

Analiza numeryczna

Kwadratury wysokiego rzędu

Rafał Nowak

19 grudnia 2017 r.

$$I_p(f) := \int_a^b p(x)f(x) \, dx \quad (f \in \mathbb{F})$$

$$Q_n(f) := \sum_{k=0}^n A_k^{(n)} f(x_k^{(n)})$$

$$A_k^{(n)} = \int_a^b p(x) \lambda_k(x) \, dx, \quad \lambda_k(x) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_k)(x - x_k)}$$

$$\omega(x) = \bar{P}_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

$$I_p(f) := \int_a^b p(x) f(x) \, dx \quad (f \in \mathbb{F})$$

$$Q_n(f) := \sum_{k=0}^n A_k^{(n)} f(x_k^{(n)})$$

$$A_k^{(n)} = \int_a^b p(x) \lambda_k(x) \, dx, \quad \lambda_k(x) = \frac{\omega(x)}{\omega'(x_k)(x - x_k)}$$

$$\omega(x) = \bar{P}_{n+1}(x) = (x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_n)$$

Lemat

$$A_k^{(n)} = \frac{a_{n+1}}{a_n} \cdot \frac{\|P_n\|^2}{P'_{n+1}(x_k) P_n(x_k)}$$

$$P_j(x) = a_j x^k + \dots$$

Lemat

Współczynniki kwadratury Gaussa są dodatnie, tzn.

$$A_k^{(n)} > 0, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Lemat

Współczynniki kwadratury Gaussa są dodatnie, tzn.

$$A_k^{(n)} > 0, \quad k = 0, 1, \dots, n.$$

Lemat

Jeśli $f \in C^{2n+2}[a, b]$, to reszta kwadratury Gaussa wyraża się wzorem

$$R_n(f) := I_p(f) - Q_n(f) = \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{(2n+2)! a_{n+1}^2} \int_a^b p(x) [P_{n+1}(x)]^2 dx.$$

Lemat

Jeśli $f \in C[a, b]$, to $\lim_{n \rightarrow \infty} Q_n(f) = I_p(f)$.

Związek rekurencyjny dla wielomianów ortogonalnych P_k

$$P_k(x) = (b_k x + c_k)P_{k-1}(x) - d_k P_{k-2}(x),$$

można zapisać macierzowo

$$x\mathbf{p}(x) = A\mathbf{p}(x) + \frac{1}{b_{n+1}}P_{n+1}(x)\mathbf{e}_{n+1}$$

$$\mathbf{p}(x) = [P_0(x), P_1(x), \dots, P_n(x)]^T, \quad \mathbf{e}_{n+1} = [0, 0, \dots, 0, 1]^T \in \mathbb{R}^{n+1}$$

$$A = \{a_{ij}\}, \quad a_{ij} = \begin{cases} -c_i/b_i, & i = j, \\ d_i/b_i, & i = j + 1, \\ 1/b_i, & i = j - 1, \\ 0, & \text{w p.p.} \end{cases}$$

Lemat

Węzły $x_k^{(n)}$ kwadratury Czebyszewa są wartościami własnymi macierzy A , a współczynniki wyrażają się wzorami

$$A_k^{(n)} = [\mathbf{v}_1^{(k)}]^2 \int_a^b p(x) \, dx,$$

gdzie $\mathbf{v}^{(k)}$ jest wektorem własnym odpowiadającym wartości $x_k^{(n)}$.

Lemat

Węzły $x_k^{(n)}$ kwadratury Czebyszewa są wartościami własnymi macierzy A , a współczynniki wyrażają się wzorami

$$A_k^{(n)} = [\mathbf{v}_1^{(k)}]^2 \int_a^b p(x) dx,$$

gdzie $\mathbf{v}^{(k)}$ jest wektorem własnym odpowiadającym wartości $x_k^{(n)}$.

