

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Ph.D. akademie, 11. listopadu 2022, FEI VŠB-TU Ostrava

Dalibor Lukáš

Katedra aplikované matematiky, FEI
VŠB-TU Ostrava

web: <http://home1.vsb.cz/~luk76>

email: dalibor.lukas@vsb.cz

VŠB TECHNICKÁ
UNIVERZITA
OSTRAVA

FAKULTA
ELEKTROTECHNIKY
A INFORMATIKY

KATEDRA
APLIKOVANÉ
MATEMATIKY

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova kurzu

1. Soustavy lineárních rovnic
2. Interpolace a numerická integrace
3. Aproximace metodou nejmenších čtverců, FFT
4. Obyčejné a parciální diferenciální rovnice metodami konečných a hraničních prvků

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 2. přednášky: Interpolace a numerická integrace

- Lagrangeova interpolace
- Ortogonální systémy polynomů
- Numerická integrace (kvadratura)

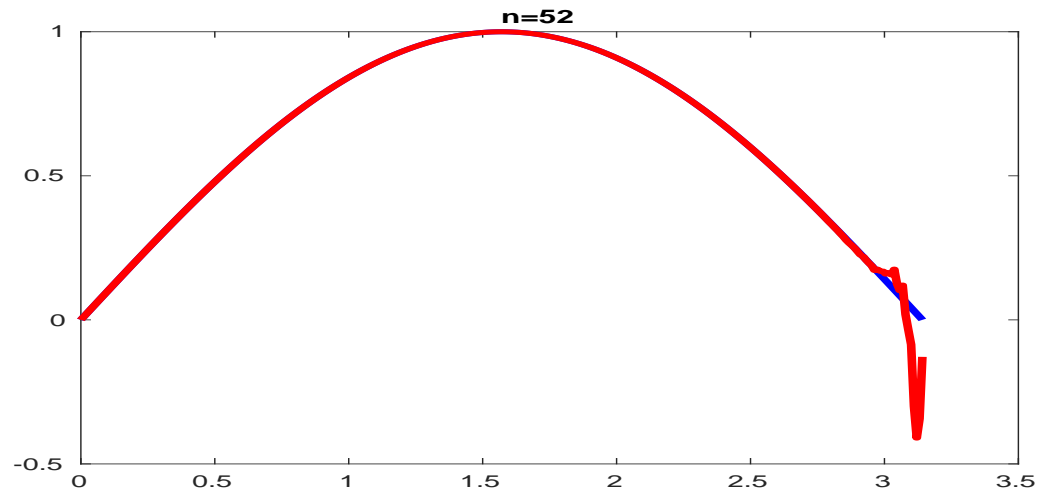
Příklad: Interpolace monomiály

Proložme $f(x) := \sin(x)$ v bodech $x_i := \frac{i\pi}{n+1}$, $i = 0, \dots, n$ pol. $f_n(x) := \sum_{i=0}^n \alpha_i x^i$.

Řešíme soustavu lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} 1 & x_0 & (x_0)^2 & \dots & (x_0)^n \\ 1 & x_1 & (x_1)^2 & \dots & (x_1)^n \\ 1 & x_2 & (x_2)^2 & \dots & (x_2)^n \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 1 & x_n & (x_n)^2 & \dots & (x_n)^n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f(x_0) \\ f(x_1) \\ f(x_2) \\ \vdots \\ f(x_n) \end{pmatrix}.$$

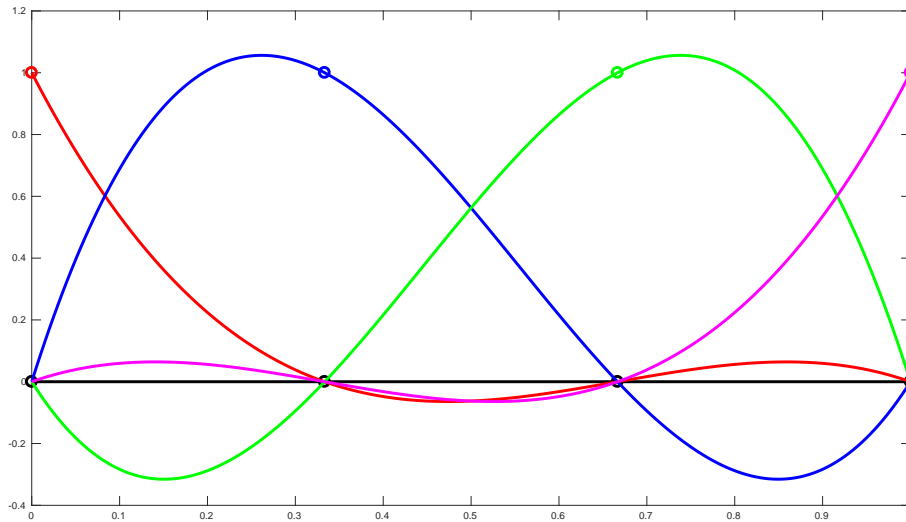
Toto řešení je nestabilní (citlivé na zaokrouhlovací chyby).



Lagrangeova interpolace

Lagrangeova báze prostoru polynomů \mathcal{P}^n stupně n

Dáno: $n \in \mathbb{N}_0$, $-\infty < x_0 < \dots < x_n < \infty$.



$$L_i^{(n)}(x) := \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

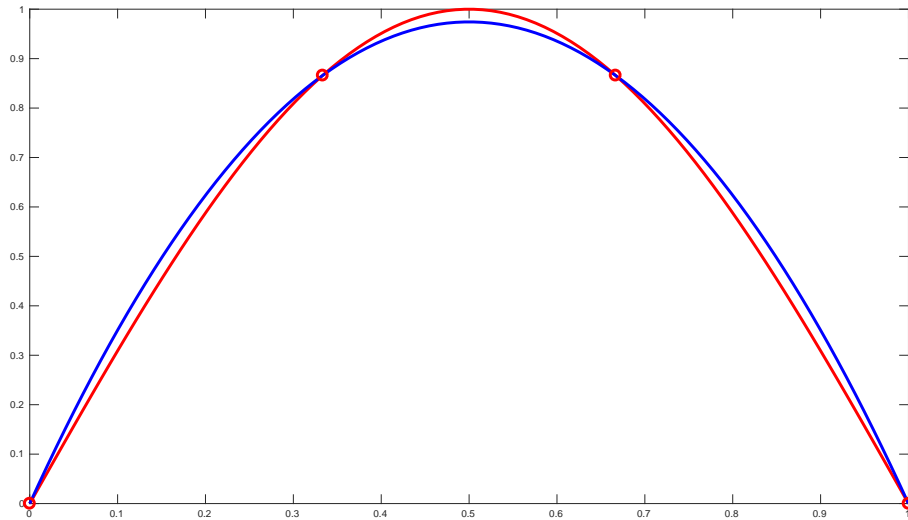
$$L_i^{(n)}(x) \in \mathcal{P}^n : \quad L_i^{(n)}(x_j) = \delta_{ij} := \begin{cases} 1, & i = j, \\ 0, & i \neq j. \end{cases}$$

Lagrangeova interpolace

Rychlý a numericky stabilní výpočet interpolace

Dáno: $f(x) \in C(\langle a, b \rangle)$, $n \in \mathbb{N}_0$, $a \leq x_0 < \dots < x_n \leq b$.

