Sprawozdanie

Metody numeryczne

Laboratorium 13.

Szacowanie całek niewłaściwych przy użyciu kwadratur Gaussa

11.06.2020 r.

Aleksandra Rolka

1. Wstęp teoretyczny

Kwadratura

Kwadraturą nazywa się funkcjonał liniowy:

$$S(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i), \tag{1}$$

gdzie:

$x_1, x_2, \dots, x_n$ −węzły kwadratury,
A_i − współczynniki kwadratury,

który oznacza skończoną sumę. Za pomocą kwadratur oblicza się numerycznie przybliżoną wartość całek oznaczonych:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} A_i f(x_i). \tag{2}$$

Kwadraturę opartą na węzłach o łącznej krotności $n+1$ nazywa się kwadraturą interpolacyjną.

Kwadratury Gaussa

Rozpatruje się kwadratury typu:

$$S(f) = \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k), \tag{3}$$

w których współczynniki z wagą $p(x)$ wynoszą:

$$A_k = \int_a^b p(x)\Phi_k(x)\, dx\,. \tag{4}$$

Ustalono funkcję wagową $p(x)$ oraz liczbą węzłów $(N+1)$, szukając położenia węzłów oraz współczynników A_k, tak aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Kwadratura tego typu nosi nazwę kwadratury Gaussa.

Do wyznaczenia kwadratur Gaussa używa się wielomianów ortogonalnych. Ciąg wielomianów:

$$\{\varphi_n(x)\} = \{\varphi_0(x, \varphi_1(x), \dots, \varphi_N(x)\}, \tag{5}$$

nazywa się ortogonalnymi w przedziale $[a, b]$ jeśli zachodzi pomiędzy nimi związek:

$$(\varphi_r, \varphi_s) = \int_a^b p(x)\varphi_r(x)\varphi_s(x)dx = 0, \qquad r \neq s \tag{6}$$

Najważniejsze twierdzenia dotyczące kwadratur Gaussa i wielomianów ortogonalnych:

- Wielomiany ortogonalne mają tylko pierwiastki rzeczywiste, leżące w przedziale $[a, b]$.
- Nie istnieje kwadratura Gaussa rzędu wyższego niż 2(N + 1). Kwadratura Gaussa jest rzędu 2(N + 1) wtedy i tylko wtedy, gdy węzły x_ksą pierwiastkami wielomianu$P_{N+1}(x)$
- Wszystkie współczynniki A_k w kwadraturach Gaussa są dodatnie.

Wysoki rząd spowodowany jest koniecznością ustalenia położenia N + 1 węzłów oraz współczynników kombinacji liniowej N + 1 wielomianów. Daje to 2n+2 parametrów swobodnych co określa rząd metody.
Metoda kwadratur Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w $[a, b]$. Kwadratury są dokładne dla wielomianów stopnia 2N + 1.

Tożsamość Christoffela-Darboux:

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(y)}{\gamma_k} = \frac{\varphi_{n+1}(x)\varphi_{n+1}(y) - \varphi_n(x)\varphi_n(y)}{\alpha_n \gamma_n (x-y)}, \tag{7}$$

gdzie:

$$\alpha_k = \frac{\beta_{k+1}}{\beta_k}, \tag{8}$$

$$\gamma_k = \int_a^b p(x)\varphi_k^2(x)dx, \tag{9}$$

gdzie β_k jest współczynnikiem stojącym w wielomianie φ_k przy zmiennej w najwyższej potędze.

