Cvičení 12 - zadání a řešení úloh

Základy numerické matematiky - NMNM201 Verze z 19. prosince 2023

1 Numerická kvadratura

Kvadratura V původním významu slova (ve starověkém Řecku) šlo o nalezení Euklidovské konstrukce[1] čtverce o stejném obsahu jako daný geometrický objekt.

Geometrický význam určitého integrálu Výpočet obsahu plochy pod grafem funkce.

Numerická integrace pomocí kvadratur Na intervalu $[a, b]$ uvažujeme uzly $x_0 < x_1 < \ldots < x_n$, $x_i \in [a, b]$, dále uvažujeme váhy $\omega_0, \ldots, \omega_n$, kde $\omega_i \in \mathbb{R}$.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx Q(f) = \sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i).$$

Chybu budeme značit $E(f) = I(f) - Q(f)$.

1.1 Newton-Cotesovy kvadraturní formule

Jde o kvadraturu na ekvidistantním dělení intervalu $[a, b]$, tedy s volbou uzlů $a = x_0 < x_1 < \ldots < x_n = b$, kde $x_i = a + \frac{i}{n}(b-a)$, jež vzniká *přesnou* integrací Lagrangeova interpolačního polynomu $L_n(x)$ k funkci $f(x)$; $L_n \approx f$.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx \approx \int_a^b L_n(x)\,dx = \sum_{i=0}^{n} f(x_i) \underbrace{\int_a^b \prod_{j \neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\,dx}_{\omega_i} = Q(f)$$

Z vyjádření chyby Lagrangeovy interpolace plyne vyjádření chyby kvadraturní formule

$$E(f) = \int_a^b \frac{f^{(n+1)}(\xi(x))}{(n+1)!} \prod_{j=0}^{n} (x - x_j)\,dx.$$

Obdélníkové pravidlo: $n = 0$, volíme $x_0 = \frac{a+b}{2}$.
Obecný tvar kvadratury; odhad chyby (je-li $f \in C^1([a, b])$):

$$Q(f) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a); \qquad E(f) = \frac{1}{2} f'(\xi)(b-a)^2 \text{ pro } \xi \in [a, b].$$

Řád kvadratury je 1.

Lichoběžníkové pravidlo: $n = 1$, volíme $x_0 = a,\ x_1 = b$.
Obecný tvar kvadratury; odhad chyby (je-li $f \in C^2([a, b])$):

$$Q(f) = \frac{1}{2}(f(a) + f(b))(b-a); \qquad E(f) = -\frac{1}{12} f''(\xi)(b-a)^3 \text{ pro } \xi \in [a, b].$$

Řád kvadratury je 1.

[1] Euklidovská konstrukce: Konstrukce pomocí kružítka a pravítka (s jednou hranou, bez značek pro měření).

Simpsonovo pravidlo: $n = 2$, volíme $x_0 = a,\ x_1 = \frac{a+b}{2},\ x_2 = b$.

Obecný tvar kvadratury; odhad chyby (je-li $f \in C^4([a, b])$):

$$Q(f) = \frac{1}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)(b-a);$$
$$E(f) = \frac{1}{2880} f^{(4)}(\xi)\,(b-a)^5 \ \text{ pro } \xi \in [a, b].$$

Řád kvadratury je 3.

Úloha 1. *Aproximujte integrál* $\int_0^2 e^{-x^2}\,dx = 0.882081\ldots$ *pomocí obdélníkového, lichoběžníkového a Simpsonova pravidla.*

[Hint: Potřebujete-li, zaokrouhlete $e^{-1} \approx 0.37,\ e^{-2} \approx 0.14,\ e^{-3} \approx 0.05,\ e^{-4} \approx 0.02$.*]*

Řešení. Ze zadání víme, že $a = 0$ a $b = 2$. Obdélníkové pravidlo:

$$Q(f) = f\left(\frac{a+b}{2}\right)(b-a) = 2e^{-1} \approx 0.7358$$

Lichoběžníkové pravidlo:

$$Q(f) = \frac{1}{2}(f(a) + f(b))(b-a) = e^{-4} + 1 \approx 1.0183$$

Simpsonovo pravidlo:

$$Q(f) = \frac{1}{6}(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b))(b-a) = \frac{1}{3}(1 + 4e^{-1} + e^{-4}) \approx 0.8299$$

