pochodnej dla h oraz $h/2$ a następnie biorąc ich różnicę z odpowiednimi współczynnikami dostajemy przybliżenie, w którym błąd zależy od h w potęgach czwartej i wyższych.

Nic nie stoi na przeszkodzie, aby tym sposobem wyeliminować człon z h^4 . Oznaczmy

$$\psi(h) = \frac{4}{3} \varphi(h/2) - \frac{1}{3} \varphi(h)$$

Obliczając teraz $\psi(h/2)$, mnożąc i odejmując równania dostaniemy

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

Następnie możemy oznaczyć

$$\theta(h) = \frac{16}{15} \psi(h/2) - \frac{1}{15} \psi(h)$$

i analogicznym sposobem dostaniemy

$$F = \frac{64}{63} \theta(h/2) - \frac{1}{63} \theta(h) - \frac{1}{84} c_8 h^8 - \dots$$

Wyeliminowaliśmy już wszystkie człony z h w potęgach niższych niż 8.

Metoda ta to ekstrapolacja Richardsona. Ponieważ rozumowanie nie zależy od tego, czym są F oraz $\varphi(h)$, więc metoda stosuje się nie tylko do numerycznego obliczania pierwszej pochodnej, ale też w innych przypadkach.

W systematycznym jej stosowaniu pomocne są następujące wzory opisujące metodę.

Jeśli chcemy wykonać jej N kroków, to zaczynając od pewnego h obliczamy wielkości:

$$F(n,0) = \varphi(h/2^n) \quad \text{dla } n = 0, \dots, N$$

Następnie dla danego n obliczamy rekurencyjnie dla $k = 1, \dots, n$:

$$F(n,k) = F(n,k-1) + \frac{F(n,k-1) - F(n-1,k-1)}{4^k - 1}$$

W efekcie otrzymujemy trójkątną tablicę z kolejnymi przybliżeniami szukanej wielkości F .

$$\begin{array}{ccccccc} F(0,0) & & & & & & \\ F(1,0) & F(1,1) & & & & & \\ F(2,0) & F(2,1) & F(2,2) & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ F(N,0) & F(N,1) & F(N,2) & \dots & F(N,N) & & \end{array}$$

Podobnym sposobem można poprawiać oszacowanie wielkości danych wzorem innym niż $\varphi(h)$.

3.11 Pewne zastosowania różniczkowania numerycznego w chemii kwantowej.

Różniczkowanie numeryczne używa się w chemii kwantowej do obliczania pochodnych energii układu, kiedy nie są dostępne (dla danej metody, lub w danym programie) analityczne wyrażenia na pochodne.

W szczególności pierwsze pochodne energii potencjalnej układu V po współrzędnych atomów x_i (indeks i numeruje współrzędne i atomy) ($\partial V/\partial x_i$) służą do obliczania gradientów przy optymalizacji geometrii. Z kolei po znalezieniu minimum energii układu można obliczając drugie pochodne energii potencjalnej wyznaczyć stałe siłowe dla drgań harmoniczych, co wynika z rozwinięcia energii w szereg Taylora i obcięciu go na członach kwadratowych:

$$V(\mathbf{R}_0 + \mathbf{x}) = V(\mathbf{R}_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 V}{\partial x_i \partial x_j} \right)_{\mathbf{R}_0} x_i x_j$$

$\mathbf{R}_0$ oznacza współrzędne atomów w minimum energii a $\mathbf{x}$ wektor wychyleń z tego minimum. Numeryczne obliczanie pochodnych wymaga tu wychylania o małą wielkość poszczególnych atomów z położenia równowagi w 3 niezależnych kierunkach.

