Počítačová fyzika IV

Numerický výpočet integrálov

Peter Papp, Ján Ďurian

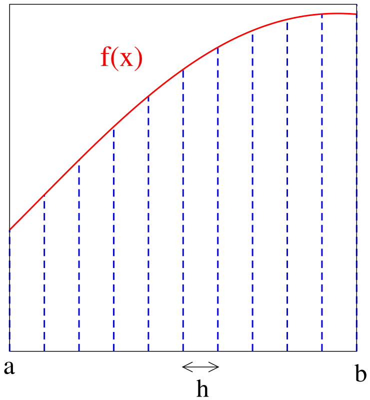
(Peter Markoš)

Katedra experimentálnej fyziky F2-81

Obsah

- Jednoduché algoritmy delenia intervalu
- Zložitejšie algoritmy delenia intervalu
- Integrovanie pomocou klasických ortogonálnych polynómov
- Transformácia integračnej oblasti na interval $(-1, +1)$
- Úlohy na riešenie:
  1. Perióda nelineárneho kyvadla
  2. Funkcie chýb

Integrál



$$I = \int_a^b \mathrm{d}\ x\ f(x)$$

Interval (a, b) rozdelím na N častí

$$h = \frac{b-a}{N}$$

Nájdem

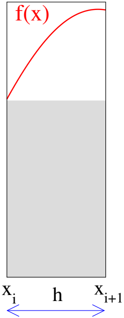
$$x_i = a + hi, \qquad f_i = f(x_i)$$

$$i = 0, 1, 2 \ldots N$$

$x_0 = a$, $x_N = b$

Hodnoty f_i použijem na výpočet integrálu.

Integrál - triviálny algoritmus

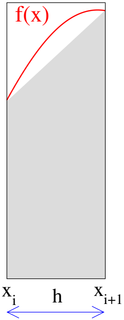


$$I \approx I_0 = h \sum_i^{N-1} f_i$$

Najjednoduchšie priblíženie.
Chyba v každom kroku $\sim h^2$
Krokov je N
Celková chyba výpočtu: $\sim h$

$$I_0 = h\left[f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-1}\right] + \mathcal{O}(h)$$

Integrál - lepší algoritmus



Funkciu v každom intervale aproximujme lineárnou funkciou

$$f(x) \approx \alpha x + \beta$$

Dostaneme

$$I \approx I_1 = h \sum_{i}^{N-1} \frac{f_i + f_{i+1}}{2}$$

Chyba v každom kroku $\sim h^3$
Krokov je N
Celková chyba výpočtu: $\sim h^2$

$$I_0 = h\left[f_0 + f_1 + f_2 + \cdots + f_{N-1}\right] + \mathcal{O}(h)$$

$$I_1 = \frac{h}{2}\left[f_0 + 2f_1 + 2f_2 + \cdots + 2f_{N-1} + f_N\right] + \mathcal{O}(h^2)$$

Program robí “takmer to isté”, ale výsledok je podstatne lepší.

Integrál - lepší algoritmus

Preložme cez tri nasledujúce body parabolu

$$f(x) = \alpha x^2 + \beta x + \gamma$$

Koeficienty α, β, γ nájdeme z požiadavky

$$f_k(x) = \alpha x_k^2 + \beta x_k + \gamma$$

v troch za sebou nasledujúcich bodoch $k = i - 1$, $k = i$, $k = i + 1$.
Pre interval (x_{i-1}, x_{i+1}) dĺžky $2h$ nájdeme

$$I_i = \frac{h}{3}\left[f_{i-1} + 4f_i + f_{i+1}\right]$$

a celý integrál $I = I_1 + I_3 + \dots I_{N-1}$, ($N$ musí byť párne!) kde

$$\begin{array}{lcl} I_1 & = & \frac{h}{3}\left[f_0 + 4f_1 + f_2\right] \\ I_3 & = & \frac{h}{3}\left[f_2 + 4f_3 + f_4\right] \\ \dots & = & \dots \\ I_{N-1} & = & \frac{h}{3}\left[f_{N-2} + 4f_{N-1} + f_N\right] \end{array}$$

$$I \approx I_2 = \frac{h}{3}\left[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \dots + 4f_{N-1} + f_N\right] + \mathcal{O}(h^4)$$

Integrál - lepší algoritmus

Integrál teda aproximujme vzťahom

$$I_2 = \frac{h}{3}\left[f_0 + 4f_1 + 2f_2 + 4f_3 + 2f_4 + \cdots + 4f_{N-1} + f_N\right] + \mathcal{O}(h^4)$$

(N musí byť párne).

