Wydział: Fizyki i Informatyki Stosowanej
Kierunek: Informatyka Stosowana
Rok: 2020/21
Semsetr: letni
Typ: stacjonarne
Nr albumu: 401984
Data: 31.05.2021

Sprawozdanie - Laboratorium nr 13
Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur Gaussa

Spis treści

opracował:
Tomasz Szkaradek

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Kwadratury Gaussa

Rozpatrujemy kwadratury typu:

$$S(f) = \sum_{k=0}^{N} A_k f(x_k), \tag{1}$$

których współczynniki kwadratury z wagą $p(x)$ mają postać:

$$A_k = \int_a^b p(x)\Phi_k(x)dx, \tag{2}$$

gdzie waga $p(x)$ jest ustalona, a liczba węzłów wynosi $N+1$. Szukamy położenia węzłów oraz współczynników A_k, tak aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Taka kwadratura zwana jest kwadraturą Gaussa.

Do wyznaczania kwadratur używa się wielomianów ortogonalnych tzn. takich, że dla ciągu wielomianów:

$$\{\varphi(x)\} = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), ..., \varphi_N(x)\}, \tag{3}$$

w przedziale $[a, b]$ zachodzi pomiędzy nimi związek:

$$(\varphi_s, \varphi_s) = \int_a^b p(x)\varphi_r(x)\varphi_s(x)dx = 0, \quad r \neq s \tag{4}$$

Dla kwadratur Gaussa można wyróżnić 3 podstawowe twierdzenia:

1. Wielomiany ortogonalne mają tylko pierwiastki rzeczywiste, leżące w przedziale $[a, b]$.
2. Nie istnieje kwadratura Gaussa rzędu wyższego niż $2(N+1)$. Kwadratura Gaussa jest rzędu $2(N+1)$ wtedy i tylko wtedy, gdy węzły x_k są pierwiastkai wielomianu $P_{n+1}(x)$.
3. Wszystkie współczynniki A_k w kwadraturach Gaussa są dodatnie.

Wysoki rząd $(2N+2)$ jest spowodowany koniecznością ustalenia położenia $N+1$ współczynników kombinacji liniowej $N+1$ wielomianów. Metoda Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w $[a, b]$ Następnie korzystamy z tożsamości Christofella-Darboux:

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(y)}{\gamma_k} = \frac{\varphi_{n+1}(x)\varphi_n(y) - \varphi_n(x)\varphi_{n+1}(y)}{\alpha_n\gamma_n(x-y)}, \tag{5}$$

gdzie:

$$\alpha_k = \tfrac{\beta_{k+1}}{\beta_k}, \quad \gamma_k = \int_a^b p(x)\varphi_k^2(x)dx \tag{6}$$

oraz β_k jest współczynnikiem stojcym w wielomianie φ_k przy zmiennej w najwyższej potędze. Za y podstawiono pierwiastek wielomianu b-tego stopnia - $y = d_j$ i otrzymano:

$$\sum_{k=0}^{n} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(d_j)}{\gamma_k} = -\frac{\varphi_n(x)\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n\gamma_n(x-d_j)}, \tag{7}$$

a następnie wykonano mnożenie i całkowanie $\int dxp(x)\varphi_0(x)$, co daje:

$$\frac{\varphi_0(d_j)}{\gamma_0}\gamma_0 = -\frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n\gamma_n}\int_a^b p(x)\frac{\varphi_0(x)\varphi_n(x)}{x-d_j}dx. \tag{8}$$

