Od numerického integrování k lineární algebře ...

Petr Vodstrčil

Text byl vytvořen v rámci realizace projektu *Matematika pro inženýry 21. století* (reg. č. CZ.1.07/2.2.00/07.0332), na kterém se společně podílela Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava a Západočeská univerzita v Plzni

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Petr Vodstrčil
Od numerického integrování k lineární algebře ...

Obsah

Kapitola 1

Úvod

Z matematické analýzy víme, že pro každou reálnou funkci f spojitou na intervalu $\langle a, b\rangle$, kde $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, existuje integrál $\int\limits_a^b f(x)\,\mathrm{d}x$. Vypočítat takovýto integrál však nemusí být vždy jednoduché. Často se dostáváme do situace, kdy integrál ze spojité funkce nelze analyticky spočítat. Takových integrálů existuje celá řada. Pro představu uveďme některé z nich. Jedná se například o integrály

$$\int\limits_a^b \mathrm{e}^{-x^2}\,\mathrm{d}x, \quad \int\limits_a^b \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x, \quad \int\limits_a^b \sin(x^2)\,\mathrm{d}x, \quad \int\limits_a^b \frac{\mathrm{e}^x}{x}\,\mathrm{d}x, \quad \int\limits_a^b \frac{1}{\ln x}\,\mathrm{d}x, \quad \text{atd.}$$

V takových případech je nutné sáhnout k numerickým metodám integrace. Při numerické integraci se integrování snažíme nahradit jiným druhem výpočtu. Přitom chceme, aby se hodnota získaná tímto náhradním výpočtem co možná nejméně lišila od skutečné hodnoty integrálu. Jednou z možností, jak numericky integrály počítat, je výpočet pomocí kvadraturních formulí.

Cílem tohoto textu je seznámení čtenáře s kvadraturními formulemi. V následující kapitole zavedeme pojem kvadraturní formule a naučíme se počítat její přesnost. Vzápětí se dozvíme i některé další vlastnosti kvadraturních formulí. Nakonec se naučíme konstruovat kvadraturní formule maximální možné přesnosti a zamyslíme se nad možnými problémy s touto konstrukcí. Při té příležitosti narazíme na provázanost s lineární algebrou.

Kapitola 2

Kvadraturní formule a jejich přesnost

V této kapitole zavedeme pojem kvadraturní formule a ukážeme příklady některých kvadraturních formulí. Dále se dozvíme, co je to přesnost kvadraturní formule.

2.1 Pojem kvadraturní formule

Definice 2.1. Kvadraturní formulí na intervalu $\langle a, b\rangle$ rozumíme předpis

$$Q^{\langle a,b\rangle}\colon f \mapsto \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) \quad (= Q^{\langle a,b\rangle}(f)), \tag{2.1}$$

který každé funkci f spojité na intervalu $\langle a, b\rangle$, kde $a, b \in \mathbb{R}$, $a < b$, přiřadí číslo $Q^{\langle a,b\rangle}(f)$. Čísla $x_1, x_2, \dots, x_n$, kde $a \leqq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leqq b$, nazýváme uzly kvadraturní formule a $A_1, A_2, \dots, A_n \in \mathbb{R}$ jsou koeficienty kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$.

Poznámka 2.2. Kvadraturní formuli lze chápat jako speciální případ spojitého lineárního funkcionálu na prostoru všech spojitých funkcí na intervalu $\langle a, b\rangle$ se suprémovou normou.

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

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x \approx \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i) = Q^{\langle a,b\rangle}(f). \tag{2.2}$$

Nyní budeme definovat tzv. přesnost kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}(f)$.

Definice 2.3. Řekneme, že kvadraturní formule (2.1) má stupeň přesnosti $k \in \mathbb{N}_0$, jestliže je vztah (2.2) přesný pro všechny polynomy stupně nejvýše k a pro polynomy stupně $k+1$ se již nějaké (nenulové) chyby dopustíme, tj.

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

a

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

2.2 Příklady kvadraturních formulí

Příklad 2.4. Určete stupeň přesnosti kvadraturní formule $Q^{\langle -1,1\rangle}(f) = \frac{8}{7} f\left(-\frac{1}{2}\right) + \frac{6}{7} f\left(\frac{2}{3}\right)$.