Pochodne energii po składowych pola elektrycznego wykorzystuje się w obliczaniu wielkości charakteryzujących elektryczne własności cząsteczek. Jeśli bowiem energię cząsteczki E rozwiniemy w szereg względem niezbyt mocnego zewnętrznego pola elektrycznego $\mathbf{F}$ (oznaczenie $\mathbf{F}$ stosujemy, aby uniknąć pomylenia pola z energią), to otrzymamy

$$E(\mathbf{F}) = E(0) + \sum_i \left(\frac{\partial E}{\partial F_i} \right)_{\mathbf{F}=0} F_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left(\frac{\partial^2 E}{\partial F_i \partial F_j} \right)_{\mathbf{F}=0} F_i F_j + \dots$$

Pierwsza pochodna energii z przeciwnym znakiem daje odpowiednią składową trwałego momentu dipolowego cząsteczki

$$\mu_i = - \left(\frac{\partial E}{\partial F_i} \right)_{\mathbf{F}=0},$$

natomiast drugie pochodne energii ze zmienionym znakiem to składowe tensora polaryzowalności cząsteczki

$$\alpha_{ij} = - \left(\frac{\partial^2 E}{\partial F_i \partial F_j} \right)_{\mathbf{F}=0}$$

z drugiej strony można je też otrzymać jako pierwsze pochodne składowych momentu dipolowego po polu:

$$\alpha_{ij} = \left(\frac{\partial \mu_i}{\partial F_j} \right)_{\mathbf{F}=0}$$

Mamy stąd znany wzór na zmianę energii cząsteczki w polu elektrycznym

$$E(\mathbf{F}) = E(0) - \boldsymbol{\mu} \mathbf{F} - \frac{1}{2} \mathbf{F} \boldsymbol{\alpha} \mathbf{F} - \dots$$

Obliczenia prowadzi się tzw. metodą skończonego pola obliczając energię cząsteczki w słabym zewnętrznym polu i bez pola a następnie wyznaczając odpowiednią wielkość przez różniczkowanie numeryczne. Jakkolwiek można w ten sposób obliczyć moment dipolowy, nie robi się tego, gdyż mając w wyniku obliczeń położenia jąder atomowych i rozkład gęstości elektronowej można moment dipolowy wyznaczyć wprost.

Polaryzowalność w metodzie skończonego pola można uzyskać z drugiej pochodnej energii albo jako pierwszą pochodną momentu dipolowego. Należy pamiętać, że ze względu na

tensorowy charakter tej wielkości w ogólnym przypadku musimy przykładać pole w różnych kierunkach, aby znaleźć wszystkie pochodne cząstkowe (chyba, że symetria cząsteczki uprości nam zadanie).

3.12 Całkowanie numeryczne. Wzór trapezów. Metoda Romberga.

Całki nieoznaczone z wielu funkcji nie wyrażają się poprzez funkcje elementarne, stąd znaczenie całkowania numerycznego.

Naturalnym sposobem obliczenia całki oznaczonej

$$\int_a^b f(x) dx$$

jest przybliżenie funkcji podcałkowej przez funkcję łatwą do scałkowania. Najprostszym przypadkiem może być funkcja liniowa, skąd otrzymujemy wzór prostokątów (przybliżając pole pod krzywą prostokątem):

$$\int_a^b f(x) dx \approx (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

oraz wzór trapezów (przybliżając pole pod krzywą trapezem):

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b)).$$

Całkując błąd interpolacji prowadzącej do wzoru trapezów można pokazać, że błąd wzoru trapezów wynosi

$$-\frac{1}{12} (b-a)^3 f''(\xi), \quad \xi \in (a, b)$$

Przedział całkowania można podzielić na mniejsze przedziały stosując do każdego z nich wzór prostokątów lub trapezów (lub inny wzór całkowania). Sumując oszacowania z podprzedziałów dostajemy wzór złożony. Częstym przypadkiem jest podział wyjściowego przedziału przy pomocy równoodległych (o h) punktów. Mamy wtedy:

$$x_0 = a, \quad x_i = a + ih, \quad x_n = b, \quad h = (b-a)/n$$

Wzór prostokątów ma wtedy postać:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \sum_{i=1}^n f(x_i - h/2)$$

a wzór trapezów:

$$\int_a^b f(x) dx \approx h \left(\frac{f(a) + f(b)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right).$$

Wychodząc ze wzoru Eulera-Maclaurina można uzasadnić podobną do ekstrapolacji Richardsona metodę polepszania przybliżenia całki przez zagęszczanie punktów podziału. Jest to metoda Romberga.

