Mètodes Numèrics
Projecte final: Quadratura Gaussiana

Marc Seguí Coll
Universitat Autònoma de Barcelona

Maig 2019

Com es va veure en pràctiques anteriors, l'elecció dels nodes d'interpolació és prou important per calcular integralas numèricament amb precisió. Per això les fórmules integrals de quadratura Gaussiana (que seleccionen nodes no-equiespaiats) permeten determinar valors amb molta precisió i pocs nodes.

1 Introducció teòrica i plantejament

L'objectiu del projecte és calcular el valor de les integrals

$$\int_{-1}^{1} e^{-x^2} dx \quad \text{i} \quad \int_{0}^{1} \frac{e^{-x^2}}{\sqrt[3]{1-x^2}} dx$$

mitjançant formules de quadratura Gaussiana, és a dir aproximarem de la següent forma:

$$\int_a^b \omega(x) f(x) dx \approx \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i)$$

on x_i són les arrels d'un polinomi de gru n ortogonal respecte la seva funció pes $\omega(x)$ i els a_i es determinen imposant exactitud per a $f(x) = x^k$ per a $k = 0, \ldots, n-1$.

Emprarem els polinomis de Chebyshev i Legendre a l'interval $[-1, 1]$ que són ortogonals respecte la funció pes $\omega_C(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ i $\omega_L(x) = 1$ respectivament. El mètode que seguirem serà calcular les arrels dels polinomis de Cebyshev i Legendre de grau n, dividint l'interval $[-1, 1]$ en trossos petits fins a tenir n intervalets on els polinomis canvien de signe. Fent bisecció i el mètode de Newton deterinarem finalment les arrels corresponents. Les de Legendre les denotarem com l_i per a $i = 1, \ldots, n$ i les de Chebyshev com c_i per a $i = 1, \ldots, n$. Per calcular els a_{L_i} i els a_{C_i} podem plantejar els següents sistemes en forma matricial

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ l_1 & l_2 & \cdots & l_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ l_1^{n-1} & l_2^{n-1} & \cdots & l_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{L_1} \\ a_{L_2} \\ \vdots \\ a_{L_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_L(0, -1, 1) \\ I_L(1, -1, 1) \\ \vdots \\ I_L(n-1, -1, 1) \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ c_1 & c_2 & \cdots & c_n \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_1^{n-1} & c_2^{n-1} & \cdots & c_n^{n-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_{C_1} \\ a_{C_2} \\ \vdots \\ a_{C_n} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} I_C(0, -1, 1) \\ I_C(1, -1, 1) \\ \vdots \\ I_C(n-1, -1, 1) \end{pmatrix}$$

on $I_L(k,a,b) = \int_a^b x^k dx = \frac{b^{k+1} - a^{k+1}}{k+1}$ i $I_C(k,a,b) = \int_a^b \frac{x^k}{\sqrt{1-x^2}} dx$. Mitjançant integració per parts es pot treure que

$$I_C(k,a,b) = a^{k-1}\sqrt{1-a^2} - b^{k-1}\sqrt{1-b^2} + \frac{k-1}{k} I_C(k-2,a,b)$$

per a $k \geq 2$, on $I(0,a,b) = \arcsin(b) - \arcsin(a)$ i $I_C(1,a,b) = \sqrt{1-a^2} - \sqrt{1-b^2}$.

Notem que les matrius de coeficients són matrius de Vandermonde. Com les arrels a_{L_i} i a_{C_i} són simples, són diferents dos a dos i per tant els sistemes tenen solució única. D'aquesta manera podrem esglaonar per Gauss i resoldre el sistema numèricament (Problemes opcionals). Se'ns vénen donades també fórmules analítiques per al càlcul dels coeficients abans esmentats. Un cop trobats simplement calcularem el valor de les integrals en qüestió de forma que si aprofitem la simetria respecte l'origen, per Legendre tindrem que

$$\int_{-1}^{1} e^{-x^2} dx \approx \sum_{i=1}^{n} a_{L_i} e^{-l_i^2} \quad \text{i} \quad \int_0^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt[3]{1-x^2}} dx = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \frac{e^{-x^2}}{\sqrt[3]{1-x^2}} dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} a_{L_i} \frac{e^{-l_i^2}}{\sqrt[3]{1-l_i^2}}$$

i per Chebyshev

$$\int_{-1}^{1} \frac{\sqrt{1-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} e^{-x^2} dx \approx \sum_{i=1}^{n} a_{C_i} e^{-c_i^2}\sqrt{1-c_i^2} \quad \text{i} \quad \int_0^1 \frac{\sqrt{1-x^2}}{\sqrt{1-x^2}} \frac{e^{-x^2}}{\sqrt[3]{1-x^2}} dx \approx \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n} a_{C_i} e^{-c_i^2}\sqrt[6]{1-c_i^2}$$