Řešení. Při řešení použijeme definici 2.3. Budeme postupně zjišťovat, zda je kvadraturní formule přesná pro funkce $f(x) = 1$, $f(x) = x$, $f(x) = x^2$, atd. Přímým výpočtem zjistíme, že

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

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

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

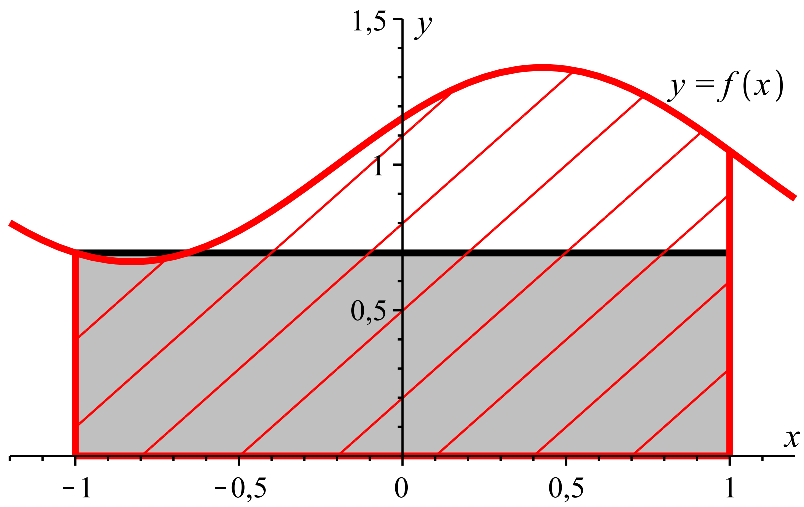
$$\int_{-1}^{1} x^3 \,\mathrm{d}x = 0 \neq \frac{8}{7} \cdot \left(-\frac{1}{2}\right)^3 + \frac{6}{7} \cdot \left(\frac{2}{3}\right)^3 = Q^{\langle -1,1\rangle}(x^3).$$

Podle definice 2.3 je stupeň přesnosti kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$ roven 2, a tedy je tato kvadraturní formule přesná pro všechny lineární i kvadratické funkce, ale není již přesná pro funkce kubické. ▲

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

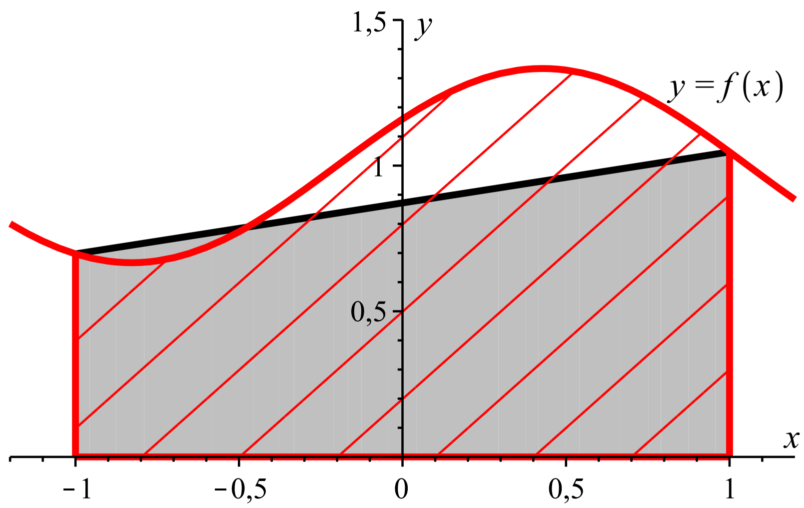
- $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx 2f(-1)$

  (obdélníkové pravidlo, stupeň přesnosti 0);