Lemat

Macierz A jest podobna do macierzy symetrycznej trójkątnejowej $T = \{t_{ij}\}$, gdzie

$$t_{ii} = -\frac{c_i}{b_i}, \quad t_{i+1,i} = t_{i,i+1} = \left(\frac{d_{i+1}}{b_i b_{i+1}} \right)^{1/2}.$$

Kwadratury Gaussa-Legendre'a

$$P_k(x) = \frac{2k-1}{k} x P_{k-1}(x) - \frac{k-1}{k} P_{k-2}(x)$$

$$P_k(x) = \frac{2k-1}{k} x P_{k-1}(x) - \frac{k-1}{k} P_{k-2}(x)$$

$$t_{ii} = 0, \quad t_{i,i+1} = t_{i+1,i} = (4 - 1/i^2)^{-1/2}$$

Kwadratury Gaussa-Legendre'a

$$P_k(x) = \frac{2k-1}{k} x P_{k-1}(x) - \frac{k-1}{k} P_{k-2}(x)$$

$$t_{ii} = 0, \quad t_{i,i+1} = t_{i+1,i} = (4 - 1/i^2)^{-1/2}$$

Implementacja kwadratury GL w Juli

```
# Funkcja oblicza całkę \int_{-1}^1 f(x) dx
# za pomocą (n+1)-punktowej kwadratury Gaussa-Legendre'a
▼ function GaussLegendre(f,n)
    β = 1 ./ sqrt(4.0 - (1:n).^(-2.0));
    T = SymTridiagonal(zeros(n+1),β);      # Macierz podobna do macierzy
    x,V = eig(T);                          # x - wartości własne (pierwiastki)
    w = 2.0*vec(V[1,:]).^2;                # w - współczynniki kwadratury
    return dot(w,f(x));
end;

# Przykładowe użycie
GaussLegendre(x -> sqrt(1-x.^2), 100);
```

$$I_p(f) = \int_{-1}^1 p(x) f(x) \, dx, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$Q_n^{GC}(f) := \int_{-1}^1 p(x) I_n(x) \, dx, \quad I_n(t_k) = f(t_k), \quad t_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right)$$

$$I_p(f) = \int_{-1}^1 p(x)f(x) \, dx, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$Q_n^{GC}(f) := \int_{-1}^1 p(x)I_n(x) \, dx, \quad I_n(t_k) = f(t_k), \quad t_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right)$$

Lemat

$$I_n(x) = \sum_{i=0}^n \alpha_i T_i(x), \quad \alpha_i = \frac{2}{n+1} \sum_{k=0}^n f(t_k) T_i(t_k)$$

$$I_p(f) = \int_{-1}^1 p(x) f(x) dx, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$Q_n^{GC}(f) := \int_{-1}^1 p(x) I_n(x) dx, \quad I_n(t_k) = f(t_k), \quad t_k = \cos\left(\frac{2k+1}{2n+2}\pi\right)$$

Lemat

$$I_n(x) = \sum_{i=0}^n {}' \alpha_i T_i(x), \quad \alpha_i = \frac{2}{n+1} \sum_{k=0}^n f(t_k) T_i(t_k)$$

Wniosek

$$Q_n^{GC}(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(t_k), \quad A_k = \frac{\pi}{n+1}.$$

$$I_p(f) = \int_{-1}^1 p(x) f(x) \, dx, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$Q_n^L(f) := \int_{-1}^1 p(x) J_n(x) \, dx, \quad J_n(u_k) = f(u_k), \quad u_k = \cos\left(\frac{k}{n}\pi\right)$$

$$I_p(f) = \int_{-1}^1 p(x) f(x) \, dx, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$Q_n^L(f) := \int_{-1}^1 p(x) J_n(x) \, dx, \quad J_n(u_k) = f(u_k), \quad u_k = \cos\left(\frac{k}{n}\pi\right)$$

Lemat

$$J_n(x) = \sum_{j=0}^n \beta_j T_j(x), \quad \beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n f(u_k) T_j(u_k)$$

$$I_p(f) = \int_{-1}^1 p(x) f(x) \, dx, \quad p(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$$

$$Q_n^L(f) := \int_{-1}^1 p(x) J_n(x) \, dx, \quad J_n(u_k) = f(u_k), \quad u_k = \cos\left(\frac{k}{n}\pi\right)$$

Lemat

$$J_n(x) = \sum_{j=0}^n \beta_j T_j(x), \quad \beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n f(u_k) T_j(u_k)$$

Wniosek

$$Q_n^L(f) = \sum_{k=0}^n A_k f(u_k), \quad A_k = \frac{\pi}{n}.$$

Lemat

Wzór

$$\int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) dx \approx \frac{\pi}{n} \sum_{k=0}^n f(u_k)$$

jest dokładny dla $f \in \Pi_{2n-1}$.

