

LUENTO 6 5.10.

Vielä ennustus-korjaus –menetelmästä

ENNUSTUS-KORJAUS –PERIAATE

Kolme vaihetta: ennustus, voimien laskenta ja korjaus

Gear-algoritmi(t): skaalattu aikaderivaatta ($n > 0$): $r_n = h^n \frac{d^n}{dt^n} r_0$

1. Ennustus

(Pascalin kolmio-
matriisi) $\rightarrow$

$$\begin{pmatrix} r_0^P(t+h) \\ r_1^P(t+h) \\ r_2^P(t+h) \\ \dots \\ r_n^P(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & \dots & 1 \\ 0 & 1 & 2 & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 1 & \dots & \dots \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 1 \end{pmatrix} * \begin{pmatrix} r_0(t) \\ r_1(t) \\ r_2(t) \\ \dots \\ r_n(t) \end{pmatrix}$$

2. Korjaustermi: lasketaan liikeyhtälöstä $r_2^C(t+h)$

jolloin korjaus $\Delta r = r_2^C - r_2^P$

3. Korjaus

$$\begin{pmatrix} r_0^C(t+h) \\ r_1^C(t+h) \\ r_2^C(t+h) \\ \dots \\ r_n^C(t+h) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_0^P(t+h) \\ r_1^P(t+h) \\ r_2^P(t+h) \\ \dots \\ r_n^P(t+h) \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} c_0 \\ c_1 \\ c_2 \\ \dots \\ c_n \end{pmatrix} * \Delta r$$

- yleiskäyttöinen menetelmä 1. tai 2. kl diff.yhtälöiden numeeriseen ratkaisemiseen
- kertoimien c arvot riippuvat diff.yhtälön kertaluvusta
- suoraviivainen menetelmä tapauksissa jossa kiihtyvyys riippuu myös nopeudesta (esim. termostaatit)
- lisäinfoa esim. Allen, Tildesley: Computer Simulation of Liquids, Appendix E

Numeerisesta integroinnista

[Haa02] luku 5

Integraalille lasketaan numeerinen approksimaatio = KVADRATUURI (QUADRATURE)

Newton-Cotesin kaavat: interpoloidaan integrandia polynomilla

- 1. suorakaidekaava**
- 2. keskipistekaava**
- 3. puolisuunnikaskaava**
- 4. Simpsonin kaava**
- 5. korkeimmat kertaluvut myös mahdollisia**

Approksimaation tarkkuutta voidaan parantaa tihentämällä integrointiväliä -> paloittainen integrointi

Newton 3/8 kaava

Gaussin – Legendren kvadratuuri

- solmupisteet Legendren polynomien nollakohtia välillä $[-1,1]$**
- solmupisteet ja painot taulukoitu**
- integraali laskettava välillä $[-1,1]$ esim. muuttujanvaihdolla**
- esim. 5.3.1. [Haa02]**

Muita vaihtoehtoja:

Gauss-Tsebysev kvadratuuri muotoa

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx.$$

Gauss-Laguerre

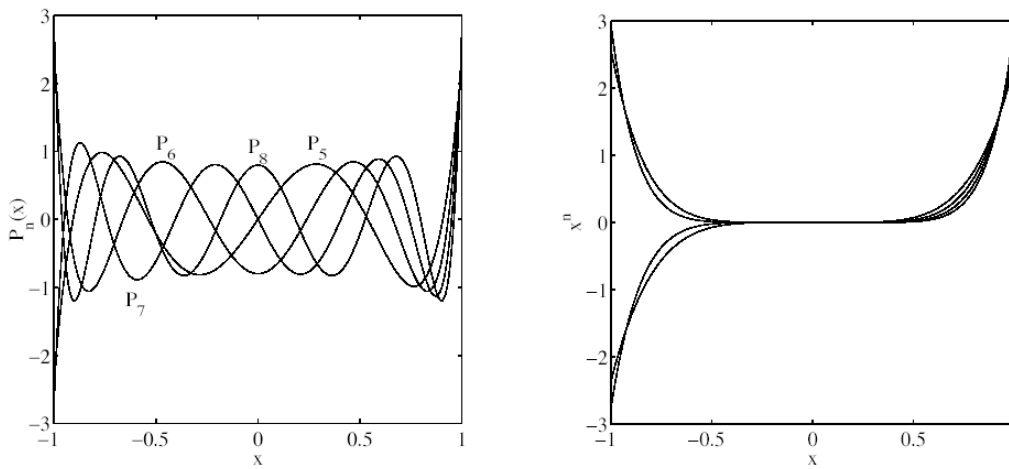
$$\int_0^{\infty} e^{-x} f(x) dx$$

Gauss-Hermite

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2/2} f(x) dx.$$

Taulukko 4.1: Tavallisimmat ortogonaalipolynomiperheet.