Podstawia się za y zero wielomianu n-tego stopnia

$$y = d_j, \tag{10}$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(d_j)}{\gamma_k} = -\frac{\varphi_n(x)\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n (x-d_j)}, \quad \int dx\, p(x)\varphi_0(x) \cdot/. \tag{11}$$

Po wykonaniu mnożenia a następnie całkowania otrzymuje się:

$$\frac{\varphi_0(d_j)}{\gamma_0}\gamma_0 = -\frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b p(x) \frac{\varphi_0(x)\varphi_n(x)}{(x-d_j)} dx, \tag{12}$$

Korzystając z definicji wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j) l_j(x), \tag{13}$$

$$l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - \alpha_j)\omega_n'(\alpha_j)} \tag{14}$$

Wybiera się przypadek, taki że:

$$\omega_n(x) = \varphi_n(x) \tag{15}$$

oraz korzysta się z faktu:

$$\varphi_0(x) = 1 \tag{16}$$

Otrzymuje się współczynniki $A_k$postaci:

$$A_k = -\frac{2}{(N+2)P_{N+2}x_k P_{N+1}' x_k} \tag{17}$$

Kwadratury Gaussa-Laguerre'a

Kwadratura Gaussa- Laguerre'a dotyczy całkowania

- na przedziale $[a, b] = [0, \infty]$
- z funkcją wagową $p(x) = e^{-x}$.

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Laguerre'a:

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \tag{18}$$

Relacja rekurencyjna dla stowarzyszonych wielomianów Laguerre'a.

Funkcja wagowa ma postać:

$$p(x) = x^\alpha e^{-x} \tag{19}$$

Współczynniki kwadratury określa wzór:

$$A_k = \frac{\left((N+1)!\right)^2}{L'_{N+1}(x_k) L_{N+2}(x_k)} \tag{20}$$

A kwadratura ma postać:

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx S(f) = \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k), \tag{21}$$

gdzie węzły x_ksą zerami wielomianu L_{N+1}(x).

Kwadratury Gaussa-Hermite'a

Kwadratura Gaussa- Hermite'a dotyczy całkowania

- na przedziale $[a, b] = [-\infty, \infty]$
- z funkcją wagową $p(x) = e^{-x^2}$.

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \tag{22}$$

dla których obowiązuje relacja rekurencyjna:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}. \tag{23}$$

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

1) Obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Legandre'a wartość całki:

$$c_1 = \int_1^2 \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} dx \tag{24}$$

Wartość dokładna całki: $c_{1,a} = \pi/3$.
Wykonać wykres $|c_1 - c_{1,a}| = f(n)$, dla liczby węzłów $n = 2, 3, \ldots, 100$.

2) Obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Hermite'a wartość całki:

$$c_2 = \int_0^\infty \ln(x) \exp(-x^2) dx \tag{25}$$

a) Stosując kwadraturę Gaussa-Hermite'a dla: $n = 2, 4, 6, 8, \ldots, 100$.
b) Stosując kwadraturę Gaussa-Legendre's dla: $n = 2, 3, 4, 5, \ldots, 100$ oraz $x \in [0, 5]$.

Wartość dokładna całki $c_{2,a}$ = −0.8700577.
Dla podpunktów (a) i (b) wykonać wykres $\left|c_2 - c_{2,a}\right| = f(n)$.

3) Obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Laguere'a wartość całki:

$$c_3 = \int_0^\infty \sin(2\mathrm{x})\mathrm{e}^{-3\mathrm{x}} dx \tag{26}$$

Wartość dokładna całki: $c_{2,a}$ = 2/13.
Wykonać wykres $\left|c_3 - c_{3,a}\right| = f(n)$, dla liczby węzłów $n = 2, 3, \ldots, 10$.

