

Metody numeryczne

Sprawozdanie z ćwiczeń laboratoryjnych nr 13

Szacowanie całek niewłaściwych przy użyciu kwadratur Gaussa

Jan Zajda
Informatyka Stosowana
WFiIS
Akademia Górniczo-Hutnicza w Krakowie
6 czerwca 2020

1. Wstęp teoretyczny

Drugą rodziną metod numerycznego całkowania są kwadratury Gaussa. Podobnie jak przy kwadraturach Newtona-Cotesa wykorzystujemy węzły interpolacji, ale tym razem nie będą one równoodległe, a wyznaczane są pomocą wielomianów ortogonalnych. Wartość całki obliczamy za pomocą sumy:

$$\int_a^b \rho(x)f(x)dx = \sum_{i=1}^n f(x_i)w_i,$$

gdzie:

$\rho(x)$ - funkcja wagowa, zależna od rodzaju wielomianu ortogonalnego,

x_i - węzły interpolacji, będące miejscami zerowymi wielomianu ortogonalnego stopnia n ,

w_i - współczynniki kwadratury zależne od liczby węzłów, ich wartości oraz rodzaju wielomianu.

Omówimy trzy rodzaje kwadratur Gaussa zależnych od użytego wielomianu ortogonalnego.

Dla przedziału całkowania $[a, b]$, $-\infty < a, b < \infty$, możemy wykorzystać kwadraturę Gaussa-Legendre'a, gdzie węzły są wyznaczone przez pierwiastki wielomianu Legendre'a n -stopnia, poddane transformacji liniowej (wielomiany Legendre'a posiadają pierwiastki w przedziale $[-1, 1]$). Waga wynosi wtedy $\rho(x) = 1$.

Dla przedziału całkowania $[0, \infty)$, możemy wykorzystać kwadraturę Gaussa-Laguerre'a, gdzie węzły są wyznaczone przez pierwiastki wielomianu Laguerre'a n -stopnia. Waga wynosi wtedy $\rho(x) = e^{-x}$. Waga taka wymaga wydzielenia z funkcji podcałkowej, aby otrzymać całkę z $f(x)$.

Dla przedziału całkowania $(-\infty, \infty)$, możemy wykorzystać kwadraturę Gaussa-Hermite'a, gdzie węzły są wyznaczone przez pierwiastki wielomianu Hermite'a n -stopnia. Waga wynosi wtedy $\rho(x) = e^{-x^2}$. Waga taka wymaga wydzielenia z funkcji podcałkowej, aby otrzymać całkę z $f(x)$.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Naszym zadaniem jest wyznaczyć numeryczną wartość trzech całek dla różnej liczby węzłów i skonfrontować ją z wartością analityczną.

Metody Gaussa-Legendre'a użyjemy do obliczenia całki:

$$c_1 = \int_1^2 \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} dx = \frac{\pi}{3}.$$

Metody Gaussa-Hermite'a użyjemy do obliczenia całki:

$$c_2 = \int_0^{\infty} \ln(x) e^{-x^2} dx = -0.8700577.$$

Jako, że wielomiany Hermite'a służą do obliczania całek w przedziale całkowania $(-\infty, \infty)$ oraz pamiętając o funkcji wagowej, musimy zmodyfikować funkcję podcałkową do postaci:

$$g(x) = \frac{1}{2} \ln(|x|).$$

Tę samą całkę obliczymy także metodą Gaussa-Legendre'a dla przedziału $[0, 5]$.

Metody Gaussa-Laguerre'a użyjemy do obliczenia całki:

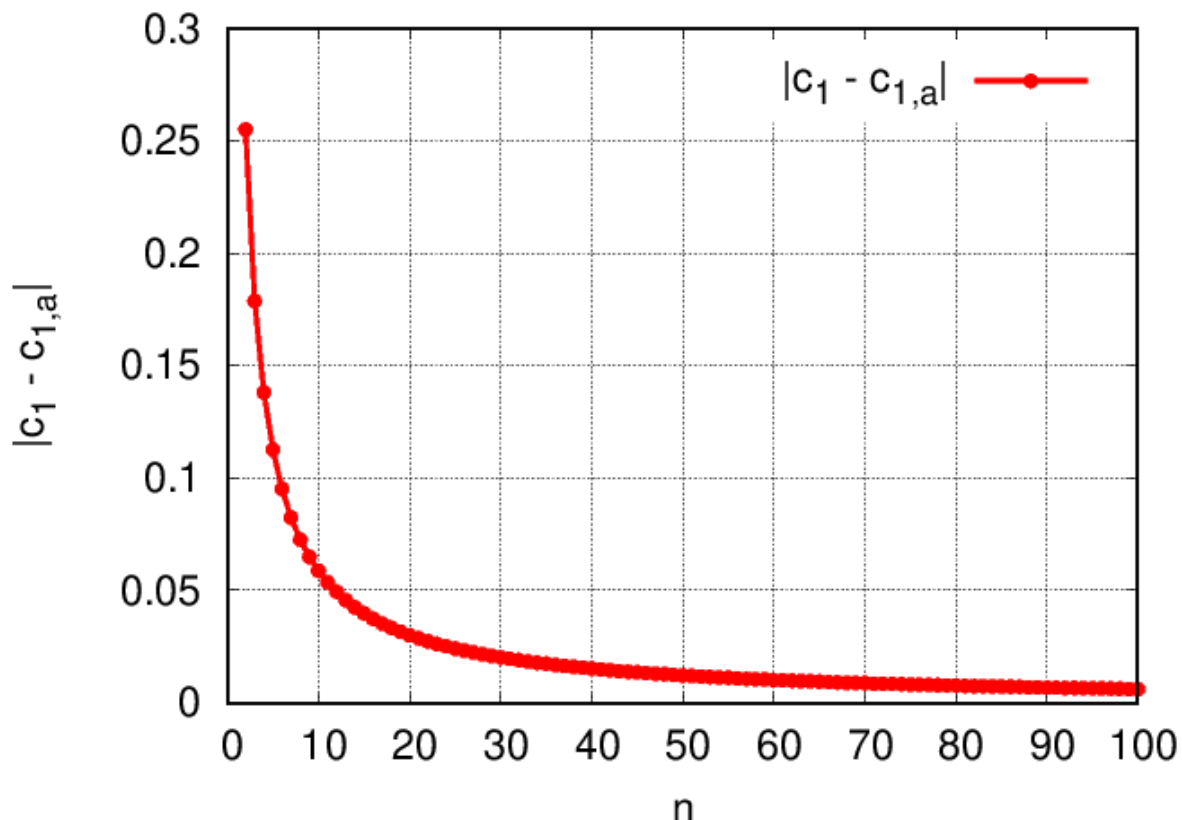
$$c_3 = \int_0^{\infty} \sin(2x) e^{-3x} dx = \frac{2}{13}.$$

Węzły x_i oraz współczynniki w_i obliczymy korzystając z odpowiednich funkcji *gauleg*, *gaulag*, *gauher* dla każdego z wielomianów ortogonalnych. Znajdują się one w bibliotece *numerical_recipes.c*.