Sabem que si $\phi_n(x)$ és el polinomi ortognoal de grau n considerat a la fórmula de quadratura Gaussiana, llavors l'error ve donat per:

$$\int_a^b \omega(x) f(x) dx - \sum_{i=1}^{n} a_i f(x_i) = \frac{f^{(2n)}(\xi)}{(2n)!}\langle \phi_n, \phi_n \rangle$$

on $a < \xi < b$. L'error el fitarem agafant $\eta \in [a,b]$ tal que $|f^{(2n)}(\eta)| \geq |f^{(2n)}(x)|$ per a tot $x \in [a,b]$. Notem que l'únic error que podem fitar és el de les derivades de la funció e^{-x^2} ja que a les derivades de les altres funcions hi apareix un factor $(1-x^2)^k$ per a cert $k < 0$. Així $\lim_{x\to 1} f^{(2n)}(x) = \infty$ per a $n \geq 1$ i per tant aquesta fórmula no ens servirà per determinar l'error. En el cas de la funció $f(x) = e^{-x^2}$ és senzill dir-li a la màquina com calcular la $2n$-èssima derivada ja que

$$\left(e^{-x^2}\right)^{(n)} = P_n(x)e^{-x^2} = \left(-2xP_{n-1}(x) - 2(n-1)P_{n-2}(x)\right)e^{-x^2} \quad \text{amb} \quad P_0(x) = 1 \quad \text{i} \quad P_1(x) = -2x$$

totes les $2n$-èssimes derivades presenten un màxim en valor absolut a $\eta = 0$ a l'interval $[-1,1]$. A més a més, si $\varphi_n(x)$ és el polinomi de Legendre de grau n llavors $\langle \varphi_n, \varphi_n \rangle = \frac{2}{2n+1}$ i per tant:

$$\left| \int_{-1}^{1} e^{-x^2} dx - \sum_{i=1}^{n} a_{L_i} e^{-l_i^2} \right| \leq \left| \frac{P_{2n}(0)}{(2n)!} \frac{2}{2n+1} \right|$$

Per veure la potència d'aquest mètode, calcularem les mateixes integrals pel mètode dels trapezis compost, és a dir, dividint l'interval d'integració en m trossos i aplicant la regla dels trapezis a cada divisió. Notem que la segona integral està mal condicionada quan $x \to 1$. Realitzarem un canvi de variable $x = \sin\theta$ ($dx = \cos\theta d\theta$) per tal de millorar la fórmula per als trapezis:

$$\int_0^1 \frac{e^{-x^2}}{\sqrt[3]{1-x^2}} dx = \int_0^{\pi/2} \frac{e^{-\sin^2\theta}}{\sqrt[3]{1-\sin^2\theta}} \cos d\theta = \int_0^{\pi/2} e^{-\sin^2\theta}\sqrt[3]{\cos\theta} d\theta$$

Amb la fórmula de l'error per a la regla dels trapezis composta determinarem una fita de l'error. En el cas d'aquesta darrera integral, el darrer interval provoca conflicte perquè la segona derivada tendeix a infinit quan $\theta \to \pi/2$. Això si, com la funció en aquest interval és decreixent cap a 0 i acotada, l'error al darrer tros és menor que la longitud de l'intervalet pel valor màxim de la funció en aquest intervalet entre 2. Per tant aplicarem la fórmula de l'error per als $m-1$ primers trossos i sumarem el terme que acabem d'esmentar.

2 Resultats i comentaris

Les fórmules comentades utilitzant els polinomis de Legendre i Chebyshev consideren únicament integrals definides a l'interval $[-1, 1]$. Per a un interval d'integració arbitrari les fórmules s'han de modificar mitjaçant una transformació lineal sobre la variable x (explicat a la secció Problemes Opcionals). Els programes calculen les integrals amb aquesta implementació.

Determinarem el valor de 6 integrals cada vegada, les denotarem per I_{L1}, I_{C1}, I_{L2}, I_{C2}, I_{T1}, I_{T2} amb notació 1 ò 2 indiquen la integral i L ò C els polinomis de Legendre o Chebyshev i T és la calculada pel mètode dels trapezis. Adjuntem la fita de l'error de les integrals I_{L1}, I_{T1} i I_{T2}. Mitjançant el codi `integral.c` s'obtenen els següents resultats:

n	2	4	6	8
I_{L1}	1.433062621147563	1.493334622449539	1.493647614150475	1.493648264898976
e_{L1}	0.200000000000000	0.009259259259259	0.000213675213675	$2.9178338002 \cdot 10^{-6}$
I_{C1}	1.347372359753598	1.509544014895041	1.501716307252252	1.498269900093952
I_{L2}	0.856756509481029	0.874086195904042	0.879996639095619	0.882852266953188
I_{C2}	0.961461552648504	0.912013042359183	0.900866279461314	0.896592216834052

n	10	10^2	10^3	10^4
I_{T1}	1.488736679527334	1.493599214378703	1.493647775118866	1.493648260719795
e_{T1}	0.013333333333333	0.000133333333333	$1.3333333333 \cdot 10^{-6}$	$1.3333333333 \cdot 10^{-8}$
I_{T2}	0.880933157128190	0.889173970045439	0.889556701377868	0.889574465751322
e_{T2}	0.022736545927908	0.003368338414542	0.001276258122321	0.000578894139970

Notem que la convergència per Legendre és extremadament ràpida ja que amb polinomis de grau 8 (8 nodes) s'assoleix una precisió de l'ordre de 10^{-6} en la primera integral mentre que aquesta precisió s'obté pel mètode dels trapezis amb 10^3 intervals ($10^3 + 1$ nodes).

