

1 Numerická kvadratura

Kvadratura V původním významu slova (ve starověkém Řecku) šlo o nalezení Euklidovské konstrukce¹ 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 $x_0 < x_1 < \dots < x_n$, $x_i \in [a, b]$, dále uvažujeme váhy $\omega_0, \dots, \omega_n$, 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 kvadrurní formule

Jde o kvadraturu na ekvidistantním dělení intervalu $[a, b]$, tedy s volbou uzlů $a = x_0 < x_1 < \dots < x_n = b$, 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 kvadrurní 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 $x_0 = \frac{a+b}{2}$.

Obečný tvar kvadratury; odhad chyby (je-li $f \in C^1([a, b])$):

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

Řád kvadratury je 1.

Lichoběžníkové pravidlo: $n = 1$, volíme $x_0 = a$, $x_1 = b$.

Obečný tvar kvadratury; odhad chyby (je-li $f \in C^2([a, b])$):

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

Řád kvadratury je 1.

¹Euklidovská konstrukce: Konstrukce pomocí kružítko 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 $\int_0^2 e^{-x^2} dx = 0.882081 \dots$ pomocí obdélníkového, lichoběžníkového a Simpsonova pravidla.

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

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

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 báze funkce. Uvažujte nad vzájemnou symetrií báze funkcí. Zobecněte vaše úvahy pro libovolné n a na libovolný interval $[a, b]$.]

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.]

Úloha 5 (Navíc). Nalezněte kvadrurní formuli tvaru

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

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

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, \dots, 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 báze funkcí bude přesná alespoň pro P_n . Nyní rozepíšeme integrál a kvadraturu polynomu f :

$$I(f) = \underbrace{\int L_{n+1}(x)q(x)}_{0 \text{ protože } L_{n+1} \perp P_n} + \int r(x) = \overbrace{I(r) = Q(r)}^{\text{přesná pro } P_n},$$
$$Q(f) = Q(L_{n+1}q) + Q(r) = \sum_{i=0}^n \omega_i \underbrace{(L_{n+1}(x_i)q(x_i))}_0 + r(x_i) = Q(r).$$

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

Úloha 6. *Odvodte 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.*

Pro numerický výpočet zadaného integrálu 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, přeskálovat kvadraturní uzly a váhy.

Úloha 7. *Pomocí přeskálování uzlů a vah z Úlohy 6 odvodte 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 $b - a$.]

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

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 $a, b, c, d \in \mathbb{R}$?*

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.]

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.]

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.*