Skaitinių metodų įvadas. Integravimas.

Motyvacija

- **Skaičiavimo metodai taikomi fizikoje, chemijoje, kituose moksluose;**
- **„Skaitinis eksperimentas“ leidžia sumažinti kaštus palyginus su realiuoju eksperimentu;**
- **Kartais skaitinis modeliavimas yra „vienintelė išeitis“, nes realusis eksperimentas nėra įmanomas**
- **...**

Skyriai

- **Tiesinių lygčių sistemų sprendimas;**
- **Matricų tikrinių reikšmių ir vektorių radimas;**
- **Netiesinių lygčių ar l. sistemų sprendimas;**
- **Skaitinis integravimas;**
- **Dif. lygčių ir sistemų sprendimas;**
- **Aproksimacijos uždaviniai;**
- **Interpoliacijos uždaviniai;**
- **Optimizavimo užsdaviniai;**
- **Skaičiuojamosios statistikos uždaviniai;**
- **...**

Pavyzdys

- **Kaip rasti sqrt(2), jei galima naudoti tik +, -, *, / ?**
- **Algoritmas (Babilono) :**

```
eps = 0.0000000000001 // :)
X = 2
While ( |  X * X – 2 | > eps )
     X = (X + 2 / X) / 2
```

Payvyzdys

Raskite sqrt(2) su tikslumu 0.01

(rodome su knygele)

Bendros sąvokos

- **Diskretizacija: sk. metoduose vietoje tolydžių funkcijų naudojami jų reikšmės tam tikruose taškuose. Toks pavertimas ir vadinasi diskretizavimu;**
- **Apvalinimo klaidos – tai klaidos, kurios atsiranda dėl to, kad realieji skaičiai kompiuteryje turi baigtinį skaičių bitų;**
- **Metodo klaidos – tai klaidos, kurios atsiranda dažniausiai dėl diskretizacijos**

Bendros sąvokos

- **Stabilumas. Tai skaičiavimo metodo savybė „nedidinti“ paklaidos**
- **Ši savybė priklauso nuo konteksto**
- **Pavyzdys:**
  - Herono formulė: trikampio plotą galima skaičiuoti pagal formule sqrt(p*(p-a)*(p-b)*(p-c)), kurioje a,b,c – kraštinės, o p yra (a+b+c)/2
    - Kai trikampyje yra labai mažas kampas, tai šios formulės tikslumas tampa labai prastas (išbandykite tai: parašykite atitinkamą algoritmą).

...tęsinys

Stabili formulė turi atrodyti taip:

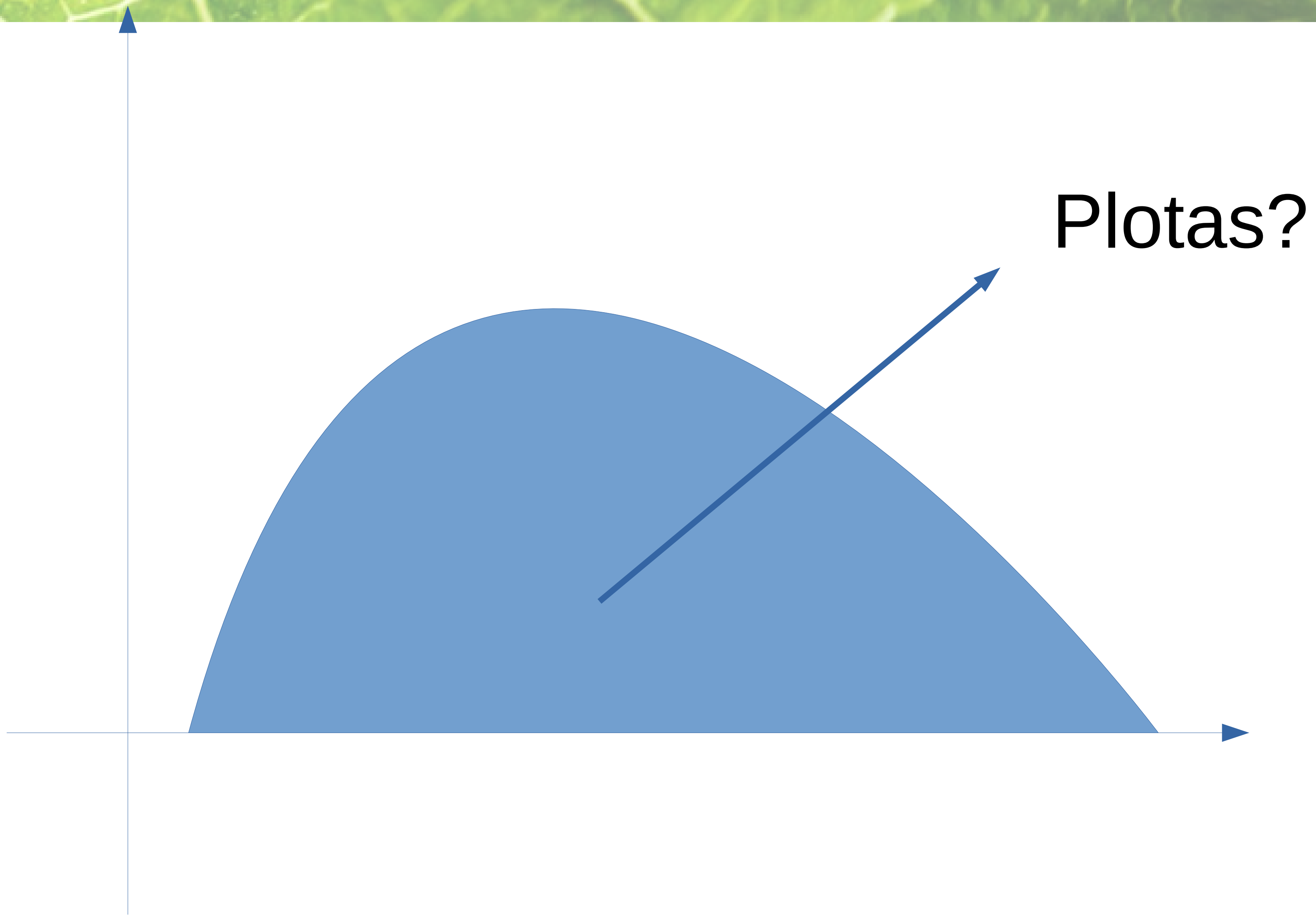
$$\frac{1}{4}\sqrt{(a+(b+c))(c-(a-b))(c+(a-b))(a+(b-c))}$$