<i>Nimi</i>	$[a, b]$	$w(x)$	<i>Normituskerroin</i>
Legendren polynomit	$[-1, 1]$	1	$\sqrt{n+1/2}$
Tšebyševin polynomit	$[-1, 1]$	$1/\sqrt{1-x^2}$	$\sqrt{1/\pi}$ ($n=0$) $\sqrt{2/\pi}$ ($n \geq 1$)
Laguerren polynomit	$[0, \infty)$	e^{-x}	1
Hermiten polynomit	$[-\infty, \infty]$	$e^{-x^2/2}$	$1/\sqrt{n!\sqrt{2\pi}}$



a: Legendren polynomit $\tilde{P}_5, \tilde{P}_6, \tilde{P}_7$ ja $\tilde{P}_8$. **b:** Polynomit $\sqrt{n+1}x^n, n = 5, 6, 7, 8$.

Kuva 4.2: Kahden eri kannan polynomeja.

Esimerkki 4.3.3 Tarkastellaan välillä $[-1, 1]$ määriteltyjen polynomien $p(x)$ avaruutta. Kantafunktioiksi olisi helppo valita suoraviivaisesti monomit x^n . Nämä eivät kuitenkaan muodosta ortonormaalia systeemiä sisätulon (A.22) suhteen, sillä

$$\int_{-1}^1 x^n x^m dx = \begin{cases} 0, & \text{jos } m+n \text{ on pariton,} \\ 2/(m+n+1), & \text{jos } m+n \text{ on parillinen.} \end{cases}$$

Ortonormaali kanta on muodostettavissa Gramin ja Schmidtin menetelmällä (sivu 391), jolloin päädytään normalisoituihin Legendren polynomeihin $\tilde{P}_0(x) = 1/\sqrt{2}$, $\tilde{P}_1(x) = \sqrt{3/2}x$, $\tilde{P}_2(x) = \sqrt{5/8}(3x^2 - 1)$, ...

Kuvassa 4.2a on normalisoitujen Legendren polynomien $\tilde{P}_5, \tilde{P}_6, \tilde{P}_7$ ja $\tilde{P}_8$ kuvaajat. Jos niitä verrataan alkeellisen kannan x^n vastaaviin funktioihin (kuva 4.2b), on helppo ymmärtää miksi jälkimmäinen kanta sopii huonosti äärellisellä laskentatarkkuudella suoritettaviin approksimaatioihin: yksinkertaiset monomit saavat hyvin pieniä arvoja merkittävällä osalla väliä $[-1, 1]$, ja lähellä päätyä $x = -1$ niiden käyttäytyminen riippuu oleellisesti eksponentin parillisuudesta tai parittomuudesta.

Taulukko 5.1: *Gaussin ja Legendren kvadratuurien solmupisteitä ja painoja välillä $[-1, 1]$.*

n	x_i	w_i
1	$x_1 = 0$	$w_1 = 2$
2	$x_2 = -x_1 = 1/\sqrt{3}$	$w_1 = w_2 = 1$
3	$x_3 = -x_1 = \sqrt{3/5}$ $x_2 = 0$	$w_1 = w_3 = 5/9$ $w_2 = 8/9$
4	$x_4 = -x_1 = 0.861136311594053$ $x_3 = -x_2 = 0.339981043584856$	$w_1 = w_4 = 0.347854845137454$ $w_2 = w_3 = 0.652145154862546$
5	$x_5 = -x_1 = 0.906179845938664$ $x_4 = -x_2 = 0.538469310105683$ $x_3 = 0$	$w_1 = w_5 = 0.236926885056189$ $w_2 = w_4 = 0.478628670499366$ $w_3 = 0.568888888888889$
6	$x_6 = -x_1 = 0.932469514203152$ $x_5 = -x_2 = 0.661209386466265$ $x_4 = -x_3 = 0.238619186083197$	$w_6 = w_1 = 0.171324492379170$ $w_2 = w_5 = 0.360761573048139$ $w_3 = w_4 = 0.467913934572691$