□

Úloha 2. *Libovolná Newton-Cotesova kvadratura na intervalu* $[a, b]$ *integruje přesně konstantní funkce. Využijte této vlastnosti k odvození vztahu pro součet vah.*

Řešení. Newton-Cotesova kvadratura integruje přesně konstanty, vypočítám si tedy jak integrál $I(1)$, tak kvadraturu $Q(1)$ a porovnáním dostanu vztah pro součet vah.

$$\sum_{i=0}^{n} \omega_i = Q(1) = I(1) = \int_a^b 1\,dx = b - a$$

□

Úloha 3. *Ukažte, že váhy libovolné Newton-Cotes kvadratury* $\sum_{i=0}^{n} \omega_i f(x_i)$ *jsou "symetrické", tedy že*

$$\omega_i = \omega_{n-i}.$$

[Hint: Začněte se svými úvahami na intervalu $[-1, 1]$. *Pro* $n = 2, 3$ *si nakreslete lagrangeovské bázové funkce. Uvažujte nad vzájemnou symetrií bázových funkcí. Zobecněte vaše úvahy pro libovolné* n *a na libovolný interval* $[a, b]$.*]*

Řešení. Obecná úvaha na intervalu $[-1, 1]$: Nakreslit si grafy lagrangeovských bázových funkcí. Pozorujeme, že dvojice lagrangeovských bázových funkcí jsou vždy vůči sobě symetrické dle osy y. Příslušné váhy se tedy musí rovnat (obsah plochy pod grafem se zrcadlením nezmění).

Zobecnění na obecný interval: příslušné lagrangeovské bázové funkce jsou symetrické podle osy procházející středem intervalu.

Pokud bychom symetrii lagr. bázových funkcí nevěřili, je možné ji formálně ukázat dosazením do vzorců a ukázáním, že $l_i(-x) = l_{n-i}(x)$.

Jiné zdůvodnění symetrie: lagr. bázové funkce jsou určeny body, kterými mají procházet. Ty body jsou symetrické. Protože polynomy jsou těmito body určeny jednoznačně, musí být jejich tvar stejný, jen zrcadlově otočený. □

Úloha 4. *Odvoďte Newton-Cotesovu formuli pro výpočet integrálu $\int_0^1 f(x)\,dx$ pro čtyři ekvidistantní uzly.*
[Hint: Za použití výsledků Úloh 2 a 3 si zkuste co nejvíce zjednodušit výpočty. Mělo by vám stačit vypočítat jeden integrál.]

Řešení. Uzly kvadratury budou $x_0 = 0$, $x_1 = 1/3$, $x_2 = 2/3$ a $x_3 = 1$.
Kvadraturu budeme hledat ve tvaru

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{3} \omega_i\, f(x_i), \text{ kde } \omega_i = \int_0^1 \underbrace{\prod_{j\neq i} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}}_{l_i(x)}\, dx.$$

Nejprve vypočítáme l_0 a ω_0:

$$\begin{aligned}
l_0 &= \frac{(x-1/3)(x-2/3)(x-1)}{-1/3(-2/3)(-1)} = \frac{-9}{2}\left(x^3 - 2x^2 + \frac{11}{9}x - \frac{2}{9}\right),\\
\omega_0 &= \int_0^1 l_0\,dx = \frac{-9}{2}\left[\frac{1}{4}x^4 - \frac{2}{3}x^3 + \frac{11}{18}x^2 - \frac{2}{9}x\right]_0^1 = \frac{1}{8}.
\end{aligned}$$

Dále z Úloh 2 a 3 víme, že $\sum_{i=0}^{3}\omega_i = 1$ a $\omega_0 = \omega_3$, $\omega_1 = \omega_2$. Jednoduchým dopočítáním máme tzv. Simpsonovo tří-osminové pravidlo:

$$Q(f) = \frac{1}{8}\,f(0) + \frac{3}{8}\,f(1/3) + \frac{3}{8}\,f(2/3) + \frac{1}{8}\,f(1).$$

□

Úloha 5 (Navíc)**.** *Nalezněte kvadraturní formuli tvaru*

$$\int_0^1 f(x)\,dx \approx \omega_0 f(0) + \omega_1 f(1),$$

která je přesná pro všechny funkce tvaru $\alpha e^x + \beta\cos(\pi x/2)$.