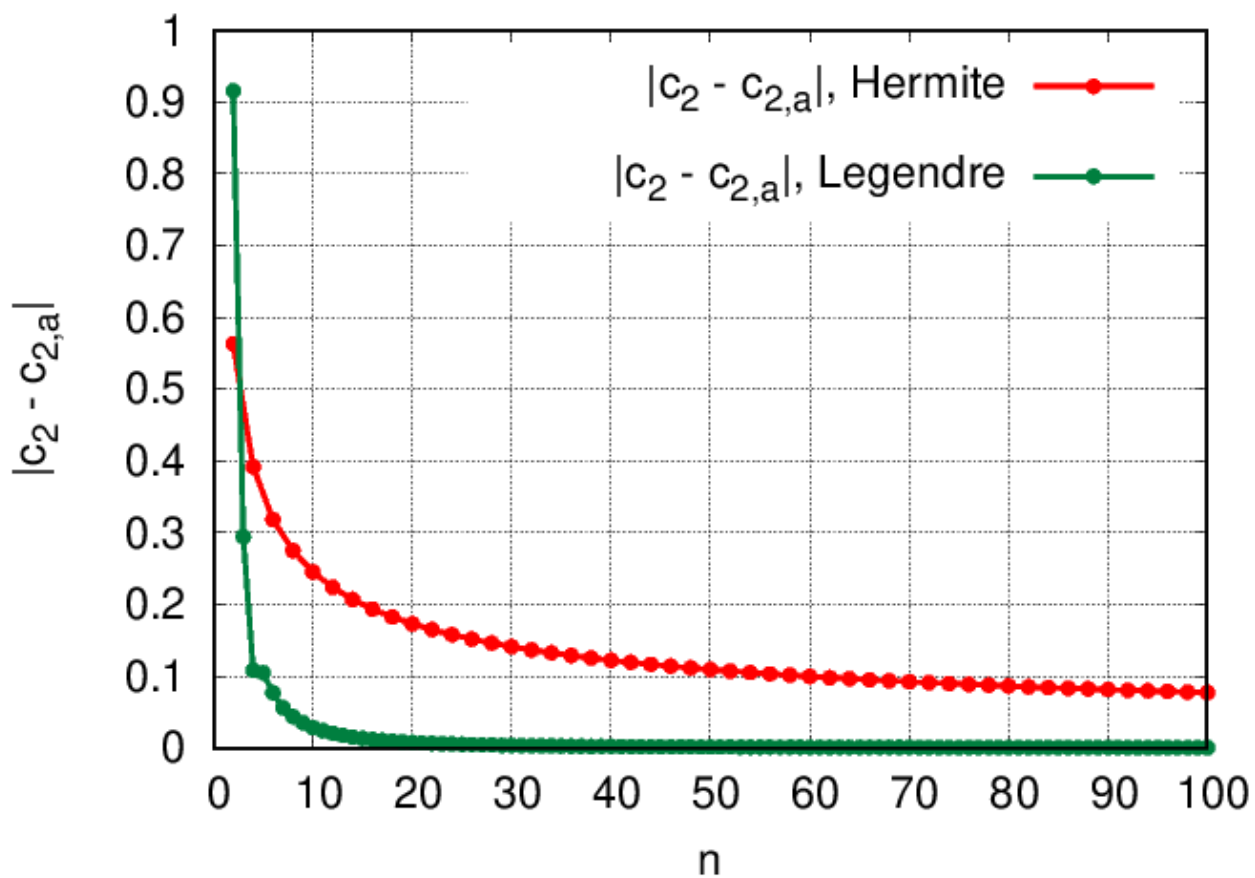
W przypadku dwóch pierwszych całek będziemy korzystać z odpowiednio $n = 2, 3, \dots, 100$ węzłów, Przy całce numer 3 wykorzystamy $n = 2, 3, \dots, 20$.

2.2. Wyniki

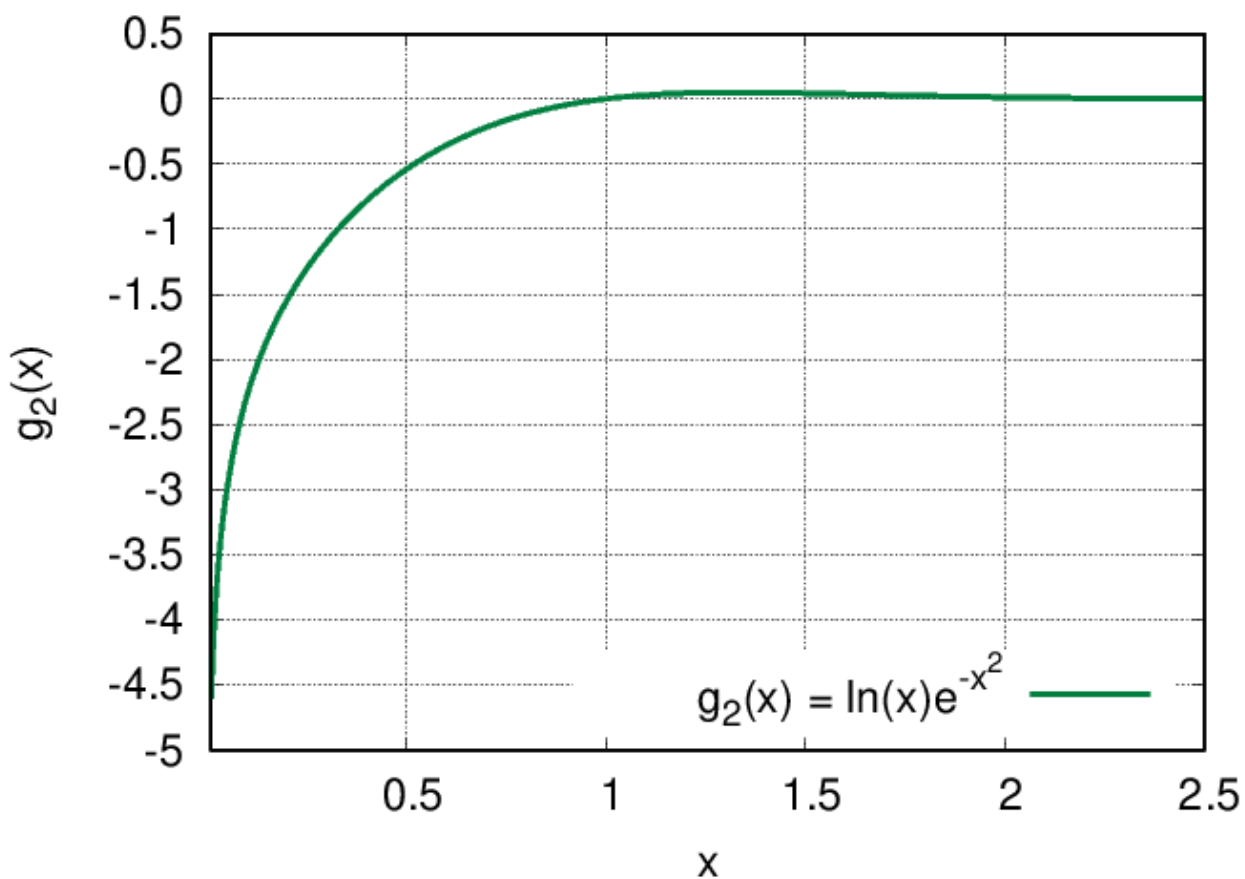
Jako wyniki przedstawiono wykresy $f(n) = |c_a - c_n|$ obrazujące różnicę między wynikiem analitycznym, a obliczonym numerycznie dla każdej z całek w zależności od liczby węzłów. Dodatkowo zamieszczono wykres funkcji podcałkowej dla całki c_2 , oraz wartości węzłów użytych do jej obliczenia zarówno metodą Gaussa-Hermite'a jak i Gaussa-Legendre'a dla $n = 20$.