Przedział $[a, b]$ dzielimy na 2^n podprzedziałów o równej długości h_n .

$$h_n = \frac{b-a}{2^n}$$

Stosując złożony wzór trapezów obliczamy wtedy przybliżenia całki dla różnej liczby punktów podziału:

$$I(n,0) = h_n \left(\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) \right), \quad x_i = a + ih_n$$

Najprostsza jest suma

$$I(0,0) = \frac{1}{2}[f(a) + f(b)]$$

Następnie obliczamy kolejno $I(1,0)$, $I(2,0)$, itd. Oczywiście należy zwrócić uwagę na fakt, że obliczając $I(n,0)$ należy tylko dołożyć nowe punkty do $I(n-1,0)$ a nie obliczać niepotrzebnie wartości funkcji we wszystkich 2^n punktach.

Podobnie jak w schemacie ekstrapolacji Richardsona przybliżenia $I(n,0)$ dają pierwszą kolumnę tabeli, a następnie obliczamy według wzoru

$$I(n,m) = I(n,m-1) + \frac{1}{4^m - 1} [I(n,m-1) - I(n-1,m-1)].$$

Dostajemy ostatecznie tabelę coraz lepszych przybliżeń całki:

$$\begin{array}{ccccccc} I(0,0) & & & & & & \\ I(1,0) & I(1,1) & & & & & \\ I(2,0) & I(2,1) & I(2,2) & & & & \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & & & \\ I(M,0) & I(M,1) & I(M,2) & \cdots & I(M,M) & & \end{array}$$

3.13 Wzory Newtona-Cotesa.

Jak już powiedzieliśmy, ogólną metodą obliczania całki oznaczonej jest przybliżenie funkcji podcałkowej wielomianem (który już łatwo scałkować).

Jeśli w przedziale całkowania $[a,b]$ wybraliśmy węzły $x_0, \dots, x_n$ to możemy zastosować wzór interpolacyjny Lagrange'a

$$p(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x), \quad \text{gdzie} \quad l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Wynika stąd, że

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b p(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x) dx$$

Wzór całkowania numerycznego postaci:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \quad (*)$$

nazywa się kwadraturą.

W przypadku wyżej współczynniki kwadratury dane są wzorem

$$A_i = \int_a^b l_i(x) dx, \quad i = 0, \dots, n$$

Jeśli węzły interpolacji są równo rozmieszczone:

$$x_i = a + i \frac{(b-a)}{n},$$

to kwadraturę (*) ze współczynnikami podanymi wyżej nazywa się wzorem Newtona-Cotesa.

Zobaczmy, co dostaniemy ze wzoru Newtona-Cotesa dla $n = 1$.

Wtedy $x_0 = a$ i $x_1 = b$

Mamy

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

Obliczając całki (współczynniki kwadratury) dostajemy

$$A_0 = \int_a^b l_0(x) dx = \frac{1}{2}(b-a), \quad A_1 = \int_a^b l_1(x) dx = \frac{1}{2}(b-a)$$

Nietrudno zauważyć, że z wzoru Newtona-Cotesa wyprowadziliśmy wzór trapezów

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} (f(a) + f(b))$$

Także inne przypadki wzoru Newtona-Cotesa dla małych n mają swoje własne nazwy.

Podamy je poniżej z użyciem $h = (b-a)/n$

$$n=1: \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{2} (f(x_0) + f(x_1)), \quad \text{błąd} = -\frac{h^3}{12} f''(\xi)$$

Jest to, jak już stwierdziliśmy, wzór trapezów.

$$n=2: \int_a^b f(x) dx \approx \frac{h}{3} (f(x_0) + 4f(x_1) + f(x_2)), \quad \text{błąd} = -\frac{h^5}{90} f^{(4)}(\xi)$$

Jest to wzór Simpsona.

$$n=3: \int_a^b f(x) dx \approx \frac{3h}{8} (f(x_0) + 3f(x_1) + 3f(x_2) + f(x_3)), \quad \text{błąd} = -\frac{3h^5}{80} f^{(4)}(\xi)$$

Jest to tzw. reguła 3/8.

Wyznaczając współczynniki kwadratury możemy uniknąć wyznaczania i całkowania wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a. Otóż kwadratura określona wzorem (*) musi być dokładna dla wielomianu stopnia n . W takim razie jej współczynniki muszą spełniać układ równań

$$\int_a^b x^j dx = \sum_{i=0}^n A_i x_i^j \quad j = 0, \dots, n$$

Obliczając proste całki po lewej stronie i rozwiązując ten układ dostajemy współczynniki kwadratury.

