

Sprawozdanie z ćwiczeń laboratoryjnych z Metod Numerycznych

Gabriel Naleźnik

Wydział Fizyki i Informatyki Stosowanej
Akademia Górniczo-Hutnicza im. Stanisława Staszica w Krakowie

27.05.2020 r.

Laboratoria XIII : Szacowanie całek przy użyciu kwadratur Gaussa

1. Wstęp Teoretyczny.

Całkowanie numeryczne – metoda numeryczna polegająca na przybliżonym obliczaniu całek oznaczonych. Termin **kwadratura numeryczna**, często po prostu *kwadratura*, jest synonimem całkowania numerycznego, w szczególności w odniesieniu do całek jednowymiarowych.

Proste metody całkowania numerycznego polegają na przybliżeniu całki za pomocą odpowiedniej sumy ważonej wartości całkowanej funkcji w kilku punktach. Aby uzyskać dokładniejsze przybliżenie dzieli się przedział całkowania na niewielkie fragmenty. Ostateczny wynik jest sumą oszacowań całek w poszczególnych podprzedziałach. Najczęściej przedział dzieli się na równe podprzedziały, ale bardziej wyszukane algorytmy potrafią dostosowywać krok do szybkości zmienności funkcji.

Kwadratury Gaussa - metody całkowania numerycznego polegające na takim wyborze wag: p_1, p_2, \dots, p_n i węzłów interpolacji $x_1, x_2, \dots, x_n \in [a, b]$ aby całkę $C = \int_a^b p(x)f(x) dx$ można było przybliżyć kwadraturą typu: $S(f) = \sum_{i=1}^N A_i f(x_i)$.

Współczynniki kwadratury z wagą $p(x)$ mają postać: $A_k = \int_a^b p(x)\varphi_k(x)dx$

Po ustaleniu funkcji wagowej $p(x)$ oraz liczby węzłów $(N+1)$, szukamy położenia węzłów oraz współczynników A_k tak aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Do wyznaczenia kwadratur Gaussa używa się wielomianów ortogonalnych.

Postać funkcji wagowej determinuje sposób wyznaczania węzłów i wartości współczynników kwadratury.

Najczęściej spotykane rodzaje kwadratur Gaussa:

1. Kwadratury Gaussa-Legendre'a - Posiada funkcję wagową postaci $p(x) = 1$. Przybliża całkę oznaczoną z przedziału $[-1, 1]$. Współczynniki kwadratury można wyznaczyć:

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

By zastosować wzory z przedziału $[-1, 1]$ dla przedziału $[a, b]$ należy dokonać transformacji liniowej zmiennej niezależnej. Wtedy przybliżenie całki ma postać:

$$\int_a^b f(t)dt \approx S(f) = \frac{b-a}{2} \sum_{k=0}^N A_k f(t_k)$$

dla $t_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2}x_k$ i węzłów rozłożonych w przedziale $[-1, 1]$. Węzłami są pierwiastki n -tego wielomianu Legendre'a.

2. Kwadratury Gaussa-Laguerre'a - Posiada funkcję wagową postaci $p(x) = e^{-x}$. Przybliża całkę oznaczoną z przedziału $[0, \infty]$. Współczynniki kwadratury można wyznaczyć:

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

Kwadratura z węzłami x_k , które są zerami N -tego wielomianu Laguerre'a $L_N(x)$, ma postać:

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

3. Kwadratury Gaussa-Hermite'a - Posiada funkcję wagową postaci $p(x) = e^{-x^2}$. Przybliża całkę oznaczoną z przedziału $[-\infty, \infty]$. Kwadratura z węzłami x_k , które są zerami N -tego wielomianu Hermite'a $H_N(x)$ ma postać:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} f(x) dx \approx S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k)$$

Podczas sumowania każdej z kwadratur pomijamy wagę – ta jest uwzględniona we współczynnikach A_k

2. Opis problemu.

Problemem w tym zadaniu z laboratoriów było:

1. Wyznaczyć wartość całki niewłaściwej:

$$C_1 = \int_0^a \ln(x) \, dx$$

metodą kwadratury Gaussa-Legendre'a dla $a=10$ i liczby węzłów $n = 5, 6, 7, \dots, 70$.

