Numeričke metode

Aleksandar Maksimović

IRB

Numerička integracija

Želimo izračunati integral funkcije f na intervalu $[a, b]$,

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx.$$

Newton-Liebnitz formula. Ne znamo *I(f)*, preostaje numerika.

$$I(f) = \int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a).$$

Identičan problem, tražimo vrijednost *I=y(b)* za diferencijalnu jednadžbu s rubnim uvjetom:

$$\frac{dy}{dx} = f(x) \qquad\qquad y(a) = 0$$

Rubni uvjet

Numerička integracija

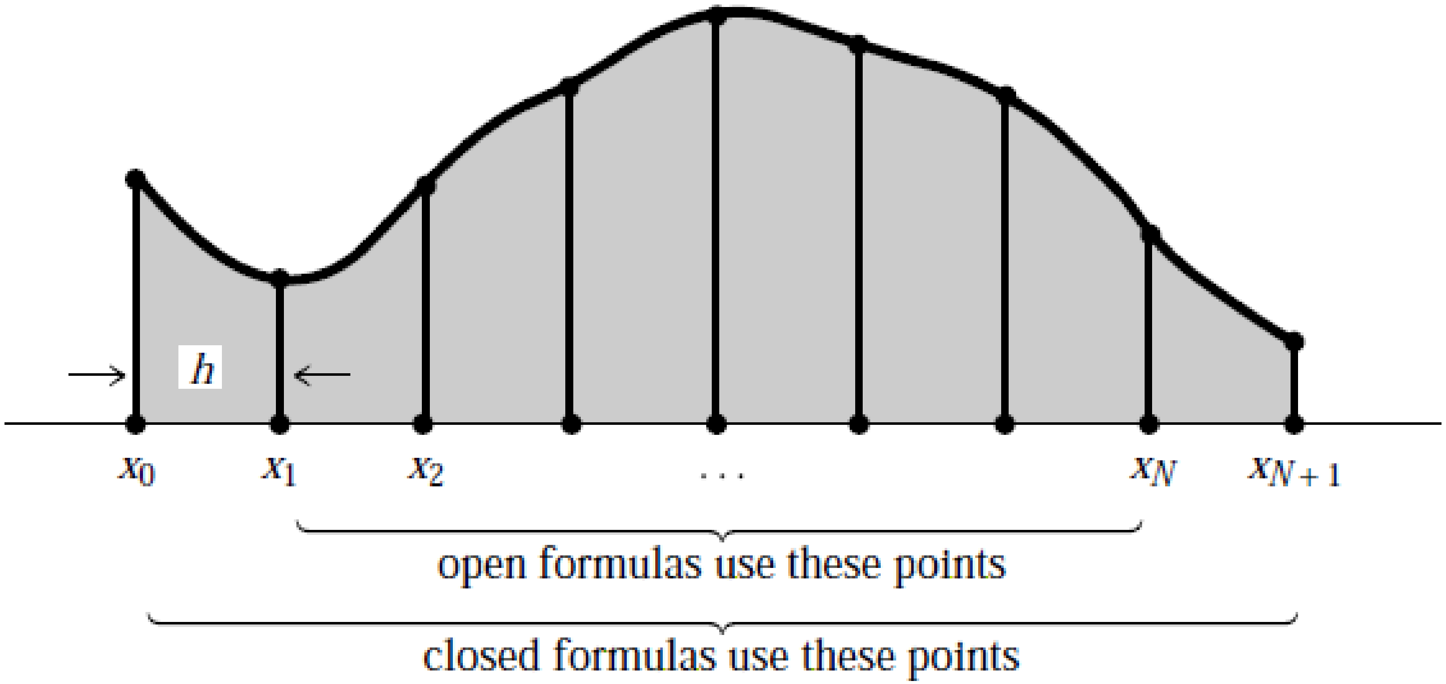
Opća integracijska formula ima oblik

$$I(f) = I_m(f) + E_m(f),$$

pri čemu je $m+1$ broj korištenih točaka, $I_m(f)$ pripadna aproksimacija integrala, a $E_m(f)$ pritom napravljena greška. Ovakve formule za približnu integraciju funkcija jedne varijable (tj. na jednodimenzionalnoj domeni) često se zovu i **kvadraturne** formule, zbog interpretacije integrala kao površine ispod krivulje.

