Vadym Semkovych
296669
03.06.2020

Sprawozdanie 13

Całkowanie w czterech wymiarach przy użyciu kwadratur Gaussa

1. Wstęp teoretyczny

Kwadratury Gaussa – metody całkowania numerycznego polegające na takim wyborze wag $w_1, w_2, \dots, w_n$ i węzłów interpolacji $t_1, t_2, \dots, t_n \in [a, b]$ aby wyrażenie:

$$\sum_{i=1}^{n} w_i f(t_i)$$

najlepiej przybliżało całkę:

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

Gdzie *f* jest dowolną funkcją określoną na odcinku [a,b], a *w* jest tzw. funkcją wagową.
Kwadratury z wagą $w(x) = e^{-x^2}$ nazywami kwadraturami **Gaussa-Hermite'a.**

2. Problem

Naszym zadaniem było numerycznie wyznaczenie wartości całki:

$$V = \iint_{-\infty}^{\infty} d^2\overrightarrow{r_1}\, d^2\overrightarrow{r_1} \frac{\rho_1(\overrightarrow{r_1})\rho_2(\overrightarrow{r_2})}{r_{12}} \quad (1)$$

gdzie:

$$\rho_1(\vec{r}_1) = exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{R}_{10})^2}{2\sigma^2}\right) = exp\left(-\frac{(x_1 - X_{10})^2 + (y_1 - Y_{10})^2}{2\sigma^2}\right)$$

$$\rho_2(\vec{r}_2) = exp\left(-\frac{(\vec{r}_2 - \vec{R}_{20})^2}{2\sigma^2}\right) = exp\left(-\frac{(x_2 - X_{20})^2 + (y_2 - Y_{20})^2}{2\sigma^2}\right)$$

oraz:

$$r_{12} = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}$$

Nasza całka jest **czterowymiarowa** (całkujemy po x_1, y_1, x_2, y_2). Po wydzieleniu funkcji wagowych ta część funkcji podcałkowej, która znajduje się w sumie do zaimplementowania, upraszcza się do:

$$f(x_1, y_1, x_2, y_2) = \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2 + x_{20})^2 + (y_1 - y_2)^2}} \quad (2)$$

Wartość całki liczymy stosując złożenie 4 kwadratur jednowymiarowych:

$$V_{num} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{m} \frac{w_i w_j w_k w_l}{\sqrt{\left(x_i - x_j + x_{20}\right)^2 + (y_k - y_l)^2}} \quad (3)$$

Dokładną wartość całki V można wyznaczyć analitycznie:

$$V_{dok} = (2\pi)^2\sigma^4 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} \exp\left(-\frac{r_0}{8\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{r_0}{8\sigma^2}\right) \quad (4)$$

gdzie:

$I_0(x)$ jest modyfikowaną funkcją Bessel'a pierwszego rodzaju, a r_0 jest odległością pomiędzy środkami gaussianów $r_0 = \left|\vec{R}_{10} - \vec{R}_{20}\right|$.

Dla liczby węzłów n = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35(dla funkcji ρ_1, dla funkcji ρ_2 liczba węzłów równa się m= n+1) trzeba było wyznaczyć wartość numeryczną całki V_{num} (3) oraz błąd względny jako $\varepsilon = \left|\frac{V_{dok} - V_{num}}{V_{dok}}\right|$.
Do wyznaczenia położenia węzłów i współczynników kwadratury korzystaliśmy z funkcji biblioteki NR:

gauher (float x[], float w[],int n),

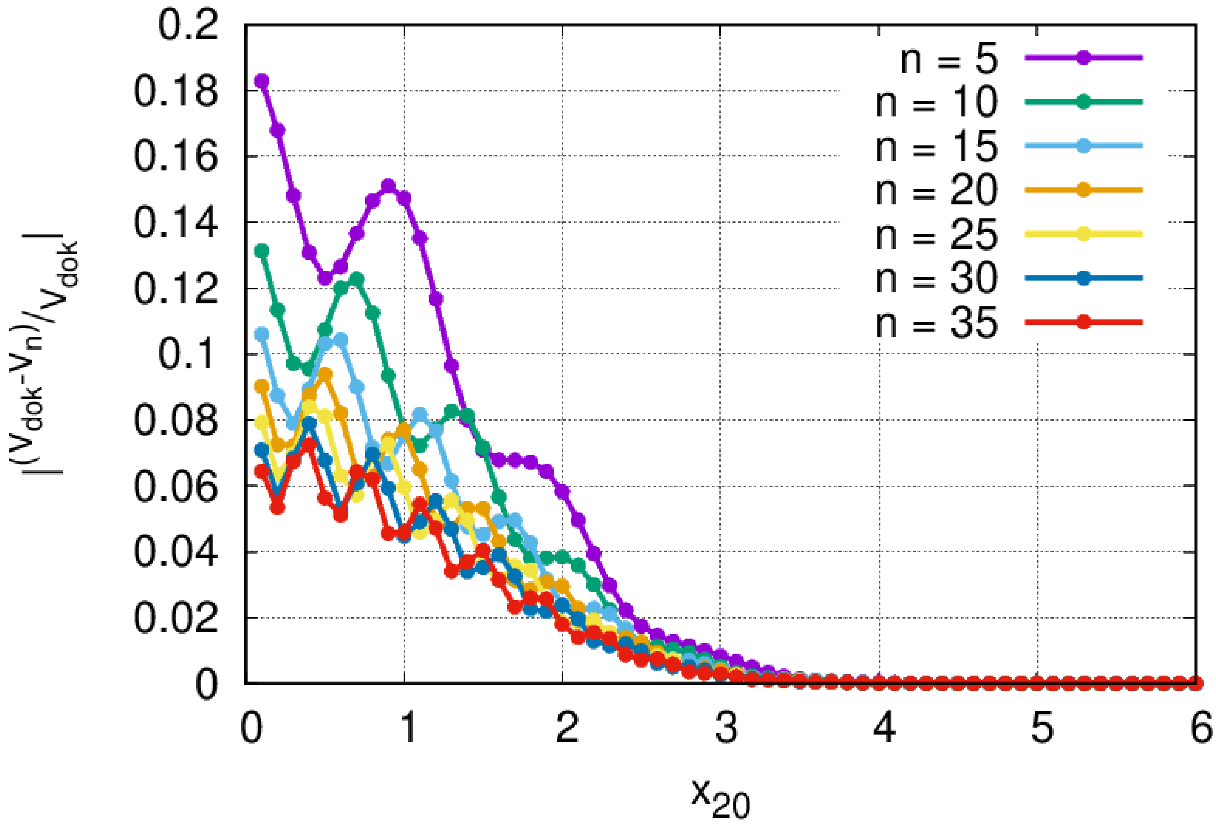
gdzie: x[] – wektor zawierający położenia węzłów kwadratury, w[] - współczynniki kwadratury, n - liczba wezłów kwadratury.

Przy obliczaniu V_{dok}, $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$, a I_0 – to funkcja Bessel'a, którą otrzymujemy przy pomocy funkcji z biblioteki NR:

float bessi0 (float x)

Wszystkie otrzymane wyniki zapisaliśmy do pliku.

3. Wyniki



Rysunek 1: Błąd względny ε w funkcji x_{20} *dla różnych wartości parametru n*

4. Wnioski

Za pomocą użycia kwadratur Gaussa udało się nam policzyć całkę (1). Dokładność obliczeń zależy od ilości węzłów użytych podczas obliczeń. Im większa ich ilość tym obliczona wartość jest dokładniejsza.