2.2 Wyniki

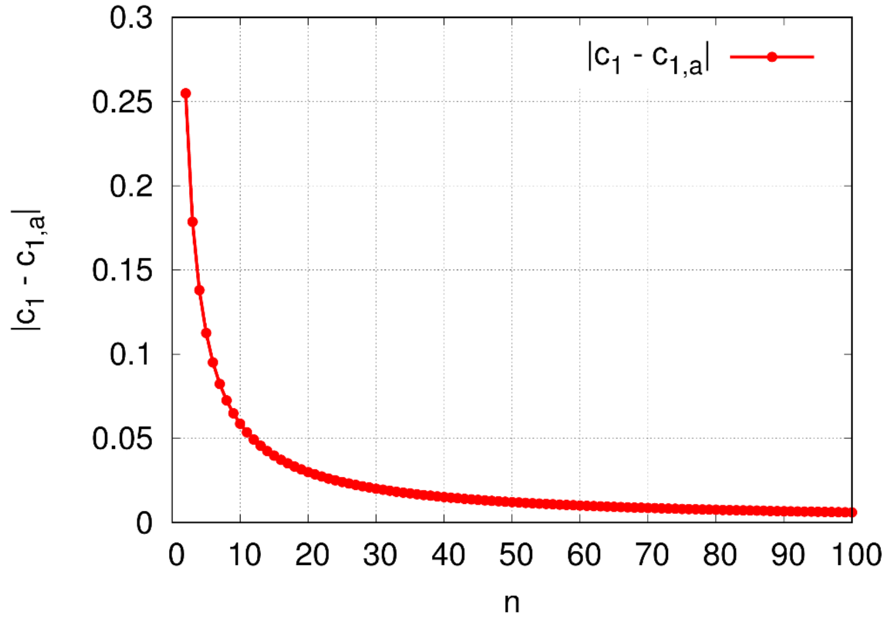
Napisany program rozwiązujący powyższe problemy korzysta z dodatkowej biblioteki numerycznej *Numerical Recipes*.

Do obliczenia

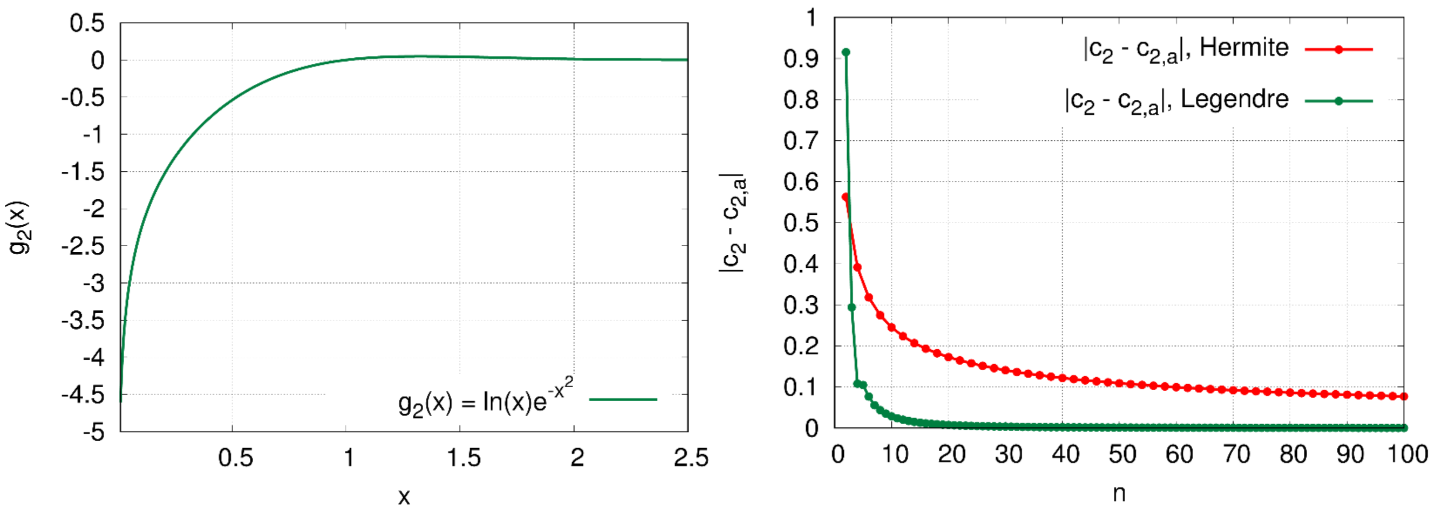
- współrzędnych węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Legendre'a wykorzystano procedurę *gauleg*
- współrzędnych węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Hermite'a : *gauher*
- współrzędnych węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Laguerre'a : *gaulag*