$$I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_k^{(m)}),$$

Numerička integracija



$x_i = x_0 + ih \qquad i = 0, 1, \ldots, N+1$

h konstantan korak

$f(x_i) \equiv f_i$

Newton Cotes

Newton–Cotesove formule zatvorenog tipa imaju ekvidistantne čvorove, s tim da je prvi čvor u točki $x_0 := a$, a posljednji u $x_m := b$. Preciznije, za zatvorenu (to se često ispušta) Newton–Cotesovu formulu s $(m+1)$-nom točkom čvorovi su

$$x_k^{(m)} = x_0 + kh_m, \quad k = 0, \ldots, m, \quad h_m = \frac{b-a}{m}.$$

Drugim riječima, osnovni je oblik Newton–Cotesovih formula

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m).$$

Trapezna formula

Izvedimo najjednostavniju (zatvorenu) Newton–Cotesovu formulu za $m = 1$.

Za $m = 1$, aproksimacija integrala (9.2.1) ima oblik

$$I_1(f) = w_0^{(1)} f(x_0) + w_1^{(1)} f(x_0 + h_1),$$

$$h := h_1 = \frac{b-a}{1} = b - a,$$

moramo pronaći težine w_0 i w_1, tako da integracijska formula egzaktno integrira polinome što višeg stupnja na intervalu $[a, b]$, tj. da za polinome f što višeg stupnja bude

$$\int_a^b f(x)\,dx = I_1(f) = w_0 f(a) + w_1 f(b).$$

Trapezna formula

Za $f(x) = 1 = x^0$ dobivamo

$$b - a = \int_a^b x^0 \, dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1.$$

Za $f(x) = x$ izlazi

$$\frac{b^2 - a^2}{2} = \int_a^b x \, dx = w_0 \cdot a + w_1 \cdot b.$$

Trapezna formula

Sada imamo dvije jednadžbe s dvije nepoznanice

$$w_0 + w_1 = b - a$$
$$aw_0 + bw_1 = \frac{b^2 - a^2}{2}.$$

Pomnožimo li prvu jednadžbu s $-a$ i dodamo drugoj, dobivamo

$$(b-a)w_1 = \frac{b^2 - a^2}{2} - a(b-a) = \frac{b^2 - 2ab + a^2}{2} = \frac{(b-a)^2}{2}.$$

$$w_1 = \frac{1}{2}(b-a) = \frac{h}{2}. \qquad w_0 = b - a - w_1 = \frac{1}{2}(b-a) = \frac{h}{2},$$

Trapezna formula

Vidimo da je integracijska formula $I_1(f)$ dobivena iz egzaktnosti na svim polinomima stupnja manjeg ili jednakog 1, i glasi

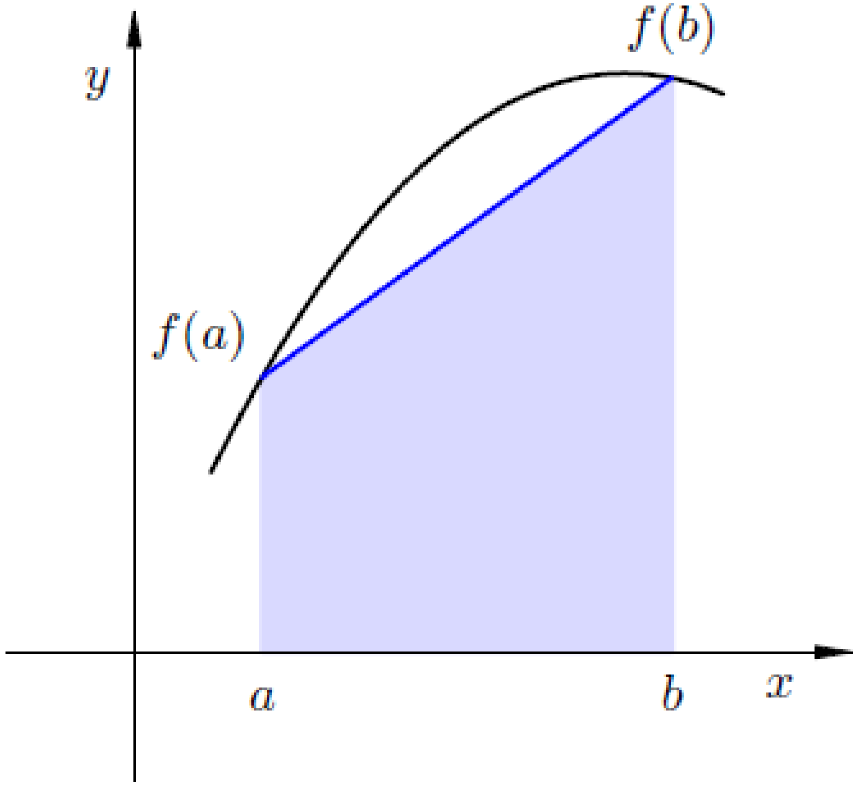
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{2}\left(f(a) + f(b)\right).$$