Hledáme: $f_n(x) \in \mathcal{P}^n := \{\sum_{i=0}^n a_i x^i : a_i \in \mathbb{R}\} : f_n(x_i) = f(x_i) \forall i$.



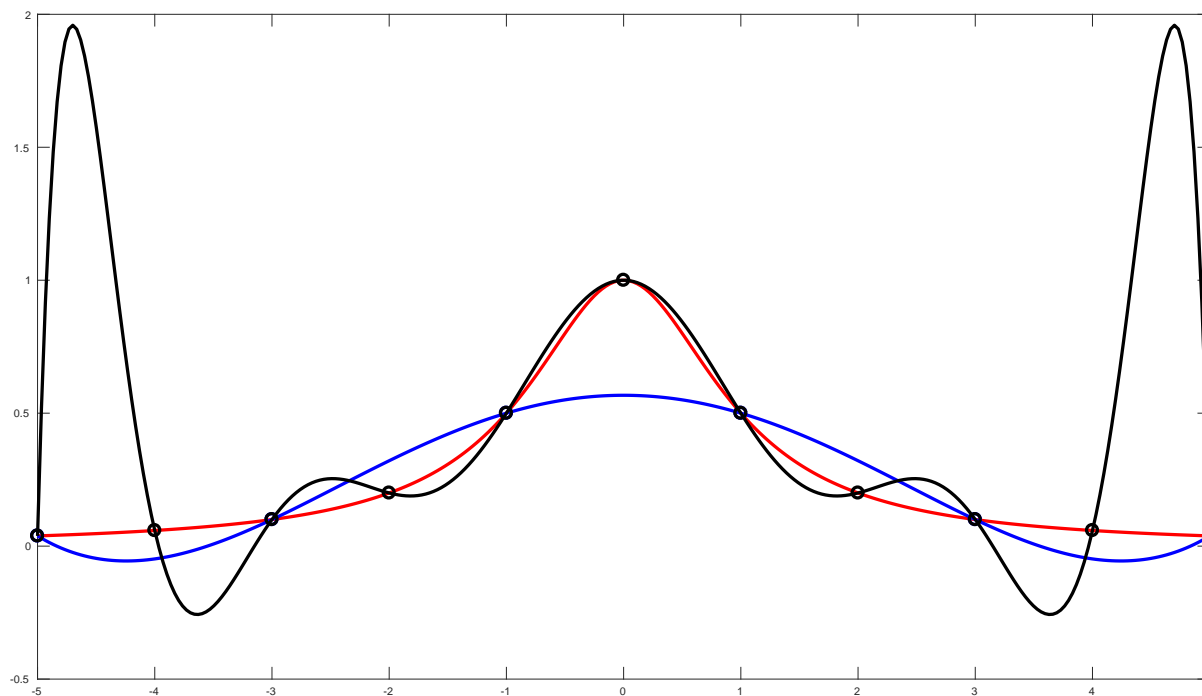
$$f_n(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j}$$

Chyba: Je-li navíc $f \in C^{(n+1)}(\langle a, b \rangle)$, pak $f(x) - f_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi_x)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^n (x - x_i)$.

Lagrangeova interpolace

Interpolace Rungeho funkce na ekvidistantní síti

$$f(x) := \frac{1}{1+x^2}, \quad x \in \langle -5, 5 \rangle, \quad x_i := -5 + 10 \frac{i}{n}, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$



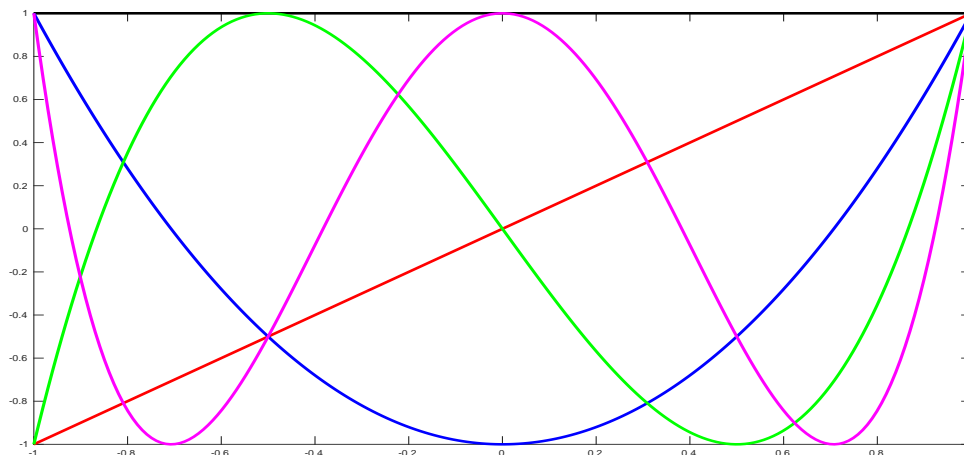
$n := 5,$
 $n := 10.$

Lagrangeova interpolace

Čebyševovy polynomy

Definice (3-člennou) rekurencí:

$$T_0(x) := 1, \quad T_1(x) := x, \quad T_n(x) := 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \text{ pro } n \geq 2.$$



