

Kwadratury

Sprawozdanie z laboratorium 6

Jakub Grześ

19.04.2024

1 Treść zadań

1.1

Zadanie 1 Wiadomo, że

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx = \pi \quad (1)$$

Powyższą równość można wykorzystać do obliczenia przybliżonej wartości π przez całkowanie numeryczne.

- (a) Oblicz wartość powyższej całki, korzystając ze złożonych kwadratur otwartej prostokątów (ang. mid-point rule), trapezów i Simpsona. Można wykorzystać funkcje `integrate.trapz` i `integrate.simps` z biblioteki `scipy`. Na przedziale całkowania rozmieść $2m + 1$ równoodległych węzłów. W kolejnych próbach m wzrasta o 1, tzn. między każde dwa sąsiednie węzły dodawany jest nowy węzeł, a ich zagęszczenie zwiększa się dwukrotnie. Przyjmij zakres wartości m od 1 do 25.

Dla każdej metody narysuj wykres wartości bezwzględnej błędu względnego w zależności od liczby ewaluacji funkcji podcałkowej, $n + 1$ (gdzie $n = 1/h$, z krokiem h). Wyniki przedstaw na wspólnym wykresie, używając skali logarytmicznej na obu osiach.

- (b) Czy istnieje pewna wartość, poniżej której zmniejszanie kroku h nie zmniejsza już błędów kwadratury? Porównaj wartość h_{\min} , odpowiadającą minimum wartości bezwzględnej błędu względnego, z wartością wyznaczoną w laboratorium 1.
- (c) Dla każdej z użytych metod porównaj empiryczny rząd zbieżności z rzędem zbieżności przewidywanym przez teorię. Aby wyniki miały sens, do obliczenia rzędu empirycznego użyj wartości h z zakresu, w którym błąd metody przeważa nad błędem numerycznym.

1.2 Zadanie 2

Oblicz wartość całki

$$\int_0^1 \frac{4}{1+x^2} dx \quad (2)$$

metodą Gaussa-Legendre'a. Narysuj wykres wartości bezwzględnej błędu względnego w zależności od liczby ewaluacji funkcji podcałkowej, $n + 1$. Przyjmij na tyle duży zakres n , aby wykryć, kiedy błąd numeryczny zaczyna przeważać nad błędem metody. Postaraj się umiejscowić otrzymane wyniki na wykresie stworzonym w podpunkcie (a).

2 Rozwiązanie zadań

2.1 Zadanie 1

2.1.1 Podpunkt a

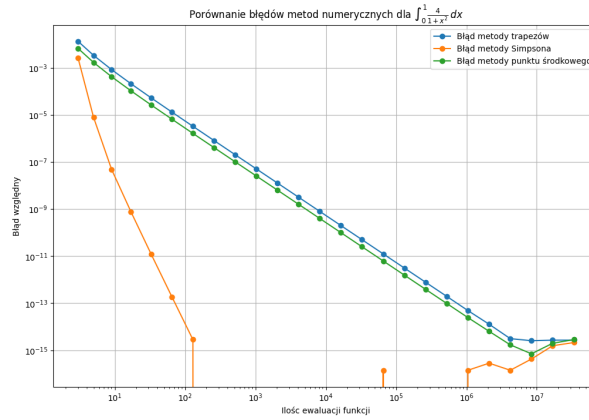
Rozpoczęto od przygotowania funkcji wykonujących całkowanie. Dla metody trapezów oraz Simpsona skorzystano z funkcji bibliotecznych Scipy, odpowiednio `integrate.trapz` oraz `integrate.simps`. Funkcje tworzą na przedziale całkowania $2^m + 1$ równoodległych węzłów.

```
def trapezoidal(m, f):
    x_values = np.linspace(0, 1, (2 ** m + 1))
    y_values = f(x_values)
    return integrate.trapz(y_values, x_values)

def simpson(m, f):
    x_values = np.linspace(0, 1, (2 ** m + 1))
    y_values = f(x_values)
    return integrate.simps(y_values, x_values)

def midpoint(m, f):
    x_values = np.linspace(0, 1, (2 ** m + 1))
    mid_x_values = (x_values[1:] + x_values[:-1]) / 2
    y_values = f(mid_x_values)
    h = x_values[1] - x_values[0]
    return np.sum(y_values * h)
```

Następnie dla m z przedziału 1 do 25 obliczono kolejno wartości bezwzględne błędów względnych w zależności od liczby ewaluacji funkcji równej liczbie węzłów. Za prawdziwą wartość przyjęto wartość π pobraną z biblioteki Numpy.



