אינטגרציה: מדוע צריך שיטה יעילה

התכנסות מהירה <= צריך N הרבה יותר קטן. למשל, אם רוצים שגיאה יחסית של $\epsilon = 10^{-6}$, נשווה את זה לשגיאה בכל שיטה, בשביל להעריך את מספר האינטרוולים N הנדרש. בכל מקרה, נזכור ש-N חייב להיות חזקה של 2, כי אנו משתמשים בשיטה רקורסיבית שמגדילה את מספר הקטעים פי 2 בכל צעד.

שיטת הטרפז: $\frac{1}{N^2} = \epsilon \;\Rightarrow\; N \simeq 1024$

שיטת סימפסון: $\frac{1}{N^4} = \epsilon \;\Rightarrow\; N \simeq 32$

שיטת רומברג עם k=5: $\frac{1}{N^{10}} = \epsilon \;\Rightarrow\; N \simeq 4$

אבל בשביל שיטת רומברג, חייבים יותר קטעים ממה שנראה מההערכה הפשוטה הזאת. בשביל לאתחל את השיטה, צריך לפחות 5 צעדים עוקבים של שיטת הטרפז, ז"א צעד ראשון עם N=1, אחריו N=2 קטעים, 4, 8, ו- 16. סה"כ מספר הקריאות לפונקציה היא 2+1+2+4+8=17 (הערה: בצעד הראשון צריך שתי קריאות, כדי לקבל את ערך הפונקציה בשני הקצוות).

הערה: יעילות חשובה עוד יותר באינטגרציה כפולה, שבה מספר הקריאות לפונקציה הוא מסדר N^2, כאשר N הוא המספר הדרוש בכל מימד.

נגזרות נומריות

__הבעיה:__ יודעים לחשב רק את ערכי הפונקציה, רוצים להעריך את הנגזרת.

שיטה ראשונה (כמו בספרי מתמטיקה, עם h קטן):
$$f'(x) \approx \frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

חישוב השגיאה:
(כמו תמיד, מתחילים עם טור טיילור)
$$f(x+h) \approx f(x) + h\,f'(x) + \tfrac{1}{2}h^2 f''(x)$$

ולכן:
$$\frac{f(x+h)-f(x)}{h} \approx f' + \tfrac{1}{2}hf''$$

שגיאת קיצוץ: (truncation)
$$e_t \sim hf''(x)$$

שגיאת עיגול: (rounding)
$$e_r \sim \epsilon_f f(x)/h$$

כאן קראנו לשגיאה היחסית בפונקציה f (בנקודה x או x+h): ϵ_f , למשל כתוצאה משגיאות עיגול כשהמחשב מחשב את f. הערה: הסימן ~ מבטה הערכה של סדר גודל.

באופן כללי, אם יש לנו איזה ערך z, והשגיאה בו היא $\triangle z$
אז מגדירים את השגיאה היחסית כך: $\epsilon_z = \frac{\triangle z}{z}$

נגזרות נומריות

סה"כ שגיאה: $$e_{\text{tot}} \sim hf'' + \frac{\epsilon_f f}{h}$$

נמצא את h שמקטין את השגיאה:
(ע"י איפוס הנגזרת)

$$\frac{de_{\text{tot}}}{dh} = f'' - \frac{\epsilon_f f}{h^2} = 0$$

לכן קיבלנו: $$h \sim \sqrt{\frac{\epsilon_f f}{f''}} \sim \sqrt{\epsilon_f}\, x$$

כאן השתמשנו בעוד צעד חשוב בהערכת הסדר גודל של השגיאה. הנחנו שבאופן כללי, בשביל רוב הפונקציות: $f' \sim \frac{f}{x}, \quad f'' \sim \frac{f}{x^2}$
וכדומה עבור נגזרות גבוהות יותר.
אפשר לראות את זה בשתי דרכים: מתמטיקאי מסתכל על חזקה כפונקציה טיפוסית. למשל, עבור: $f(x) = x^4$ רואים ש: $f' = 4\frac{f}{x}, \quad f'' = 12\frac{f}{x^2}$

לעומת זאת, פיסיקאי חושב על בדיקת יחידות:
למשל, אם ל-x יש יחידות של מרחק, אז לנגזרת של f ביחס למרחק יש יחידות של $\frac{f}{x}$, וכדומה לנגזרות יותר גבוהות.