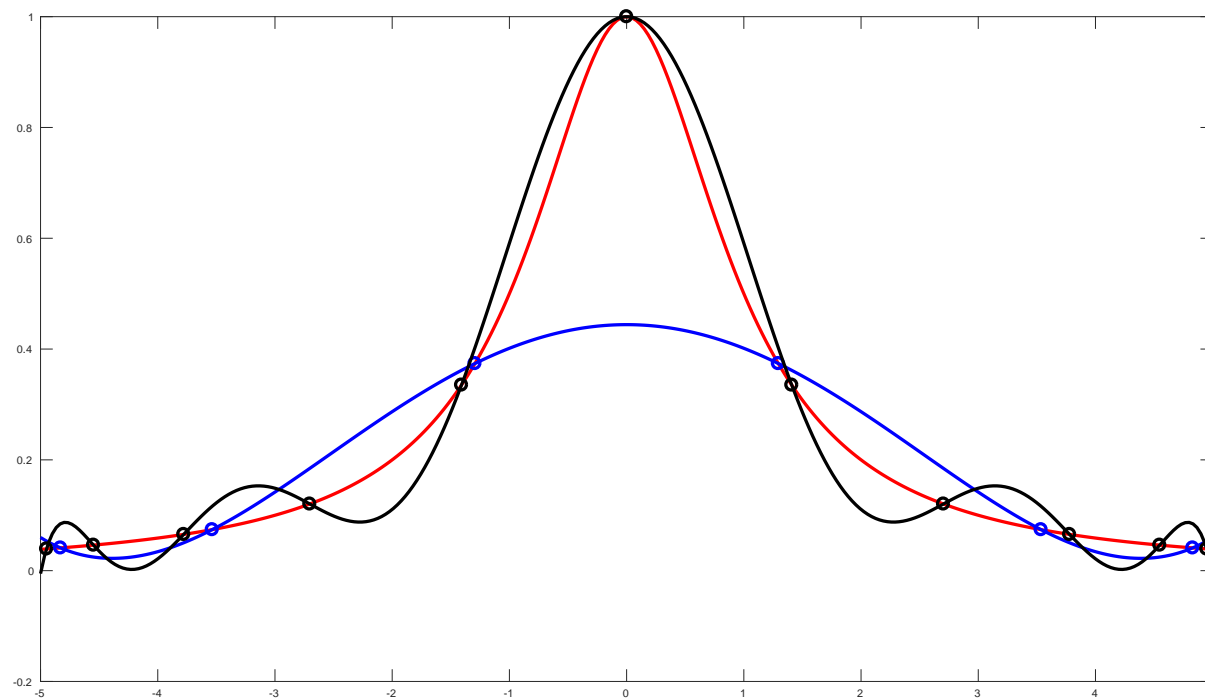
Pro $x \in \langle -1, 1 \rangle$ Čeb. polynomy splňují: $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$. Kořeny T_{n+1} , $\xi_i^{(n+1)} = \cos \frac{(2i+1)\pi}{2(n+1)}$, $i = 0, \dots, n$, minimalizují výraz z interpolační chyby:

$$\xi^{(n+1)} = \arg \min_{\mathbf{x} \in \langle -1, 1 \rangle^{n+1}} \max_{x \in \langle -1, 1 \rangle} \left| \prod_{i=0}^n (x - x_i) \right|.$$

Lagrangeova interpolace

Interpolace Rungeho funkce v kořenech ξ_i Čeb. polynomů

$$f(x) := \frac{1}{1+x^2}, \quad x \in \langle -5, 5 \rangle, \quad x_i := -5 + 10\xi_i, \quad i = 0, 1, \dots, n.$$



$n := 5,$
 $n := 10.$

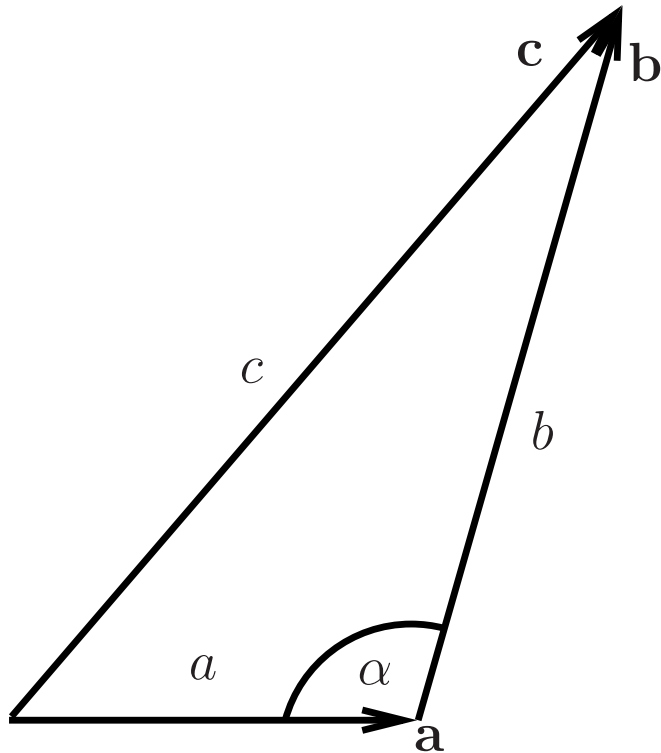
Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 2. přednášky: Interpolace a numerická integrace

- Lagrangeova interpolace
- Ortogonální systémy polynomů
- Numerická integrace (kvadratura)

Ortogonální systémy polynomů

Skalární součin = kritérium kolmosti



Vektorový počet

$$\mathbf{a} := \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{b} := \begin{pmatrix} b_1 \\ b_2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{c} = \mathbf{a} + \mathbf{b} := \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{pmatrix}$$

Kvadrát velikosti vektoru, **Kosinová věta**

$$\begin{aligned} c^2 = \|\mathbf{c}\|^2 &= \left\| \begin{pmatrix} a_1 + b_1 \\ a_2 + b_2 \end{pmatrix} \right\|^2 = \\ &= (a_1 + b_1)^2 + (a_2 + b_2)^2 = \\ &= \underbrace{(a_1)^2 + (a_2)^2}_{=\|\mathbf{a}\|^2} + \underbrace{(b_1)^2 + (b_2)^2}_{=\|\mathbf{b}\|^2} + 2 \underbrace{(a_1 b_1 + a_2 b_2)}_{=:\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = \cos(\alpha) \|\mathbf{a}\| \|\mathbf{b}\|} \\ &= a^2 + b^2 + 2 \cos(\alpha) a b \end{aligned}$$

$\alpha = \frac{\pi}{2} \Leftrightarrow \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = 0$: Pythagorova \equiv Kosinová věta

Ortogonalní systémy polynomů

Eukleidovský skalární součin, norma, ortogonalita, ortonormalita

Bilineární forma $(\cdot, \cdot) : \mathbb{R}^n \times \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}$ definovaná

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \mathbf{x} \cdot \mathbf{y}$$

se nazývá **Eukleidovský skalární součin**. Ten indukuje **Eukleidovskou normu**

$$\|\mathbf{x}\| := \sqrt{(\mathbf{x}, \mathbf{x})}.$$

Vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n \setminus \{\mathbf{0}\}$ jsou **ortogonální** (v Eukl. skalárním součinu), pokud

$$(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = 0,$$

a jsou **ortonormální** (v Eukl. skalárním součinu), pokud navíc

$$\|\mathbf{x}\| = \|\mathbf{y}\| = 1.$$

Úhel mezi vektory $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in \mathbb{R}^n$ zobecníme takto

$$\cos \alpha = \frac{(\mathbf{x}, \mathbf{y})}{\|\mathbf{x}\| \|\mathbf{y}\|}$$

Ortogonalní systémy polynomů

Zobecnění pojmů

Mějme vektorový prostor \mathcal{V} a symetrickou bilineární formu $B : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{R}$, jejíž příslušná kvadratická forma $Q(\mathbf{v}) := B(\mathbf{v}, \mathbf{v})$ je pozitivně definitní (kladná).