Wykres 1: Bezwzględna różnica między wartością numeryczną i analityczną całki c_1 .



Wykres 2: Bezwzględna różnica między wartością numeryczną całki c_2 , obliczoną metodą Gaussa-Hermite'a i Gaussa-Legendre'a oraz wartością analityczną.



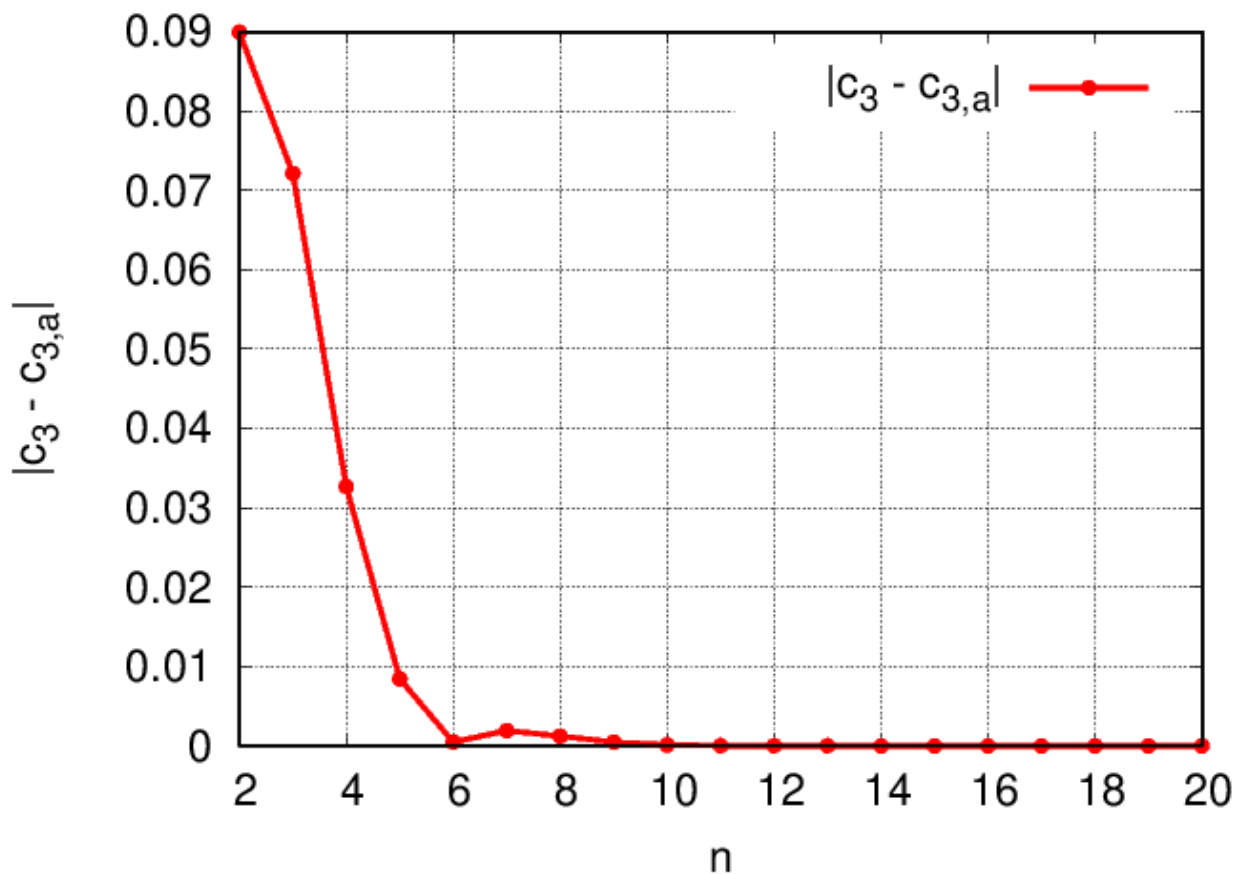
Wykres 3: Wykres funkcji podcałkowej dla całki c_2 .