נגזרות נומריות

בשביל ה-h האופטימאלי, השגיאה היחסית בנגזרת היא:

$$\epsilon_{f'} = \frac{e_{\rm tot}}{f'} \sim \frac{\sqrt{\epsilon_f}\; x\,\frac{f}{x^2} + \frac{\epsilon_f f}{\sqrt{\epsilon_f} x}}{f/x} \sim \sqrt{\epsilon_f}$$

הערה: ב-h האופטימאלי, שתי השגיאות e_t ו- e_r שוות (חוץ ממקדמים נומריים שאנו מזניחים). משפט זה יהיה נכון גם בהמשך.

שיטה שנייה: (השיטה הסימטרית)

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

חישוב השגיאה: (בעזרת איבר נוסף בטור טיילור)

$$\begin{aligned}\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} &= \Big[\big(f + hf' + \tfrac{1}{2}h^2 f'' + \tfrac{1}{6}h^3 f'''\big) - \\ &\qquad \big(f - hf' + \tfrac{1}{2}h^2 f'' - \tfrac{1}{6}h^3 f'''\big)\Big]/(2h) \\ &= f' + O(h^2 f''')\end{aligned}$$

השיטה הסימטרית נותנת דיוק בסדר אחד גבוה יותר.

נגזרות נומריות

שגיאת קיצוץ: $e_t \sim h^2 f'''$

שגיאת עיגול: (כמו קודם) $e_r \sim \epsilon_f f(x)/h$

שתי השגיאות שוות כש- $h \sim \left(\frac{\epsilon_f f}{f'''}\right)^{1/3} \sim \epsilon_f^{1/3} x$

אותה תוצאה (בסדר גודל) מקבלים ממינימיזציה של השגיאה:

$$\frac{de_{\text{tot}}}{dh} = 2hf''' - \frac{\epsilon_f f}{h^2} = 0$$

השגיאה המינימאלית, ב-h האופטימאלי, היא:

$$\epsilon_{f'} = \frac{e_{\text{tot}}}{f'} \sim \frac{\frac{\epsilon_f f}{\epsilon_f^{1/3} x}}{f/x} \sim \epsilon_f^{2/3}$$

השיטה הסימטרית נותנת דיוק יותר גבוה, אבל לא בהרבה, כיוון שעדיין צריך להתמודד עם שגיאת העיגול הגדולה. באופן כללי, נגזרות נומריות הם מקרה קיצוני שבו שגיאת העיגול חשובה במיוחד, כיוון שכל השיטות בנויות על פעולת חיסור של שני מספרים כמעט שווים.

נגזרות נומריות

עכשיו נוסיף טריק שחשוב להשתמש בו בכל שיטה לחישוב נגזרות נומריות.
אחרי שבוחרים את h לפי ניתוח השגיאות, מכוונים אותו כך:

$$\mathrm{temp} = \mathrm{x} + \mathrm{h};$$
$$\mathrm{donothing}(\mathrm{temp});$$
$$h = \mathrm{temp} - \mathrm{x};$$

קוראים לפונקציה ריקה, כדי למנוע את הסרת השורות האחרות ע"י האופטימיזציה של הקומפיילר.

