Od numerického integrování k lineární algebře ...

Petr Vodstrčil
petr.vodstrcil@vsb.cz

Katedra aplikované matematiky, Fakulta elektrotechniky a informatiky,
Vysoká škola báňská–Technická univerzita Ostrava

3.12. 2009

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Tato prezentace je spolufinancována Evropským sociálním fondem a státním rozpočtem České republiky.

Předpokládejme, že f je funkce spojitá na intervalu $\langle a, b\rangle$.

Definice

Kvadraturní formulí na intervalu $\langle a, b\rangle$ rozumíme předpis

$$Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i), \tag{KV}$$

kde $a \leq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leq b$ jsou uzly kvadraturní formule a $A_1, A_2, \ldots, A_n \in \mathbb{R}$ jsou koeficienty kvadraturní formule.

Pomocí kvadraturních formulí budeme aproximovat hodnotu integrálu funkce f, tj.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) = Q(f). \tag{1}$$

Definice

Řekneme, že kvadraturní formule (KV) má stupeň přesnosti $k \in \mathbb{N}_0$, jestliže je vztah (1) přesný pro všechny polynomy stupně nejvýše k a pro polynomy stupně $k+1$ se již nějaké (nenulové) chyby dopustíme, tj.

$$\int_a^b x^j \,\mathrm{d}x = \sum_{i=1}^{n} A_i x_i^j \quad \textit{pro každé } j \in \{0, 1, \dots, k\}$$

a

$$\int_a^b x^{k+1} \,\mathrm{d}x \neq \sum_{i=1}^{n} A_i x_i^{k+1}.$$

Příklad

Uvažujme kvadraturní formuli $Q(f) = \frac{8}{7} f\left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{6}{7} f\left(\frac{2}{3}\right)$ na intervalu $\langle -1, 1\rangle$. Určete její stupeň přesnosti.

Řešení.

$$I(1) = \int_{-1}^{1} 1 \,\mathrm{d}x = 2 = \frac{8}{7} + \frac{6}{7} = Q(1),$$

$$I(x) = \int_{-1}^{1} x \,\mathrm{d}x = 0 = \frac{8}{7} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{6}{7} \cdot \frac{2}{3} = Q(x),$$

$$I(x^2) = \int_{-1}^{1} x^2 \,\mathrm{d}x = \frac{2}{3} = \frac{8}{7} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)^2 + \frac{6}{7} \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^2 = Q(x^2),$$

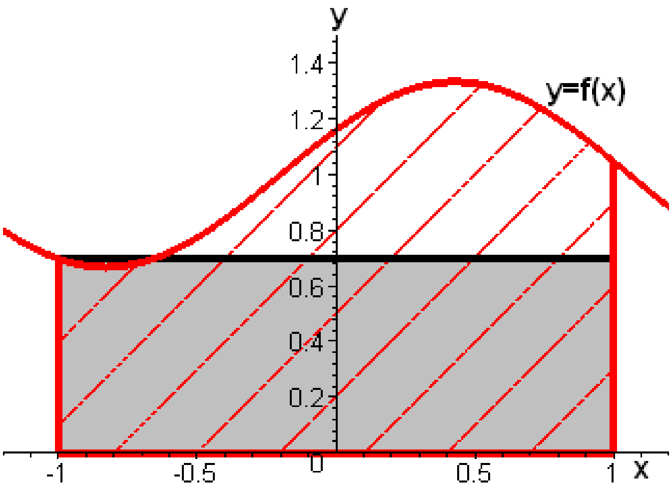
$$I(x^3) = \int_{-1}^{1} x^3 \,\mathrm{d}x = 0 \neq \frac{8}{7} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{6}{7} \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^3 = Q(x^3).$$

Vidíme tedy, že stupeň přesnosti kvadraturní formule $Q(f)$ je 2. □

Další příklady kvadraturních formulí na intervalu $\langle -1, 1\rangle$:

- $$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2f(-1)$$

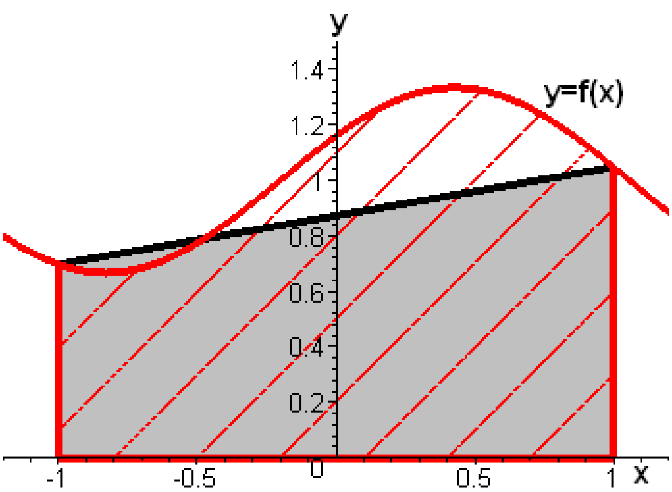
(obdélníkové pravidlo, stupeň přesnosti 0)



Další příklady kvadraturních formulí na intervalu $\langle -1, 1\rangle$:

- $$\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(-1) + f(1)$$

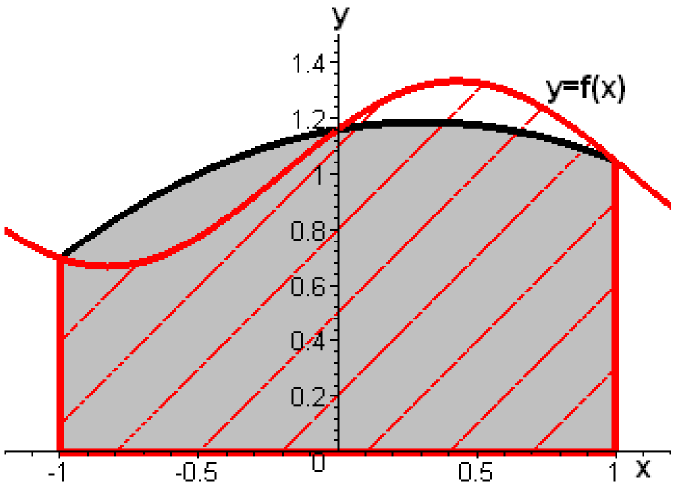
(lichoběžníkové pravidlo, stupeň přesnosti 1)



Další příklady kvadraturních formulí na intervalu $\langle -1, 1\rangle$:

- $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx \frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1)$

(Simpsonovo pravidlo, stupeň přesnosti 3)



Věta

Pro libovolnou volbu uzlů $a \le x_1 < x_2 < \cdots < x_n \le b$ existuje právě jedna kvadraturní formule $Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$, která má stupeň přesnosti alespoň $n-1$.

Důkaz.

Chceme-li, aby kvadraturní formule $Q(f)$ měla požadovaný stupeň přesnosti, musí platit následující podmínky:

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
Q(1) & = & A_1 & + & A_2 & + & \dots & + & A_n & = & I(1), \\
Q(x) & = & A_1x_1 & + & A_2x_2 & + & \dots & + & A_nx_n & = & I(x), \\
Q(x^2) & = & A_1x_1^2 & + & A_2x_2^2 & + & \dots & + & A_nx_n^2 & = & I(x^2), \\
\dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots \\
Q(x^{n-1}) & = & A_1x_1^{n-1} & + & A_2x_2^{n-1} & + & \dots & + & A_nx_n^{n-1} & = & I(x^{n-1}).
\end{array}
$$

Důkaz.

Toto je však soustava lineárních rovnic s neznámými $A_1, A_2, \dots, A_n$ a s maticí soustavy

$$V(x_1, x_2, \dots, x_n) = \begin{pmatrix} 1 & 1 & \dots & 1 \\ x_1 & x_2 & \dots & x_n \\ x_1^2 & x_2^2 & \dots & x_n^2 \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ x_1^{n-1} & x_2^{n-1} & \dots & x_n^{n-1} \end{pmatrix},$$

což je tzv. Vandermondova matice a ta je regulární pro libovolnou n–tici navzájem různých čísel $x_1, x_2, \dots, x_n$. Odtud plyne tvrzení věty. □

Nyní nás bude zajímat, jaký největší stupeň přesnosti může mít kvadraturní formule o n uzlech.

Věta

Stupeň přesnosti libovolné kvadraturní formule $Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ o n uzlech je nejvýše $2n - 1$.

Důkaz.