Skliaustai svarbūs

Pastaba. Svarbu surikiuoti kraštines: $a \geq b \geq c$

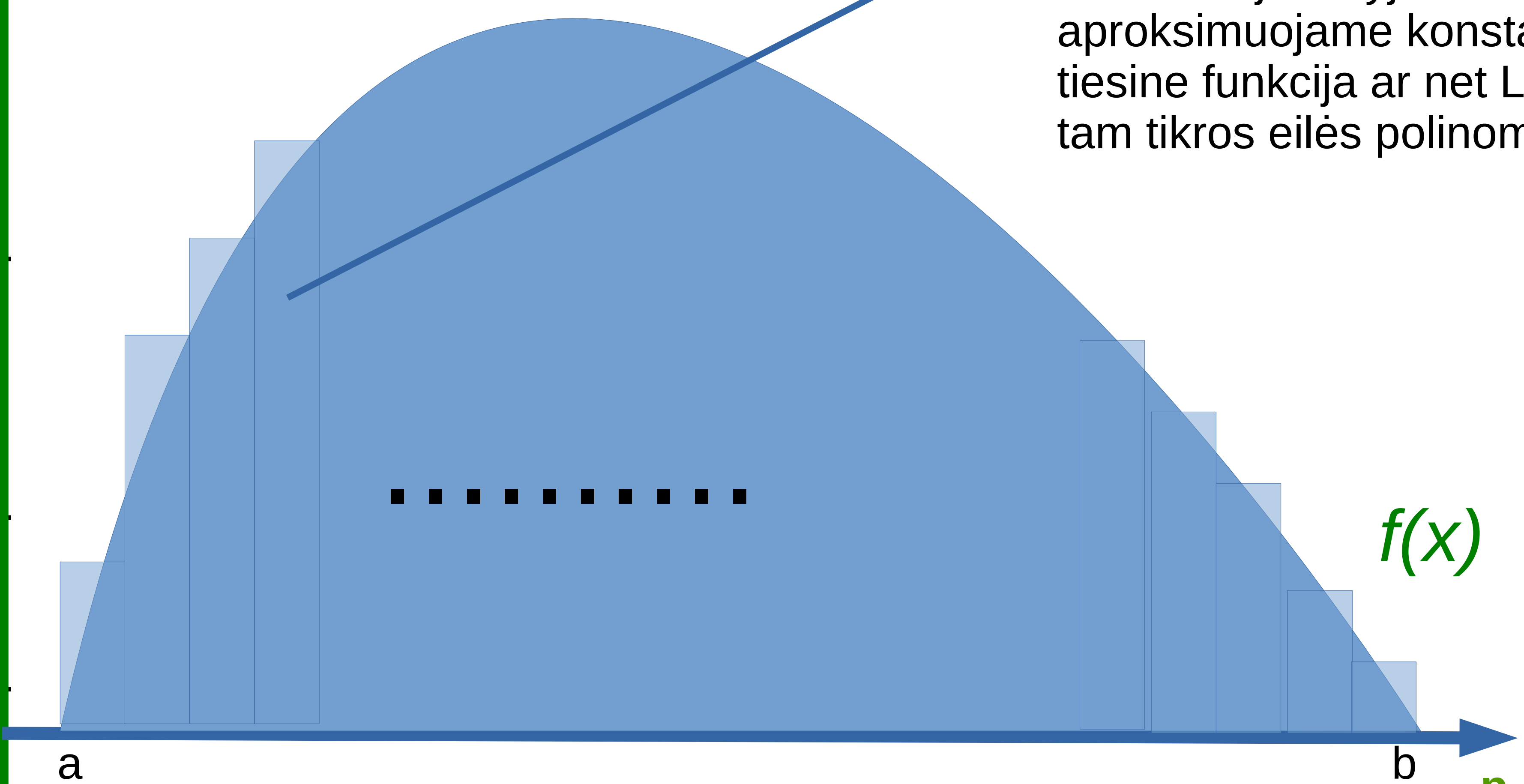
Kai kurie skaičiavimo metodų skyreliai

Skaitinis integravimas

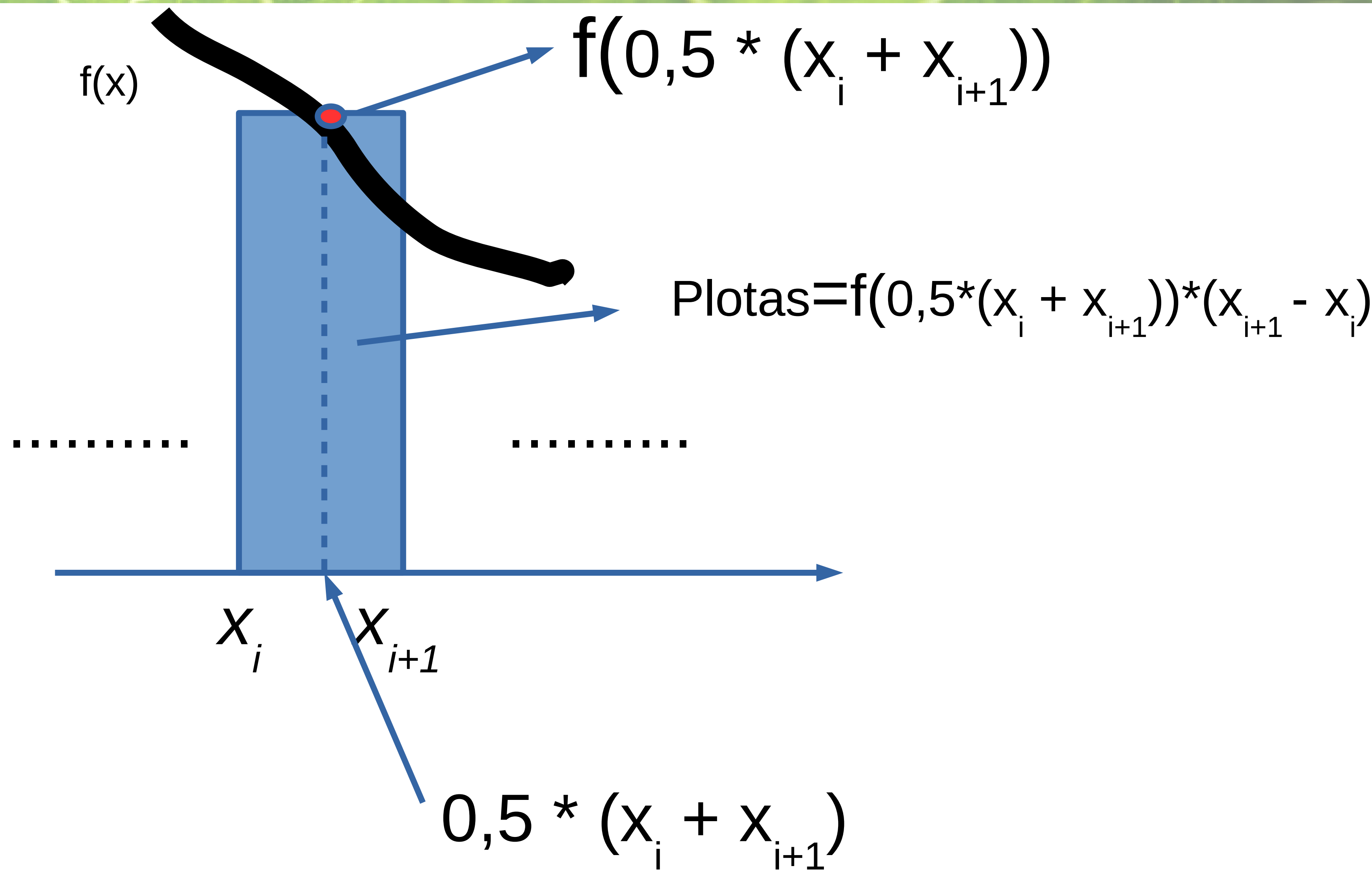


Idėja

Daliname intervalą [a,b] į N (lygių) dalių.
Kiekvienoje dalyje funkciją aproksimuojame konstanta, tiesine funkcija ar net Lagranžo tam tikros eilės polinomu



Viduriniųjų stačiakampių metodas



Viduriniųjų stačiakampių formulė visam intervalui

- **Tarkime, kad intervalą [a,b] padalinome į N lygių dalių. Tada turime N taškų:**

  { a+0,5h, a+1,5h,..., a+(N-0,5)h},

  kur h yra (b-a)/N. Tada:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} f(a+(i+\frac{1}{2})h)\cdot h$$

Kairiųjų stačiakampių formulė visam intervalui

- **Tarkime, kad intervalą [a,b] padalinome į N lygių dalių. Tada turime N taškų:**

  { a,a+h, a+2h,..., a+(N-1)h},

  kur h yra (b-a)/N.