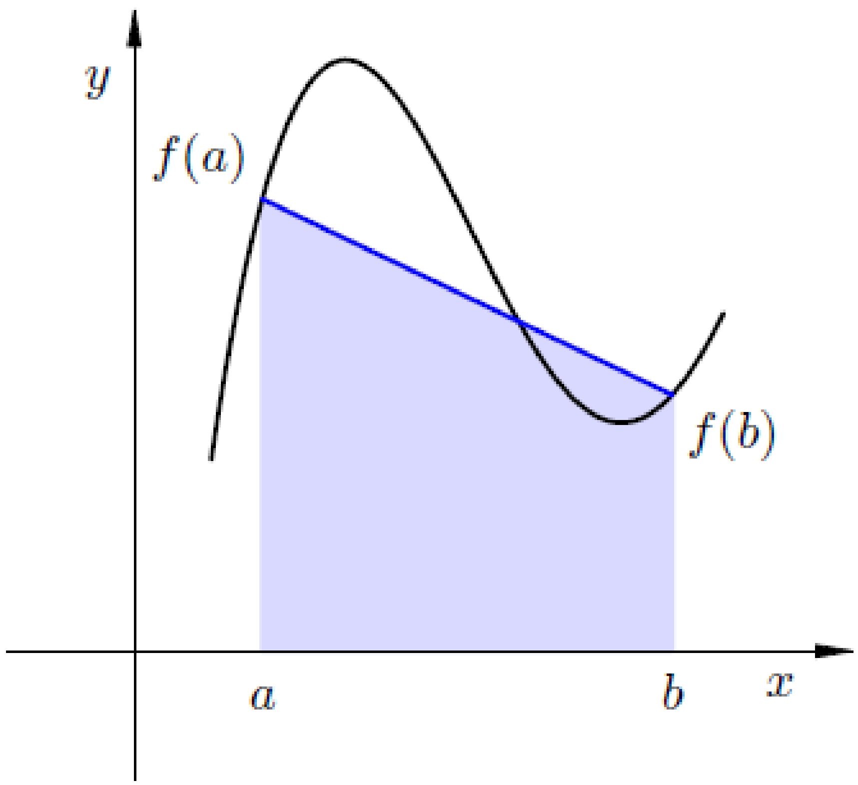
Ta formula zove se trapezna formula. Odakle joj ime? Napišemo li je na malo drugačiji način, kao

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{f(a) + f(b)}{2}\,(b-a),$$

odmah ćemo vidjeti da je $(f(a) + f(b))/2$ srednjica, a $b - a$ visina trapeza sa slike.

Trapezna formula





Desna slika prikazuje funkciju koju loše aproksimira pravac.

Simpsonova formula

Izvedimo sljedeću (zatvorenu) Newton–Cotesovu formulu za $m = 2$, poznatu pod imenom Simpsonova formula.

Za $m = 2$, aproksimacija integrala (9.2.1) ima oblik

$$I_2(f) = w_0^{(2)} f(x_0) + w_1^{(2)} f(x_0 + h_2) + w_2^{(2)} f(x_0 + 2h_2),$$

$$h := h_2 = \frac{b-a}{2}.$$

$$I_2(f) = w_0 f(a) + w_1\, f\left(\frac{a+b}{2}\right) + w_2 f(b).$$

Za $f(x) = 1$ dobivamo

$$b - a = \int_a^b x^0\, dx = w_0 \cdot 1 + w_1 \cdot 1 + w_2 \cdot 1.$$

Simpsonova formula

Za $f(x) = x$ izlazi

$$\frac{b^2 - a^2}{2} = \int_a^b x\,dx = w_0 \cdot a + w_1 \frac{a+b}{2} + w_2 \cdot b.$$