- Ak $f(x) \equiv F$ (konštanta), tak dostaneme

$$I_2 = \frac{h}{3}F\times[1 + 4(N/2) + 2(N/2-1) + 1] = \frac{h}{3}F\times 3N = I_2 = (b-a)F$$

- použili sme kvadratickú aproximáciu, ale výsledný vzťah presne integruje aj kubický polynóm (presvedčte sa!).
  Preto je presnosť priblíženia h^4.

Integrál - lepšie algoritmy

Z tých istých hodnôt funkcie môžem zostrojiť presnejšie priblíženia, keď cez body prekladám polynóm vyššieho stupňa.

Aproximácia polynómom 4. stupňa (používa vždy 5 nasledujúcich bodov):

$$
\begin{aligned}
I \approx I_4 = \frac{h}{45}\Big[&+ \; 14f_0 + 64f_1 + 24f_2 + 64f_3 + 14f_4 \\
&+ \; 14f_4 + 64f_5 + 24f_6 + 64f_7 + 14f_8 \\
&+ \; \ldots \\
&+ \; 14f_{N-4} + 64f_{N-3} + 24f_{N-2} + 64f_{N-1} + 14f_N \Big] + \mathcal{O}(h^6)
\end{aligned}
$$

($N = 4M$, pretože kvartický polynóm prekladám cez 5 bodov na intervale dĺžky $4h$).
Podobne ako predtým je vzorec presný pre polynómy 5. stupňa.

Všimnime si, že numerická náročnosť výpočtu nerastie, vyjadrenia integrálu sa líšia len koeficientami pri jednotlivých hodnotách f_i.
Napriek tomu sa presnosť výpočtu zlepší o niekoľko rádov.

Integrál - porovnanie presnosti výpočtu

Algoritmy testujeme na jednoduchom integráli

$$I = 6\int_0^1 x^5 \mathrm{d}x = 1$$

N	I_0	I_1	I_2	I_4
4	0.4042968750	1.1542968750	1.0078125000	1.0000000000
8	0.6639404297	1.0389404297	1.0004882812	1.0000000000
16	0.8222579956	1.0097579956	1.0000305176	1.0000000000
128	0.9767150806	1.0001512586	1.0000000075	1.0000000000

I_4 je samozrejme presný, pretože integrujeme polynóm piateho stupňa.

Klasické ortogonálne polynómy

Polynómy $p_0(x)$, $p_1(x)$,... definované na intervale (a, b) ktoré spĺňajú:

- Rekurzívny vzťah

$$p_{n+1}(x) = (x - a_n)p_n(x) - b_n p_{n-1}(x)$$

- vzťah ortogonality:

$$\int_a^b \mathrm{d}x W(x) p_n(x) p_m(x) = A_n \delta_{nm}$$

s danou váhovou funkciou $W(x)$.

Po normovaní $p_n(x) \to p_n(x)/\sqrt{A_n}$ budú polynómy ortonormované.

Klasické ortogonálne polynómy a integrál

Pre ortogonálny polynóm rádu N môžeme integrál I aproximovať

$$I = \int_a^b \mathrm{d}x \; W(x) f(x) \approx I_N = \sum_i^N v_i f(x_i)$$

body x_i sú dané vzťahom

$$p_N(x_i) = 0, \qquad\qquad i = 1, 2, \ldots N$$

a v_i sú váhy, ktoré je treba dopočítať.

Tvrdenie: I_N je presný, ak $f(x)$ je polynóm stupňa $2N - 1$.

Gauss-Chebyshevove polynómy

Definované na intervale $(-1, 1)$. Môžeme ich zostrojiť z rekurentného vzťahu

$$\begin{aligned} T_0(x) &= 1 \\ T_1(x) &= x \\ T_{n+1}(x) &= 2xT_n(x) - T_{n-1}(x) \end{aligned}$$

Platí

$$\int_{-1}^{+1} \mathrm{d}x \frac{T_n(x)\,T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} = \frac{\pi}{2}\delta_{nm}$$

$$T_n(\cos\phi) = \cos(n\phi)$$

preto vieme nuly polynómu stupňa N:

$$T_N(x_i) = 0 \qquad x_i = \cos\frac{2i-1}{2N}\pi$$

váhy $v_i = \pi/N$.