Wartości węzłów dla metody Gaussa-Hermite'a, $n = 20$:

5.38748	4.60368	3.94476	3.34785	2.78881
2.25497	1.73854	1.23408	0.737474	0.245341
-0.245341	-0.737474	-1.23408	-1.73854	-2.25497
-2.78881	-3.34785	-3.94476	-4.60368	-5.38748

Wartości węzłów dla metody Gaussa-Legendre'a, $n = 20$:

0.0171785	0.0900702	0.219414	0.402208	0.63417
0.909866	1.22283	1.56573	1.93054	2.30868
2.69132	3.06946	3.43427	3.77717	4.09013
4.36583	4.59779	4.78059	4.90993	4.98282



Wykres 4: Bezwzględna różnica między wartością numeryczną i analityczną całki c_3 .

3. Wnioski

Jak widać po zamieszczonych wykresach błąd przy obliczeniach bardzo szybko maleje wraz z liczbą węzłów, dla każdej z kwadratur.

Dla całki c_1 na początku obserwujemy dużą różnicę – około 0.2 od wartości analitycznej. Już jednak dla około 30 węzłów błąd staje się 10 razy mniejszy i następnie bardzo powoli maleje, zbliżając się do zera.

Dla całki c_2 wyniki są najbardziej zaskakujące. Kształt wykresów obu kwadratur wygląda podobnie. Błąd bardzo szybko maleje, a następnie stabilizuje się. Okazuje się jednak, że błąd wyników uzyskanych za pomocą kwadratury Gaussa-Hermite’a jest cały czas większy niż w przypadku kwadratury Gaussa-Legendre’a. Nie jest to wynik, którego można było się spodziewać, ponieważ to metoda Gaussa-Hermite’a służy do obliczania całek niewłaściwych.

Powód tego zjawiska możemy znaleźć patrząc na zamieszczony wykres funkcji podcałkowej oraz węzły wybrane dla każdej z metod. Po wykresie funkcji widzimy, że wartość całki prawie w całości zależy od wartości funkcji w przedziale $(0, 2]$. Dla wartości większych funkcja ta przyjmuje już wartości bardzo bliskie zeru. Dla $n = 20$ metoda Gaussa-Hermite’a korzysta z zaledwie 4 węzłów w istotnym przedziale, w stosunku do 9 w przypadku metody Gaussa-Legendre’a. Widzimy także, że połowa węzłów generowanych na potrzebę pierwszej metody „marnuje się” w przypadku naszej funkcji $g(x)$ – są na moduł sobie równe. Jest to spowodowane tym, że metoda Gaussa-Hermite’a powinna być stosowana dla całek niewłaściwych z przedziałem całkowania $(-\infty, \infty)$, lecz nic nam nie daje, gdy funkcja podcałkowa jest parzystą. Przykład ten pokazuje nam jak ważny jest wybór odpowiednich węzłów przy wykorzystaniu omawianych metod.

Dla całki c_3 wykres wygląda podobnie do poprzednich, z tą różnicą, że błąd już od początku jest bardzo mały i od około 6 węzłów jest już niemal równy zero.