Implementacja kwadratury Gaussa-Czebyszewa i Lobatto w Juli

```
function GaussChebyshev(f,n)
    x = cos(collect(1:2:2*n+1)*pi/(2*n+2)); # węzły kwadratury Gaussa-Czebyszewa
    return pi/(n+1)*sum(f(x));
end;

function Lobatto(f,n)
    x = cos(collect(0:n)*pi/n); # węzły kwadratury Lobatto (punkty ekstremalne)
    y = f(x); y[1] *= 0.5; y[n+1] *= 0.5;
    return pi/n*sum(y);
end;

# Przykładowe użycie
GaussChebyshev(x -> (1-x.^2), 1000);
Lobatto(x -> (1-x.^2), 1000);
```

Szereg Czebyszewa

Niech $f \in C^1[-1, 1]$. Wówczas funkcję f można rozwinąć w **szereg Czebyszewa**

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} 'a_k T_k(x) \quad (-1 \leq x \leq 1),$$

$$a_k \equiv a_k[f] := \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) T_k(x) dx.$$

Szereg Czebyszewa

Niech $f \in C^1[-1, 1]$. Wówczas funkcję f można rozwinąć w **szereg Czebyszewa**

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} 'a_k T_k(x) \quad (-1 \leq x \leq 1),$$

$$a_k \equiv a_k[f] := \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) T_k(x) dx.$$

Współczynniki Czebyszewa a_k obliczamy w sposób przybliżony

$$a_k \approx \alpha_k^n := \frac{2}{\pi} Q_n^{GC}(f \cdot T_k) = \frac{2}{n+1} \sum_{j=0}^n f(t_j) T_k(t_j),$$

$$a_k \approx \beta_k^n := \frac{2}{\pi} Q_n^L(f \cdot T_k) = \frac{2}{n} \sum_{j=0}^n '' f(u_j) T_k(u_j),$$

Lemat

Jeśli $f = \sum_{k=0}^{\infty} 'a_k T_k$, to zachodzą wzory

$$\beta_k^n = a_k + \sum_{i=1}^{\infty} (a_{2in-k} + a_{2in+k}) \quad (k = 0, 1, \dots, n-1), \quad (1)$$

$$\beta_n^n = a_n + \sum_{i=1}^{\infty} a_{(2i+1)n}. \quad (2)$$

Wzory te mówią, że jeśli ciąg $\{a_k\}$ dąży dostatecznie regularnie do zera, to równość przybliżona $\beta_k^n \approx a_k$ jest obarczona niewielkim błędem, wyrażającym się przez współczynniki $a_m[f]$ dla $m > n$:

$$\begin{aligned} \beta_0^n &= a_0 + 2a_{2n} + 2a_{4n} + \dots \approx a_0 + 2a_{2n}, \\ \beta_{n-1}^n &= a_{n-1} + a_{n+1} + a_{3n-1} + \dots \approx a_{n-1} + a_{n+1}, \\ &\dots\dots\dots \\ \beta_{n-2}^n &= a_{n-2} + a_{n+2} + a_{3n-2} + \dots \approx a_{n-2} + a_{n+2}, \\ \beta_n^n &= a_n + a_{3n} + a_{5n} + \dots \approx a_n + a_{3n}. \end{aligned}$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx, \quad f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k(x)$$

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) T_k(x) \, dx, \quad k \geq 0$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx, \quad f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k(x)$$

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) T_k(x) \, dx, \quad k \geq 0$$

$$Q_n(f) := \int_{-1}^1 \left(\sum_{k=0}^n a_k T_k(x) \right) dx$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx, \quad f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} a_k T_k(x)$$

$$a_k = \frac{2}{\pi} \int_{-1}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} f(x) T_k(x) \, dx, \quad k \geq 0$$

$$Q_n(f) := \int_{-1}^1 \left(\sum_{k=0}^n a_k T_k(x) \right) dx = 2 \sum_{k=0}^{\lfloor n/2 \rfloor} \frac{a_{2k}}{1-4k^2}$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx$$

$$Q_n^{CC}(f) := \int_{-1}^1 J_n(x) \, dx, \quad J_n = \sum_{j=0}^n {}''\beta_j T_j$$

$$I(f) = \int_{-1}^1 f(x) \, dx$$

$$Q_n^{CC}(f) := \int_{-1}^1 J_n(x) \, dx, \quad J_n = \sum_{j=0}^n{}'' \beta_j T_j$$

$$Q_n^{CC}(f) = \sum_{k=0}^n{}'' A_k^{(n)} f(u_k), \quad A_k^{(n)} := \frac{4}{n} \sum_{j=0}^{n/2}{}'' \frac{T_{2j}(u_k)}{1 - 4j^2}$$

Uwaga: w powyższym wzorze symbol $\sum_{j=0}^{n/2}{}''$ oznacza sumę, w której pierwszy składnik jest pomnożony przez $1/2$, zaś ostatni jest mnożony przez $1/2$ tylko, gdy n jest parzyste.