Konačno, za $f(x) = x^2$ dobivamo

$$\frac{b^3 - a^3}{3} = \int_a^b x^2\,dx = w_0 \cdot a^2 + w_1 \frac{(a+b)^2}{4} + w_2 \cdot b^2.$$

Simpsonova formula

Sada imamo linearni sustav s tri jednadžbe i tri nepoznanice

$$\begin{aligned} w_0 + w_1 + w_2 &= b - a \\ aw_0 + \frac{a+b}{2} w_1 + bw_2 &= \frac{b^2 - a^2}{2} \\ a^2 w_0 + \frac{(a+b)^2}{4} w_1 + b^2 w_2 &= \frac{b^3 - a^3}{3}. \end{aligned}$$

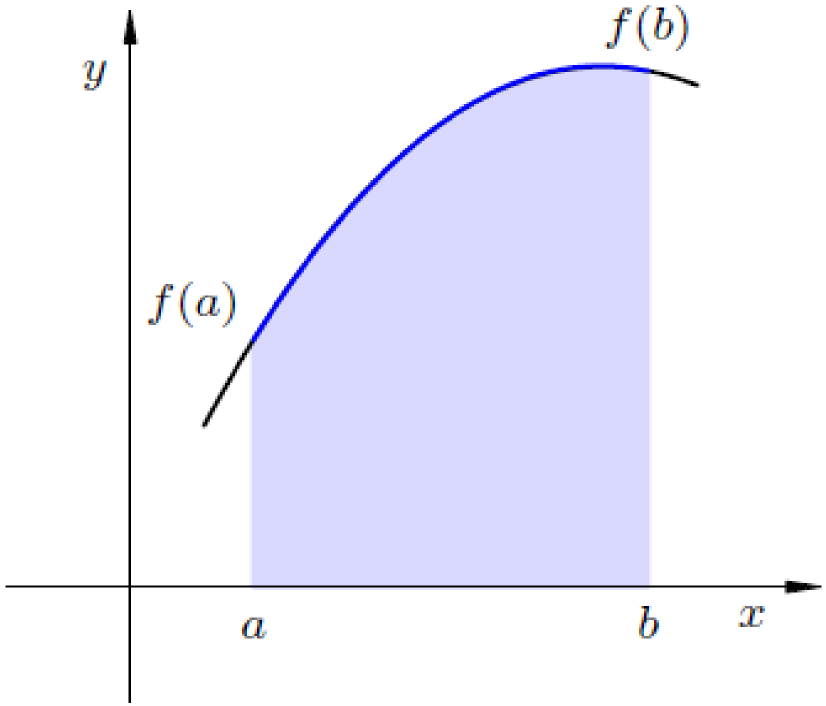
Rješavanjem ovog sustava, dobivamo

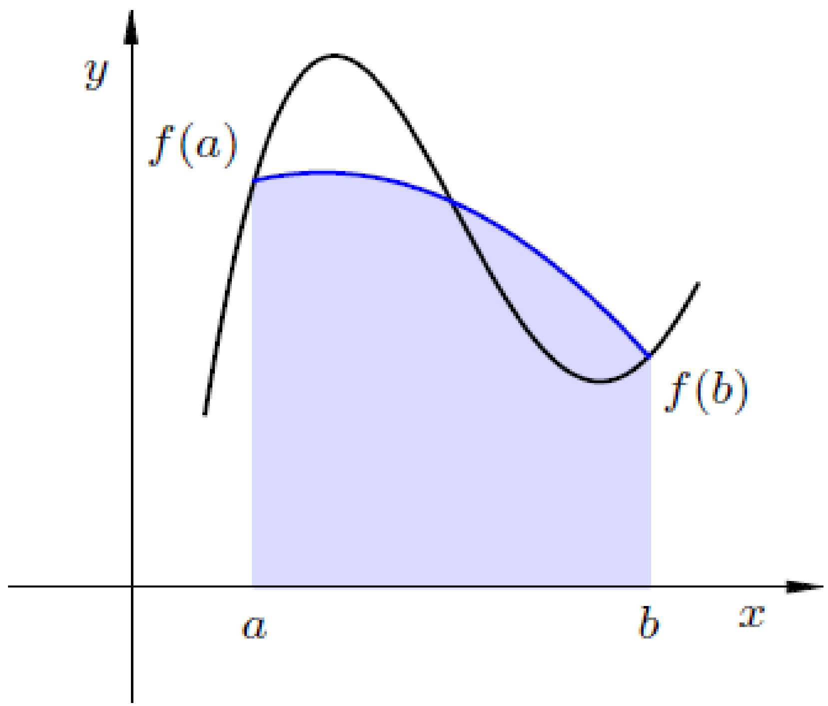
$$w_0 = w_2 = \frac{h}{3} = \frac{b-a}{6}, \quad w_1 = \frac{4h}{3} = \frac{4(b-a)}{6}.$$