Taulukko 5.2: *Tšebyševin kvadratuurien solmupisteet ja painot*

n	x_i	w_i
1	$x_1 = 0$	$w_1 = 2$
2	$x_2 = -x_1 = 0.57735026918963$	$w_i = 1$
3	$x_3 = -x_1 = 0.70710678118655$ $x_2 = 0$	$w_i = 2/3$
4	$x_4 = -x_1 = 0.79465447229177$ $x_3 = -x_2 = 0.18759247408508$	$w_i = 2/4$
5	$x_5 = -x_1 = 0.83249748700098$ $x_4 = -x_2 = 0.37454140955358$ $x_3 = 0$	$w_i = 2/5$
6	$x_6 = -x_1 = 0.86624681810782$ $x_5 = -x_2 = 0.42251865376111$ $x_4 = -x_3 = 0.26663540151670$	$w_i = 2/6$
7	$x_7 = -x_1 = 0.88386170075805$ $x_6 = -x_2 = 0.52965677528516$ $x_5 = -x_3 = 0.32391181051991$ $x_4 = 0$	$w_i = 2/7$

■ **Esimerkki 5.3.1** Laskemme integraalin $\int_0^4 e^{-x} dx = 1 - e^{-4} \approx 0.981684$ likiarvon käyttäen kahden pisteen Gaussin kvadratuuria (kohta $n = 2$ taulukossa 5.1). Koska taulukkoarvot soveltuvat sellaisinaan vain välin $[-1, 1]$ integraaleille, joudumme joko tekemään integraalissa sopivan muuttujanvaihdon tai skaalaamaan taulukossa annettuja lukuja.

Kokeillaan ensin muuttujanvaihdoista $x = 2(t + 1)$ eli $t = x/2 - 1$, jolloin

$$\int_0^4 e^{-x} dx = \int_{-1}^1 2e^{-2(t+1)} dt.$$

Jälkimmäinen integraali on nyt välillä $[-1, 1]$, joten taulukon luvut ovat käytettävissä sellaisenaan, ja

$$\begin{aligned} \int_{-1}^1 2e^{-2(t+1)} dt &\approx 1 \cdot 2e^{-2(-0.577350+1)} + 1 \cdot 2e^{-2(0.577350+1)} \\ &\approx 0.944160. \end{aligned}$$

Integraalin arviointi Gaussin kvadratuurilla aiheuttaa tässä tapauksessa absoluuttisen virheen $0.981684 - 0.944160 = 0.037524$.

Pisteiden ja painojen skaalaus välille $[0, 4]$ sopiviksi käy puolestaan seuraavasti: välien pituuksien suhde on $4 : 2 = 2$, joten painot joudutaan kertomaan tekijällä 2. Solmupisteet ratkeavat kaavasta

$$x_i = \frac{4 - 0}{1 - (-1)}(t_i - (-1)) + 0$$

eli $x_i = 2(t_i + 1)$, $i = 1, 2$, joten $x_1 = 2(-0.577350 + 1) = 0.845299$ ja $x_2 = 2(0.577350 + 1) = 3.154701$. Lopullinen kvadratuuri on siis

$$2 \cdot e^{-0.845299} + 2 \cdot e^{-3.154701} \approx 0.944160.$$

Käytännön laskujen kannalta ei siis ole merkitystä kummin päin hoitaa taulukoitujen arvojen soveltamisen.

Moniulotteiset integraalit

Tulokaavat

- sovelletaan 1-ul menetelmiä peräkkäin kullekin dimensiolla
- yl. integrointihila s-ulotteisessa avaruudessa
- virhe $O(N^{-2/s}) \rightarrow$ integrointitarkkuus suppenee huonosti jos s suuri

Ei-tulokaavat

Monte Carlo –integrointi

- suorakulmasäännön sovellus

$$I_{SK} = h \sum_{i=0}^{n-1} f(x_i)/n \quad h = (b-a) / n$$

$\rightarrow I_{SK}$ on integrointiväli $(b-a) * f$ -arvojen keskiarvo !

kun $h \rightarrow 0$ ($n \rightarrow \infty$), niin $I_{SK} \rightarrow I$

Tilastollinen strategia:

valitaan N satunnaispistettä U_i väliltä $[0,1]$ ja skaalataan välille $[a,b]$: $u_i = a + U_i(b-a)$

lasketaan

$$I_{MC} = (b-a) \sum_{i=1}^N f(u_i)/N$$

MC integroinnin plussat ja miinukset:

- + yksinkertainen menetelmä myös useampidimensionaaliselle integraalille**
- + virhe aina luokkaa $O(N^{-1/2})$, ei riipu integraalin dimensiosta!**
- kun dimensio pieni, MC ”suppenee” hitaammin kuin tulokaavat
(esim. 1-ul: N kasvatettava tekijällä 100 jos halutaan parantaa tuloksen tarkkuutta yhdellä desimaalilla)**
- satunnaislukuotoksen hyvyys??? (satunnaislukugeneraattorit, ”importance sampling...)**