- B je **skalární součin** na \mathcal{V} .
- Nenulové **vektory** $\mathbf{u}, \mathbf{v} \in \mathcal{V}$ jsou **ortogonální vzhledem k B** , pokud

$$(\mathbf{u}, \mathbf{v})_B := B(\mathbf{u}, \mathbf{v}) = 0.$$

- B indukuje normu vektoru $\mathbf{v} \in \mathcal{V}$

$$\|\mathbf{v}\|_B := \sqrt{B(\mathbf{u}, \mathbf{u})}.$$

Příklad: $B(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := 2x_1y_1 - x_1y_2 - x_2y_1 + 2x_2y_2$ je skalární součin na \mathbb{R}^2 .

B je zjevně symetrická bilineární forma. Příslušná kvadr. forma

$$Q(\mathbf{x}) := B(\mathbf{x}, \mathbf{x}) = 2(x_1)^2 - 2x_1x_2 + 2(x_2)^2 = (x_1)^2 + (x_2)^2 + (x_1 - x_2)^2 > 0$$

pro $\mathbf{x} \neq \mathbf{0}$, tedy Q je pozitivně definitní.

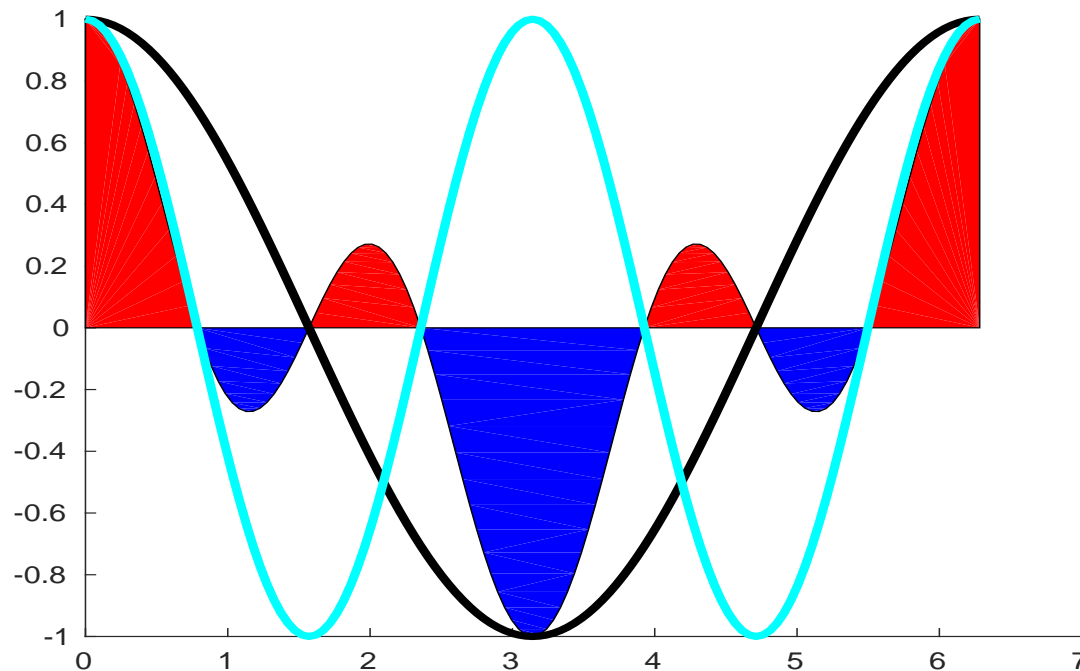
Ortogonalní systémy polynomů

Kolmé funkce (báze pro MP3, JPEG, viz příště)

Funkce $(\cos(kx))_{k=0}^{\infty}$, $(\sin(kx))_{k=1}^{\infty}$ jsou navzájem kolmé vzhledem ke skalárnímu součinu

$$(f, g) := (f, g)_{L^2(0, 2\pi)} := \int_0^{2\pi} f(x) g(x) dx$$

Např. $(\cos(x), \cos(2x)) = 0$



Ortogonalní systémy polynomů

$L_w^2(a, b)$ skalární součin

Mějme $(a, b) \in \mathbb{R}$, interval (ne nutně omezený), a váhovou funkci $w : (a, b) \rightarrow \mathbb{R}$:

$$w(x) > 0 \text{ „skoro všude“ v } (a, b), \quad \int_a^b w(x) dx \in \mathbb{R}.$$

Pak následující bilineární forma tvoří skalární součin na prostoru (např. spojitých) funkcí:

$$(f, g)_{L_w^2(a, b)} := \int_a^b w(x) f(x) g(x) dx.$$

Dále nás budou zajímat zejména tyto případy:

- $(-1, 1)$, $w(x) := 1$ (Legendreovy polynomy/kvadratura),
- $(-1, 1)$, $w(x) := \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ (Čebyševovy polynomy/kvadratura),
- $(0, 1)$, $w(x) := -\ln x$ („Gauss-log“ kvadratura),
- $(0, \infty)$, $w(x) := e^{-x}$ (Laguerrovy polynomy/kvadratura),
- $(-\infty, \infty)$, $w(x) := e^{-x^2}$ (Hermiteovy polynomy/kvadratura).

Ortogonalní systémy polynomů

Gram–Schmidtův ortogonalizační/ortonormalizační algoritmus v \mathbb{R}^n

Mějme bázi $E := (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$ prostoru \mathbb{R}^n . Ortogonalizujme ji.

$$\mathbf{f}_1 := \mathbf{e}_1,$$

$$\mathbf{f}_i := \mathbf{e}_i - \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \mathbf{f}_j, \text{ kde } \alpha_{ij} = \frac{(\mathbf{e}_i, \mathbf{f}_j)}{\|\mathbf{f}_j\|^2}, \text{ pro } i \in \{2, \dots, n\}.$$

Arnoldiho (spec. Gram-Schmidt) algoritmus v \mathcal{P}^n , 3-členná rekurence

$$p_0(x) := 1,$$

$$p_i(x) := x p_{i-1}(x) - \sum_{j=0}^{i-1} \alpha_{ij} p_j(x), \text{ kde } \alpha_{ij} = \frac{(x p_{i-1}(x), p_j(x))}{(p_j(x), p_j(x))}, \text{ pro } i \in \{1, \dots, n\}.$$

Pro $L_w^2(a, b)$ skal. součin dostáváme 3-člennou rekurenci t.j.