הרעיון: למנוע שגיאת עיגול גדולה כשמוסיפים h קטן ל-x גדול.
דוגמא: נחשב את $\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$ עם הנתונים:

$$f(x) = x, \quad x = 1, \quad h = 0.1$$

בשביל לחסוך כתיבה, נדמיין מחשב ששומר רק 5 ספרות בינאריות, פלוס חזקה של 2:

הערך:	x=1	h=0.1	x+h=1.1
כמספר בינארי:	1.	0.000110011…	1.000110011…
5 ביטים וחזקה:	$1. \times 2^0$	1.1001×2^{-4}	1.0001×2^0

נגזרות נומריות

בגלל הדיוק המוגבל של המחשב (5 ביטים בדוגמא הזאת), כשמוסיפים את h הקטן ל-x הגדול, מאבדים ספרות דיוק ב-h.

לכן, חישוב ישיר (בלי הטריק) נותן (עם שימוש במספרים בינאריים):

$$(x+h)-x = 1.0001 \times 2^0 - 1. \times 2^0 = 1. \times 2^{-4}$$

ואז:

$$\frac{(x+h)-x}{h} = \frac{1.\times 2^{-4}}{1.1001\times 2^{-4}} \simeq \frac{1}{1\frac{1}{2}} = \frac{2}{3}$$

זו שגיאה עצומה! (33%)

עכשיו, חישוב עם הטריק:

$$\text{temp} = x + h = 1.0001 \times 2^0$$

$$h = \text{temp} - x = 1. \times 2^{-4}$$

ועכשיו, עם ה-h החדש:

$$(x+h)-x = 1.0001 \times 2^0 - 1. \times 2^0 = 1. \times 2^{-4}$$

ולכן מקבלים דיוק מלא:

$$\frac{(x+h)-x}{h} = \frac{1.\times 2^{-4}}{1.\times 2^{-4}} = 1$$

נגזרות נומריות

<u>מסקנה:</u> כיוון שעלולה להיות שגיאת עיגול גדולה ב-h כשמוסיפים אותו ל-x, אז קודם מורידים את השגיאה הזאת מ-h, ואז משתמשים ב-h החדש שקיבלנו. זה לא משנה ששינינו קצת את h. מה שחשוב זה שעכשיו h יהיה אותו מספר במונה ובמכנה, ללא שגיאת עיגול נוספת במונה.

דוגמא: (עם דיוק כפול) $f(x) = \sin(x) \quad x = 1 \quad \epsilon_f = 10^{-16}$

שיטה ראשונה (נדגים עם h הלא נכון): $h = 10^{-12}$

הערכת השגיאה היחסית: $\dfrac{hf'' + \frac{\epsilon_f f}{h}}{f'} \sim 10^{-12} + \dfrac{10^{-16}}{10^{-12}} \sim 10^{-4}$

השגיאה שהתקבלה במחשב:

<u>עם הטריק:</u> $\epsilon_{f'} = 10^{-5}$

<u>בלי הטריק:</u> $\epsilon_{f'} = 8 \times 10^{-5}$

עם ה-h הנכון: $h \sim \sqrt{\epsilon_f}\, x \sim 10^{-8}$

נגזרות נומריות

הערכת השגיאה היחסית:

$$\sqrt{\epsilon_f} \sim 10^{-8}$$

השגיאה שהתקבלה במחשב (עם הטריק):

$$\epsilon_{f'} = 2 \times 10^{-10}$$

שיטה שנייה (עם ה-h הנכון):

$$h \sim \epsilon_f^{1/3} x \sim 5 \times 10^{-6}$$

הערכת השגיאה היחסית:

$$\epsilon_f^{2/3} \sim 2 \times 10^{-11}$$

השגיאה שהתקבלה במחשב:

$$\epsilon_{f'} = 4 \times 10^{-12}$$

סיכום של הדוגמא: אם לוקחים נגזרת נומרית נאיבית, עם ה-h הלא נכון וללא הטריק, מקבלים דיוק גרוע (8.e-5). בדוגמא זו, הטריק משפר את הדיוק בסדר גודל, שימוש ב-h הנכון משפר בעוד חמישה סדרי גודל, ושימוש בשיטה היותר טובה (הסימטרית) עם ה-h הנכון משפר בעוד שני סדרי גודל.