2. Wyznaczyć wartość całki:

$$C_2 = \int_0^\infty (x - 10)^2 \sin(4x) e^{-x} \, dx$$

przy użyciu kwadratury Gaussa-Laguerre'a oraz Gaussa-Legendre'a, dla liczby węzłów $n = 5, 6, 7, \dots, 70$.

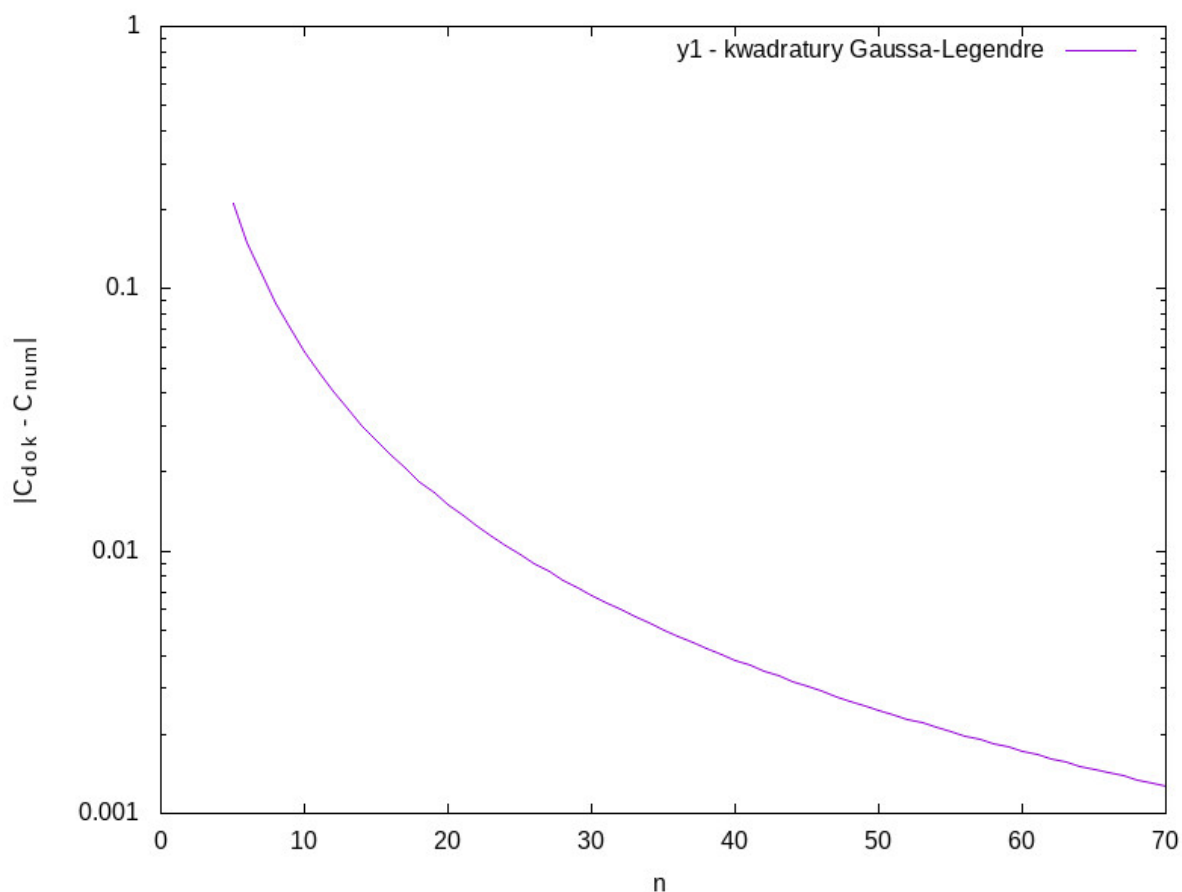
3. Wyznaczyć wartość całki:

$$C_3 = \int_{-\infty}^\infty x^7 2^{(-x^2+x+4)} e^{-x^2} \, dx$$

przy użyciu kwadratury Gaussa-Hermite'a oraz Gaussa-Legendre'a, dla liczby węzłów $n = 5, 6, 7, \dots, 70$.