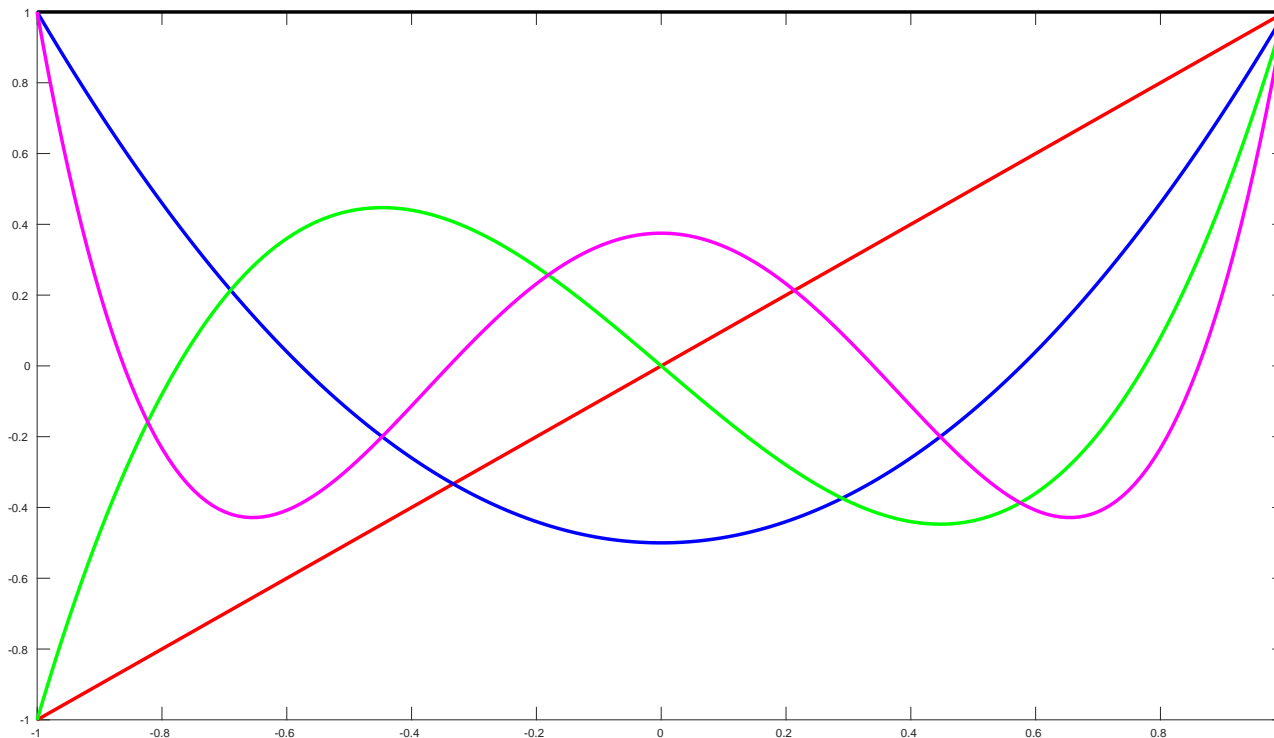
$$\alpha_{i,i-2} = \alpha_{i,i-3} = \dots = \alpha_{i,0} = 0.$$

Ortogonalní systémy polynomů

Legendreovy polynomy

$$a := -1, \quad b := 1, \quad w(x) := 1 :$$

$$P_0(x) := 1, \quad P_1(x) := x, \quad P_n(x) := \frac{2n-1}{n} x P_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} P_{n-2}(x) \text{ pro } n \geq 2.$$

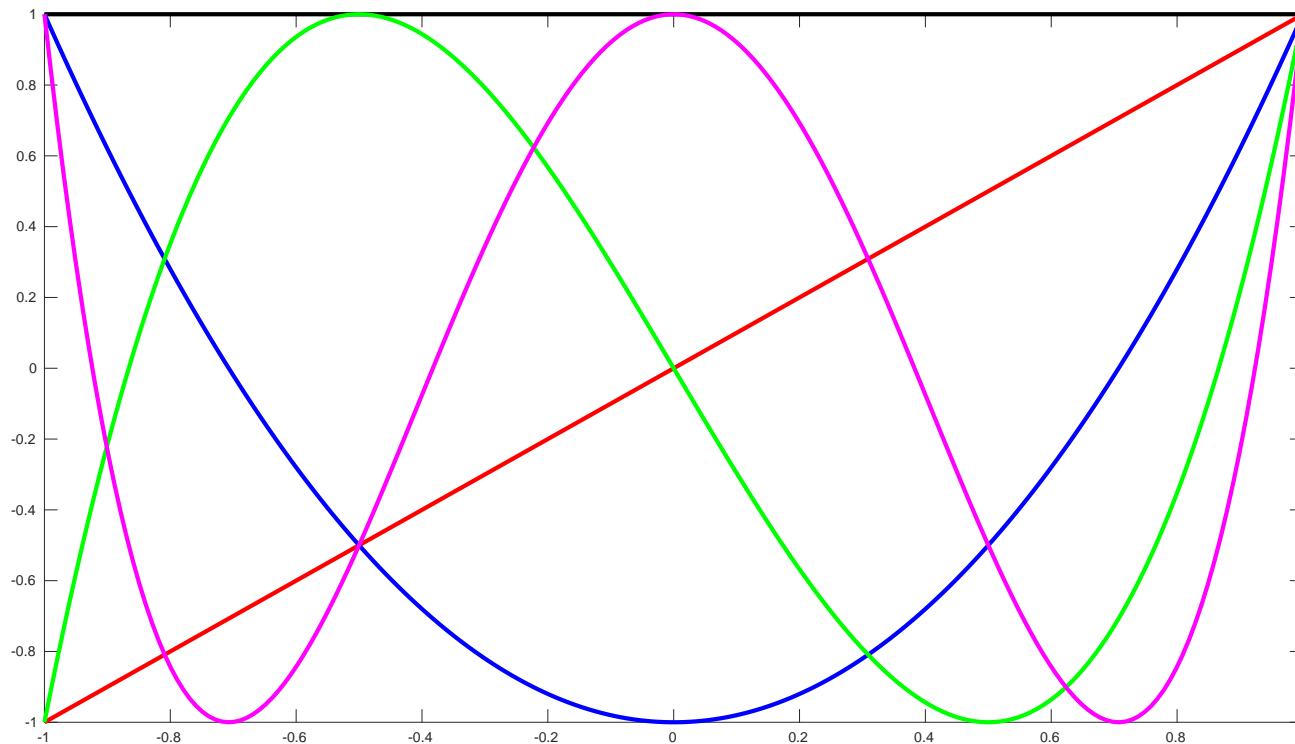


Ortogonalní systémy polynomů

Čebyševovy polynomy

$$a := -1, \quad b := 1, \quad w(x) := \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} :$$

$$T_0(x) := 1, \quad T_1(x) := x, \quad T_n(x) := 2xT_{n-1}(x) - T_{n-2}(x) \text{ pro } n \geq 2.$$

