Matematičke metode fizike III

Larisa Zoranić

2022/23

Bilješke s predavanja

Literatura

[1] Morten Hjorth-Jensen: *Computational Physics*, University of Oslo, 2007, 2010, 2015.

[2] V. Hari i dr: *Numerička analiza*, skripta, Sveučilište u Zagrebu PMF, 2004.

[3] William H. Press, Saul A. Teukolsky, William T. Vetterling, Brian P. Flannery: *Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing*, SE, Cambridge University Press, USA, 2002.

[4] Leandra Vranješ Markić: *Matematiče metode fizike 1*, skripta, Sveučilište u Splitu PMFST, 2009.

6 Numerička integracija

Neka je zadana funkcija $f : I \rightarrow R$; gdje je $I \subseteq R$ (interval može biti i beskonačan). Želimo izračunati određeni integral:

$$I(f) = \int_a^b f(x)dx \tag{6.1}$$

pri čemu je $[a, b] \subset I$.
Koristimo osnovni teorem integralnog računa: Newton-Leibnitzovu formulu za računanje $I(f)$ preko vrijednosti primitivne funkcije F na rubovima segmenta:

$$I(f; a, b) = \int_a^b f(x)dx = F(a) - F(b) \tag{6.2}$$

Integriranje nije jednostavan postupak i u većini slučajeva nije lako izračunati integrale u analitičkoj formi, zadanom Newton-Leibnitzovom formulom. Iz tog razloga koristimo numeričko integriranje, odnosno računamo približnu vrijednost integrala $I(f; a, b)$.

Osnovna ideja numeričke integracije je izračunavanje $I(f; a; b) \equiv I(f)$ korištenjem vrijednosti funkcije f na nekom konačnom skupu točaka. Neke integracijske formule koriste i vrijednosti derivacija funkcije f. Općenito, numerička formula za integral ima oblik:

$$I(f) = I_m(f) + \varepsilon_m(f) \tag{6.3}$$

pri čemu je m je prirodni broj, $m + 1$ je broj korištenih točaka, $I_m(f)$ je pripadna numerička vrijednost integrala (aproksimacija), a $\varepsilon_m(f)$ je greška, odnosno preciznost numeričkog rezultata.
Ova forma za računanje integrala naziva se kvadraturna formula zbog interpretacije određenog integrala kao površine ispod krivulje.
Općenito, kvadraturne formule se mogu napisati u formi:

$$I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_k^{(m)}) \tag{6.4}$$

pri čemu se vrijednosti $x_k^{(m)}$ zovu čvorovi integracije, a $w_k^{(m)}$ su pripadne težine za zadani $m + 1$ broj čvorova. Integral funkcije $f(x)$ možemo izračunati kao površinu koju obuhvaća funkcija $f(x)$ u zadanim granicama $[a, b]$. Površinu možemo podijeliti na manje doprinose za koje znamo izračunati $I(f)$.
Podjela integrala na više intervala (segmenata), odnosno odabir čvorova $x_k^{(m)}$, može bit takav da su:

- ekvidistanti (jednako udaljeni) čvorovi - Newton-Cotes kvadratura
- slobodni (promjenjivi) čvorovi - Gaussova kvadratura

Razmislite kada se primjenjuju ove različite metode (primjeri na satu).

6.1 Newton-Cotes kvadratura

Newton-Cotesove formule zatvorenog tipa imaju ekvidistantne čvorove, s tim da su prvi i posljednji čvorovi uvijek krajevi segmenta $[a, b]$ (dakle, $x_0 = a$ i $x_m = b$). Možemo izraziti čvorove preko odabranog koraka h:

$$x_k^{(m)} = x_0 + kh_m, k = 0, ..., m$$

$$h_m = \frac{b-a}{m}$$

Osnovni oblik Newton-Cotesove formula jest:

$$\int_a^b f(x)dx \approx I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_0 + kh_m) \tag{6.5}$$

Skicirajte na segmentu $[a, b]$ za odabire $m = 0, 1, 2, 3$ intervale i čvorove. Primjetite da je broj intervala jednak m, a broj čvorova $m + 1$.