Interpolacyjna kwadratura Clenshawa-Curtisa

Z własności wielomianów Czebyszewa

$$T_j(u_k) = T_k(u_j),$$

mamy

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) T_j(u_k) = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) T_k(u_j),$$

a więc przybliżenia β_j współczynników Czebyszyszewa $a_j[f]$ można obliczać za pomocą algorytmu Clenshawa.

Z własności wielomianów Czebyszewa

$$T_j(u_k) = T_k(u_j),$$

mamy

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) T_j(u_k) = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) T_k(u_j),$$

a więc przybliżenia β_j współczynników Czebyszyszewa $a_j[f]$ można obliczać za pomocą algorytmu Clenshawa. Obliczając raz wektor współczynników $[f(u_0), f(u_1), \dots, f(u_n)]^T$ wywołujemy $n + 1$ razy algorytm Clenshawa, mianowicie z parametrem $t = u_0, u_1, \dots, u_n$, w celu obliczenia współczynników $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$.

Z własności wielomianów Czebyszewa

$$T_j(u_k) = T_k(u_j),$$

mamy

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) T_j(u_k) = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) T_k(u_j),$$

a więc przybliżenia β_j współczynników Czebyszyszewa $a_j[f]$ można obliczać za pomocą algorytmu Clenshawa. Obliczając raz wektor współczynników $[f(u_0), f(u_1), \dots, f(u_n)]^T$ wywołujemy $n + 1$ razy algorytm Clenshawa, mianowicie z parametrem $t = u_0, u_1, \dots, u_n$, w celu obliczenia współczynników $\beta_0, \beta_1, \dots, \beta_n$. Ostatecznie otrzymujemy metodę o złożoności $\mathcal{O}(n^2)$.

Wszystkie współczynniki

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) \cos(kj\pi/n), \quad j = 0, 1, \dots, n$$

można wyznaczyć w czasie $\mathcal{O}(n \log n)$ za pomocą **szybkiej transformaty Fouriera (FFT)**.

Wszystkie współczynniki

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) \cos(kj\pi/n), \quad j = 0, 1, \dots, n$$

można wyznaczyć w czasie $\mathcal{O}(n \log n)$ za pomocą **szybkiej transformaty Fouriera (FFT)**.

- algorytm FFT powstał w 1965 roku.

Interpolacyjna kwadratura Clenshawa-Curtisa

Wszystkie współczynniki

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) \cos(kj\pi/n), \quad j = 0, 1, \dots, n$$

można wyznaczyć w czasie $\mathcal{O}(n \log n)$ za pomocą **szybkiej transformaty Fouriera (FFT)**.

- algorytm FFT powstał w 1965 roku.
- Clenshaw i Curtis opublikowali swoją metodę w 1960 roku.

Wszystkie współczynniki

$$\beta_j = \frac{2}{n} \sum_{k=0}^n {}'' f(u_k) \cos(kj\pi/n), \quad j = 0, 1, \dots, n$$

można wyznaczyć w czasie $\mathcal{O}(n \log n)$ za pomocą **szybkiej transformaty Fouriera (FFT)**.

- algorytm FFT powstał w 1965 roku.
- Clenshaw i Curtis opublikowali swoją metodę w 1960 roku.
- Uwaga: Jeśli $n = 2^j$, to wszystkie węzły $u_k = \cos(k\pi/n)$ można wyznaczyć obliczając tylko $\mathcal{O}(\log n)$ wywołań funkcji cosinus.