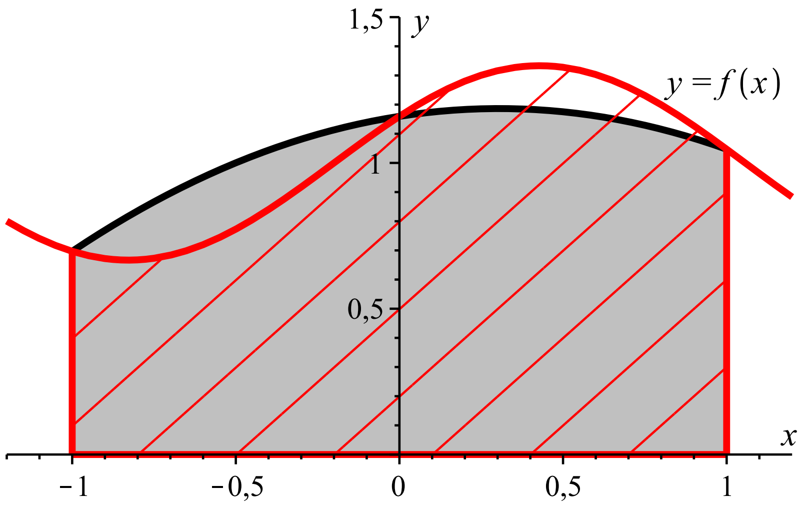
- $\displaystyle\int_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x \approx f(-1) + f(1)$

  (lichoběžníkové pravidlo, stupeň přesnosti 1);



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

(Simpsonovo pravidlo, stupeň přesnosti 3).



Poznámka 2.5. Na předchozích obrázcích je možné vidět geometrický význam jednotlivých kvadraturních formulí. Hodnota integrálu $\int\limits_{-1}^{1} f(x)\,\mathrm{d}x$ odpovídá obsahu červeně vyšrafované oblasti. Přibližná hodnota integrálu, kterou dostaneme při použití kvadraturní formule, odpovídá obsahu šedě vybarvené oblasti.

Tato šedě vybarvená oblast je v prvním případě obdélník s obsahem $2f(-1)$ a ve druhém lichoběžník s obsahem $f(-1) + f(1)$. Proto tedy mluvíme o obdélníkovém popř. lichoběžníkovém pravidlu. V případě Simpsonova pravidla se původní funkce f nahradí parabolou a není těžké se přesvědčit, že obsah plochy pod touto parabolou je právě $\frac{1}{3}f(-1) + \frac{4}{3}f(0) + \frac{1}{3}f(1)$.

2.3 Věta o existenci a jednoznačnosti

Věta 2.6. *Pro libovolnou volbu uzlů $a \leqq x_1 < x_2 < \cdots < x_n \leqq b$, kde $n \in \mathbb{N}$, existuje právě jedna kvadraturní formule $Q^{\langle a,b \rangle}(f) = \sum\limits_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$, která má stupeň přesnosti alespoň $n - 1$.*

Důkaz. Chceme-li, aby kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$ měla požadovaný stupeň přesnosti, musí (podle definice 2.3) platit následující podmínky:

$$
\begin{array}{ccccccccccc}
Q^{\langle a,b\rangle}(1) & = & A_1 & + & A_2 & + & \dots & + & A_n & = & \int_a^b 1\,\mathrm{d}x, \\
Q^{\langle a,b\rangle}(x) & = & A_1 x_1 & + & A_2 x_2 & + & \dots & + & A_n x_n & = & \int_a^b x\,\mathrm{d}x, \\
Q^{\langle a,b\rangle}(x^2) & = & A_1 x_1^2 & + & A_2 x_2^2 & + & \dots & + & A_n x_n^2 & = & \int_a^b x^2\,\mathrm{d}x, \\
\dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots & & \dots \\
Q^{\langle a,b\rangle}(x^{n-1}) & = & A_1 x_1^{n-1} & + & A_2 x_2^{n-1} & + & \dots & + & A_n x_n^{n-1} & = & \int_a^b x^{n-1}\,\mathrm{d}x.
\end{array}
$$

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. □

Kapitola 3

Kvadraturní formule maximální přesnosti

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

3.1 Horní odhad přesnosti

Věta 3.1. *Stupeň přesnosti libovolné kvadraturní formule* $Q^{\langle a,b\rangle}(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ *o* n *uzlech je nejvýše* $2n-1$.