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{h}{3}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right).$$

Simpsonova formula

Ako pogledamo kako ona funkcionira na funkcijama koje smo već integrirali trapeznom formulom, vidjet ćemo da joj je greška bitno manja. Posebno, na prvom primjeru, kvadratni interpolacijski polinom tako dobro aproksimira funkciju f, da se one na grafu ne razlikuju.





Formula srednje točke (midpoint)

Ako u Newton–Cotesovim formulama ne interpoliramo (pa onda niti ne integriramo) jednu ili obje rubne točke, dobili smo otvorene Newton–Cotesove formule. Ako definiramo $x_{-1} := a$, $x_{m+1} := b$ i

$$h_m = \frac{b-a}{m+2},$$

onda otvorene Newton–Cotesove formule imaju oblik

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m). \tag{9.2.6}$$

Vjerojatno najkorištenija i najpoznatija otvorena Newton–Cotesova formula je ona najjednostavnija za $m = 0$, poznata pod imenom "midpoint formula" (formula srednje točke).

Formula srednje točke (midpoint)

Dakle za bismo odredili midpoint formulu, moramo naći koeficijent $w_0 := w_0^{(0)}$ takav da je

$$\int_a^b f(x)\,dx = w_0 f\left(\frac{a+b}{2}\right)$$

egzaktna na vektorskom prostoru polinoma što višeg stupnja.

Za $f(x) = 1$, imamo

$$b - a = \int_a^b 1\,dx = w_0,$$

odakle odmah slijedi da je

$$\int_a^b f(x)\,dx = (b-a) f\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

Produljene formule

Općenito, produljenu trapeznu formulu dobivamo tako da cijeli interval $[a, b]$ podijelimo na n podintervala oblika $[x_{k-1}, x_k]$, za $k = 1, \ldots, n$, s tim da je

$$a = x_0 < x_1 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b,$$

i na svakom od njih upotrijebimo "običnu" trapeznu formulu. Znamo da je tada

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=1}^{n} \int_{x_{k-1}}^{x_k} f(x)\,dx,$$

Aproksimacija produljenom trapeznom formulom je

$$\int_a^b f(x)\,dx = h\left(\frac{1}{2} f_0 + f_1 + \cdots + f_{n-1} + \frac{1}{2} f_n\right) + E_n^T(f),$$

Gaussove integracijske formule

Za razliku od Newton–Côtesovih formula, **Gaussove integracijske formule** su oblika

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i),$$

u kojima točke integracije x_i nisu unaprijed poznate, nego se izračunaju tako da greška takve formule bude najmanja. Motivirani praktičnim razlozima, promatrat ćemo malo općenitije integracijske formule oblika

$$\int_a^b w(x)\,f(x)\,dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i),$$

gdje je w **težinska funkcija**, pozitivna na otvorenom intervalu (a, b). Koeficijente w_i zovemo **težinski koeficijenti** ili, skraćeno, **težine** integracijske formule. specijalni slučaj u kojem je $w \equiv 1$ čine formule koje se zovu **Gauss–Legendreove**

Gaussove integracijske formule

Bitno je znati da se za neke težinske funkcije na određenim intervalima, čvorovi i težine standardno tabeliraju u priručnicima. To su

težinska funkcija w	interval	formula Gauss–
1	$[-1,1]$	Legendre
$\dfrac{1}{\sqrt{1-x^2}}$	$[-1,1]$	Čebišev
$\sqrt{1-x^2}$	$[-1,1]$	Čebišev 2. vrste
e^{-x}	$[0,\infty)$	Laguerre
e^{-x^2}	$(-\infty,\infty)$	Hermite