6.1.1 Trapezna formula

Podjelimo segment $[a, b]$ na intervale veličine $2h$:

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx + ... + \int_{b-2h}^{b} f(x)dx \tag{6.6}$$

Potrebno je odrediti dobru aproksimaciju iznosa integrala na odabranom intervalu općenitog oblika:

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)dx$$

Budući da je korak h mali broj, primjenit ćemo Taylor razvoje oko točke $x = x_0 + h$ i $x = x_0 - h$. Taylorov razvoj funkcije $f(x_0 \pm h)$ oko $f(x_0)$ je:

$$f(x = x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + \frac{h^2 f''(x_0)}{2!} \pm \frac{h^3 f'''(x_0)}{3!} + \frac{h^4 f''''(x_0)}{4!} ... \tag{6.7}$$

Uz aproksimaciju funkcije $f(x)$ do drugog člana u Taylorovom razvoju vrijedi:

$$f(x = x_0 \pm h) = f(x_0) \pm hf'(x_0) + O(h^2) \tag{6.8}$$

Iskoristimo izraz za numeričku derivaciju:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \equiv \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \tag{6.9}$$

primjenog kojeg se dobiju formule:

$$f(x = x_0 + h) \approx f(x_0) + h \cdot \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}$$

$$f(x = x_0 - h) \approx f(x_0) - h \cdot \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}$$

Primjetimo da su derivacije funkcije $f(x)$ u točki x_0 konstantne vrijednosti, dok korak $h = x - x_0$ je vrijednost koja ovisi o x.

Uvrstimo formule za funkciju $f(x)$ u formu za integral:

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)dx \approx \int_{x_0-h}^{x_0} (f(x_0) - h \cdot \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h})dx +$$

$$\int_{x_0}^{x_0+h} (f(x_0) + h \cdot \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h})dx$$

pri čemu vrijednost parametra dobijemo supstitucijom $h = \pm(x - x_0)$ i $dx \equiv d(x - x_0)$ uz promjenu granica integracije. Primjetimo da vrijednost h u izrazu za numeričku derivaciju se ne mjenja u postupku supstitucije, budući da su derivacije konstante vrijednosti definirane u točki x_0. Uz malo matematike dobije se izraz:

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)dx = \frac{1}{2}h(f(x_0+h) + 2f(x_0) + f(x_0-h)) + O(h^3) \tag{6.10}$$

pri čemu greška podintegralne funkcije $f(x)$ reda veličine $O(h^2)$ integracijom postaje $O(h^3)$. Aproksimacija funkcije (izraz (6.10)) se uvrštava za svaki interval u formuli (6.6):

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx + ... + \int_{b-2h}^{b} f(x)dx$$

$$\approx \frac{1}{2}h(f(a)+2f(a+h)+f(a+2h)+f(a+2h)+2f(a+3h)+f(a+4h)+...+f(b-2h)+2f(b-h)+f(b))$$

što definira formu trapezne formule:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{2}h(f(a) + 2f(a+h) + 2f(a+2h) + ... + 2f(b-h) + f(b)) + O(h^2) \tag{6.11}$$

Konačni izraz je rješenje zadano u obliku $I_m(f) = \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_k^{(m)})$, pri čemu su vrijednosti $x_k^{(m)} = a, ..., a+kh, ...b$ čvorovi funkcije, a skup $w_k^{(m)} = h(\frac{1}{2}, 1)$ pripadne težine.
Greška na segmentu u nekim granicama od x_0 do $x_0 + 2h$ naziva se lokalna greška i jednaka je $O(h^3)$. Ukupna greška dobije se zbrajanjem svih lokalnih grešaka:

$$\sum_{k=1}^{m} O(h^3) = m \cdot O(h^3) = \frac{b-a}{h} \cdot O(h^3) \rightarrow O(h^2)$$

dakle globalna greška trapezne formule je reda veličine $O(h^2)$.