Důkaz. Předpokládejme sporem, že existuje kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ o n uzlech, která má stupeň přesnosti alespoň $2n$, tj. vztah (2.2) je jistě přesný pro všechny polynomy stupně $2n$. Definujme

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

což je polynom stupně n. Pak platí

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

neboť funkce ω^2 je polynom stupně $2n$. Na druhé straně je jasné, že polynom ω^2 musí mít kladný integrál a to je spor. $\square$

3.2 Nutná podmínka

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 tedy, že jistá kvadraturní formule

$$Q^{\langle a,b\rangle}(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$$

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 $Q^{\langle a,b\rangle}$ plyne, že pro libovolný polynom p stupně nejvýše $n-1$ platí

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

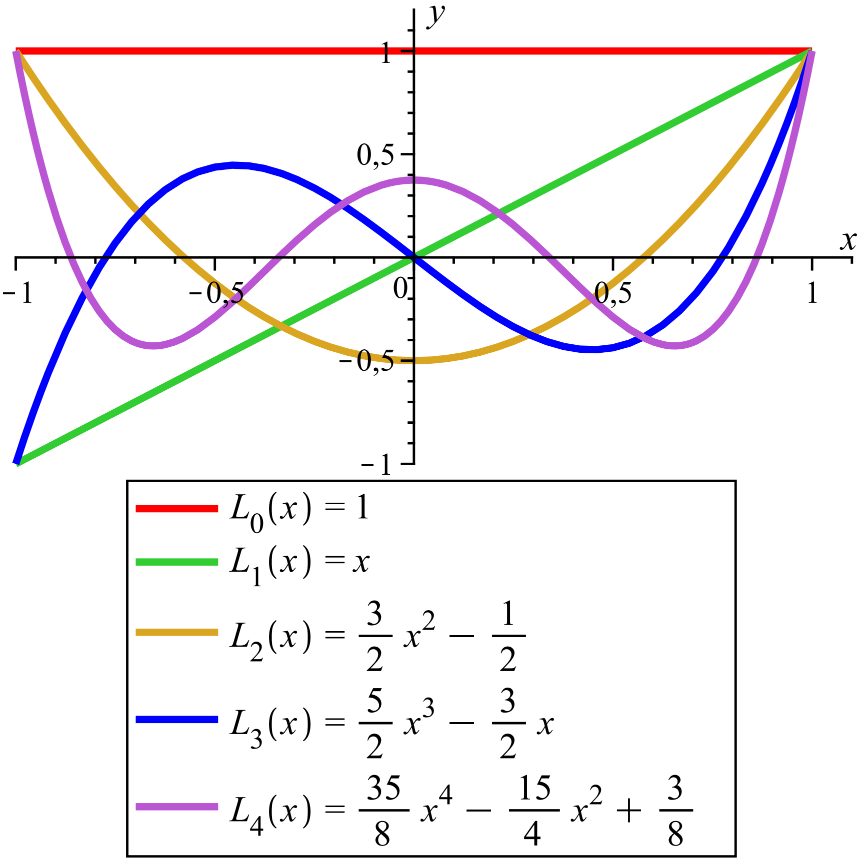
neboť stupeň polynomu $p\omega$ je nejvýše $2n-1$. Vidíme tedy, že polynom ω (stupně n) musí být kolmý (ve smyslu integrálního skalárního součinu $\langle u;v\rangle = \int_a^b u(x)v(x)\,\mathrm{d}x$) ke všem polynomům stupně nejvýše $n-1$. To však znamená, že polynom ω lze dostat Gramm-Schmidtovou ortogonalizací posloupnosti polynomů $1, x, x^2, \dots, x^n$. Uzly kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$ jsou potom kořeny polynomu ω (tak jsme polynom ω definovali).

Poznámka 3.2. Polynomy, které dostaneme ortogonalizací posloupnosti polynomů $1, x, x^2, \dots$ vzhledem ke skalárnímu součinu $\langle u;v\rangle = \int_a^b u(x)v(x)\,\mathrm{d}x$ souvisí s tzv. Legendrovými polynomy $L_n^{\langle a,b\rangle}$. Přesněji řečeno, polynomy, které takto obdržíme, jsou jisté nenulové násobky těchto (Legendrových) polynomů.