Gaussove integracijske formule

Glavni rezultat je sljedeći: ako zahtijevamo da formula integrira egzaktno polinome što je moguće većeg stupnja, onda su točke integracije x_i nultočke polinoma koji su ortogonalni na intervalu (a, b) obzirom na težinsku funkciju w, a težine w_i mogu se eksplicitno izračunati po formuli

$$w_i = \int_a^b w(x)\, \ell_i(x)\, dx, \quad i = 1, \ldots, n.$$

Pritom je ℓ_i poseban polinom Lagrangeove baze

$$\int_a^b w(x)\, f(x)\, dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i), \longrightarrow \int_a^b g(x) dx \approx \sum_{j=1}^{N} v_j g(x_j)$$

$g(x) \equiv W(x) f(x)$ and $v_j \equiv w_j / W(x_j)$

Gauss integracija

Budući da su apscise i težine ortogonalnih polinoma tabelirane (Gauss Legendre, *w(x)=1*) možemo napisati podprogram tipa qgaus bez znanja o detaljima teorije.

Kao što znamo, Legendreov polinom stupnja n definiran je **Rodriguesovom formulom**

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n.$$

Tako definirani polinomi čine **ortogonalnu bazu** u prostoru polinoma stupnja n, tj. oni su linearno nezavisni i ortogonalni obzirom na skalarni produkt

$$\langle P, Q \rangle := \int_{-1}^{1} P(x)\, Q(x)\, dx. \qquad \int_{-1}^{1} P_m(x)\, P_n(x)\, dx = 0, \quad \text{za} \quad m \neq n.$$

Ortogonalni polinomi

$$p_{-1}(x) \equiv 0$$

$$p_0(x) \equiv 1$$

$$p_{j+1}(x) = (x - a_j)p_j(x) - b_j p_{j-1}(x) \qquad j = 0, 1, 2,$$

$$a_j = \frac{\langle x p_j | p_j \rangle}{\langle p_j | p_j \rangle} \qquad j = 0, 1, \ldots$$

$$b_j = \frac{\langle p_j | p_j \rangle}{\langle p_{j-1} | p_{j-1} \rangle} \qquad j = 1, 2, \ldots$$

Točke integracije u Gaussovim formulama su nultočke polinoma $p_N(x)$ kod integracije u N točaka. Kad je apscisa poznata, težinske funkcije se mogu odrediti iz linearnog sustava (nije najbolja metoda)

$$\begin{bmatrix} p_0(x_1) & \ldots & p_0(x_N) \\ p_1(x_1) & \ldots & p_1(x_N) \\ \vdots & & \vdots \\ p_{N-1}(x_1) & \ldots & p_{N-1}(x_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 \\ w_2 \\ \vdots \\ w_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \int_a^b W(x) p_0(x) dx \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}$$

$$w_j = \frac{\langle p_{N-1} | p_{N-1} \rangle}{p_{N-1}(x_j) p'_N(x_j)}$$

Gauss Legendre težinske funkcije

$$w_j = \frac{2}{(1 - x_j^2)[P'_N(x_j)]^2}$$

podprogrami

SUBROUTINE trapzd(func,a,b,s,n)

This routine computes the nth stage of refinement of an extended trapezoidal rule. func is input as the name of the function to be integrated between limits a and b, also input. When called with n=1, the routine returns as s the crudest estimate of $\int_a^b f(x)dx$. Subsequent calls with n=2,3,... (in that sequential order) will improve the accuracy of s by adding 2^{n-2} additional interior points. s should not be modied between sequential calls.

float trapzd(float (*func)(float), float a, float b, int n)

SUBROUTINE qtrap(func,a,b,s)

C USES trapzd

Returns as s the integral of the function func from a to b. The parameters EPS can be set to the desired fractional accuracy and JMAX so that 2 to the power JMAX-1 is the maximum allowed number of steps. Integration is performed by the trapezoidal rule.

float qtrap(float (*func)(float), float a, float b)

podprogrami

SUBROUTINE qsimp(func,a,b,s)

C USES trapzd

Returns as s the integral of the function func from a to b. The parameters EPS can be set to the desired fractional accuracy and JMAX so that 2 to the power JMAX-1 is the maximum allowed number of steps. Integration is performed by Simpson's rule.

float qsimp(float (*func)(float), float a, float b)

podprogrami

SUBROUTINE qgaus(func,a,b,ss)