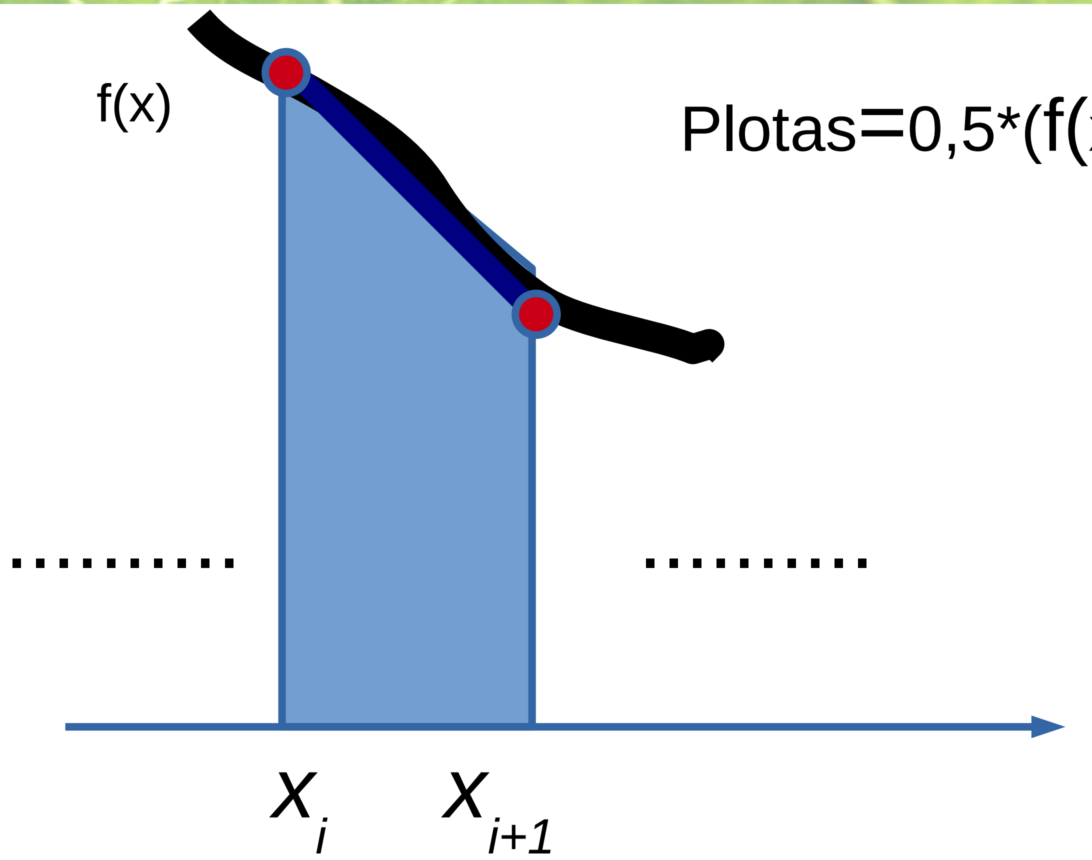
Dešiniųjų stačiakampių formulė visam intervalui

- **Tarkime, kad intervalą [a,b] padalinome į N lygių dalių. Tada turime N taškų:**

  { a+h, a+2h,..., a+Nh},

  kur h yra (b-a)/N.