Řešení. Integrací dostaneme

$$\int_0^1 \alpha\, e^x + \beta\, \cos(\pi x/2)\,dx = \alpha\, e + \frac{2\beta}{\pi} - \alpha.$$

Dále $f(0) = \alpha + \beta$ a $f(1) = \alpha\, e$. Kvadratura musí být přesná pro funkce daného typu, tudíž

$$\begin{aligned}
\alpha(e-1) + \beta\frac{2}{\pi} &= \omega_0(\alpha+\beta) + \omega_1\alpha\, e\\
e - 1 &= \omega_0 + \omega_1\, e\\
\frac{2}{\pi} &= \omega_0.
\end{aligned}$$

Odtud dostaneme $\omega_0 = \frac{2}{\pi}$ a $\omega_1 = 1 - \frac{1}{e} - \frac{2}{\pi e}$. □

1.2 Gaussova kvadratura

Fakt, že pro některá rovnoměrná rozložení uzlů dostáváme přesnost o stupeň vyšší napovídá, že pro vhodně umístěné uzly může mít kvadratura vyšší algebraický stupeň. V Gaussově kvadratuře jsou uzly a váhy zvoleny tak, aby řád kvadratury byl maximální: pro $n+1$ uzlů $x_0, \ldots, x_n$ získáme maximální řád přesnosti $2n+1$ (tj. pro prostor dimenze $2n+2$).

Shrnutí myšlenky Gaussovy kvadratury: Nechť $f \in P_{2n+1}$, L_{n+1} je polynom stupně $n+1$ kolmý na P_n. Pak existují polynomy $q,\ r \in P_n$ tak, že platí $f(x) = L_{n+1}(x)q(x) + r(x)$ (dělení polynomu f polynomem L_{n+1} se zbytkem r).

Uvažujeme kvadraturu s uzly $x_0 \dots x_n$ odpovídajícími kořenům polynomu L_{n+1}. Víme, že kvadratura s $n+1$ uzly a vahami odpovídajícími integrálům lagrangeovým bázovým funkcím bude přesná alespoň pro P_n. Nyní rozepíšeme integrál a kvadraturu polynomu f:

$$
\begin{aligned}
I(f) &= \overbrace{\int L_{n+1}(x)q(x)}^{0 \text{ protože } L_{n+1} \perp P_n} + \int r(x) = \overbrace{I(r) = Q(r)}^{\text{přesná pro } P_n}, \\
Q(f) &= Q(L_{n+1}q) + Q(r) = \sum_{i=0}^{n} \omega_i \big(\underbrace{L_{n+1}(x_i)}_{0} q(x_i) + r(x_i) \big) = Q(r).
\end{aligned}
$$

Uzly $x_0, \dots, x_n$ už tedy nebudou ekvidistantní. Jak lze získat váhy kvadraturní formule?

Řešení.
- Váhy jsou integrály lagrangeových bázových funkcí.
- Kvadratura bude přesná pro P_n. Pro libovolnou bázi P_n získáme soustavu rovnic.

□

Úloha 6. *Odvoďte dvoubodovou Gaussovu kvadraturní formuli pro $\int_{-1}^{1} f(x)\,dx$. Tedy najděte x_0, x_1, ω_0 a ω_1 tak, aby kvadraturní formule $Q(f) = \omega_0\, f(x_0) + \omega_1\, f(x_1)$ byla přesná pro polynomy stupně nejvýše 3.*

Řešení. Máme $n = 1$, tj. hledáme kvadraturní formuli tvaru

$$Q(f) = \omega_0\, f(x_0) + \omega_1\, f(x_1).$$

Uzly x_0 a x_1 si zvolíme jako kořeny Legendrova polynomu $L_2(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$, tj.