Výpočet integrálu

Pre ortogonálny polynóm rádu N môžeme integrál I aproximovať

$$I = \int_a^b \mathrm{d}x \; W(x) f(x) \approx I_N = \sum_i^N v_i f(x_i)$$

Váhová funkcia $W(x) = (1 - x^2)^{-1/2}$, váhy $v_i = \pi / N$. Integrál aproximujme

$$I_N = \frac{\pi}{N} \sum_i^N F(x_i) \qquad\qquad x_i = \cos \frac{2i - 1}{2N} \pi$$

Výhoda: počítame len malý počet funkčných hodnôt, výsledok je veľmi presný.

Výpočet integrálu

Ortogonálnych polynómov je veľa, voľba polynómov závisí od typu integrálu.

Príklad: Ak funkcia nemá singularitu, použijem Gauss-Legendreove polynómy $P_n(x)$ s váhovou funkciou $W(x) = 1$.

$$\begin{aligned} P_0(x) &= 1 \\ P_1(x) &= x \\ (n+1)P_{n+1}(x) &= (2n+1)xP_n(x) - nP_{n-1}(x) \end{aligned}$$

$$\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x P_n(x) P_m(x) = \frac{2}{2n+1} \delta nm$$

Nuly a váhy ortogonálnych polynómov je treba niekde nájsť (internet).
pre $N = 32$ pozri aj web stránku predmetu.

Transformácia integračnej oblasti

- Konečný interval (a, b) transformujem na interval $(-1, +1)$:

$$y = \frac{1}{b-a}\left[2x - (a+b)\right]$$

- Transformácia interval $x \in (-\infty, +\infty)$ na $y \in (-1, +1)$:

$$y = \tanh x$$

- Vždy sa dá nájsť vhodná transformácia. Nájdite napr. transformáciu $x \in (0, +\infty)$ na $y \in (-1, +1)$
- Dlhý interval sa dá rozdeliť na menšie časti a v každej integrovať zvlášť.
  (Pozri napr. prvú prednášku – integrovanie oscilujúcej funkcie.)

Výpočet váh v_i

Predpokladajme, že poznáme nuly x_i polynómu P_n.
Potrebujeme ešte váhy v_i.

Pre nultý polynóm $P_0(x)$ nájdeme

$$\int \mathrm{d}x W(x) P_0(x) \ = \sum_i^N v_i P_0(x_i)$$

Z ortogonality polynómov vieme, že pre $k = 1, 2, \dots N-1$ platí

$$\int \mathrm{d}x W(x) P_k(x) \ = \int \mathrm{d}x W(x) P_k(x) \ P_0(x) = 0 = \sum_i^N v_i P_k(x_i)$$

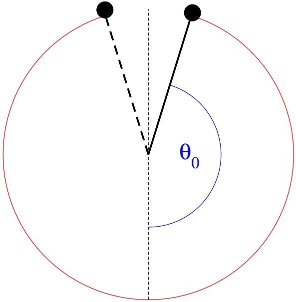
Dostali sme N lineárnych rovníc pre N neznámych váh v_i.

Fyzikálne kyvadlo

Bod hmotnosti m na pevnej nehmotnej tyči. Kyvadlo vychýlim o uhol θ_0 a nechám kmitať. Akú má periódu ?
Energia:

$$E = \frac{1}{2} J\omega^2 + mgh$$

$$E = \frac{1}{2} m\ell^2 \left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 + mg\ell(1-\cos\theta)$$



Počiatočné podmienky:

$$\theta(t=0) = \theta_0, \quad \frac{\partial\theta}{\partial t}(t=0) = 0$$

Potom platí

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 = \frac{g}{\ell}\left[\cos\theta - \cos\theta_0\right]$$

Fyzikálne kyvadlo

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial\theta}{\partial t}\right)^2 = \frac{g}{\ell}\left[\cos\theta - \cos\theta_0\right]$$

$$\left|\frac{\partial t}{\partial\theta}\right| = \sqrt{\frac{\ell}{2g}}\frac{1}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_0}}$$

Z čoho dostaneme pre periódu vzťah

$$\frac{T}{4} = \sqrt{\frac{\ell}{2g}} \times I, \qquad I = \int_0^{\theta_0} \frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_0}}$$

V limite $\theta_0 \to 0$ je $I = \pi/\sqrt{2}$ takže dostaneme $T_{\theta_0\to 0} = 2\pi\sqrt{\ell/g}$ ako sme očakávali.