El fet que a la resta d'integrals i funcions a avaluar hi aparegui el factor $(1 - x^2)^k$ amb $k < 0$ que hem comentat abans, frena una mica el mètode i produeix errors grans tenint en compte el fet que a la fórmula de l'error hi apareix un $(2n)!$ dividint. Si comparem amb el valor obtingut pel mètode dels trapezis amb la integral modificada, veiem que ni Legendre ni Chebyshev aconsegueixen més de 3 xifres decimals correctes per a 8 nodes. Aquest fet és degut al mal condicionament de la fórmula i inclús de la funció en sí ja que calcular la integral pel mètode de Chebyshev o Legendre amb el canvi de variable ja implementat no millora gaire els resultats.

3 Problemes opcionals

Retornant al sistema que hem plantejat per trobar els coeficients a_{L_i} i a_{C_i}, es pot computar el seu valor si resolem el sistema pel mètode de Gauss, esglaonant la matriu i fent substitució cap endarrera. Compararem els resultats entre els coeficients calculats amb la fórmula i els provinents del sistema al programa `coeficients.c` per a alguns casos concrets d'n.

$n = 2$	a_1	a_2
Legendre fórmula	0.999999999999987	1.000000000000000
Legendre sistema	0.999999999999993	1.000000000000007
Chebyshev fórmula	1.570796326794897	1.570796326794897
Chebyshev sistema	1.570796326794897	1.570796326794896

$n = 6$	a_1	a_2	a_3
Legendre fórmula	0.1713244923790757	0.3607615730481386	0.4679139345726913
Legendre sistema	0.1713244923791328	0.3607615730481725	0.4679139345727565
Chebyshev fórmula	0.5235987755982988	0.5235987755982988	0.5235987755982988
Chebyshev sistema	0.5235987755978901	0.5235987755982925	0.5235987755987263

$n = 6$	a_4	a_5	a_6
Legendre fórmula	0.4679139345726692	0.3607615730481386	0.1713244923790757
Legendre sistema	0.4679139345726718	0.3607615730481236	0.1713244923791425
Chebyshev fórmula	0.5235987755982988	0.5235987755982988	0.5235987755982988
Chebyshev sistema	0.5235987755986946	0.5235987755983028	0.5235987755978867

Notem que a mesura que augmentem n anem perdent una mica de precisió en calcular els coeficients amb el sistema. De totes formes els resultats són prou bons i en cas de no tenir una fórmula explícita el mètode de Gauss numèric serveix.

Per tractar de calcular integrals en un interval arbitrari $[a, b]$ he de realitzar una transformació lineal T sobre les x tal que $T(x) = \alpha x + \beta$, $T(-1) = a$ i $T(1) = b$. Amb això obtenim que $\alpha = \frac{b-a}{2}$ i $\beta = \frac{a+b}{2}$. D'aquesta forma les fórmules de quadratura Gaussiana per a Chebyshev i Legendre canvien i queden

$$\int_a^b \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{(2x-(a+b))^2}{(b-a)^2}}} f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} a_{C_i} f\left(\frac{(b-a)c_i + a + b}{2}\right) \qquad \text{(Chebyshev)}$$

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2} \sum_{i=1}^{n} a_{L_i} f\left(\frac{(b-a)l_i + a + b}{2}\right) \qquad \text{(Legendre)}$$

Dites fórmules són les implementades als codis del projecte. Els coeficients i les arrels segueixen sent els calculats a l'interval $[-1, 1]$.

Finalment, aplicarem tot això a calcular el valor de la integral que ens dóna la longitud de l'arc descrit per la el·lipse

$$\left(\frac{x}{2}\right)^2 + (2y)^2 = 1$$

a l'interval $[-1, 1]$ amb 6 xifres decimals correctes, és a dir determinarem

$$L(y, -1, 1) = \frac{1}{4} \int_{-1}^{1} \sqrt{16 + \frac{x^2}{x^2 - 4}} dx$$

En tant que calcular la $2n$-èssima derivada de la funció a integrar és inviable numèricament (amb els coneixements que tenim), determinarem el seu valor amb el mètode dels trapezis (coneixem l'error ja que el màxim en valor absolut de la segona derivada de la funció el sabem, s'assoleix a l'extrem de l'interval $[-1, 1]$). Un cop trobat el valor, per Legendre determinarem un valor pròxim a l'anterior i compararem el nombre de nodes. Tot això es duu a terme al programa `elipse.c`.

Realitzant 211 divisions equidistants de l'interval $[-1, 1]$, pel mètode dels trapezis s'obté que $L(y, -1, 1) \approx 1.993817868931637$ amb fita de l'error $e_T = 9.927459869352019 \cdot 10^{-7}$. Amb 6 nodes de Legendre queda que $L(y, -1, 1) \approx 1.993818495065172$. Si aquest valor el comparem amb el nombre obtingut amb els trapezis queden 6 xifres decimals correctes.