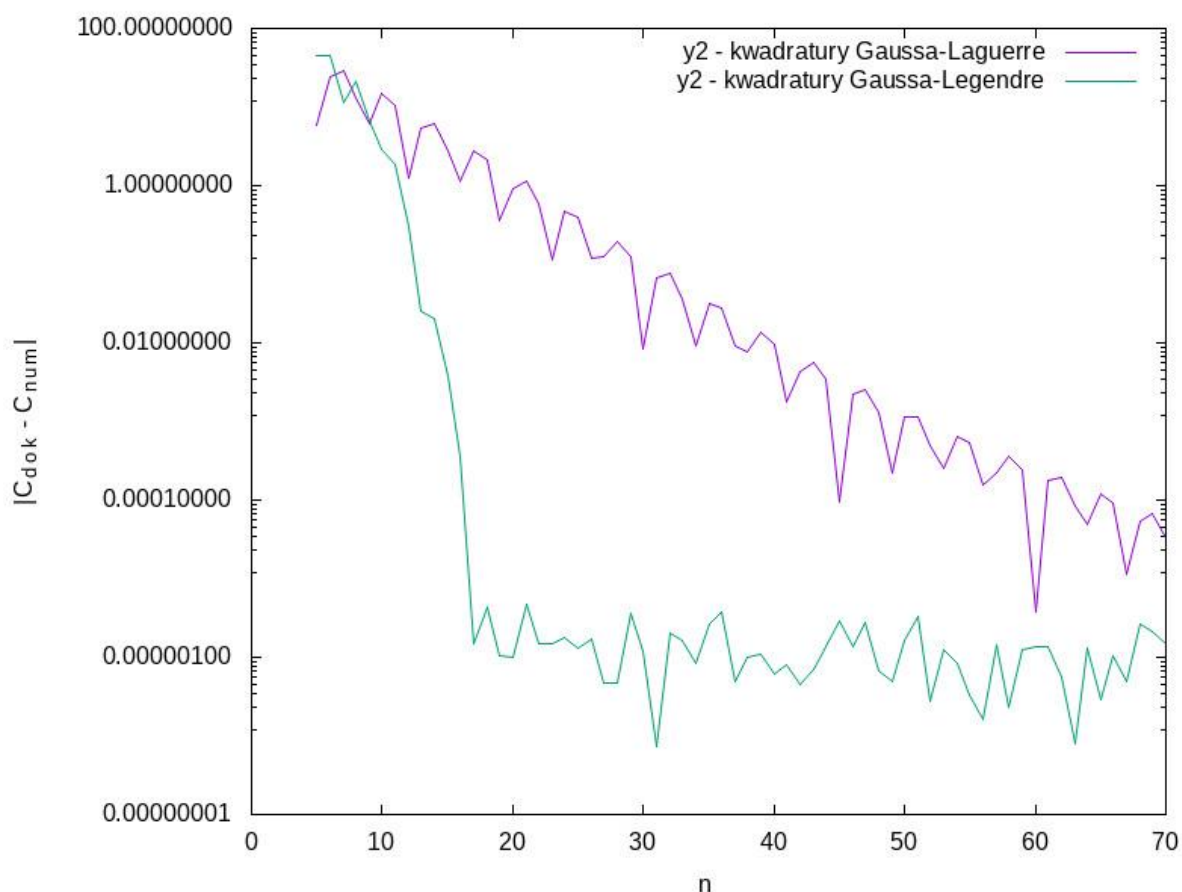
3. Wyniki

Napisałem program w języku C, wykorzystujący bibliotekę Numerical Recipes, w którym wyznaczyłem numeryczne wartości całek metodami kwadratur Gaussa-Legendre'a , Gaussa-Laguerre'a oraz Gaussa-Hermite'a. Poniżej zamieszczam uzyskane wyniki:



Rys. 3.1 Wykres modułu różnicy wartości dokładnej i numerycznej całki C_1 od liczby przyjętych węzłów.