Trapecijų metodas



Plotas$=0{,}5*(f(x_i)+f(x_{i+1}))*(x_{i+1} - x_i)$

Trapecijų formulė visam intervalui

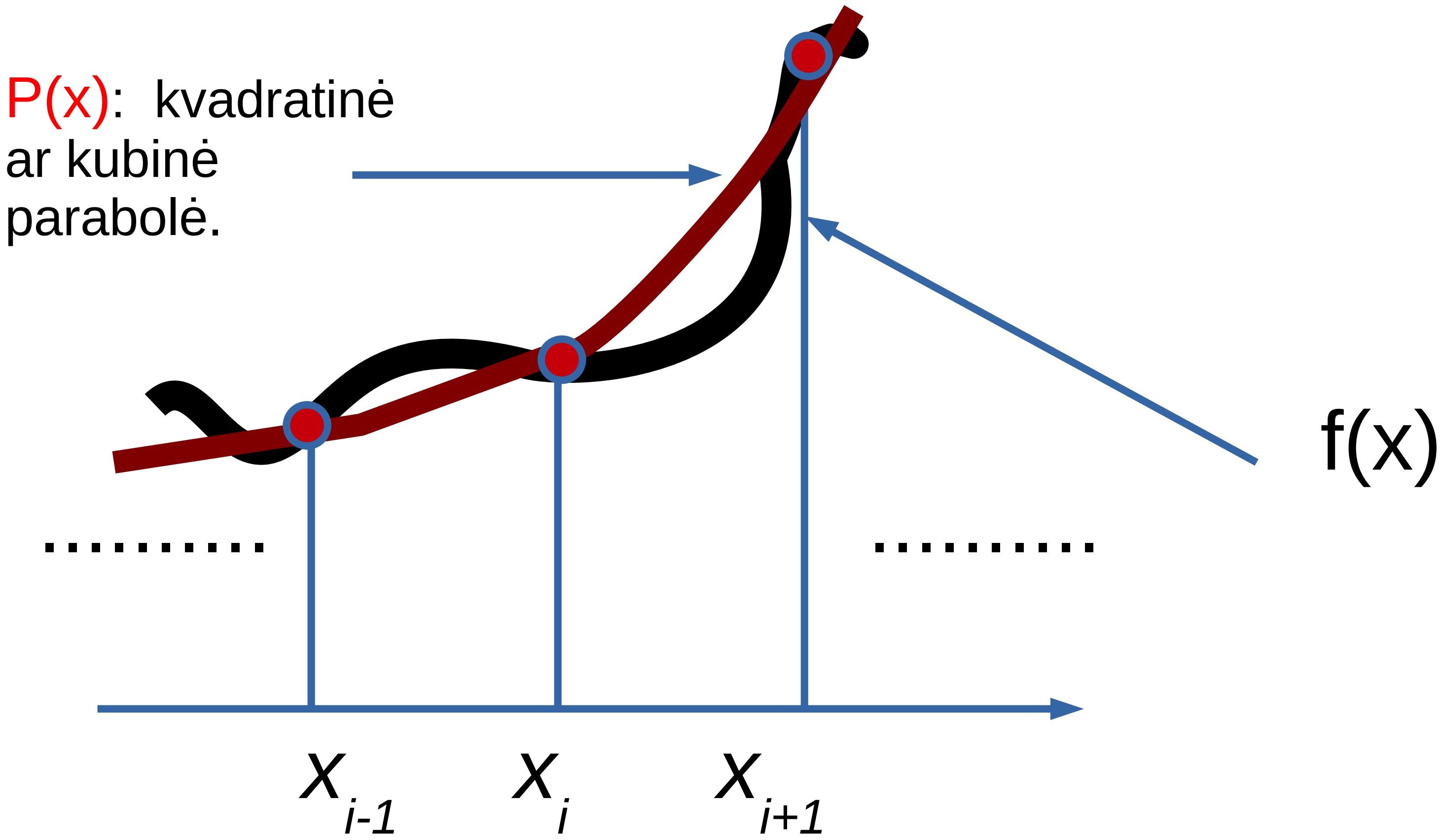
- **Tarkime, kad intervalą [a,b] padalinome į N lygių dalių. Tada turime N+1 tašką:**

  {a, a+h, a+2h,..., a+(N-1)h, b},

  kur h yra (b-a)/N. Tada:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \left[f(a) + 2 \cdot \sum_{i=1}^{N-1} f(a+ih) + f(b) \right] h$$