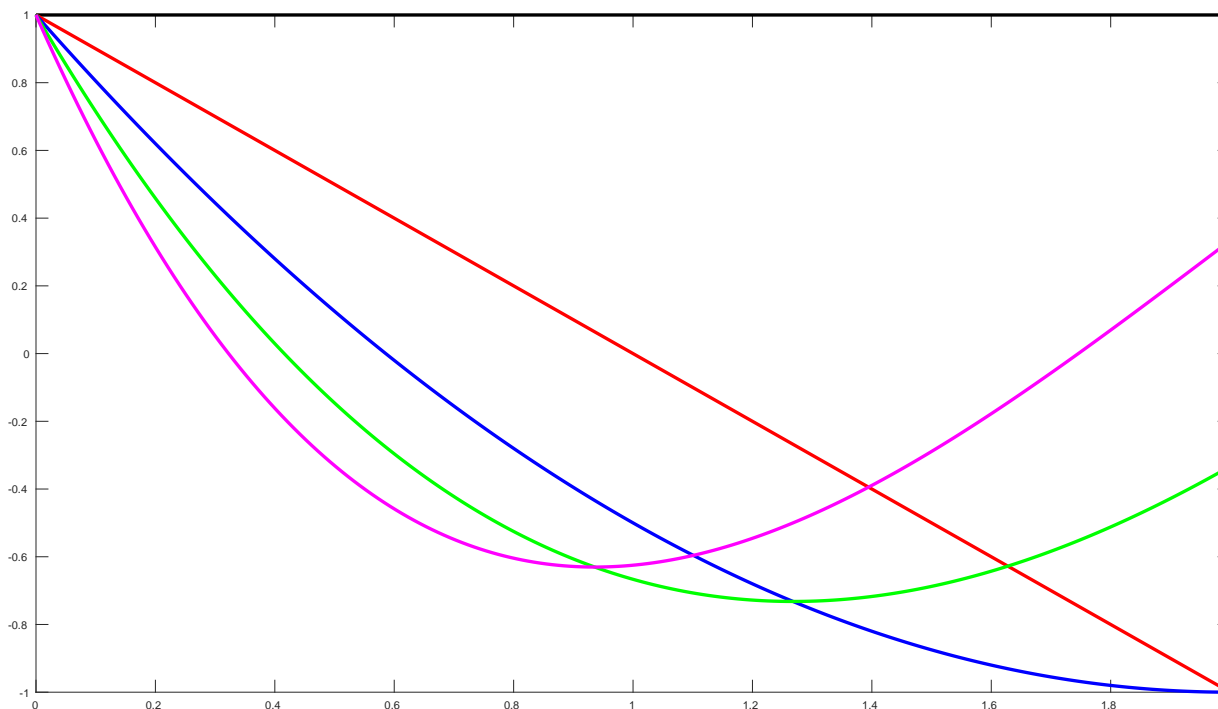


Ortogonalní systémy polynomů

Laguerrovy polynomy

$$a := 0, \quad b := \infty, \quad w(x) := e^{-x} :$$

$$L_0(x) := 1, \quad L_1(x) := 1-x, \quad L_n(x) := \frac{2n-1-x}{n} L_{n-1}(x) - \frac{n-1}{n} L_{n-2}(x) \text{ pro } n \geq 2.$$

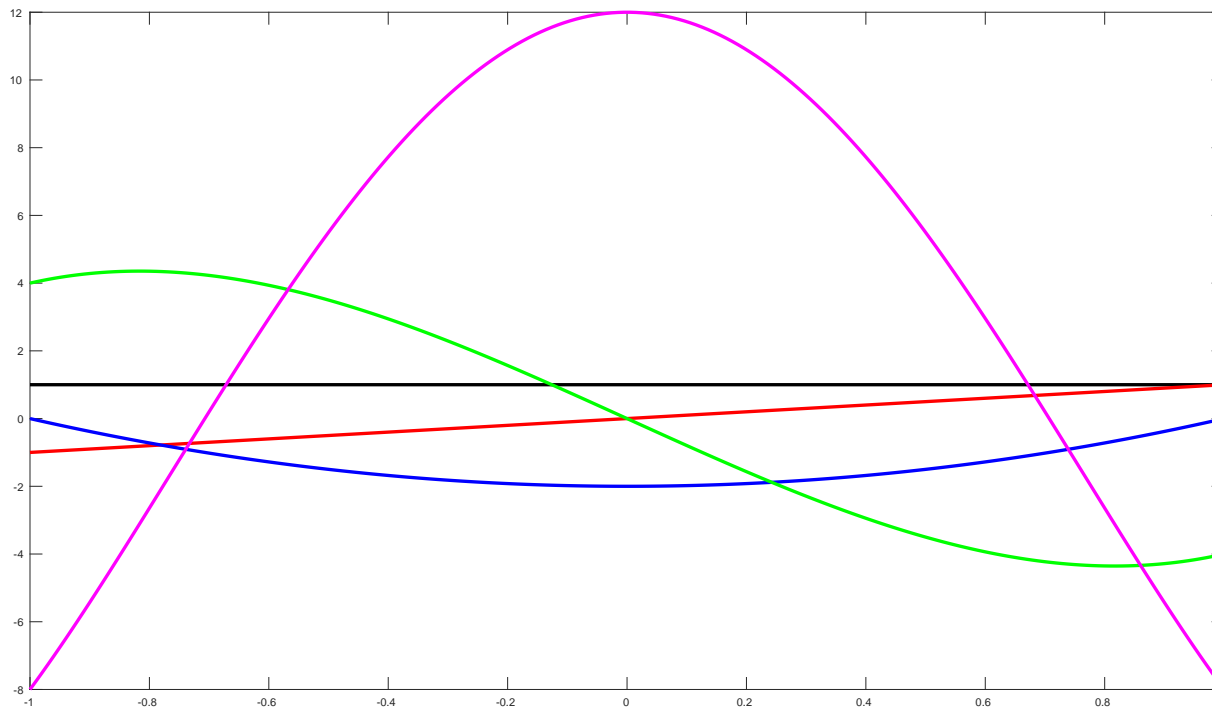


Ortogonalní systémy polynomů

Hermiteovy polynomy

$$a := -\infty, \quad b := \infty, \quad w(x) := e^{-x^2} :$$

$$H_0(x) := 1, \quad H_1(x) := x, \quad H_n(x) := 2xH_{n-1}(x) - 2(n-1)H_{n-2}(x) \text{ pro } n \geq 2.$$



