

LJETNI SEMESTAR 2007/2008

NUMERIČKE METODE I MATEMATIČKO MODELIRANJE



12. PREDAVANJE

www.phy.hr/~npaar





METODE NUMERICĀKE INTEGRACIJE

II dio

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- prethodno razmatrane metode integracije su prilagođene problemima gdje su točke integracije x_i ekvidistantne (konstantni korak h)
- ukoliko integrand slabo varira preko velikog intervala integracije, prethodno razmatrane metode će sporo konvergirati prema traženoj preciznosti
- želimo metodu koja će imati dovoljnu preciznost, a manji broj točaka (kraće ukupno vrijeme računanja), uz pretpostavku da integrand glatko varira preko intervala
- → Gaussova kvadratura

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- osnove Gaussove kvadrature
- općenita ideja numeričke integracije zasnovana je na aproksimiranju integrala,

$$I = \int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i)$$

- (ω i x su težine i odgovarajuće točke integracije)
- kod prethodnih metoda, točke integracije su odabrane na početku, odabirom ukupnog broja točaka N , težine ω su izvedene ovisno o metodi integracije
- npr. za Simpsonovu metodu,

$$\omega : \{h/3, 4h/3, 2h/3, 4h/3, \dots, 4h/3, h/3\}$$

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- općenito, formula integracije zasnovana na Taylorovom razvoju koristeći N točaka, integrira egzaktno polinom P stupnja $N-1$, dakle, N težina ω_n može se odrediti iz N linearnih jednadžbi
- veća preciznost za određen numerički proračun može se postići ukoliko smo u mogućnosti odustati od zahtjeva na ekvidistantne točke integracije
- u Gaussovoj kvadraturi potrebno je odrediti i točke integracije i odgovarajuće težine, točke integracije neće biti jednako udaljene

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- ideja metode je određivanje težina ω koristeći ortogonalne polinome
- polinomi su ortogonalni u nekom intervalu, npr. $[-1,1]$, točke x_i su odabrane tako da budu unutar tog intervala
- zajedno sa težinama, treba odrediti $2N$ parametara
- ako integrand nije gladak, može se prilagoditi korištenjem težinskih funkcija - ortogonalnih polinoma

$$I = \int_a^b f(x)dx = \int_a^b W(x)g(x)dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i)$$

- g je glatka funkcija, W je težinska funkcija

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- težinska funkcija W je nenegativna u području integracije $x \in [a, b]$ takva da je za svaki $n \geq 0$,

$$\int_a^b |x|^n W(x) dx \text{ integrabilan.}$$

- naziv težinska funkcija znači da funkcija određuje veći značaj jednom ili drugom dijelu intervala
- formula Gaussove kvadrature:

$$\int_a^b W(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^N \omega_i f(x_i)$$

za N točaka, integrira egzaktno sve polinome $p \in P_{2N-1}$

$$\int_a^b W(x) p(x) dx = \sum_{i=1}^N \omega_i p(x_i)$$

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- pretpostavlja se da je težinska funkcija $W(x)$ neprekidna i pozitivna, i da postoji integral

$$\int_a^b W(x)dx$$

- u fizici postoji nekoliko značajnih ortogonalnih polinoma koji se dobivaju kao rješenja diferencijalnih jednačbi:
- Legendre, Hermite, Laguerre, i Chebyshevi polinomi
- odgovarajuće težinske funkcije su sljedeće:

težinska funkcija	interval	polinom
$W(x) = 1$	$x \in [-1, 1]$	Legendre
$W(x) = e^{-x^2}$	$-\infty \leq x \leq \infty$	Hermite
$W(x) = e^{-x}$	$0 \leq x \leq \infty$	Laguerre
$W(x) = 1/(\sqrt{1-x^2})$	$-1 \leq x \leq 1$	Chebyshev

GAUSSOVA METODA INTEGRACIJE

- primjena ortogonalnih polinoma u izračunu integrala:
- ako se funkcija $f(x)$ može aproksimirati s polinomom stupnja $N - 1$

$$f(x) \approx P_{N-1}(x)$$

- u integraciji sa N točaka, polinom P_{N-1} može se integrirati egzaktno
- Gaussova kvadratura omogućuje bolju polinomnu aproksimaciju funkcije $f(x)$ i to reda većeg od N , pritom zadržavajući broj točaka integracije na N

$$f(x) \approx P_{2N-1}(x)$$

- točke integracije i težine određuju se pomoću ortogonalnih polinoma

LEGENDREOVI POLINOMI

- Legendreovi polinomi su rješenje diferencijalne jednažbe

$$C(1 - x^2)P - m_l^2 P + (1 - x^2) \frac{d}{dx} \left((1 - x^2) \frac{dP}{dx} \right) = 0$$

- gdje je C konstanta, $m_l = 0$
- u slučaju $m_l \neq 0 \rightarrow$ pridruženi Legendreovi polinomi
- ova diferencijalna jednažba se pojavljuje npr. u rješavanju kutnog dijela Schroedingerove jednažbe sa sferno-simetričnim potencijalom (npr. Coulomb)
- rješenje jednažbe su polinomi

$$L_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k}{dx^k} (x^2 - 1)^k \quad k = 0, 1, 2, \dots,$$