Simpsono formulė



$$Plotas = 0{,}5 * (f(x_i) + f(x_{i+1})) * (x_{i+1} - x_i)$$

Simpsono formulė

$$P(x) = f(x_{i-1})L_{i-1}(x) + f(x_i)L_i(x) + f(x_{i+1})L_{i+1}(x)$$

$$L_{i-1}(x) = \frac{(x - x_i)(x - x_{i+1})}{(x_{i-1} - x_i)(x_{i-1} - x_{i+1})}$$

$$L_i(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_{i+1})}{(x_i - x_{i-1})(x_i - x_{i+1})}$$

$$L_{i+1}(x) = \frac{(x - x_{i-1})(x - x_i)}{(x_{i+1} - x_{i-1})(x_{i+1} - x_i)}$$

Naudojame Lagranžo polinomą

Praeita skaidrė, naudosime kvadratinę parabolę

Simpsono formulė

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} f(x)dx \approx \int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P(x)dx$$

$$x_i = x_{i-1} + h$$

$$x_{i+1} = x_{i-1} + 2h$$

Tariame, kad intervalas padalintas į lygias dalis

$$\int_{x_{i-1}}^{x_{i+1}} P(x)dx = \frac{h}{3} \cdot [f(x_{i-1}) + 4f(x_i) + f(x_{i+1})]$$

Tai tiksli formulė, nes kvadratinė funkcija lengvai integruojama

Simpsono formulė

- **Paprastai, taikant Simpsono formulę, ima lyginį (lygių) dalių skaičių. Tada**

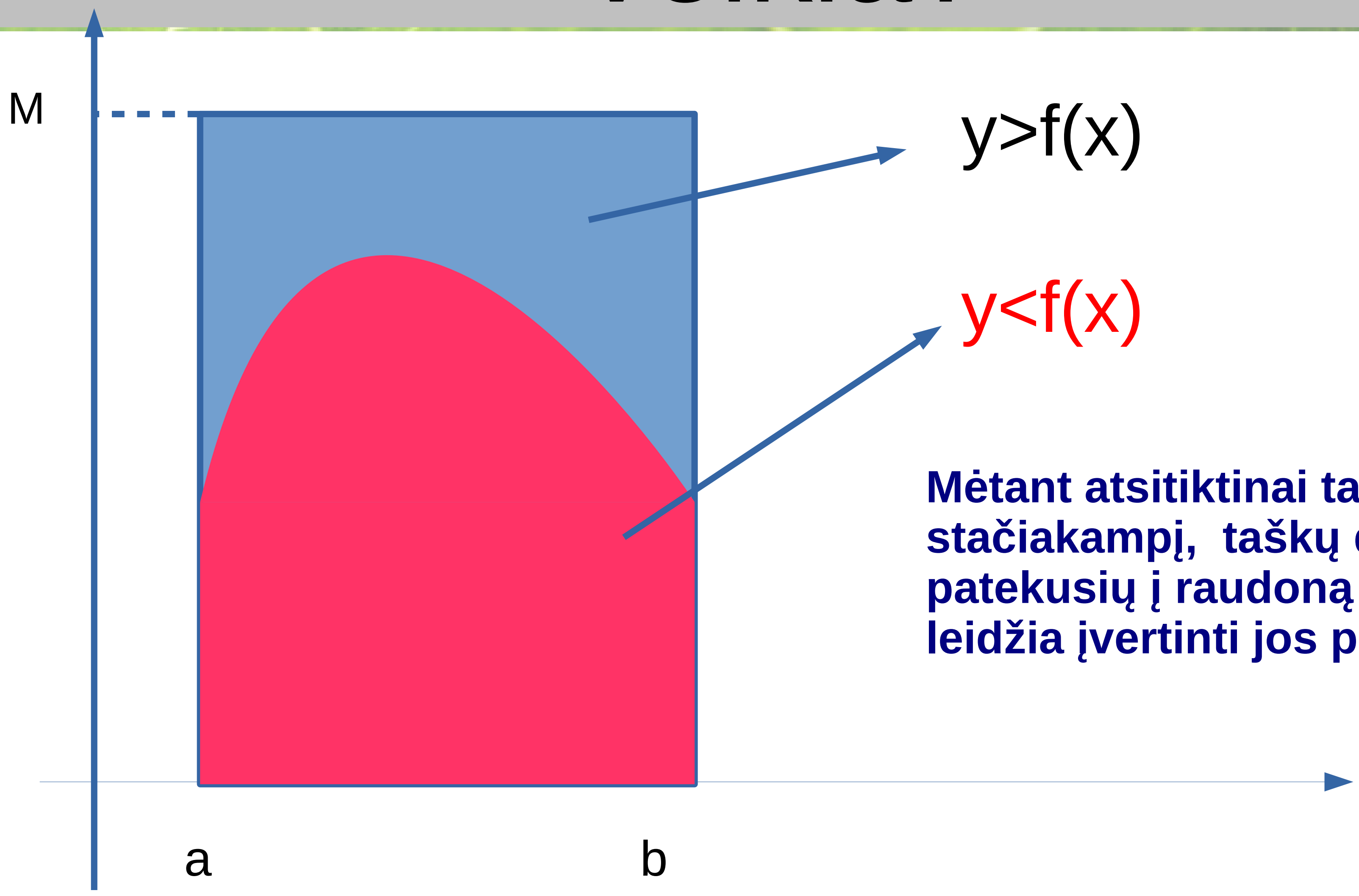
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\Big[f(x_0)+4f(x_1)+2f(x_2)+4f(x_3)+2f(x_4)+\cdots+4f(x_{n-1})+f(x_n)\Big]$$