Předpokládejme sporem, že existuje kvadraturní formule $Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ o n uzlech, která má stupeň přesnosti alespoň $2n$, tj. vztah (1) je přesný pro všechny polynomy stupně $2n$. Definujme

$$\omega(x) = (x - x_1)(x - x_2) \dots (x - x_n).$$

Pak platí

$$\int_a^b \omega^2(x)\,\mathrm{d}x = Q(\omega^2) = \sum_{i=1}^{n} A_i \omega^2(x_i) = 0,$$

což je spor, neboť funkce ω^2 musí mít kladný integrál. □

Zde se nabízí přirozená otázka, zda je možné sestavit kvadraturní formuli o n uzlech, která má stupeň přesnosti $2n-1$ a zda je tato konstrukce možná pro libovolné $n \in \mathbb{N}$.

Pokusme se nyní odvodit nutnou podmínku pro to, aby kvadraturní formule o n uzlech měla stupeň přesnosti $2n-1$.

Předpokládejme, že jistá kvadraturní formule

$$Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

má stupeň přesnosti $2n-1$. Definujme (stejně jako v důkazu předchozí věty) funkci $\omega(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$. Z předpokládané přesnosti kvadraturní formule $Q(f)$ plyne, že pro libovolný polynom p stupně nejvýše $n-1$ platí

$$\int_a^b p(x)\omega(x)\,\mathrm{d}x = Q(p\omega) = \sum_{i=1}^{n} A_i p(x_i)\omega(x_i) = 0.$$

Vidíme tedy, že polynom ω (stupně n) musí být kolmý ke všem polynomům stupně nejvýše $n-1$. Je tedy jasné, že polynom ω lze dostat ortogonalizací posloupnosti polynomů $1, x, x^2, \dots, x^n$.

Uzly kvadraturní formule jsou zároveň kořeny polynomu ω (tak jsme polynom ω definovali). Dostáváme tak následující větu.

Věta

Má-li kvadraturní formule $Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ stupeň přesnosti $2n-1$, pak uzly této formule musí být kořeny takového polynomu stupně n, který je ortogonální ke všem polynomům nižších stupňů, tj. polynomu, který dostaneme ortogonalizací posloupnosti polynomů $1, x, x^2, \dots, x^n$.

Za vhodných předpokladů můžeme předchozí větu obrátit a dostat tak postačující podmínku pro to, aby kvadraturní formule o n uzlech měla stupeň přesnosti $2n-1$.

Věta

Nechť $a \le x_1 < x_2 < \dots < x_n \le b$ jsou kořeny polynomu (stupně n), který je ortogonální ke všem polynomům nižších stupňů. Nechť dále kvadraturní formule $Q(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ (o n uzlech) má stupeň přesnosti alespoň $n-1$ (to lze zajistit). Pak tato kvadraturní formule má stupeň přesnosti dokonce $2n-1$.

Důkaz.

Chceme ukázat, že kvadraturní formule $Q(f)$ je přesná pro všechny polynomy stupně nejvýše $2n-1$. Stejně jako dříve definujme polynom $\omega(x) = (x-x_1)(x-x_2)\dots(x-x_n)$ (stupně n), který je jistě ortogonální ke všem polynomům nižších stupňů.

Nechť nyní p je libovolný polynom stupně nejvýše $2n-1$. Vydělme tento polynom polynomem ω. Dostáváme

$$p(x) = \omega(x)s(x) + r(x),$$

kde polynom s představuje podíl a polynom r zbytek po dělení polynomu p polynomem ω. Je tedy $\mathrm{st}(r) \le \mathrm{st}(\omega) - 1 = n-1$ a rovněž $\mathrm{st}(s) \le n-1$.

Důkaz.

Není obtížné ověřit, že

$$\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \omega(x)s(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b r(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{ortog. } \omega}{=} \int_a^b r(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{přesnost } Q}{=}$$

$$\overset{\text{přesnost } Q}{=} Q(r) = \sum_{i=1}^{n} A_i r(x_i) = \sum_{i=1}^{n} A_i \omega(x_i)s(x_i) + \sum_{i=1}^{n} A_i r(x_i) =$$

$$= \sum_{i=1}^{n} A_i(\omega(x_i)s(x_i) + r(x_i)) = \sum_{i=1}^{n} A_i p(x_i) = Q(p).$$

To však znamená, že kvadraturní formule má stupeň přesnosti $2n-1$, což jsme chtěli dokázat. $\square$

Příklad

Najděte kvadraturní formuli na intervalu $\langle -1, 1\rangle$ takovou, aby měla dva uzly a její stupeň přesnosti byl maximální.