Poznámka 3.3. Legendrovy polynomy na intervalu $\langle -1,1\rangle$ mají tvar

$$\begin{aligned}
&L_0^{\langle -1,1\rangle}(x) = 1, && L_1^{\langle -1,1\rangle}(x) = x,\\
&L_2^{\langle -1,1\rangle}(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}, && L_3^{\langle -1,1\rangle}(x) = \frac{5}{2}x^3 - \frac{3}{2}x,\\
&L_4^{\langle -1,1\rangle}(x) = \frac{35}{8}x^4 - \frac{15}{4}x^2 + \frac{3}{8}, && \dots\dots
\end{aligned}$$

a jejich grafy jsou znázorněny na následujícím obrázku.



Vzhledem k předchozím úvahám dostáváme následující větu.

Věta 3.4. *Má-li kvadraturní formule* $Q^{\langle a,b\rangle}(f) = \sum_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ *(o n uzlech) stupeň přesnosti* $2n-1$*, pak uzly této formule musí být kořeny Legendrova polynomu* $L_n^{\langle a,b\rangle}$ *(stupně n).*

3.3 Postačující podmínka

Za vhodných předpokladů můžeme větu 3.4 obrátit a dostat tak postačující podmínku pro to, aby kvadraturní formule o n uzlech měla stupeň přesnosti $2n-1$.

Věta 3.5. *Nechť $a \leqq x_1 < x_2 < \dots < x_n \leqq b$ jsou kořeny Legendrova polynomu $L_n^{\langle a,b\rangle}$ (stupně n) a navíc kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}(f) = \sum\limits_{i=1}^{n} A_i f(x_i)$ (o n uzlech) má stupeň přesnosti alespoň $n-1$ (to lze díky větě 2.6 zajistit). Pak tato kvadraturní formule má stupeň přesnosti dokonce $2n-1$.*

Důkaz. Chceme ukázat, že kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$ je přesná pro všechny polynomy stupně nejvýše $2n-1$. Stejně jako dříve definujme funkci

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

která je jistým nenulovým násobkem Legendrova polynomu $L_n^{\langle a,b\rangle}$ (stupně n), neboť (vzhledem k předpokladům věty) $x_1, x_2, \dots, x_n$ jsou kořeny polynomu $L_n^{\langle a,b\rangle}$.

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 $\operatorname{st}(r) \leqq \operatorname{st}(\omega) - 1 = n - 1$ a rovněž $\operatorname{st}(s) \leqq n - 1$. Není obtížné ověřit, že

$$\begin{aligned}
\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x = \int_a^b \omega(x)s(x)\,\mathrm{d}x + \int_a^b r(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{ortog. }\omega}{=} \int_a^b r(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{přesnost }Q}{=} \\
\overset{\text{přesnost }Q}{=} Q^{\langle a,b\rangle}(r) = \sum_{i=1}^{n} A_i r(x_i) = \sum_{i=1}^{n} A_i \omega(x_i)s(x_i) + \sum_{i=1}^{n} A_i r(x_i) = \\
= \sum_{i=1}^{n} A_i(\omega(x_i)s(x_i) + r(x_i)) = \sum_{i=1}^{n} A_i p(x_i) = Q^{\langle a,b\rangle}(p).
\end{aligned} \tag{3.1}$$

Zde jsme využili toho, že polynom ω (stejně jako Legendrův polynom $L_n^{\langle a,b\rangle}$) je kolmý ke všem polynomům nižších stupňů a rovněž toho, že kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$ má stupeň přesnosti alespoň $n-1$.

Vztah (3.1) však znamená, že kvadraturní formule $Q^{\langle a,b\rangle}$ má stupeň přesnosti $2n-1$, což jsme chtěli dokázat. □

Příklad 3.6. 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 Legendrova polynomu $L_2^{\langle -1,1\rangle}$. Pro tento polynom platí

$L_2^{\langle -1,1\rangle}(x) = \frac{3}{2}x^2 - \frac{1}{2}$ (viz. poznámka 3.3) a jeho kořeny jsou $\pm\frac{\sqrt{3}}{3}$. Kdybychom Legendrův polynom $L_2^{\langle -1,1\rangle}$ neznali, museli bychom provést ortogonalizaci posloupnosti polynomů $1, x, x^2$ vzhledem ke skalárnímu součinu $\langle u; v\rangle = \int_{-1}^{1} u(x)v(x)\,\mathrm{d}x$. Hledaná kvadraturní formule má tedy nutně tvar

$$Q^{\langle -1,1\rangle}(f) = A_1 f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + A_2 f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right).$$