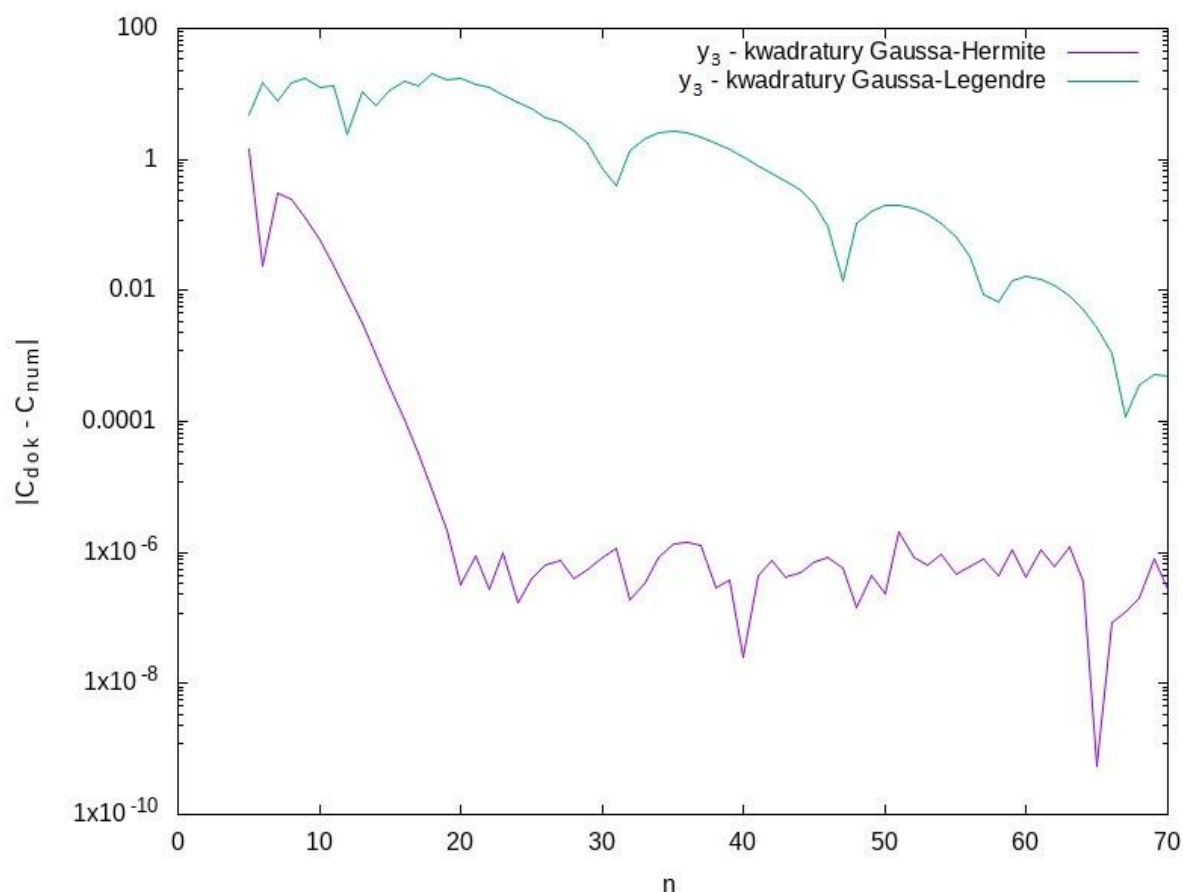
Jak można zauważyć na wykresie, wraz ze zwiększeniem liczby węzłów, cały czas zwiększała się dokładność wyznaczonego przybliżenia wartości całki metodą kwadratury Gaussa-Legendre'a.



