Cvičení 10 - zadání a řešení úloh

Základy numerické matematiky - NMNM201 Verze z 21. listopadu 2023

1 Optimalizace

Na přednášce zaznělo několik metod, jak najít

$$\bar{x} = \underset{x \in M}{\operatorname{argmin}} f(x),$$

kde $f : \mathbb{R}^n \to \mathbb{R}$ a $M \subset \mathbb{R}^n$. Na cvičení z nich probereme jen jednu a to metodu zlatého řezu.

1.1 Metoda zlatého řezu

Metoda zlatého řezu funguje na principu bisekce. Na intervalu, na kterém chceme najít minimum, zvolíme dva body. Pomocí jejich funkčních hodnot zvolíme menší interval, na kterém budeme minimum funkce hledat.

Algorithm 1 Metoda zlatého řezu

Require: f, a_0, b_0
  $a = a_0$, $b = b_0$
  $\rho = \frac{3-\sqrt{5}}{2}$
  for $k = 1, \ldots$ **do**
    $u = a + \rho(b - a)$
    $v = b - \rho(b - a)$
    if $f(u) < f(v)$ **then**
      $b = v$
    else
      $a = u$
    end if
  end for

Úloha 1. *Pomocí Algoritmu 1 napište funkci v MATLABu na hledání minima metodou zlatého řezu.* (Navíc) *Metoda zlatého řezu byla navržena tak, aby bylo možné použít výsledky z předchozích iterací. Zkuste funkci naprogramovat tak, aby bylo potřeba vyhodnocovat co nejméně funkčních hodnot.*

Řešení.

```
function [x,fx] = zlaty_rez(f,a,b,max_it)
  rho = (3-sqrt(5))/2;
  u = a+rho*(b-a); v = b-rho*(b-a);
  fa = f(a); fb = f(b); fu = f(u); fv = f(v);
  for k = 1:max_it
    if fu<fv
      b = v; fb = fv;
      v = u; fv = fu;
      u = a+rho*(b-a); fu = f(u);
    else
      a = u; fa = fu;
      u = v; fu = fv;
      v = b-rho*(b-a); fv = f(v);
    end
  end
```

```
  points = [a,b,u,v];
  [fx,i] = min([fa, fb, fu, fv]);
  x = points(i);
end
```
□

Úloha 2. *Pomocí funkce z Úlohy 1 zkoumejte nalezení minima následujících funkcí s daným počátečním intervalem:*

a) $f(x) = x^2$, $a = -1$, $b = 1$,

b) $f(x) = \sin(x)$, $a = -3$, $b = 6$,

c) $f(x) = \sin(x)$, $a = -3$, $b = 10$,

d) $f(x) = 1.2 + x^2 - x - e^{-x}$, $a = -3$, $b = 3$.

Na každou úlohu použijte 50 iterací. Pozorujte volbu bodů u a v. Bylo nalezeno skutečně minimum funkce?

Řešení. Úlohy a) - c) naleznou minimum. V úloze d) konvergujeme k lokálnímu minimu, ale nejedná se o globální minimum na intervalu $[-3,\ 3]$. Úlohy b) a c) pokaždé konvergují k jinému minimu. □

2 Ortogonální polynomy

Ortogonální polynomy jsou důležité funkce v numerické matematice. Aplikaci nalezneme v mnoha metodách. Důležité nejsou pouze samotné funkce, ale i jejich kořeny.

2.1 Legendrovy polynomy

Nejznámější ortogonální polynomy jsou tzv. *Legendrovy polynomy* na $[-1, 1]$ odpovídající skalárnímu součinu $(f, g) = \int_{-1}^{1} f g \, dx$. Získat je můžeme pomocí Gram-Schmidtovy ortogonalizace polynomů $1, x, x^2, x^3, \ldots, x^n$. Lze je také vyjádřit rekurentním vztahem:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_0(x) &= 1, \\
\mathcal{L}_1(x) &= x, \\
\mathcal{L}_{n+1}(x) &= \frac{2n+1}{n+1}\, x\, \mathcal{L}_n(x) - \frac{n}{n+1}\, \mathcal{L}_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \ldots
\end{aligned}$$

Úloha 3. *Spočtěte $\mathcal{L}_2$ jak pomocí Gram-Schmidtovy ortogonalizace, tak pomocí 3-členné rekurence. Liší se polynomy? Liší se jejich kořeny?*