Musíme ale zajistit, aby tato kvadraturní formule měla stupeň přesnosti alespoň 1, tj. aby tato formule byla přesná pro funkce $f(x) = 1$ a $f(x) = x$. Na základě toho jednoznačně vypočteme koeficienty A_1 a A_2. Musí totiž platit

$$\begin{array}{rcccccccc} Q^{\langle -1,1\rangle}(1) & = & A_1 \cdot 1 & + & A_2 \cdot 1 & = & 2 & = & \int_{-1}^{1} 1\,\mathrm{d}x, \\ Q^{\langle -1,1\rangle}(x) & = & A_1 \cdot \left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) & + & A_2 \cdot \frac{\sqrt{3}}{3} & = & 0 & = & \int_{-1}^{1} x\,\mathrm{d}x. \end{array}$$

Po vyřešení soustavy rovnic obdržíme $A_1 = A_2 = 1$. Hledaná kvadraturní formule má tedy tvar

$$Q^{\langle -1,1\rangle}(f) = f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right)$$

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

3.4 Možný problém s konstrukcí kvadraturní formule maximální přesnosti

Poznámka 3.7. Problém s konstrukcí kvadraturní formule o n uzlech a stupni přesnosti $2n-1$ by mohl nastat, pokud by Legendrův polynom $L_n^{\langle a,b\rangle}$ (stupně n) např. neměl reálné kořeny. Pak bychom nemohli sestavit příslušnou kvadraturní formuli.

Platí však následující věta, která říká, že tento problém nenastane. To však znamená, že konstrukce kvadraturní formule o n uzlech a stupni přesnosti $2n-1$ je možná pro libovolné $n \in \mathbb{N}$.

Věta 3.8. *Nechť $n \in \mathbb{N}$. Pak Legendrův polynom $L_n^{\langle a,b\rangle}$ (stupně n) má právě n různých reálných kořenů, které navíc všechny leží v intervalu (a, b).*

Důkaz. Na úvod poznamenejme, že výše zmíněný Legendrův polynom musí být ortogonální ke všem polynomům stupně nejvýše $n-1$.

Nechť $\alpha_1 < \alpha_2 < \cdots < \alpha_k$ $(k \in \mathbb{N}_0,\ k \leqq n)$ jsou všechny reálné kořeny polynomu

$L_n^{\langle a,b\rangle}$, 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 $L_n^{\langle a,b\rangle}$ psát ve tvaru

$$L_n^{\langle a,b\rangle}(x) = (x-\alpha_1)^{l_1}(x-\alpha_2)^{l_2}\ldots(x-\alpha_k)^{l_k}s(x).$$

Není těžké si uvědomit, že s je nenulový polynom, který na intervalu $\langle a,b\rangle$ nemění znaménko. Tento polynom totiž buď nemá žádné reálné kořeny, nebo má reálné kořeny mimo interval (a,b), popř. má reálné kořeny sudé násobnosti v intervalu (a,b). Proto na intervalu $\langle a,b\rangle$ platí $s(x) \geqq 0$, nebo $s(x) \leqq 0$. Bez újmy na obecnosti můžeme předpokládat, že $s(x) \geqq 0$ pro všechna $x \in \langle a,b\rangle$. Nyní položme

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

což je polynom stupně k, a vypočtěme skalární součin polynomů $L_n^{\langle a,b\rangle}$ a r.

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

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

Poslední integrál je skutečně kladný, protože integrujeme spojitou nezápornou funkci, která není identicky nulová. Proto polynom $L_n^{\langle a,b\rangle}$ není ortogonální k polynomu r. Na druhé straně víme, že polynom $L_n^{\langle a,b\rangle}$ je ortogonální ke všem polynomům stupně nejvýše $n-1$. Znamená to tedy, že $k = \mathrm{st}\,(r) \geqq n$, odkud plyne tvrzení věty. □

Literatura

[1] Jarník, V.: *Integrální počet (I).* Academia, Praha 1984.

[2] Horová, I. – Zelinka, J.: *Numerické metody.* Skriptum. MU v Brně, Brno 2004. ISBN 80-210-3317-7.

[3] http://en.wikipedia.org/wiki/Gaussian_quadrature

Rejstřík