LEGENDREOVI POLINOMI

- Legendreovi polinomi zadovoljavaju relaciju ortogonalnosti,

$$\int_{-1}^1 L_i(x)L_j(x)dx = \frac{2}{2i+1}\delta_{ij}$$

- mogu se odrediti koristeći rekurzivnu relaciju

$$(j+1)L_{j+1}(x) + jL_{j-1}(x) - (2j+1)xL_j(x) = 0$$

- obično se zadaje uvjet normiranja $L_N(1) = 1$
- Npr. određivanje L_0, L_1, L_2

$$L_0(x) = 1$$

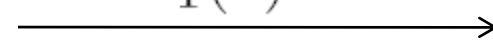
$$L_1(x) = a + bx$$

$$a = 0$$

$$b = 1$$

$$\int_{-1}^1 L_0(x)L_1(x)dx = 0$$

$$L_1(1) = 1$$



$$L_1(x) = x$$

LEGENDREOVI POLINOMI

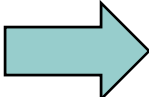
- slično se određuje i L_2

$$L_2(x) = a + bx + cx^2$$

- koriste se relacije ortogonalnosti i uvjet $L_2(1) = 1$

$$\int_{-1}^1 L_0(x)L_2(x)dx = 0$$

$$\int_{-1}^1 L_1(x)L_2(x)dx = 0$$

 $L_2(x) = \frac{1}{2} (3x^2 - 1)$

- alternativno, može se primjeniti rekurzivna relacija

$$2L_2(x) = 3xL_1(x) - L_0$$

LEGENDREOVI POLINOMI

- funkcija za izračun Legendreovih polinoma reda n za argument x :

```
double legendre( int n, double x)
{
    double r, s, t;
    int m;
    r = 0; s = 1.;
    // Use recursion relation to generate p1 and p2
    for (m=0; m < n; m++ )
    {
        t = r; r = s;
        s = (2*m+1)*x*r - m*t;
        s /= (m+1);
    } // end of do loop
    return s;
} // end of function legendre
```

$$L_0(x) = 1$$

$$L_1(x) = x$$

$$L_2(x) = (3x^2 - 1)/2$$

$$L_3(x) = (5x^3 - 3x)/2$$

$$L_4(x) = (35x^4 - 30x^2 + 3)/8$$

LEGENDREOVI POLINOMI

- relacije ortogonalnosti imaju značajnu ulogu u određivanju točaka i težina kod Gaussove integracije
- pretp. proizvoljni polinom Q_{N-1} reda $N-1$ i Legendreov polinom $L_N(x)$ reda N . Proizvoljni polinom Q_{N-1} se može izraziti preko Legendreovih polinoma:

$$Q_{N-1}(x) = \sum_{k=0}^{N-1} \alpha_k L_k(x)$$

- ovdje su α_k konstante
- primjenom relacije ortogonalnosti slijedi

$$\int_{-1}^1 L_N(x) Q_{N-1}(x) dx = \sum_{k=0}^{N-1} \int_{-1}^1 L_N(x) \alpha_k L_k(x) dx = 0$$

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

- točke integracije i težine za Gaussovu kvadraturu određuju se pomoću ortogonalnih polinoma

- def. polinom reda $2N - 1$, izrazimo ga kao

$$P_{2N-1}(x) = L_N(x)P_{N-1}(x) + Q_{N-1}(x)$$

- gdje su $P_{N-1}(x)$ i $Q_{N-1}(x)$ polinomi stupnja $N - 1$ ili manjeg, funkcija $L_N(x)$ je Legendreov polinom reda N

- Računamo integral proizvoljne funkcije $f(x)$ Gaussovom kvadraturom,

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \int_{-1}^1 P_{2N-1}(x)dx$$

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

- uvrštavanjem izraza za P_{2N-1} u integral

$$\int_{-1}^1 P_{2N-1}(x)dx = \int_{-1}^1 (L_N(x)P_{N-1}(x) + Q_{N-1}(x))dx = \int_{-1}^1 Q_{N-1}(x)dx$$

- dakle, treba izračunati $\int_{-1}^1 Q_{N-1}(x)dx$

u točkama x_i gdje je L_N jednak nuli,

$$P_{2N-1}(x_i) = Q_{N-1}(x_i) \quad i = 1, 2, \dots, N$$

- u ovim točkama je u potpunosti definirana $Q_{N-1}(x)$ i integral koji treba izračunati

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

- razvoj $Q_{N-1}(x)$ po Legendreovim polinomima

$$Q_{N-1}(x) = \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i L_i(x)$$

- primjenom relacije ortogonalnosti (uz ubacivanje $L_0(x) = 1$)

$$\int_{-1}^1 Q_{N-1}(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i \int_{-1}^1 L_0(x) L_i(x) dx = 2\alpha_0$$

- problem integracije svodi se na proračun koeficijenta α_0
- vrijednosti Q_{N-1} na nultočkama L_N

$$Q_{N-1}(x_k) = \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i L_i(x_k) = \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i L_{ik} \quad k = 1, 2, \dots, N$$