$$
\begin{aligned}
\frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2} &= 0 \\
x &= \pm\frac{1}{\sqrt{3}} \quad => \quad x_0 = -\frac{1}{\sqrt{3}},\ x_1 = \frac{1}{\sqrt{3}},
\end{aligned}
$$

takže kvadraturu budeme hledat ve tvaru

$$Q(f) = \omega_0\, f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \omega_1\, f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right).$$

Jelikož $n = 1$, kvadratura má být přesná pro polynomy stupně nejvýše 3, proto k určení vah ω_0 a ω_1 postupně dosadíme za integrand $f = 1$ a $f = x$:

$$
\begin{aligned}
\int_{-1}^{1} 1\,dx &= 2 = \omega_0 + \omega_1, \\
\int_{-1}^{1} x\,dx &= 0 = \omega_0 \left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + \omega_1 \frac{1}{\sqrt{3}}.
\end{aligned}
$$

Odtud dostaneme

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{\sqrt{3}}\,\omega_0 + \frac{1}{\sqrt{3}}\,(2 - \omega_0) &= 0 \\
-2\omega_0 &= -2 \quad => \quad \omega_0 = 1,\ \omega_1 = 1.
\end{aligned}
$$

Hledaná kvadratura je $Q(f) = f\left(-\frac{1}{\sqrt{3}}\right) + f\left(\frac{1}{\sqrt{3}}\right)$. □

Pro numerický výpočet zadaného integrálů na intervalu (a, b) musíme pomocí lineární substituce buď převést zadaný integrál na integrál na intervalu $(-1, 1)$, nebo, což je v praxi obvyklejší postup, přeškálovat kvadraturní uzly a váhy.

Úloha 7. *Pomocí přeškálování uzlů a vah z Úlohy 6 odvoďte dvoubodovou Gaussovu kvadraturní formuli pro* $\int_2^8 f(x)\,dx$.
[Hint: Najděte předpis lineární funkce, která bod -1 *zobrazí do* 2 *a bod* 1 *zobrazí do* 8.*]*
[Hint: Využijte vlastnost, že součet všech vah je roven $b - a$.*]*

Řešení. Lze si rozmyslet, že když budeme počítat ortogonální polynomy L_{n+1} ortogonalizací $\{1, x, x^2, \dots\}$ na různých intervalech, budeme dostávat funkce, které se budou lišit pouze škálováním (budou vynásobené nějakým skalárem a roztažené na příslušný interval). Uzly se tedy transformují podle afinní transformace intervalu (posunutí plus lineární transformace), tedy se zachovávají poměry mezi úsečkami (poměry vzdáleností mezi uzly).
Hledáme tedy afinní funkci $f(x) = ax + b$, která správně zobrazí krajní body intervalu. Dostáváme:

$$\begin{aligned} \widetilde{x}_i &= 3(x_i + 1) + 2 = 3x_i + 5, \quad i = 0, 1, \\ \widetilde{x}_0 &= 5 - \sqrt{3}, \\ \widetilde{x}_1 &= 5 + \sqrt{3} \end{aligned}$$

Váhy se škálují lineárně s délkou intervalu. To například proto, že váhy jsou integrály příslušných lagrangeovských bázových funkcí, a ty se škálují lineárně s délkou integrálu (a na posunutí intervalu vůbec nezávisí). Tedy

$$\begin{aligned} \widetilde{\omega}_i &= 3\omega_i, \quad i = 0, 1, \\ \widetilde{\omega}_0 &= \widetilde{\omega}_1 = 3. \end{aligned}$$

Gaussova kvadratura je tak tvaru $Q(f) = 3f(5 - \sqrt{3}) + 3f(5 + \sqrt{3})$. □

Úloha 8 (Navíc)**.** *Dokážete napsat obecný vzorec pro přeškálování uzlů a vah z intervalu* $(-1, 1)$ *na interval* (a, b)*?*

Řešení. Obecné vzorce pro přeškálování z intervalu $(-1, 1)$ na interval (a, b) lze zapsat takto:

$$\begin{aligned} \widetilde{x}_i &= \frac{b-a}{2}(x_i + 1) + a, \quad i = 0, \dots, n, \\ \widetilde{\omega}_i &= \frac{b-a}{2}\omega_i, \quad i = 0, \dots, n. \end{aligned}$$