Returns as ss the integral of the function func between a and b, by ten-point Gauss-Legendre integration: the function is evaluated exactly ten times at interior points in the range of integration.

```
float qgaus(float (*func)(float), float a, float b)
```

SUBROUTINE gauleg(x1,x2,x,w,n)

Given the lower and upper limits of integration x1 and x2, and given n, this routine returns arrays x(1:n) and w(1:n) of length n, containing the abscissas and weights of the Gauss-Legendre n-point quadrature formula.

```
void gauleg(float x1, float x2, float x[], float w[], int n),
```

NR primjeri

Trapezna i simpson formula za funkciju: $x^2 (x^2-2) \sin(x)$ na intervalu [0,pi/2]

gcc -o xqtrap xqtrap.c qtrap.c trapzd.c nrutils/nrutil.c -I nrutils/ -lm

f77 -o xqtrap xqtrap.for trapzd.for qtrap.for

gcc -o xqsimp xqsimp.c qsimp.c trapzd.c nrutils/nrutil.c -I nrutils/ -lm

f77 -o xqsimp xqsimp.for qsimp.for trapzd.for

Midpoint formula za funkciju: $1/\sqrt{x}$, na intervalu [0,1]

gcc -o xmidpnt xmidpnt.c midpnt.c nrutils/nrutil.c -I nrutils/ -lm

f77 -o xmidpnt xmidpnt.for midpnt.for

Gauss-Legendre integracija za funkciju $x \exp(-x)$ na intervalu [0,5]

gcc -o xqgaus xqgaus.c qgaus.c nrutils/nrutil.c -I nrutils/ -lm

f77 -o xqgaus xqgaus.for qgaus.for

izračuna 10 integrala od [0,0.5 i], i=1..10

gcc -o xgauleg xgauleg.c gauleg.c nrutils/nrutil.c -I nrutils/

f77 -o xgauleg xgauleg.for gauleg.for

izračuna $w(i)$ za interval [0,1], i integral za interval [0,10]

Nepravi integrali

Uglavnom se radi promjena varijabli kako bi se uklonio singularitet, odnosno beskonačna granica se preslikava u konačnu.

Slijedeća relacija se može koristiti za $b \to \infty$ i *a* pozitivno,

ili *b* negativno i $a \to -\infty$

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{1/b}^{1/a} \frac{1}{t^2} f\left(\frac{1}{t}\right) dt \qquad ab > 0$$

Za midpoint formulu jednadžba je implementirana u rutini midinf.

Primjer: Integral od funkcije *exp(x)* od [0,∞], rastavljen je na integracije od [0,1] i [1,∞].

gcc -g -o tmidinf tmidinf.c midinf.c nrutils/nrutil.c midpnt.c -I nrutils/ -lm

f77 -o tmidinf tmidinf.for midinf.for midpnt.for

Nepravi integrali

SUBROUTINE midinf(funk,aa,bb,s,n)

This routine is an exact replacement for midpnt, i.e., returns as s the nth stage of refinement of the integral of funk from aa to bb, except that the function is evaluated at evenly spaced points in 1/x rather than in x. This allows the upper limit bb to be as large and positive as the computer allows, or the lower limit aa to be as large and negative, but not both. aa and bb must have the same sign.

float midinf(float (*funk)(float), float aa, float bb, int n)

Zadaci za praktikum

1. integral od 0 do beskonačno za funkciju $f(x)=(2x+4)\exp(-x)$
2. integral od 2 do 5 za funkciju $f(x)= 1/[x(2x+3)]$

2a. Koliko iznosi čvor integracije i težina u Gaussovoj formuli za n=1 i n=10?

2b. Usporedite rezultat s nekom drugom metodom koju smo obradili

3. Iskoristite program Mathematica i notebooka "Integrali.nb" kako bi utvrdili točnu vrijednost integrala.
4. Pošaljite mail na Aleksandar.Maksimovic@irb.hr, koji će imati rezultate integrala pod 1, 2a i 2b, te procjenu pogreške za korištene metode dobivene usporedbom s rezultatima iz Mathematice.

Literatura

- Online literatura:
  - Numerička matematika-osnovni udžbenik, PMF, projekt mzt.
  - Numerical Recipes in C
  - Numerical Recipes in Fortran
- L. F. Shampine, R. C. Allen, Jr., S. Pruess: FUNDAMENTALS OF NUMERICAL COMPUTING, John Wiley & Sons, Inc. (1997)