

Programowanie i metody numeryczne

Ćwiczenia 9.

Całkowanie: kwadratury interpolacyjne.

CZĘŚĆ A

Zadanie 1. Porównanie kwadratur interpolacyjnych.

Napisz program `qint` obliczający numerycznie wartości kilku całek o znanej wartości analitycznej różnymi kwadraturami omówionymi na wykładzie. Porównaj dokładność tych kwadratur.

Zadanie 2. Adaptacyjna kwadratura trapezów.

Rozważmy zadanie obliczenia przybliżonej wartości całki oznaczonej

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

gdzie $f : [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ jest funkcją gładką. Niech S_N^T i S_N^S będą aproksymacjami wartości tej całki uzyskanymi za pomocą, odpowiednio, złożonej kwadratury trapezów i złożonej kwadratury Simpsona, opartych na podziale przedziału $[a, b]$ na N podprzedziałów tej samej długości $h = (b - a) / N$.

Błąd przybliżenia wartości całki I uzyskanego za pomocą złożonej kwadratury Simpsona, S_N^S , jest mniej więcej h^{-2} razy mniejszy od błędu przybliżenia wartości tej całki za pomocą złożonej kwadratury trapezów, S_N^T . Sugeruje to, że wielkość

$$E_N = |S_N^S - S_N^T|$$

będzie dobrym oszacowaniem błędu kwadratury trapezów $\varepsilon_N^T = |I - S_N^T|$.

- a) Napisz program `traperr`, którego celem będzie zbadanie, czy E_N rzeczywiście jest dobrym estymatorem błędu ε_N^T .

Program ten powinien przyjmować jako argument wywołania liczbę naturalną K oraz, dla kilku całek, których wartość można wyznaczyć analitycznie, obliczać E_N i ε_N^T dla $N = 1, 2, \dots, K$. Wynikiem działania programu powinny być wykresy wielkości $\delta = E_N - \varepsilon_N^T$ dla każdej z całek.

Spróbuj znaleźć całkę, dla której E_N zawodzi, co oznacza, że, przynajmniej dla pewnych N , δ jest istotnie mniejsza od zera.

- b) Napisz funkcję `int_trap_ad`, implementującą adaptacyjną złożoną kwadraturę trapezów, wykorzystując E_N jako estymator błędu. Funkcja ta może wykorzystywać rekurencję.

Korzystając z tej funkcji, napisz program `trapad`, przyjmujący jako argumenty wywołania liczbę naturalną N oraz liczbę rzeczywistą r i obliczający za pomocą złożonej kwadratury trapezów wartości następujących całek, których analityczne wartości są znane:

$$I_1 = \int_0^1 \cos(rx) dx, \quad I_2 = \int_{-1}^1 rx^2 dx, \quad I_3 = \int_0^1 e^{rx} dx.$$

Program powinien dla każdej z całek wypisywać jej wartość analityczną, obliczoną wartość numeryczną, oszacowanie błędu E_N i rzeczywisty błąd ε_N^T .

Możesz dodać więcej całek – np. jedną z tych, dla których E_N nie jest dobrym estymatorem błędu.

Zadanie 3. Całki niewłaściwe.

Napisz program `intimproper`, przyjmujący jako argumenty wywołania liczbę naturalną K nie większą niż 5, liczbę naturalną N oraz liczbę rzeczywistą r i obliczający numeryczne wartości całek

$$I_1 = \int_0^1 x^r \ln \frac{1}{x} dx = \frac{1}{1+r}, \quad I_2 = \int_{-\infty}^{\infty} e^{-x-x^2} dx = \sqrt{\pi\sqrt{e}}, \quad I_3 = \int_0^{\infty} \frac{\ln x dx}{1+100x^2} = -\frac{\ln 10}{20}.$$

Dla każdej z nich wykorzystaj złożoną kwadraturę Simpsona opartą na N podprzedziałach (wraz z odpowiednimi zabiegami sprowadzającym zadanie obliczenia tych całek do zadania obliczania całek właściwych), dla całek I_2 oraz I_3 – dodatkowo odpowiednią K -punktową kwadraturę Gaussa.

Program powinien wypisywać na standardowe wyjście obliczone wartości (dla każdej z metod), wartości analityczne oraz ich różnicę.

Zadanie 4. Kwadratury Romberga.

Napisz funkcję `int_romberg`, obliczającą całkę

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

gdzie $f: [a, b] \rightarrow \mathbb{R}$ jest funkcją gładką, metodą Romberga opartą o złożoną kwadraturę trapezów

Następnie napisz program `intromberg`, który obliczy przybliżone wartości kilku całek o znanych wartościach analitycznych, wykorzystując Twoją funkcję oraz odpowiednią funkcję biblioteczną. Porównaj wyniki obu podejść z wartością analityczną.

CZĘŚĆ B

Zadanie 5. Całki dwuwymiarowe: oddziaływanie elektrostatyczne.