Rys. 3.2 Wykres modułu różnicy wartości dokładnej i numerycznej całki C2 od liczby przyjętych węzłów.

Dla metody kwadratur Gaussa-Legendre'a dokładność stale się zwiększała podczas zwiększania liczby węzłów do 15. Dla ich większej liczby następowały oscylacje różnicy rozwiązania dokładnego z numerycznym i jakość wyznaczonego przybliżenia nie zwiększała się znacznie.

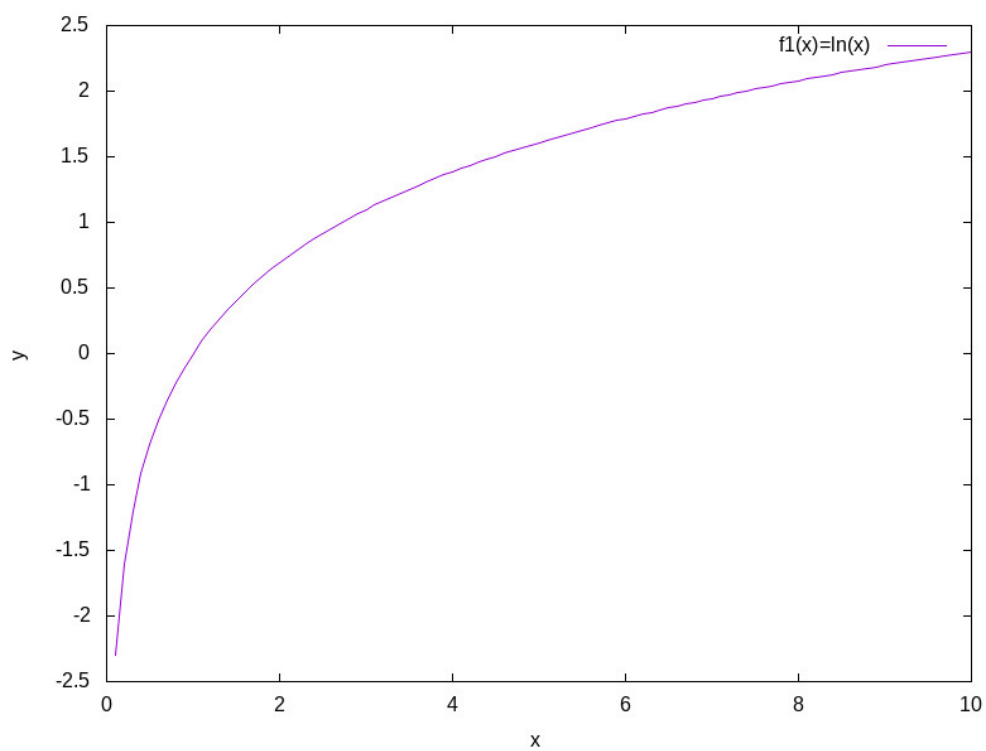
Dla metody kwadratur Gaussa-Laguerre'a mimo niewielkich oscylacji, jakość przybliżenia zwiększała się przy zwiększaniu liczby węzłów do 70. Dla większości przypadków metodą kwadratur Gaussa-Legendre'a uzyskaliśmy lepszą dokładność niż dla metody kwadratur Gaussa-Laguerre'a.