Ortogonalní systémy polynomů

Výpočet kořenů polynomu

Kořeny polynomu

$$p_n(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + \cdots + c_{n-1} x^{n-1} + c_n x^n, \quad c_n \neq 0,$$

jsou totožné s kořeny polynomu

$$\tilde{p}_n(x) := \underbrace{\frac{c_0}{c_n}}_{=:\tilde{c}_0} + \underbrace{\frac{c_1}{c_n}}_{=:\tilde{c}_1} x + \underbrace{\frac{c_2}{c_n}}_{=:\tilde{c}_2} x^2 + \cdots + \underbrace{\frac{c_{n-1}}{c_n}}_{=:\tilde{c}_{n-1}} x^{n-1} + x^n,$$

a ty jsou rovny vlastním číslům tzv. companion matice

$$\begin{pmatrix} 0 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{c}_0 \\ 1 & 0 & \cdots & 0 & \tilde{c}_1 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 & \tilde{c}_2 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 & \tilde{c}_{n-1} \end{pmatrix}.$$

Stabilní a rychlé numerické metody pro řešení náročných inženýrských úloh

Osnova 2. přednášky: Interpolace a numerická integrace

- Lagrangeova interpolace
- Ortogonální systémy polynomů
- Numerická integrace (kvadratura)

Numerická integrace (kvadratura)

Princip: Nahradíme integrand interpolantem.

$$\begin{aligned}\int_a^b f(x) dx &\approx \int_a^b f_n(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^n f(x_i) \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{x - \xi_j^{(n)}}{\xi_i^{(n)} - \xi_j^{(n)}} dx \\ &= \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n w_i^{(n)} f\left(\frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \xi_i^{(n)}\right),\end{aligned}$$

kde např.

$$-1 \leq \underbrace{\xi_0^{(n)} < \dots < \xi_n^{(n)}}_{\text{integrační body}} \leq 1, \quad \underbrace{w_i^{(n)}}_{\text{int. váhy}} := \int_{-1}^1 \prod_{\substack{j=0 \\ j \neq i}}^n \frac{\xi - \xi_j^{(n)}}{\xi_i^{(n)} - \xi_j^{(n)}} d\xi$$

Newtonova(-Cotesova) kvadratura: $\xi_i^{(n)} := -1 + 2\frac{i}{n}$, $i = 0, \dots, n$.

Gaussova(-Legendreova) kvadratura: $\xi_i^{(n)}$ jsou kořeny Legendreova polynomu $P_{n+1}(x)$.

Numerická integrace (kvadratura)

Gaussova kvadratura

Uvažujme skalární součin $L_w^2(a, b)$ a integrál

$$I := (f, 1)_{L_w^2(a, b)} = \int_a^b w(x) f(x) dx.$$

Integrační body volíme jako kořeny příslušného ortogonálního polynomu $p_{n+1}(x)$.

Platí:

- Všechny kořeny p_{n+1} jsou reálné, leží v intervalu (a, b) a jsou navzájem různé.
- Kvadratura s těmito kořeny je přesná pro všechny polynomy z \mathcal{P}^{2n+1} .
- Je-li interval (a, b) omezený a $f(x)$ je v (a, b) analytická, pak Gaussova kvadratura konverguje exponenciálně.

Numerická integrace (kvadratura)

Gaussova vers. Newtonova kvadratura

$$\int_0^1 \sin(\pi x) dx = \frac{2}{\pi} \approx \mathbf{0.636619772367581}$$

n	Gaussova kvadratura	Newtonova kvadratura
0	1.0000000000000000	1.0000000000000000
1	0.616190508479558	0.0000000000000000
2	0.637061877299981	0.6666666666666667
3	0.636614752129754	0.649519052838329
4	0.636619807472219	0.6361648221771
5	0.636619772201192	0.636366109282591
6	0.636619772368151	0.636625442624238
7	0.63661977236758	0.636623230976873
8	0.636619772367581	0.636619719933897
31	0.636619772367581	0.636619772363701
63	0.636619772367581	0.638671875

Numerická integrace (kvadratura)

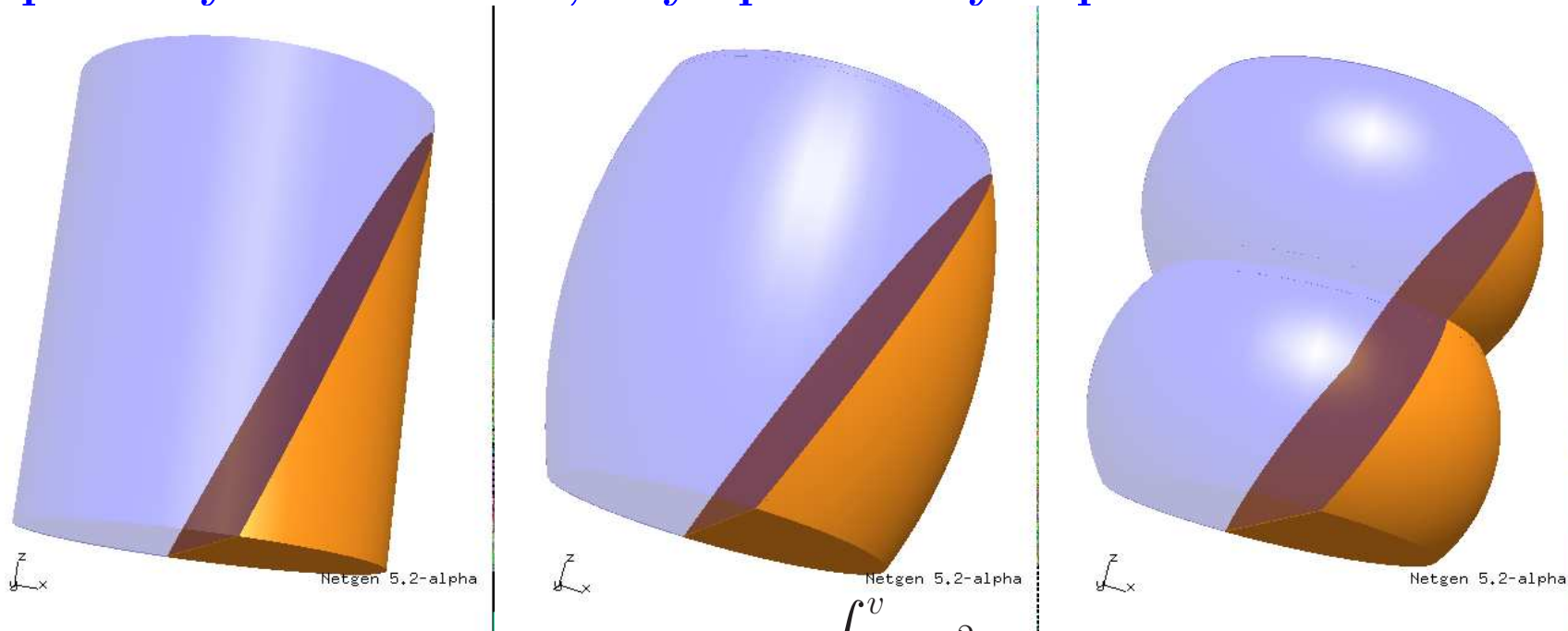
Gaussova vers. Newtonova kvadratura

$$\int_{-5}^5 \frac{1}{1+x^2} dx = 2 \arctan(5) \approx \mathbf{2.74680153389003179}$$