Szybka transformata Fouriera

Problem $\mathbf{y} = DCT(N, \mathbf{x})$

Dane: $\mathbf{x} = [x_0, x_1, \dots, x_{N-1}]$

Wynik: $\mathbf{y} = [y_0, y_1, \dots, y_{N-1}]$, gdzie

$$y_k = \sum_{j=0}^{N-1} x_j \theta_N^{jk} \quad (\theta_N = \exp(2\pi i/N), \quad i = \sqrt{-1}).$$

Szybka transformata Fouriera

Problem $y = DCT(N, x)$

Dane: $x = [x_0, x_1, \dots, x_{N-1}]$

Wynik: $y = [y_0, y_1, \dots, y_{N-1}]$, gdzie

$$y_k = \sum_{j=0}^{N-1} x_j \theta_N^{jk} \quad (\theta_N = \exp(2\pi i/N), \quad i = \sqrt{-1}).$$

Zakładamy, że $N = 2M$. Mamy

$$\begin{aligned} y_k &= \sum_{j=0}^{N-1} x_j \theta_N^{jk} = \sum_{j=0}^{M-1} x_j \theta_N^{jk} + \sum_{j=M}^{N-1} x_j \theta_N^{jk} \\ &= \sum_{j=0}^{M-1} x_j \theta_N^{jk} + \sum_{j=0}^{M-1} x_{M+j} \theta_N^{(M+j)k} = \sum_{j=0}^{M-1} x_j \theta_N^{jk} + \sum_{j=0}^{M-1} (-1)^k x_{M+j} \theta_N^{jk} \\ &= \sum_{j=0}^{M-1} (x_j + (-1)^k x_{M+j}) \theta_N^{jk} \quad (3) \end{aligned}$$

$$y_k = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j + (-1)^k x_{M+j}) \theta_N^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

$$y_k = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j + (-1)^k x_{M+j}) \theta_N^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

Dla parzystych i nieparzystych wskaźników otrzymujemy wzory

$$y_{2k} = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j + x_{M+j}) \theta_M^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, M-1,$$

$$y_{2k+1} = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j - x_{M+j}) \theta_N^j \theta_M^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, M-1$$

Stąd widzimy, że wektory $[y_0, y_2, \dots, y_{N-2}] = DCT(M, \bar{x})$,
 $[y_1, y_3, \dots, y_{N-1}] = DCT(M, \tilde{x})$ możemy obliczyć rekurencyjnie
rozwiązując dwa podproblemy DCT o rozmiarze $M = N/2$.

$$y_k = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j + (-1)^k x_{M+j}) \theta_N^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, N-1$$

Dla parzystych i nieparzystych wskaźników otrzymujemy wzory

$$y_{2k} = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j + x_{M+j}) \theta_M^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, M-1,$$

$$y_{2k+1} = \sum_{j=0}^{M-1} (x_j - x_{M+j}) \theta_N^j \theta_M^{jk}, \quad k = 0, 1, \dots, M-1$$

Stąd widzimy, że wektory $[y_0, y_2, \dots, y_{N-2}] = DCT(M, \bar{x})$, $[y_1, y_3, \dots, y_{N-1}] = DCT(M, \tilde{x})$ możemy obliczyć rekurencyjnie rozwiązując dwa podproblemy DCT o rozmiarze $M = N/2$.

Dla uzasadnienia złożoności obliczeniowej algorytmu FFT, wystarczy skorzystać z tego, że rozwiązaniem związku rekurencyjnego

$$T(N) = 2T(N/2) + \mathcal{O}(N)$$

jest $T(N) = \mathcal{O}(N \log N)$.

Szybka transformata Fouriera

Implementacja w Juli

```
# Dyskretna transformacja cosinusowa
# Implementacja naiwna, wprost ze wzoru.
# Złożoność:  $O(n^2)$ 
function slowFFT(x)
    N = length(x);
    θ = [exp(Complex(0,2π*j/N)) for j=0:N-1];
    y = Complex(0,0)*zeros(N);
    for k=0:N-1
        y[k+1] = dot(x,θ.^k);
    end;
    return y;
end;

# Dyskretna transformacja cosinusowa
# Implementacja za pomocą "dziel i zwyciężaj"
# Złożoność:  $O(n \log n)$ 
function myFFT(x) # N =  $2^k$ 
    N = length(x);
    if (N==1) return x; end;
    M = Int( floor(N/2) );
    xL = x[1:M];
    xR = x[M+1:N];
    ye = myFFT(xL+xR);
    yo = myFFT((xL-xR).*[exp(Complex(0,2π*j/N)) for j=0:M-1]);
    y = Complex(0,0)*zeros(N);
    y[1:2:N-1] = ye;
    y[2:2:N] = yo;
    return y;
end;
```