□

Úloha 9. *Uvažujme kvadraturní formuli tvaru*

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,dx \approx f(\alpha) + f(-\alpha).$$

a) *Pro jaké hodnoty* α *bude tato kvadraturní formule přesná pro všechny polynomy stupně nejvýše 1?*

b) *Pro jaké hodnoty* α *bude tato kvadraturní formule přesná pro všechny polynomy stupně nejvýše 3?*

c) *Pro jaké hodnoty* α *bude tato kvadraturní formule přesná pro všechny polynomy tvaru* $a + bx + cx^2 + dx^4$*, kde* $a, b, c, d \in \mathbb{R}$*?*

Řešení. a) Pro všechny hodnoty $\alpha \in \mathbb{R}$.

b) Pro $\alpha = \pm 1/\sqrt{3}$.

c) Zadané přesnosti nedosáhneme pro žádné α. To, že opravdu nenalezneme vhodné α plyne z toho, že má-li být kvadratura přesná pro funkci x^2, musí být $\alpha = \pm\frac{1}{\sqrt{3}}$. Má-li být přesná pro x^4, musí platit $\alpha = \pm\frac{1}{\sqrt{5}}$. Ty požadavky se ale navzájem vylučují.

□

Úloha 10 (Navíc). *Dokažte, že nelze najít kvadraturu o $n+1$ uzlech, která by byla algebraického řádu $2n+2$.*

[Hint: Pro obecnou kvadraturu s danými $n+1$ uzly a vahami najděte polynom stupně $2n+2$, pro který tato kvadratura nemůže být přesná.]

[Hint: Zkuste najít polynom, kterému sice kvadratura přiřadí nulu, ale jeho integrál bude nenulový.]

Řešení. Polynom $\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)^2$ stupně $2n+2$ je nezáporný (jeho integrál je kladný) a má kořeny ve všech uzlech kvadratury ($Q(f)=0$). □

Úloha 11 (Navíc). *Ukažte, že váhy Gaussovy kvadratury jsou vždy kladné.*

[Hint: Integrujte vhodně zvolený polynom stupně $2n$, kde $n+1$ je počet uzlů kvadratury.]

Řešení. Nechť máme Gaussovu kvadraturu s $n+1$ uzly $x_0,\dots,x_n$ a váhami $\omega_0,\dots,\omega_n$. Tato kvadratura je přesná pro polynomy stupně až $2n+1$. Zvolme jeden z uzlů x_i a uvažujme

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

Zřejmě $p_i(x_j)=0$ pro $j\neq i$ a $p_i(x_i)=1$. Polynom $p_i^2(x)$ stupně $2n$ je zřejmě nezáporná funkce a daná Gaussova kvadratura je pro něj přesná. Dostáváme tedy

$$0 < \int_a^b p_i^2(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} \omega_k\, p_i^2(x_k) = \omega_i\,.$$

Protože i jsme volili libovolně, dostáváme $\omega_i > 0$, $i=0,\dots,n$. □

1.3 Metoda polovičního kroku

Nevýhodou apriorního odhadu chyby $E(f)$ výše je, že může být velmi nadsazený, nebo nemusíme mít k dispozici odhad derivace funkce f. Proto hledáme metodu aposteriorního odhadu chyby. Touto metodou je metoda polovičního kroku z přednášky.

Nejen že nám metoda polovičního kroku pomůže s aposteriorním odhadem chyby, ale zároveň nám dá přesnější výsledek každým rozpůlením intervalů.

Úloha 12. *Určete, kolik nových funkčních hodnot $f(x_k)$ je potřeba spočítat, pokud jsme původně měli jen jeden interval délky h a nyní z něj vytvoříme dva intervaly délky $\frac{h}{2}$ a používáme*

a) čtyřbodovou Newton-Cotesovu metodu,

b) čtyřbodovou Gaussovu metodu.

Řešení. a) Je potřeba spočítat funkční hodnotu ve 3 bodech.

b) Je potřeba spočítat funkční hodnotu ve všech 8 bodech.

□