W zadaniu tym będziemy zajmować się elektrodynamiką klasyczną w przestrzeni jednowymiarowej. Rozważmy układ dwóch ładunków elektrycznych w postaci paczek gaussowskich: ich gęstości ładunku to, odpowiednio,

$$\rho_1(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-(x-d_1)^2/\sigma^2} \quad \text{oraz} \quad \rho_2(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}} e^{-(x-d_2)^2/\sigma^2},$$

gdzie d_1 , d_2 i σ są ustalonymi parametrami. Energia oddziaływania elektrycznego tego układu to

$$E = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_1(x_1) \rho_2(x_2)}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + \mu^2}} dx_1 dx_2 = \frac{1}{\sigma^2 \pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-(x_1-d_1)^2/\sigma^2} e^{-(x_2-d_2)^2/\sigma^2}}{\sqrt{(x_1 - x_2)^2 + \mu^2}} dx_1 dx_2.$$

przy czym wybraliśmy wygodny układ jednostek, by zminimalizować liczbę stałych, a w celu uniknięcia osobliwości wprowadziliśmy dodatkową, stałą wielkość μ , nazywaną regulatorem. Zastępując zmienne całkowania (x_1, x_2) nowymi zmiennymi (y_1, y_2) , określonymi równościami

$$y_1 = \frac{x_1 - d_1}{\sigma} \quad \text{oraz} \quad y_2 = \frac{x_2 - d_2}{\sigma},$$

otrzymamy

$$E = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-y_1^2} e^{-y_2^2}}{\sqrt{(\sigma y_1 - \sigma y_2 + d_1 - d_2)^2 + \mu^2}} dy_1 dy_2.$$

Całkę podwójną po prawej stronie tego wzoru można obliczyć, łącząc dwie kwadratury jednowymiarowe:

$$E \approx S \equiv \frac{1}{\pi} \sum_{n_1=0}^{N_1} \sum_{n_2=0}^{N_2} w_{n_1} w_{n_2} f(q_{n_1}, q_{n_2}),$$

gdzie w_n i q_n to, odpowiednio, wagi i węzły użytej kwadratury, zaś N_1 i N_2 to liczby węzłów dla całkowania po, odpowiednio, y_1 i y_2 . Ze względu na całkowicie symetryczną postać funkcji podcałkowej oraz to, że obie całki pojedyncze są obliczane na tym samym przedziale, możemy dla obu posłużyć się tym samym zestawem wag i węzłów.

Przyjmijmy

$$d_1 = 1, \quad d_2 = 3, \quad \sigma = 2, \quad \mu = 0, 5.$$

Wykorzystamy również tę samą liczbę węzłów dla obu zmiennych całkowania:

$$N_1 = N_2 \equiv N.$$

a) Postać całki, którą musimy obliczyć, sugeruje wykorzystanie kwadratury Gaussa–Hermite’a.

Napisz funkcję `qel_h`, obliczającą energię E omówioną wyżej metodą numeryczną, wykorzystując N -punktową kwadraturę Gaussa–Hermite’a. Liczba węzłów, N , powinna być przekazywana funkcji jako argument. Wartości wag i węzłów dla kilku wartości N możesz umieścić na stałe w kodzie funkcji lub napisać odpowiednią funkcję pomocniczą, która będzie je obliczała.

b) Gdy narysujemy wykres funkcji podcałkowej, łatwo przekonamy się, że bardzo szybko ona znika – nie popełnimy zatem dużego błędu, jeśli ograniczymy przedział całkowania (zarówno dla y_1 , jak i y_2) do $[-5, 5]$, a następnie wykorzystamy kwadraturę Gaussa–Legendre’a.

Napisz funkcję `qel_l`, obliczającą energię E omówioną wyżej metodą numeryczną, wykorzystując N -punktową kwadraturę Gaussa–Legendre’a. Liczba węzłów, N , powinna być przekazywana funkcji jako argument. Wartości wag i węzłów dla kilku wartości N możesz umieścić na stałe w kodzie funkcji lub napisać odpowiednią funkcję pomocniczą, która będzie je obliczała.

c) Napisz program `qeln`, który – wykorzystując powyższe funkcje – sporządzi dwa wykresy: zależności $E = E(N)$ (czyli zależności obliczonej energii od liczby węzłów) dla dostępnych wartości N , wykreślając na jednym rysunku krzywe dla obu kwadratur; zależności $|E(N) - E(N - 1)|$ dla dostępnych wartości N , wykreślając na jednym rysunku krzywe dla obu kwadratur.

Wybierz najmniejszą wartość N , dla której zwiększanie liczby węzłów nie wpływa na poprawę jakości wyniku.

d) Napisz program `qeln`, który – wykorzystując powyższe funkcje – przygotuje dwukrotnie wykres $E = E(d)$, gdzie $d = d_1 - d_2$, dla $d \in [0, 1, 50]$, za każdym razem używając innej kwadratury. Porównaj otrzymaną zależność z oddziaływaniem kulombowskim dwóch ładunków punktowych w odległości d – ją również nanieś na każdy z wykresów.

Opracowanie: Bartłomiej Zglinicki.