Řešení. Legendrovy polynomy pomocí Gram-Schmidta:

$$\begin{aligned}
q_0(x) &= \frac{1}{\|1\|} = \frac{\sqrt{2}}{2}, \\
q_1(x) &= \frac{x - (x, q_0)\, q_0}{\|\ldots\|} = \frac{x - 0}{\|x\|} = \frac{\sqrt{6}}{2}\, x, \\
q_2(x) &= \frac{x^2 - (x^2, q_0)\, q_0 - (x^2, q_1)\, q_1}{\|\ldots\|} = \frac{x^2 - \frac{1}{3} - 0}{\|x^2 - \frac{1}{3}\|} = \frac{\sqrt{40}}{8} \left(3x^2 - 1\right).
\end{aligned}$$

Legendrovy polynomy pomocí rekurence:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_0(x) &= 1,\\
\mathcal{L}_1(x) &= x,\\
\mathcal{L}_2(x) &= \frac{3}{2}x\,\mathcal{L}_1 - \frac{1}{2}\,\mathcal{L}_0 = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}\left(3x^2 - 1\right).
\end{aligned}$$

Polynomy spočítané Gram-Schmidtovou ortogonalizací a rekurencí se liší o násobení skalárem. Kořeny se v závislostí na výpočet nemění. □

Pro numerický výpočet zadaného integrálů na intervalu (a, b) musíme buď spočíst Gram-Schmidtovu ortogonalizaci na intervalu (a, b), nebo, což je v praxi obvyklejší postup, přeškálovat Legendrovy polynomy na zadaný interval.

Úloha 4. *Pomocí přeškálování $\mathcal{L}_2$ (odvozeného rekurentně) z Úlohy 3 odvoďte Legendrovo polynom na intervalu $[2, 8]$. Normu zachovat nepotřebujeme.*
[Hint: Najděte předpis lineární funkce, která bod -1 zobrazí do 2 a bod 1 zobrazí do 8.]

Řešení. Hledáme tedy afinní funkci $f(x) = ax + b$, která správně zobrazí krajní body intervalu. Dostáváme:

$$\begin{aligned}
\widetilde{x} &= 3(x + 1) + 2 = 3x + 5\\
x &= \frac{\widetilde{x} - 5}{3}.
\end{aligned}$$

Tedy

$$\widetilde{\mathcal{L}_2}(\widetilde{x}) = \mathcal{L}_2\left(\frac{\widetilde{x} - 5}{3}\right) = \frac{1}{2}\left(3\left(\frac{\widetilde{x} - 5}{3}\right)^2 - 1\right) = \frac{1}{6}\left((\widetilde{x} - 5)^2 - 3\right) = \frac{1}{6}\left(\widetilde{x}^2 - 10\widetilde{x} + 22\right)$$

□

Úloha 5 (Navíc)**.** *Dokážete napsat rekurentní vzorec pro Legendrovo polynom na intervalu $[a, b]$?*

Řešení. Obecný vzorce pro přeškálování z intervalu $[-1, 1]$ na interval $[a, b]$ lze zapsat takto:

$$\begin{aligned}
\widetilde{x} &= \frac{b - a}{2}(x + 1) + a\\
x &= \frac{\widetilde{x} - \frac{b+a}{2}}{\frac{b-a}{2}} = \frac{2\widetilde{x} - (b + a)}{b - a}.
\end{aligned}$$

Tedy

$$\begin{aligned}
\widetilde{\mathcal{L}_0}(\widetilde{x}) &= 1,\\
\widetilde{\mathcal{L}_1}(\widetilde{x}) &= \frac{2\widetilde{x} - (b + a)}{b - a},\\
\widetilde{\mathcal{L}_{n+1}}(\widetilde{x}) &= \frac{2n + 1}{n + 1}\,\frac{2\widetilde{x} - (b + a)}{b - a}\,\widetilde{\mathcal{L}_n}(\widetilde{x}) - \frac{n}{n + 1}\,\widetilde{\mathcal{L}_{n-1}}(\widetilde{x}), \quad n = 1, 2, \ldots
\end{aligned}$$

□

2.2 Chebyshevovy polynomy

Dalšími používanými ortogonálními polynomy jsou tzv. *Chebyshevovy polynomy* na $[-1,1]$ odpovídající skalárnímu součinu

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

Vyjádřit je můžeme ve tvaru:

$$T_n(x) = \cos\left(n \arccos x\right), \quad n = 0, 1, \ldots$$

Úloha 6. *Ukažte, že funkce T_n je opravdu polynom stupně n.*
[Hint: Zkuste odvodit rekurentní vztah pro výpočet Chebyshevova polynomu T_{n+1}.]
[Hint: S použitím součtových vzorců vyjádřete $\cos(\alpha+\beta)+\cos(\alpha-\beta)$ a vhodně dosaďte za α a β.]