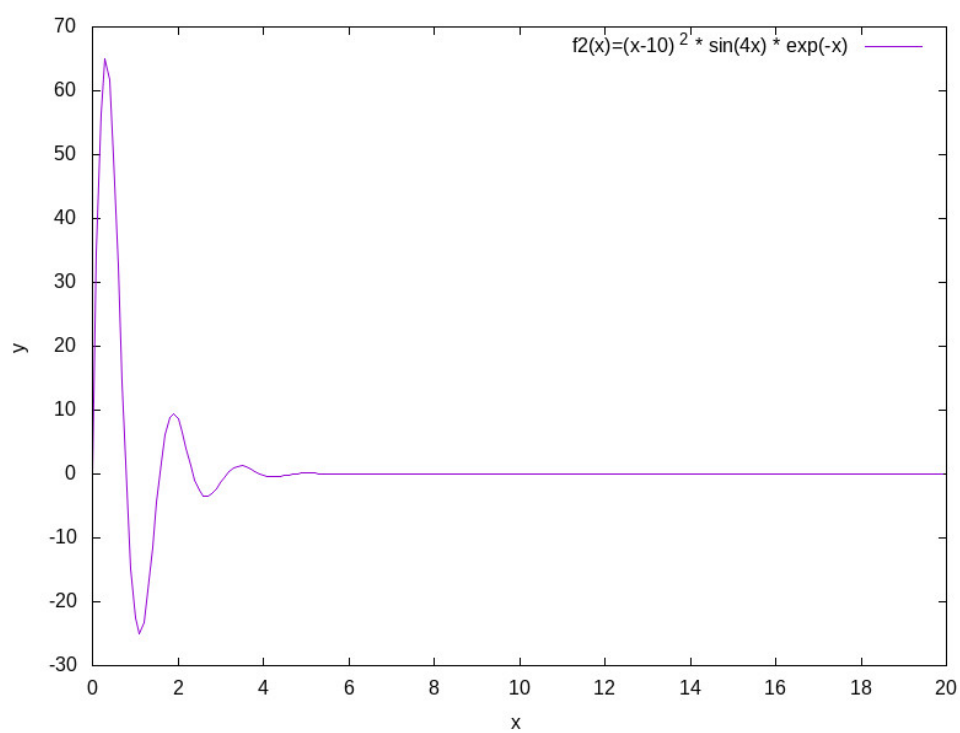
Rys. 3.3 Wykres modułu różnicy wartości dokładnej i numerycznej całki C_3 od liczby przyjętych węzłów.

Dla metody kwadratur Gaussa-Hermite'a dokładność wyznaczonej wartości całki oznaczonej C_3 zwiększała się podobnie jak dokładność przybliżenia całki C_2 metodą kwadratur Gaussa-Legendre'a. Przy zwiększaniu liczby węzłów od 5 do 20 dokładność widocznie się zwiększała, natomiast dla większej liczby przyjętych węzłów, występowały oscylacje i dokładność nie zwiększała się znacząco.