Řešení.

Víme, že maximální stupeň přesnosti kvadraturní formule o dvou uzlech je 3. Uzly získáme jako kořeny kvadratického polynomu, který vznikne ortogonalizací posloupnosti polynomů 1, x a x^2. Není těžké ověřit, že po provedení ortogonalizace dostaneme 1, x a $x^2 - \frac{1}{3}$. Kořeny polynomu $x^2 - \frac{1}{3}$ jsou $\pm\frac{\sqrt{3}}{3}$. Hledaná kvadraturní formule pak má nutně tvar

$$Q(f) = A_1 f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + A_2 f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right).$$

Musíme ale zajistit, aby tato kvadraturní formule měla stupeň přesnosti alespoň 1. Na základě toho jednoznačně vypočteme koeficienty A_1 a A_2. Po provedení výpočtu obdržíme $A_1 = A_2 = 1$. Hledaná kvadraturní formule má tedy tvar

$$Q(f) = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

a je přesná pro všechny lineární, kvadratické i kubické polynomy. □

Poznámka

Problém s konstrukcí kvadraturní formule o n uzlech a stupni přesnosti $2n - 1$ by mohl nastat, pokud by polynom stupně n vzniklý ortogonalizací posloupnosti polynomů $1, x, x^2, \ldots, x^n$ např. neměl reálné kořeny. Pak bychom nemohli sestavit příslušnou kvadraturní formuli.

Podobně bychom se mohli dostat do problémů, kdyby tento polynom měl násobné kořeny, popř. kořeny ležící mimo interval $\langle a, b\rangle$.

Platí však následující věta, která říká, že tento problém nenastane.

Věta

Nechť p je polynom stupně $n \in \mathbb{N}$, který vznikne ortogonalizací posloupnosti polynomů $1, x, x^2, \ldots, x^n$ (vzhledem ke standardnímu skalárnímu součinu $\langle u; v\rangle = \int_a^b u(x)v(x)\,\mathrm{d}x$). Pak má polynom p právě n různých reálných kořenů, které navíc všechny leží v intervalu (a, b).

Důkaz.

Na úvod poznamenejme, že výše zmíněný polynom p, který ortogonalizací obdržíme, musí být ortogonální ke všem polynomům stupně nejvýše $n-1$.

Nechť $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_k$ ($k \in \mathbb{N}_0,\ k \leq n$) jsou všechny reálné kořeny polynomu p, které mají lichou násobnost a navíc leží v intervalu (a, b). Násobnosti těchto kořenů označme $l_1, l_2, \ldots, l_k$. Pak lze polynom p psát ve tvaru

$$p(x) = (x-\alpha_1)^{l_1}(x-\alpha_2)^{l_2}\ldots(x-\alpha_k)^{l_k}s(x).$$

Není těžké si uvědomit, že s je polynom, který na intervalu $\langle a, b\rangle$ nemění znaménko. Bez újmy na obecnosti můžeme předpokládat, že $s(x) \geq 0$ pro všechna $x \in \langle a, b\rangle$.

Důkaz.

Nyní položme

$$r(x) = (x-\alpha_1)(x-\alpha_2)\ldots(x-\alpha_k),$$

což je polynom stupně k, a vypočtěme skalární součin polynomů p a r.

$$\langle p; r\rangle = \int_a^b p(x)r(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int_a^b (x-\alpha_1)^{l_1+1}(x-\alpha_2)^{l_2+1}\ldots(x-\alpha_k)^{l_k+1}s(x)\,\mathrm{d}x > 0.$$

Poslední integrál je skutečně kladný, protože integrujeme spojitou nezápornou funkci, která není identicky nulová. Znamená to tedy, že polynom p není ortogonální k polynomu r. Na druhé straně víme, že polynom p je ortogonální ke všem polynomům stupně nejvýše $n-1$. To však znamená, že $k = \mathrm{st}(r) \geq n$, odkud plyne tvrzení věty. $\square$

Děkuji za pozornost !!