Wykres 1: Porównanie błędów względnych różnych metod numerycznych

Wzrost zagęszczenia węzłów poprawiał dokładność każdej z metod aż do momentu, gdy liczba ewaluacji przekroczyła wartości rzędu 10^7 dla metod trapezów i punktu środkowego oraz 10^6 dla metody Simpsona. Poziom błęd ulegał później wypłaszczeniu i wyniki przestały zbliżać się do szukanej wartości. Metody trapezów i punktu środkowego dostarczały bardzo podobne wyniki. Najdokładniejszą metodą okazała się metoda Simpsona, która dostarczała niemal idealny wynik już dla liczby ewaluacji rzędu 10^2 .

2.1.2 Podpunkt b

Teoretycznie zmniejszanie kroku h powinno zawsze prowadzić do poprawy dokładności kwadratury. W praktyce, gdy wartość kwadratury wyznaczamy za pomocą komputera, taka tendencja utrzymuje się tylko do pewnego momentu. Gdy h staje się odpowiednio małe, przy obliczeniach zaczynają dominować czynniki takie jak błędy zaokrągleń.

Sprawdzono, dla jakiej wartości kroku h otrzymano najmniejszą wartość bezwzględną błędu względnego w podpunkcie *a* dla każdej z metod.

Tabela 1: h_{min} dla którego wartość błędu jest najmniejsza

Metoda	h_{min}	m dla h_{min}
Metoda trapezów	1.192e-07	23
Metoda punktu środkowego	1.192e-07	23
Metoda punktu Simpsona	3.906e-03	8

Otrzymane wyniki nie odpowiadają wartości 25, mimo że analityczne podejście przewidywałoby najlepszy wynik właśnie dla największego $m = 25$.

W laboratorium pierwszym przybliżano wartość pochodnej zadanej funkcji metodami różnic progresywnych oraz różnic centralnych. Wtedy także wyznaczono wartości h , dla których wartość bezwzględna błędu była najniższa.

Tabela 2: h_{min} dla którego wartość błędu jest najmniejsza

Metoda	h_{min}
Metoda różnic progresywnych	9.124e-09
Metoda różnic centralnych	2.273e-06

Porównując wartości h_{min} z obu tabel, możemy zauważyć, że dla metod kwadratur najmniejszy błąd został osiągnięty przy innych wartościach h niż dla metod przybliżania pochodnych. Ten wynik sugeruje, że różne problemy mogą wymagać różnej dyskretyzacji dziedziny zależnie od uwarunkowania zadania oraz użytej metody.

2.1.3 Podpunkt c

Porównano empiryczny rząd zbieżności dla każdej z metod z tym przewidywanym przez teorię. Empiryczny rząd zbieżności można obliczyć ze wzoru:

Równanie 1. stanowi ogólną postać równania błędu aproksymacji jako funkcję zmiennej h .

$$E(h) \approx Ch^p \quad (1)$$

Następnie układamy równanie obustronnie logarytmem celem uproszczenia analizy.

$$\log E(h) \approx \log(C) + p \log(h) \quad (2)$$

Otrzymując wzór na empiryczny rząd zbieżności.

$$p \approx \frac{\log \left(\frac{E(h_2)}{E(h_1)} \right)}{\log \left(\frac{h_2}{h_1} \right)} \quad (3)$$

Na podstawie poprzedniego podpunktu, że dla wartości h wyznaczonych przez $m < 7$ błąd metody dominuje nad numerycznym. Przygotowano funkcję, wykonującą powyższe obliczenia dla tablicy zbudowanej z wartości kroków dla $m < 7$ i obliczonych wcześniej błędów. Zwraca ona średnią wartość empirycznych rządów zbieżności.

```
hs = [1 / (2**m) for m in ms[:7]]
def calculate_order_of_convergence(errors):
    orders = []
    for i in range(1, len(errors)):
        p = np.log(errors[i] / errors[i - 1]) /
            np.log(hs[i] / hs[i - 1])
        orders.append(p)
    return np.mean(orders)
```

Wykonano obliczenia dla każdej z metod i porównano je z teoretycznymi.