Otrzymane wyniki obliczeń zapisane zostały w plikach **.dat:*

Następnie na podstawie tych danych za pomocą skryptu Gnuplot'a wygenerowano poniższe wykresy:



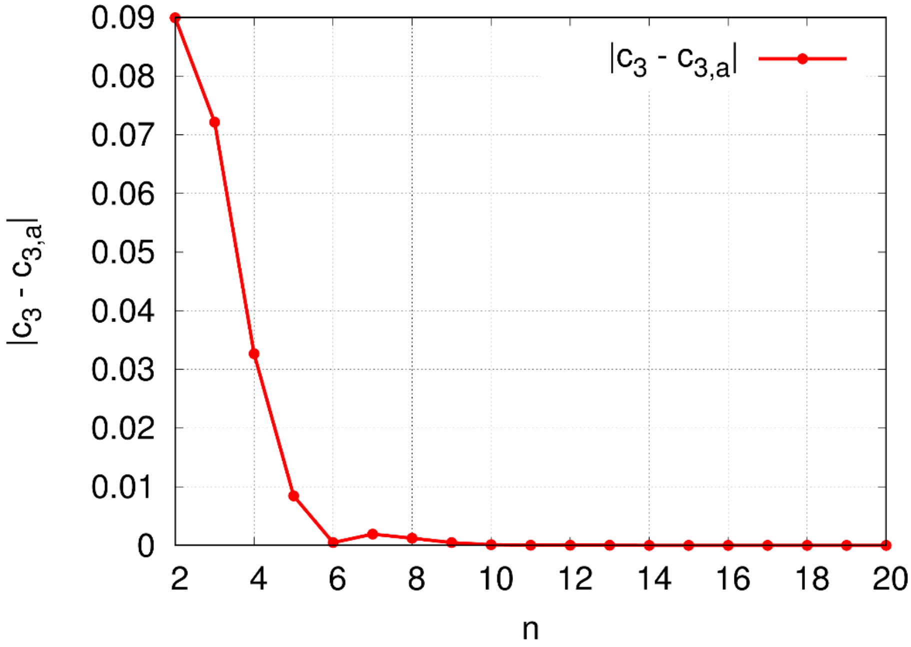
Rysunek 1. *Wyniki całkowania funkcji* $g_1(x) = \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}}$ *w przedziale [1, 2]: błąd bezwzględny całkowania* $|c_1 - c_{1,a}|$*, gdzie* $c_{1,a} = \frac{\pi}{3}$ *jest rozwiązaniem analitycznym.*



(a) *Wykres funkcji* $g_2(x)$

(b) błąd bezwzględny całkowania $|c_2 - c_{2,a}|$*, gdzie* $c_{2,a} = -00577$ *jest rozwiązaniem analitycznym.*

Rysunek 2. *Wyniki całkowania funkcji* $g_2(x) = \ln(x)\exp(-x^2)$ *w przedziale* $[0, \infty]$:



Rysunek 3. *Wyniki całkowania funkcji* $g_3(x) \; = \sin(2\mathrm{x})\mathrm{e}^{-3\mathrm{x}}$ *w przedziale* $[0, \infty]$: *błąd bezwzględny całkowania* $|c_3 \; - \; c_{3,a}|$, *gdzie* $c_{3,a} = \frac{2}{13}$ *jest rozwiązaniem analitycznym.*

3. Wnioski

Wykresy pokazują, że całkowanie kwadraturami Gaussa są skuteczne i każdą metodą udało się uzyskać błąd bezwzględny równy zero lub bliski zeru.
Najlepszymi metodami do całkowania wybranych całek okazały się te wykorzystujące kwadratury:

- Legendre'a, gdzie błąd bezwzględny całkowania był równy zeru dla $n = 20$

- Laguerre'a, gdzie błąd bezwzględny całkowania był równy stałemu zeru już dla $n = 10$.

Źródła:

- Dr hab inż. Tomasz Chwiej – Notatki do wykładu *„Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur”*. Dostępne w Internecie: http://galaxy.agh.edu.pl/~chwiej/mn/calkowanie_1819.pdf