Trapezna formula

- ulazni podaci funkcija $f(x)$, granice integracija a i b, broj čvorova ili veličina koraka h.
- definirati broj čvorova ili veličinu koraka $h = \frac{b-a}{m}$
- izračunati vrijednosti funkcije u granicama a i b pomnožene s faktorom $\frac{1}{2}$
- u petlji $(k = 1, m-1)$ sumirati doprinose vrijednosti funkcije u čvorovima $f(x = a + kh)$
- rješenje je zbroj vrijednosti funkcije u zadanim čvorovima pomnožen s korakom h

6.1.2 Simpsonova formula

U trapeznoj formuli podintegralna funkcija je aproksimirana Taylorovim razvojem do člana s prvom derivacijom. Točnost rezultata možemo povećati ako koristimo članove višeg reda u Taylorovom razvoju. Za Simpsonovu formulu se podintegralna funkcija aproksimira do člana s drugom derivacijom.

Uvrstimo formule za funkciju $f(x)$ u formu za integral:

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)dx \approx \int_{x_0-h}^{x_0+h} (f(x_0) + h \cdot \frac{f(x_0+h) - f(x_0-h)}{2h} +$$

$$+\frac{1}{2}h^2 \cdot \frac{f(x_0+h)-2f(x_0)+f(x_0-h)}{h^2})dx$$

pri čemu smo uključili formule za numeričku derivaciju prvog i drugog reda.
Sličnim postupkom kao i za trapeznu formulu, uz suptituciju $h = x - x_0$ i $dx \equiv d(x - x_0)$ uz promjenu granica integracije, dobije se izraz:

$$\int_{x_0-h}^{x_0+h} f(x)dx = \frac{1}{3}h(f(x_0-h)+4f(x_0)+f(x_0+h))+O(h^5) \tag{6.12}$$

Primjetimo da zadani interval ima simetrične granice, te je za svaku neparnu funkciju doprinos integracije jednak nuli. Iz tog razloga odabir aproksimacije podintegralne funkcije do člana h^2 daje isti rezultat ako uključimo i sljedeći član ovisan o neparnoj potenciji h^3. Greška aproksimacije za ovaj odabir podintegralne funkcije je reda veličine $O(h^4)$ što pri integraciji definira lokalnu grešku reda veličine $O(h^5)$.

Aproksimacija integrala (6.12) na pojedinim intervalima se uključuje u formulu (6.6):

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^{a+2h} f(x)dx + \int_{a+2h}^{a+4h} f(x)dx + ... + \int_{b-2h}^{b} f(x)dx$$

$$\approx \frac{1}{3}h(f(a)+4f(a+h)+f(a+2h)+f(a+2h)+4f(a+3h)+f(a+4h)+...+f(b-2h)+4f(b-h)+f(b))$$

što definira Simpsonovu formu:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{1}{3}h(f(a)+4f(a+h)+2f(a+2h)+...+2f(b-2h)+4f(b-h)+f(b))+O(h^4) \tag{6.13}$$

Simpsonova formula je definirana skupom čvorova $x_k^{(m)} = a, ..., a+kh, ...b$ i pripadnih težina $w_k^{(m)} = h(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{4}{3})$. Lokalna greška jednaka je $O(h^5)$, dok globalna greška je reda veličine $m \cdot O(h^5) = O(h^4)$.