Tabela 3: Porównanie empirycznych błędów zbieżności z teoretycznymi

Metoda	Empiryczny rząd zb.	Teoretyczny rząd zb.
Metoda punktów środkowych	1.9992	2
Metoda trapezów	1.9996	2
Metoda Simpsona	6.6264	4

Empiryczny rząd zbieżności osiągnął oczekiwane wyniki dla metod punktów środkowych i trapezów. Dla metody Simpsona, empiryczny rząd zbieżności okazał się ponad 1,6 raza lepszy, niż przewidywano. Może to być spowodowane przez błędy zaokrągleń arytmetyki komputerowej, które mogą wypaczyć rezultat.

2.2 Zadanie 2

Tę samą całkę obliczono, używając metody Gaussa-Legendre’a. Skorzystano w tym celu z funkcji `roots_legendre` z biblioteki Scipy. Oblicza ona punkty próbki i wagi dla tej metody na przedziale $[-1, 1]$. Następnie węzły i wagi są skalowane do przedziału $[0, 1]$ według poniższych równań:

$$\int_{-1}^1 f(\xi) d\xi \approx \sum_{i=0}^n A_i f(\xi_i) \quad (1)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=0}^n A_i f(x_i) \quad (2)$$

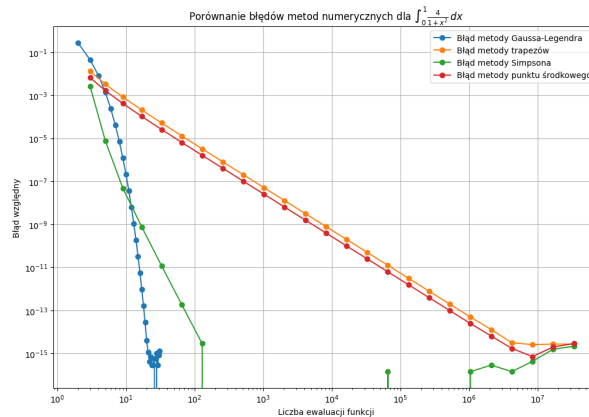
$$x_i = \frac{b+a}{2} + \frac{b-a}{2} \xi_i \quad (3)$$

Powyższe operacje realizuje funkcja `gauss_legendre`.

```
def gauss_legendre(f, n, a = 0, b = 1):
    nodes, weights = roots_legendre(n)
    # Transformacja przedziału z (-1, 1) na (a, b)
    transformed_nodes = 0.5 * (nodes + 1) * (b - a) + a
    transformed_weights = 0.5 * (b - a) * weights

    return np.sum(transformed_weights * f(transformed_nodes))
```

Obliczono wartości bezwzględne błędów względnych tej metody i przedstawiono je na wykresie wraz z tymi uzyskanymi w podpunkcie a. Obliczeń dokonano dla liczby ewaluacji funkcji w zakresie $[1, 30]$.



Wykres 2: Porównanie błędów względnych różnych metod numerycznych

Metoda Gaussa-Legendre'a okazała się najlepsza, osiągając niski poziom błędów dla niewielkiej liczby ewaluacji. Minimalny błąd został osiągnięty dla liczby ewaluacji 24, w okolicach tego węzła błąd numeryczny zaczął dominować nad błędem metody.

3 Wnioski

Kwadratury mogą pozwolić na skuteczne przybliżanie wartości całek. Może to być szczególnie przydatne, gdy wyznaczenie wartości analitycznie jest niemożliwe lub kosztowne obliczeniowo. Różne kwadratury mogą dawać różną precyzję przybliżeń, najlepsze okazały się metoda Simpsona i Gaussa-Legendre'a. Zwiększanie liczby ewaluacji funkcji zwiększa precyzję obliczeń jedynie do pewnego momentu. Dla bardzo niewielkiego kroku h błąd numeryczny zaczyna dominować nad błędem metody i dalsze rachunki nie poprawiają wyniku. Liczba punktów i metoda powinna zostać dobrana odpowiednio w zależności od przedziału, całkowanej funkcji i mocy obliczeniowej, którą dysponujemy.

Bibliografia

- [1] Marcin Kuta, *Quadratures*
- [2] Katarzyna Rycerz, Marcin Bubak, *Wykład 6 - Kwadratury*