n	Gaussova kvadratura	Newtonova kvadratura
0	10	10
1	1.07142857142857	0.384615384615385
2	4.79166666666667	6.79487179487179
3	1.8546365914787	2.08144796380091
4	3.53473960195448	2.37400530503979
5	2.30850279211885	2.30769230769231
6	3.08061040107096	3.8704486734708
7	2.540609588215	2.89899440974838
8	2.89351348551755	1.50048890712791
31	2.74678609298465	222.242927655308
63	2.74680153384364	21050053.9804688

Numerická integrace (kvadratura)

Kolik piva zbývá ve sklenici, když pivo zakrývá půlku dna?



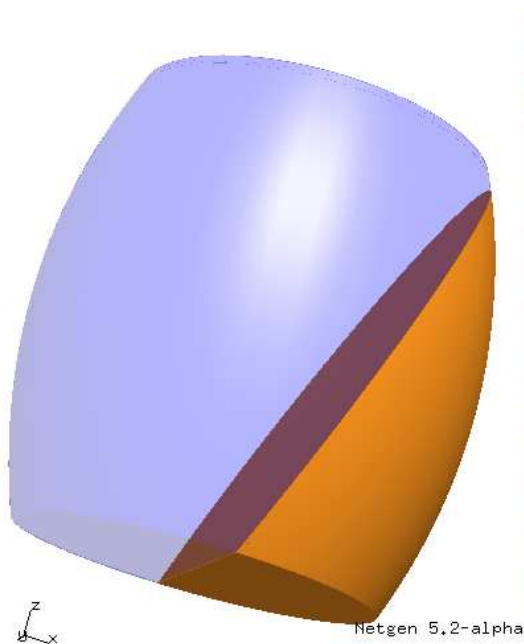
$$\text{Objem sklenice} = \int_0^v \pi r^2(z) dz,$$

$$\text{Objem piva} = \int_0^v \underbrace{\left[r^2(z) \arccos \left(\frac{r(v)}{v} \frac{z}{r(z)} \right) - \frac{r(v)}{v} z \sqrt{r^2(z) - \frac{r^2(v)}{v^2} z^2} \right]}_{=: f(z)} dz,$$

kde $r(z) : \langle 0, v \rangle \mapsto \mathbb{R}_+$ je tvar (plášť) sklenice a v je výška sklenice.

Numerická integrace (kvadratura)

Kolik piva zbývá ve sklenici, když pivo zakrývá půlku dna?



Např. $v := 1$, $r(z) := \frac{1}{4} (1 + z(1 - z))$:

$$\text{Objem sklenice} = \int_0^1 \pi r^2(z) dz = \frac{41}{120} \pi \approx \mathbf{1.07337748997651}$$

$$\text{Objem piva} = \int_0^1 f(z) dz \approx \int_0^1 p_n(z) dz = \sum_{i=0}^n w_i f(z_i) =: I_n$$

kde $p_n(z)$ je polynom stupně n , který prochází $f(z)$ v kořenech $z_0, z_1, \dots, z_n \in (0, 1)$ Legendreova ortogonálního polynomu $P_{n+1}(z)$.

n	I_n	n	I_n	n	I_n
0	0.07740951417294347	6	0.06643 671413731998	15	0.0664379 1490228415
1	0.06553899985493714	7	0.066437 29131780218	19	0.0664379 2997094274
2	0.06637347291541409	8	0.066437 57022093867	23	0.06643793 448415233
3	0.06642069316066881	9	0.066437 71627809419	31	0.06643793 685101656
4	0.06643189208136203	10	0.066437 79783358168	39	0.06643793 735796341
5	0.06643538893431605	11	0.066437 84582290042	47	0.06643793 750795548

Numerická integrace (kvadratura)

Nevlastní integrály: Gauss-Čebyševova kvadratura

$$I := \int_{-1}^1 \frac{\sin(-x^2 + 2x + 3)}{\sqrt{1-x^2}} dx$$

n	I_n	n	I_n
0	0.443341580595411	9	-0.0391346647139735
1	0.293198425234708	10	-0.0391346646483662
2	-0.113861235187953	11	-0.039134664648848
3	-0.038508399433212	12	-0.039134664648891
4	-0.0386567452146315	13	-0.0391346646488903
5	-0.0391533120636902	14	-0.0391346646488905
6	-0.039135492939562	15	-0.0391346646488903
7	-0.0391346109969149	16	-0.0391346646488904
8	-0.039134664349165		

Numerická integrace (kvadratura)

Nevlastní integrály: Gauss-Log kvadratura

$$I := \int_0^1 (-\ln x) \sin(-x^2 + 2x + 3) dx$$

n	I_n
0	-0.291607881313853
1	-0.231540043743048
2	-0.233058284359943
3	-0.233095330568843
4	-0.233094364132324
5	-0.233094358761784
6	-0.233094358948475

Numerická integrace (kvadratura)

Nevlastní integrály: Gauss-Laguerrova kvadratura

$$I := \int_0^{\infty} e^{-x} \sin(-x^2 + 2x + 3) dx$$

n	I_n
0	-0.756802495307928
1	-0.682845220356001
2	-0.139030561815973
3	-0.371584471181417
4	-0.448356834527666
5	-0.417148989312759
6	-0.235589968451425
7	-0.277817284587353
8	-0.28564025525704

Numerická integrace (kvadratura)

Nevlastní integrály: Gauss-Hermiteova kvadratura

$$I := \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} \sin(-x^2 + 2x + 3) dx$$

n	I_n
0	0.250128701725529
1	0.165419497430028
2	-0.286982191582418
3	0.281071459595821
4	-0.0778606771918533
5	0.0410626030907351
6	0.0560746196873777
7	0.00924459925113985
8	0.0395469713393161