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

- s obzirom da su Legendreovi polinomi linearno nezavisni, niti jedan od stupaca matrice L_{ik} nije linearna kombinacija ostalih stupaca
- invertiramo prethodnu jednažbu,

$$\sum_{i=0}^{N-1} (L^{-1})_{ki} Q_{N-1}(x_i) = \alpha_k$$

$$\int_{-1}^1 P_{2N-1}(x) dx = \int_{-1}^1 Q_{N-1}(x) dx = 2\alpha_0 = 2 \sum_{i=0}^{N-1} (L^{-1})_{0i} P_{2N-1}(x_i)$$

- ako identificiramo težine kao $2(L^{-1})_{0i}$ gdje su x_i nultočke L

$$\int_{-1}^1 P_{2N-1}(x) dx = \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i P_{2N-1}(x_i)$$

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

- Zaključno, ako funkcija $f(x)$ može biti aproksimirana polinomom P stupnja $2N - 1$ formula Gaussove kvadrature svodi se na

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \int_{-1}^1 P_{2N-1}(x)dx = \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i P_{2N-1}(x_i)$$

gdje su točke integracije x_i definirane kao nultočke L , a težine su dane sa $2(L^{-1})_{0i}$

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

- primjena Gaussove kvadrature za $N=2$
- funk. $f(x)$ aproksimiramo polinomom $P_3(x)$ stupnja $2N - 1 = 3$
- točke integracije su nultočke od

$$L_2(x) = 1/2(3x^2 - 1) \quad \longrightarrow \quad \begin{aligned} x_0 &= -1/\sqrt{3} \\ x_1 &= 1/\sqrt{3} \end{aligned}$$

$$Q_{N-1}(x_k) = \sum_{i=0}^{N-1} \alpha_i L_i(x_k) \quad k = 1, 2, \dots, N$$

$$\begin{aligned} N = 2 \quad \longrightarrow \quad Q_1(x_0) &= \alpha_0 - \alpha_1 \frac{1}{\sqrt{3}} & Q_1(x_1) &= \alpha_0 + \alpha_1 \frac{1}{\sqrt{3}} \end{aligned}$$

- definiramo matricu L_{ik}

$$\begin{aligned} L_0(x = \pm 1/\sqrt{3}) &= 1 \\ L_1(x = \pm 1/\sqrt{3}) &= \pm 1/\sqrt{3} \end{aligned} \quad \longrightarrow \quad L_{ik} = \begin{pmatrix} 1 & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ 1 & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

GAUSS-LEGENDREOVA METODA INTEGRACIJE

$$(L_{ik})^{-1} = \frac{\sqrt{3}}{2} \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ -1 & 1 \end{pmatrix}$$

- težine za integraciju su određene sa elementima $2(L_{0k})^{-1}$



$$\omega_0 = 1 \quad \omega_1 = 1$$

- zaključno, za Legendreove polinome za $N=2$ težine i točke integracije su:

$$\omega : \{1, 1\} \quad x : \left\{ -\frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{\sqrt{3}} \right\}$$



GAUSS-LEGENDREOVA INTEGRACIJA

- Npr. treba izračunati integral $f(x) = x^2$

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \quad (=2/3 \text{ egzaktno})$$

- Gaussova integracija,

$$I = \int_{-1}^1 x^2 dx \approx \sum_{i=0}^{N-1} \omega_i x_i^2$$

- uvrštavanjem težina i točaka integracije slijedi

$$I = \int_{-1}^1 x^2 dx = \sum_{i=0}^1 \omega_i x_i^2 = \frac{1}{3} + \frac{1}{3} = \frac{2}{3}$$

- dobiven je isti rezultat kao egzaktno rješenje, a samo su dvije točke integracije korištene !!!

OPĆENITI INTERVAL ZA GAUSS-LEGENDRE INTEGRACIJU

- Gauss-Legendreova metoda ne mora biti ograničena samo na interval $[-1,1]$
- supstitucijom se integral može poopćiti na interval $[a,b]$

$$t = -1 + 2\frac{x - a}{b - a}$$

$$\int_a^b f(t)dt = \frac{b - a}{2} \int_{-1}^1 f\left(\frac{(b - a)x}{2} + \frac{b - a}{2}\right) dx$$

DRUGE VARIJANTE GAUSSOVE INTEGRACIJE

- Gauss-Laguerrova integracija

$$I = \int_0^{\infty} f(x)dx = \int_0^{\infty} x^{\alpha} e^{-x} g(x)dx$$

- Gauss-Hermiteova integracija

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)dx = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} g(x)dx$$

- ...

ZADATAK 10

- Napišite program koji primjenom trapezne, Simpsonove i Gauss Legendreove metode integrira funkciju

$$\int_1^{100} \frac{\exp(-x)}{x} dx$$

Treba ispisati tablicu rezultata integracije za sve tri metode kao funkcije broja točaka integracije $N=10,20,40,100,1000$. Za određivanje točaka i težina za Gauss-Legendreovu integraciju dozvoljeno je korištenje funkcije `gauleg` iz `Numerical Recipes`.