Potrebujeme nájsť integrál I.

Výpočet integrálu

Priblíženia I_0 - I_4 vyžaduje hodnoty funkcie na hranici intervalu, kde naša funkcia diverguje.
Pretože funkcia je integrovateľná, dá sa tento problém obísť:

- nepatrne znížiť integračnú hranicu $\theta_0 \to \theta_0 - \phi$
  Chyba, ktorej sa dopustíme, je $\propto (\phi/sin\theta_0)^{1/2}$.
- Použiť iné vzťahy pre integrál, ktoré pre výpočet nepoužívajú okrajové body: napr.

$$I_5 = h\Big[\quad \tfrac{55}{24}(f_1 + f_{N-1}) - \tfrac{1}{6}(f_2 + f_{N-2}) + \tfrac{11}{8}(f_3 + f_{N-3}) \\ + f_4 + f_5 + \cdots + f_{N-5} + f_{N-4}\Big] + \mathcal{O}(h^4)$$

[Numerical Recipes, 4.1.17]

Výpočet integrálu

... pomocou Gauss-Chebyshevových polynómov:

$$\frac{T}{2} = \sqrt{\frac{\ell}{2g}} \times I, \qquad I = \int_{-\theta_0}^{+\theta_0} \frac{\mathrm{d}\theta}{\sqrt{\cos\theta - \cos\theta_0}}$$

substitúcia $\theta = \theta_0 x$:

$$I = \theta_0 \int_{-1}^{+1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{\cos\theta_0 x - \cos\theta_0}}$$

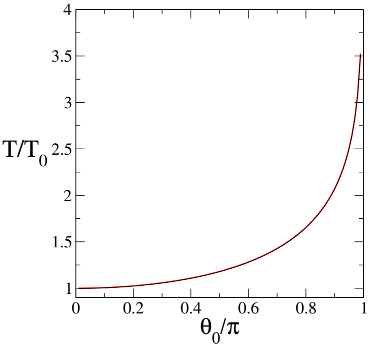
ktorý ešte upravíme:

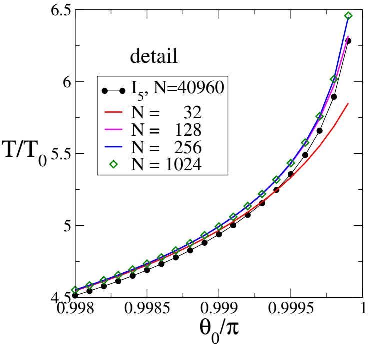
$$I = \theta_0 \int_{-1}^{+1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} \frac{\sqrt{1-x^2}}{\sqrt{\cos\theta_0 x - \cos\theta_0}} = \theta_0 \int_{-1}^{+1} \frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} F(x)$$

Funkcia $F(x)$ už nemá singularity na okraji.
Integrujme pomocou Gauss-Chebyshevových polynómov:

Fyzikálne kyvadlo

Perióda T v jednotkách $T_0 = 2\pi\sqrt{\ell/g}$:





Čierne body: integrál I_5 pre $N = 40960$ bodov.
Ostatné symboly: výpočet pomocou Gauss-Chebyschevových polynómov rádu 32 - 1024.
Pre $\theta_0 = 0.999\pi$ sa získané periódy líšia medzi 4.9929 resp. 4.938 (rozdiel 1.1%).

Úlohy

Vyberte si jednu z dvoch úloh:

Úloha 4.1

Napíšte program pre výpočet periódy kyvadla (algoritmus podľa vlastného výberu). Ukážte, ako sa perióda kyvadla mení ako funkcia počiatočnej výchylky θ_0. Viacerými voľbami počtu bodov sa presvedčte, či vaše riešenie je dostatočne presné.

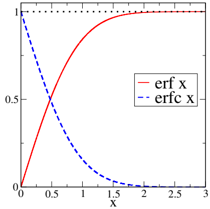
Úlohy

Úloha 4.2

Napíšte program na výpočet numerickej hodnoty integrálov

$$\mathrm{erf}\ x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \mathrm{d}t\ e^{-t^2} \qquad \mathrm{erfc}\ x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^{+\infty} \mathrm{d}t\ e^{-t^2}$$

(error functions). Presvedčte sa, že platí erf x + erfc $x = 1$.



Výpočet pomocou Gauss-Legendre polynómu $N = 32$.