Simpsonova formula

- ulazni podaci funkcija $f(x)$, granice integracija a i b, broj čvorova ili veličina koraka h
- definirati broj čvorova ili veličinu koraka $h = \frac{b-a}{m}$
- izračunati vrijednosti funkcije u granicama a i b
- u petlji $(k = 1, m-1)$ sumirati doprinose vrijednosti funkcije u čvorovima $f(x = a+kh)$ na način da se one s neparnim indeksom množe sa 4, a one s parnim indeksom množe sa 2
- rješenje je zbroj vrijednosti funkcije u zadanim čvorovima pomnožen s $\frac{h}{3}$

6.1.3 Primjena interpolacijskog polinoma

Ideja korištenja Taylorovog razvoja se može interpretirati kao da smo koristili interpolacijski polinom za opis funkcije na intervalima. Trapezna formula odgovara interpolacijskom polinomu prvog stupnja - linearnoj funkciji, dok Simpsonova formula odgovara polinomu drugog stupnja - paraboli. Trapezna formula dati će točan rezultat za polinom drugog reda. Prema interpolacijskom polinomu Simpsonova formula bi trebala biti točna za integraciju polinoma trećeg stupnja, ali budući da doprinos člana u Taylorovom razvoju reda veličine $O(h^3)$ integracijom je jednak nuli, Simsonova formula integrira točno za polinom četvrtog stupnja.

Primjer 6.1.

Usporedite trapeznu i Simpsonovu formulu na primjeru integrala

$$\int_a^b f(x)dx = \int_a^b x^3 dx = \frac{1}{4}(b^4 - a^4)$$

Rješenje:

Usporedit ćemo rješenja za $m+1=3$ integracijske točke i korakom $h = \frac{b-a}{m} = \frac{b-a}{2}$.

Trapezna formula

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2\cdot 2}[f(a) + 2f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] =$$

$$= \frac{b-a}{4}[a^3 + 2\frac{(a+b)^3}{8} + b^3] = ... = \frac{1}{4}(b^4 - a^4) + \frac{1}{16}(b^4 - a^4) + \frac{3}{16}(ba^3 - ab^3)$$

Simpsonova formula

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{3\cdot 2}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)] =$$

$$= \frac{b-a}{6}[a^3 + 4\frac{(a+b)^3}{8} + b^3] = ... = \frac{1}{4}(b^4 - a^4)$$

Primjer 6.2.

Usporedite trapeznu i Simpsonovu formulu na primjeru integrala

$$I(f) = \int_0^4 \frac{4}{1+x^2}dx = 4tan^{-1}(4) \approx 5.30327065$$

Rješenje:

Usporedit ćemo numerička rješenja za različite odabire broja integracijskih točaka (koraka h).

- $m = 5$
  - trapezna formula =5.30228
  - Simpsonova formula = 5.151251
- $m = 10$
  - trapezna formula = 5.3018
  - Simpsonova formula = 5.301637
- $m = 50$
  - trapezna formula 5.30321
  - Simpsonova formula 5.303271

6.2 Gaussova kvadratura

Gaussova kvadratura definirana je oblikom (6.4):

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{k=0}^{m} w_k^{(m)} f(x_k^{(m)}) \equiv \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i)$$

pri čemu čvorovi integracije $x_1, ..., x_n$ nisu ravnomjerno raspoređeni na intervalu $[a, b]$, već se definiraju na način da numerička greška izračuna vrijednosti integrala bude što manja. Težinske funkcije $w(x)$ na intervalnim čvorovima definirane su standardnim funkcijama čiji primjeri su dani u tablici 6.2 za određen potpuni skup ortogonalnih funkcija:

Tablica 6.2

težinska funkcija w	interval	ime formule Gauss-*
1	$[-1, 1]$	Legendre
$1/\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	Čebišev 1. vrste
$\sqrt{1-x^2}$	$[-1, 1]$	Čebišev 2. vrste
e^{-x}	$[0, \infty >$	Laguerre
e^{-x^2}	$< -\infty, \infty >$	Hermite

Ideja metode jest izraziti funkciju $f(x)$ preko polinoma najvišeg stupnja za koji forma (6.4) integrira egzaktno, uz ovaj uvjet može se odabrati iz potpunog skupa ortogonalnih funkcija na intervalu $[a, b]$, funkcija čije nultočke su integracijski čvorovi x_i.