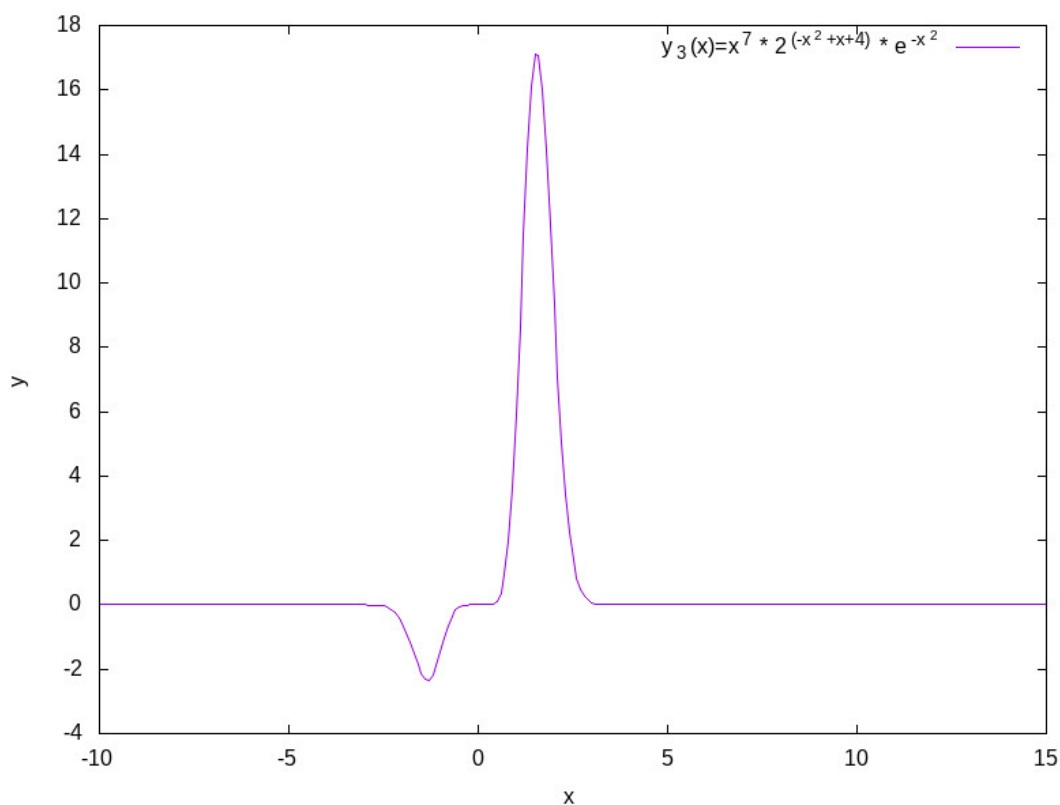
Dla metody kwadratur Gaussa-Legendre'a dokładność przybliżenia zwiększała się na całym przedziale przyjmowanej liczby węzłów. Można zauważyć powtarzające się 'uskoki' wykresu, gdzie błąd przybliżenia najpierw rośnie, a następnie zaczyna maleć. Dla całej dziedziny rozpatrywanej liczby węzłów, metoda kwadratur Gaussa-Hermite'a pozwoliła mi uzyskać lepsze przybliżenie niż metoda kwadratur Gaussa-Legendre'a.



Rys. 3.4 Wykres iloczynu funkcji podcałkowej i funkcji wagowej $f_1(x) \cdot p_1(x)$.



Rys. 3.5 Wykres iloczynu funkcji podcałkowej i funkcji wagowej $f_2(x) \cdot p_2(x)$.



Rys. 3.6 Wykres iloczynu funkcji podcałkowej i funkcji wagowej $f_3(x) \cdot p_3(x)$.

Wykresy funkcji $f_2(x) \cdot p_2(x)$ oraz $f_3(x) \cdot p_3(x)$ pokazują, że w niektórych przypadkach możliwe jest zastąpienie kwadratur Laguerre’a i Hermite’a kwadraturą Legendre’a.

Funkcja $f_2(x) \cdot p_2(x)$ przyjmuje wartości bardzo bliskie zeru dla argumentów większych od 10, zatem zamiast liczyć całkę niewłaściwą na przedziale $[0, \infty]$ metodą kwadratur Laguerre’ można ją obliczyć na przedziale $[0, 10]$ metodą kwadratur Legendre’a.

Podobna sytuacja ma miejsce dla funkcji $f_3(x) \cdot p_3(x)$, która przyjmuje wartości bliskie zeru dla argumentów większych od 15 i mniejszych od -10. Zatem kwadratury Hermite’a w przedziale $[-\infty, \infty]$ można zamienić kwadraturami Legendre’a w przedziale $[-10, 15]$.

4. Wnioski

Szacowanie wartości całek oznaczonych przy użyciu kwadratur Gaussa okazało się być bardzo wydajne i skuteczne. Już dla około 30 przyjętych węzłów, uzyskane przybliżenie było bardzo dobrej jakości. Wydajność przyjętych metod potwierdza również bardzo szybkie wykonanie obliczeń przez program. Uzyskane błędy przybliżenia są minimalnie większe od tych, uzyskanych metodą Simpsona, jednak sama implementacja algorytmu, z wykorzystaniem biblioteki numerical recipes, jest dużo prostsza i pozwala na obliczenie niektórych całek niewłaściwych bardzo prostą metodą.