Metodę tę nazywa się metodą nieoznaczonych współczynników.

Podajmy jeszcze użyteczny wzór na zmianę przedziału całkowania. Jeśli mamy wzór (czyli współczynniki kwadratury) dla przedziału $[c, d]$

$$\int_c^d f(t) dt \approx \sum_{i=0}^n A_i f(t_i),$$

to po zamianie zmiennych możemy otrzymać wzór dla przedziału $[a, b]$:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{d-c} \sum_{i=0}^n A_i f\left(\frac{(b-a)t_i + ad - bc}{d-c}\right).$$

3.14 Kwadratury Gaussa.

Zauważmy na początek, że wzór kwadratury (*) możemy także zapisać z funkcją wagową $w(x)$:

$$\int_a^b f(x)w(x)dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i). \quad (**)$$

Wtedy współczynniki kwadratury dane są wzorem:

$$A_i = \int_a^b l_i(x)w(x)dx, \quad i = 0, \dots, n$$

Węzły x_i mogą być w ogólnym przypadku dowolne.

Powstaje pytanie, czy jakieś układy węzłów są lepsze od innych.

Otóż zachodzi twierdzenie:

Jeśli węzły $x_0, \dots, x_n$ są zerami $(n+1)$ -szego wielomianu ortogonalnego p_{n+1} w przedziale $[a, b]$ z wagą w , to kwadratura $(**)$ o współczynnikach zadanych wzorem wyżej jest dokładna dla każdego wielomianu do stopnia $2n+1$ włącznie. Nazywamy ją kwadraturą Gaussa.

Z rozdziału 3.8 wynika, że dla funkcji wagowej $w(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$ węzłami kwadratury Gaussa w przedziale $[-1, 1]$ są zera wielomianu Czebyszewa odpowiedniego stopnia a dla funkcji wagowej $w(x) = 1$ w tym samym przedziale do konstrukcji kwadratury Gaussa używamy zer wielomianu Legendre'a.

3.15 Całki wielokrotne. Całkowanie metodami Monte Carlo.

Metody całkowania numerycznego dają się uogólniać na funkcje wielu zmiennych.

Na przykład dla całki podwójnej w prostokącie $[a, b] \times [c, d]$ dzieląc przedziały odpowiednio na n i m punktów dostajemy

$$x_0 = a, x_i = a + ih, h = (b - a)/n, y_0 = c, y_i = c + jk, k = (d - c)/m$$

Odpowiednikiem wzoru prostokątów jest

$$I \approx hk \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m f(x_i - h/2, y_j - k/2)$$

a odpowiednikiem wzoru trapezów:

$$I \approx hk \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \frac{1}{4} [f(x_{i-1}, y_{j-1}) + f(x_{i-1}, y_j) + f(x_i, y_{j-1}) + f(x_i, y_j)] = hk \sum_{i=0}^n \sum_{j=0}^m w_{ij} f(x_i, y_j)$$

gdzie $w_{ij} = 1$ dla wewnętrznych punktów siatki, $w_{ij} = 1/4$ dla wierzchołków prostokąta i $w_{ij} = 1/2$ dla pozostałych punktów brzegowych.

Dla złożonych obszarów płaskich używa się często siatek złożonych z trójkątów.

Dla całek o dużej krotności opłacać się może zastosowanie metod Monte-Carlo. Załóżmy, że chcemy obliczyć całkę

$$I = \int_0^1 f(x)dx$$

(posłużyliśmy się całką jednokrotną dla przejrzystości, w praktyce nie opłaca się dla nich stosować metod MC).

Niech $r_1, r_2, \dots, r_n$ będą liczbami losowymi (w praktyce pseudolosowymi) o rozkładzie prostokątnym w $[0, 1]$ (tzn. każda wartość z tego przedziału jest jednakowo prawdopodobna).

Policzmy, uśrednioną wartość funkcji f w punktach r_i

$$\sum_{i=1}^n \frac{f(r_i)}{n}.$$

Otóż wartością oczekiwaną tej zmiennej jest szukana wartość całki I .