Težinska funkciju $w(x)$ i težine w_i povezuje formula:

$$w_i = \int_a^b w(x) F_i(x) dx \tag{6.14}$$

pri čemu $i = 1, n$ i F_i su odabrane iz skupa funkcija u tablici 6.2.
Objasnit ćemo metodu na primjeru Legendrovih polinoma, koji definiraju Gauss-Legendrovu kvadraturnu formulu za numerički račun integrala.

6.2.1 Legendrovi polinomi

U fizici se koristi nekoliko skupova ortogonalnih funkcija koja su rješenja određenih diferencijalnih jednadžbi. Legendrovi (i pridruženi Legendrovi) polinomi su rješenja Schrodingerove jednadžbe za angularni dio sferno-simetrične potencijalne energije kao što je na primjer elektrostatska potencijalna energija. Općenito Legendrove polinome možemo napisati u obliku:

$$P \equiv L_k(x) = \frac{1}{2^k k!} \frac{d^k (x^2-1)^k}{dx^k}, ...k = 0, 1... \tag{6.15}$$

Ortogonalnost polinoma definirana je relacijom:

$$\int_{-1}^{1} L_i(x) L_j(x) dx = \frac{2}{2i+1} \delta_{ij} \tag{6.16}$$

pri čemu Kroneckerov simbol δ_{ij} jednak je 0 za $i \neq j$, a 1 za $i = j$.
Vrijedi rekurzivna formula:

$$(j+1) L_{j+1}(x) + j L_{j-1}(x) - (2j+1) x L_j(x) = 0 \tag{6.17}$$

Uvjet normiranosti zadan je relacijom $L_j(1) = 1$ za svaki j.

Primjer 6.3.
Izračunajte Legendrove polinome $L_0(x) = 1$, $L_1(x) = x$ i $L_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$.

Rješenje:
primjeri na satu ...

Primjer 6.4.
Izrazite polinom $Q_{n-1}(x)$ razvojem u red koristeći kao bazu Legendrove polinome.
Rješenje:
Polinom $Q_{n-1}(x)$ izražavamo preko Legendrovih polinoma do stupnja $n-1$:

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

... izvod na satu

$$\int_{-1}^{1} L_m(x) Q_{n-1} dx = \frac{2}{2m+1}\alpha_m$$

pri čemu je $m \leq (n-1)$.

Zadatak $\boxed{6.1.}$ Napišite program koji računa vrijednosti Legendrovog polinoma n-tog reda za zadanu vrijednosti x. Izračunajte rješenja $L_n(x)$ za vrijednosti $x_i = (i+3)/(i^2) \cdot x_{i-1} + x_{i-2}$ i $i = 1, 10$, uz početne uvjete $x_{-1} = 0$ i $x_0 = 1$.

6.2.2 Gauss-Legendrova kvadratura

Razradimo ideju Gaussove kvadrature na primjeru odabira Legendrovih polinoma

$$\int_a^b f(x)dx \approx \int_a^b P_{2n-1}(x)dx = \sum_{i=1}^{n} w_i^{(n)} P_{2n-1}(x_i) \equiv \sum_{i=1}^{n} w_i^{(n)} f(x_i)$$

Na satu ćemo izvesti dokaz da ova forma vrijedi.
Uz ovaj dokaz, vrijedi da se funkcija $f(x)$ može aproksimirati polinomom P_{2n-1} $2n-1$ stupnja što znači da se mogu napisati $2n$ jednadžbi i izračunati $2n$ nepoznanica, odnosno n točaka koje su nultočke Legendrovog polinoma n-tog stupnja i n pripadnih težina.