Řešení. Napřed si uvědomíme, že:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= \cos(0) = 1, \\ T_1(x) &= \cos(\arccos x) = x. \end{aligned}$$

První dva členy jsou tedy polynomy stupně 0 a 1.
Budeme chtít upravovat výraz $\cos(\alpha+\beta)+\cos(\alpha-\beta)$ pomocí součtových vzorců:

$$\begin{aligned} \cos(\alpha+\beta)+\cos(\alpha-\beta) &= [\cos(\alpha)\cos(\beta)-\sin(\alpha)\sin(\beta)] + [\cos(\alpha)\cos(\beta)+\sin(\alpha)\sin(\beta)] \\ &= 2\cos(\alpha)\cos(\beta). \end{aligned}$$

Budeme substituovat $\alpha = n\arccos(x)$ a $\beta = \arccos(x)$. Potom dostaneme:

$$\begin{aligned} \cos((n+1)\arccos(x)) + \cos((n-1)\arccos(x)) &= 2\cos(n\arccos(x))\cos(\arccos(x)) \\ T_{n+1}(x) + T_{n-1}(x) &= 2x\,T_n(x) \\ T_{n+1}(x) &= 2x\,T_n(x) - T_{n-1}(x). \end{aligned}$$

Dostali jsme tak rekurentní zápis pro výpočet dalších funkcí. Důkaz, že se jedná o polynom stupně n provedeme indukcí. První dva členy jsme již ověřili. Nechť T_{n-1} a T_n jsou polynomy stupně $n-1$, respektive n. Potom nutně $2x\,T_n(x)$ je polynom stupně $n+1$. Odečtením polynomu stupně $n-1$ ale stále musí být výsledný polynom stupně $n+1$. Tím jsme ukázali, že T_{n+1} je polynom stupně $n+1$. □

V Úloze 6 jsme odvodili rekurentní vztah pro vyjádření Chebyshevových polynomů:

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1, \\ T_1(x) &= x, \\ T_{n+1}(x) &= 2x\,T_n(x) - T_{n-1}(x), \quad n = 1, 2, \ldots \end{aligned}$$

V případě ortogonálních polynomů nás často zajímají jejich kořeny a body extrému. Chebyshevovy polynomy mají pro obojí vzorec, jak dané body spočíst.

Úloha 7. *Ukažte, že pro T_n jsou:*

a) jeho kořeny ve tvaru

$$x_k = \cos\left(\frac{(2k-1)\,\pi}{2n}\right), \quad k = 1, \ldots, n.$$

b) jeho extrémy ve tvaru

$$x_k = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right), \quad k = 0, \ldots, n.$$

Řešení. a) Budeme chtít spočítat rovnici $T_n(x) = 0$.

$$\begin{aligned}
\cos(n \arccos x) &= 0 \\
n \arccos x &= \frac{\pi}{2} + k\pi \\
n \arccos x &= \frac{(2k+1)\pi}{2} \\
x &= \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{2n}\right),
\end{aligned}$$

kde $k \in \mathbb{Z}$. Protože chceme každý kořen jen jednou a k můžeme posunout tak, aby jsme ho volili z množiny bodů $\{1, \ldots, n\}$, dostaneme vzorec pro kořen ve tvaru

$$x_k = \cos\left(\frac{(2k-1)\pi}{2n}\right), \quad k = 1, \ldots, n.$$

b) Jsou dva způsoby. Buďto zderivujeme funkci $T_n(x)$ a zjistíme jeho extrémy (a ověříme krajní body intervalu $[-1, 1]$) a nebo budeme zkoumat vlastnosti funkce $T_n(x)$. My zvolíme druhou variantu. Z definice T_n víme, že $T_n([-1, 1]) \subseteq [-1, 1]$. Tedy pokud funkce nabývá hodnot ± 1, jsou tyto body extrémem. Vyřešíme napřed $T_n(x) = 1$.

$$\begin{aligned}
\cos(n \arccos x) &= 1 \\
n \arccos x &= 2k\pi \\
x &= \cos\left(\frac{2k\pi}{n}\right),
\end{aligned}$$

kde $k \in \mathbb{Z}$. To samé provedeme pro $T_n(x) = -1$.

$$\begin{aligned}
\cos(n \arccos x) &= -1 \\
n \arccos x &= \pi + 2k\pi \\
x &= \cos\left(\frac{(2k+1)\pi}{n}\right),
\end{aligned}$$

kde $k \in \mathbb{Z}$. Protože $2k$ jsou všechna sudá a zároveň $2k - 1$ jsou pro změnu všechna lichá čísla, můžeme místo nich psát pouze k (pro k sudé nabýváme hodnoty 1, pro k liché nabýváme hodnoty -1). Protože chceme každý extrém jen jednou, dostaneme vzorec pro extrém ve tvaru

$$x_k = \cos\left(\frac{k\pi}{n}\right), \quad k = 0, \ldots, n.$$

$\square$