Monte-Karlo metodas

- **Tarkime M > f(x) > 0 intervale [a,b]. Paimkime N - „pakankamai“ didelį skaičių. Tada galima naudoti tokį algoritmą integralui nuo f(x) intervale [a,b] rasti:**

```
I := 1
Pataikėme := 0
while (I < N) do
   x:= atsitiktinis skaičius iš [a,b]
   y:= atsitiktinis skaičius iš [0,M]
   If y<f(x) then Pataikėme :=  Pataikėme + 1
   I := I + 1
End while
Integralas := (b-a) * M * Pataikėme / N
```

Kodėl Monte-Karlo metodas veikia?



Mėtant atsitiktinai taškus į stačiakampį, taškų dalis patekusių į raudoną figūrą, leidžia įvertinti jos plotą

Pratimas/pavyzdys

Bandome rašyti kodą MC metodui

Laboratorinio darbo Nr. 1 užduotis 2

- **Sukurkite google *colab* aplinkoje knygelę, kurioje skaičiuojamas Jums duotasis integralas, priklausantis nuo parametro duotajame intervale ir duotajame parametrų reikšmių intervale pagal trapecijų ir Simpsono formules. Nupieškite integralo priklausomybių grafikus nuo parametrų.**

Variantai

Lab. darbo variantai:

1. $\int_0^1 \sin(\pi x + \alpha)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
2. $\int_0^1 \cos(\pi x + \alpha)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
3. $\int_0^1 \sin(\alpha x + \pi)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
4. $\int_0^1 \cos(\alpha x + \pi)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
5. $\int_0^1 \exp(\alpha x + 1)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
6. $\int_0^1 \exp(-\alpha x + 1)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
7. $\int_0^1 \exp(-2\alpha x + 1)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
8. $\int_0^1 \sin(-\alpha x + \frac{\pi}{3})dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
9. $\int_0^1 \cos(-\alpha x + \frac{\pi}{6})dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
10. $\int_0^1 \sin^2(-\alpha x)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
11. $\int_0^1 \cos^2(-\alpha x)dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$
12. $\int_0^1 \sin(-\alpha x)\cos x dx, \alpha \in \{0, 0.01, 0.02, \cdots, 1.0\}$