Primjer 6.5.
Ako se funkcija $f(x)$ može opisati polinomom trećeg stupnja rješenje integrala $\int f(x)dx$ može se izrazi u čvorovima koje su nultočke Legendrovog polinoma drugog stupnja $L_2(x)$. Dokažite.
Rješenje:
Tražimo vrijednost integrala $\int_{-1}^{1} f(x)dx$ uz pretpostavku da vrijedi $f(x) \equiv P_3 = P_{2n-1}$ i za $n = 2$ rješenje je oblika:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx w_1 f(x_1) + w_2 f(x_2)$$

Funkciju $f(x)$ izrazimo preko općeg oblika polinoma trećeg stupnja:

$$f(x) = ax^3 + bx^2 + cx + d \equiv P_3$$

uvrstimo u gornji izraz:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx = \int_{-1}^{1} (ax^3 + bx^2 + cx + d) \approx w_1(ax_1^3 + bx_1^2 + cx_1 + d) + w_2(ax_2^3 + bx_2^2 + cx_2 + d)$$

što definira sustav 4 jednadžbe s 4 nepoznanice x_1, x_2, w_1 i w_2:

$$a\int_{-1}^{1} x^3 dx = 0 = a(w_1 x_1^3 + w_2 x_2^3)$$

$$b\int_{-1}^{1} x^2 dx = \frac{2}{3}b = b(w_1 x_1^2 + w_2 x_2^2)$$

$$c\int_{-1}^{1} x dx = 0 = c(w_1 x_1 + w_2 x_2)$$

$$d\int_{-1}^{1} dx = 2d = d(w_1 + w_2)$$

Uz malo matematike dobiju se rješenja $w_1 = w_2 = 1$, $x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}$ i $x_2 = -\frac{\sqrt{3}}{3}$:

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx \approx 1 \cdot f(\frac{\sqrt{3}}{3}) + 1 \cdot f(-\frac{\sqrt{3}}{3})$$

Primjetimo da su vrijednosti $x_{1,2}$ nultočke Legendrovog polinoma drugog stupnja $L_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1)$, te smo time dokazali početna pretpostavku.

Opis postupka numeričke integracije primjenom Gauss-Legendrove kvadrature jest za zadani stupanj polinoma n izračunati vrijednosti nultočaka Legendrovog polinoma n-tog stupnja i pripadne težine. Nultočke definiraju odabir čvorova na zadanom intervalu integracije. Integral je jednak sumi vrijednosti podintegralne funkcije u odabranim čvorovima pomnožene s pripadnim težinama.
Iskoristi ćemo funkciju gaugleg iz knjige Numerical recipes za računanje nultočki i pripadnih težina Legendrovih polinoma.

Opis funkcije gaugleg

Funkcija gaugleg iz Numerical Recepies za zadani n stupanj Legendrovog polinoma računa nultočke i pripadne težine.

- Ulazni i izlazni parametri:
  - granice integracije $x1$ i $x2$
  - stupanj Legendrovog polinoma n
  - x [] - polje koje sadrži nultočke
  - w [] - polje koje sadrži pripadne težine
- jedna nultočka za neparan n je jednaka nuli, dok su ostale nultočke i pripadne težine simetrične s obzirom na nulu, te je dovoljno da ih tražimo pola, tako da definiramo brojač $m = \frac{n+1}{2}$
- za Legendrove polinome interval definicije je $[-1, 1]$ definiramo vrijednosti $xm = \frac{x1+x2}{2}$ -sredina intervala i $xl = \frac{x2-x1}{2}$ -pola duljine intervala. Ove vrijednosti se koriste da se nultočke Legendrovog polinoma pozicioniraju na traženi interval $[x1, x2]$
- Otvorimo petlju za određivanje nultočaka uz brojač $i = 1, m$. Nultočke se definiraju Newton-Raphsonovom metodom, pri čemu se za svaku nultočku početna vrijednost odabire

prema vrijednosti funkcije $z = cos(\pi \cdot \frac{i-0.25}{n+0.5})$

- Legendrovi polinomi i derivacija Legendrovog polinoma se računaju preko rekurzivnih formula:

$$L_{j+1} = \frac{1}{j+1}[(2i+1)x \cdot L_j - jL_{j-1}]$$

$$L'_{j+1} = \frac{jL_{j-1} - jx \cdot L_j}{1 - x^2}$$

- i-to izvršavanje petlje nađe jednu nultočku z te u polje $x[]$ upisujemo nultočke prema pravilma:

$$x(i) = xm - xl \cdot z$$

$$x(n+1-i) = xm + xl \cdot z$$

- Težine se računaju prema formuli:

$$w(i) = \frac{2}{(1 - x_i^2)(L'_n(x_i))^2}$$

pri čemu je

$$w(i) = w(n+1-i)$$

- Izvrši se petlja m puta i nađu sve nultočke i pripadne težine

Primjer 6.6.

Usporedite trapeznu, Simpsonovu i Gauss-Legendrovu formulu na primjeru integrala

$$I(f) = \int_0^4 \frac{4.}{1. + x^2} dx = 4tan^{-1}(4) \approx 5.30327065$$

Rješenje:

Usporedit ćemo numerička rješenja za različite odabire broja integracijskih točaka (koraka h).

- $m = 5$
  - trapezna formula =5.30228
  - Simpsonova formula = 5.151251
  - Gauss-Legendrova formula = 5.17443
- $m = 10$
  - trapezna formula = 5.3018
  - Simpsonova formula = 5.301637
  - Gauss-Legendrova formula = 5.2711
- $m = 50$
  - trapezna formula 5.30321
  - Simpsonova formula 5.303271

– Gauss-Legendrova formula = 5.30186

Zadatak $\boxed{6.2.}$ (obavezan) Datoteka gaug-leg.c sadrži funkciju gauleg iz Numerical Recipes str. 152. koja računa čvorove i težine za Gauss-Legendrovu metodu integracije. Na mjestima zvjezdica objasnite (komentirajte) kod ove funkcije.

Zadatak $\boxed{6.3.}$ Izračunajte težine i čvorove za Gaussovu kvadraturu za funkciju f(x)= polinom 3eg stupnja, metodom traženja koeficijenta preko razvoja $\int(ax^3+bx^2+cx+d)dx \approx w_0 f(x_0)+w_1 f(x_1)$ i metodom računanja inverzne matrice L (matrica L dimenzije N sadrži vrijednosti Legendrovih polinoma $L_0(x)...L_{N-1}$ u nultočkama Legendrovog polinoma $L_N(x)$. Izračunajte integrale $\int_{-1}^{1}(7x^2+6x+3)dx$ i $\int_{-1}^{1}(3x^3+5x+2)dx$ koristeći dobivene težine i čvorove. Što možete zaključiti o točnosti ove metode?

Zadatak $\boxed{6.4.}$ (obavezan) Izračunajte vjerojatnost da atom neona mase $m = 3.37 \cdot 10^{-26}kg$ u idealnom plinu na temperaturi $T = 300K$ ima brzinu u intervalu $50ms^{-2}$ oko srednje brzine. Funkcija gustoće vjerojatnosti za iznos brzina odgovara Maxwellovoj distribuciji:

$$f_{MB}(v) = \frac{m}{2\pi k_B T}^{3/2} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{2k_B T}}$$

te je iznos srednje brzine jednak

$$v_{srednje} = \sqrt{\frac{8k_B T}{\pi m}} = 559.4m/s$$

$k_B = 1.38064852 \cdot 10^{-23} m^2 kg s^{-2} K^{-1}$

a) Postavite problem, napišite jednadžbu za integraciju i izračunajte sve konstante.

b) Pripremite programe za numeričku integraciju. Nađite rješenja korištenjem metoda integracije trapeznom i Simsonovom formulum, te Gauss-Legandrovu kvadraturom za broj koraka (točaka) jednak $10, 50, 100$.

c) Ispišite rezultate i komentirajte točnost rezultata.