Następnie korzystając z następującej definicji wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)l_j(x) \quad l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x-a_j)\omega_n'(a_j)}, \tag{9}$$

oraz wybranego przez nasz przypadku, że $\omega_n(x) = \varphi_n(x)$, korzystamy z faktu, że $\varphi_0(x) = 1$ i po przekształceniach otrzymujemy współczynnik A_k:

$$A_k = -\frac{2}{(N+1)P_{N+2}(x_k)P'_{N+1}(x_k)} \tag{10}$$

1.2 Kwadratura Gaussa-Laguerre'a

W analiza numeryczna Kwadratura Gaussa – Laguerre'a (nazwany po Carl Friedrich Gauss i Edmond Laguerre) jest rozszerzeniem Kwadratura Gaussa metoda aproksymacji wartości całek typu:

$$\int_0^{+\infty} e^{-x}f(x)dx \tag{11}$$

$$\int_0^{+\infty} e^{-x}f(x)dx \approx \sum_{i=0}^{n} w_i(x_i) \tag{12}$$

gdzie x_i to i-ty pierwiastek Wielomian Laguerre'a $L_n(x)$ z wagą w_i przedział całkowania to $(-\infty,\infty)$, a funkcja wagowa jest postaci $p(x) = e^{-x^2}$.

1.3 Kwadratury Gaussa-Hermite'a

Kwadratury Gaussa-Hermite'a to specjalne przypadki kwadratur Gaussa gdzie przedział całkowania to $(-\infty,\infty)$, a funkcja wagowa jest postaci $p(x) = e^{-x^2}$. Wówczas ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}, \tag{13}$$

dla których obowiązuje relacja rekurencyjna:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}. \tag{14}$$

2 Zadanie do wykonania

Zadaniem w trakcie laboratoriów było numeryczne wyznaczenie wartości całek:
Pierwszą z nich musieliśmy obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Legandre'a:

$$c_1 = \int_0^2 \frac{x}{4x^2+1} dx \tag{15}$$

przy pomocy funkcji Pythona z biblioteki numpy

```
import numpy as np
def calka_leandre(fun,a,b,n):
    x, w = np.polynomial.legendre.leggauss(n)
```

wyznaczamy zera wielomianu Legandre'a oraz jego współczynniki a następnie obliczamy wartość całki po wcześniejszym przeskalowaniu wektora x i w
(domyślnie funkjca np.polynomial.legendre.leggauss(n) przyjmuje zakres [-1,1])

$$c_1 = \sum_{i=0}^{n} w_i * f(x_i) \tag{16}$$

Kolejno obliczamy wartość dokładną naszej całki korzystając z rozwiązania analitycznego

$$c_{1,a} = \int_0^2 \frac{x}{a^2x^2+c^2} dx = \frac{1}{2a^2} ln|a^2x^2+c^2| \tag{17}$$

Na sam koniec prac związanych z pierwszą całką rysujemy wykres:

- całkowanej funkcji
- $|c_1 - c_{1,a}| = f(n)$ dla węzłów $n = 2, \cdots, 30$

Następna całkę liczmy numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Laguerre'a dla k=5 a następnie dla k=10:

$$c_2 = \int_0^\infty x^k exp(-x) dx \tag{18}$$

przy pomocy funkcji Pythona z biblioteki numpy

```
import numpy as np

x, w = np.polynomial.laguerre.laggauss(n)
```

wyznaczamy zera wielomianu Laguerre'a oraz jego współczynniki a następnie obliczamy wartość całki

$$c_2 = \sum_{i=0}^{n} w_i * f(x_i) \tag{19}$$

Kolejno obliczamy wartość dokładną naszej całki korzystając z rozwiązania analitycznego

$$c_{2,a} = \int_0^\infty x^k exp(-x) dx = k! \tag{20}$$

Na sam koniec prac rysujemy wykres:

- całkowanej funkcji
- $|c_2 - c_{2,a}| = f(n)$ dla węzłów $n = 2, \cdots, 30$

Ostatnią całkę liczmy numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Hermite'a:

$$c_3 = \int_0^\infty x^k exp(-x)dx \tag{21}$$

przy pomocy funkcji Pythona z biblioteki numpy

```
import numpy as np

x, w = np.polynomial.hermite.hermgauss(n)
```

wyznaczamy zera wielomianu Hermite'a oraz jego współczynniki a następnie obliczamy wartość całki

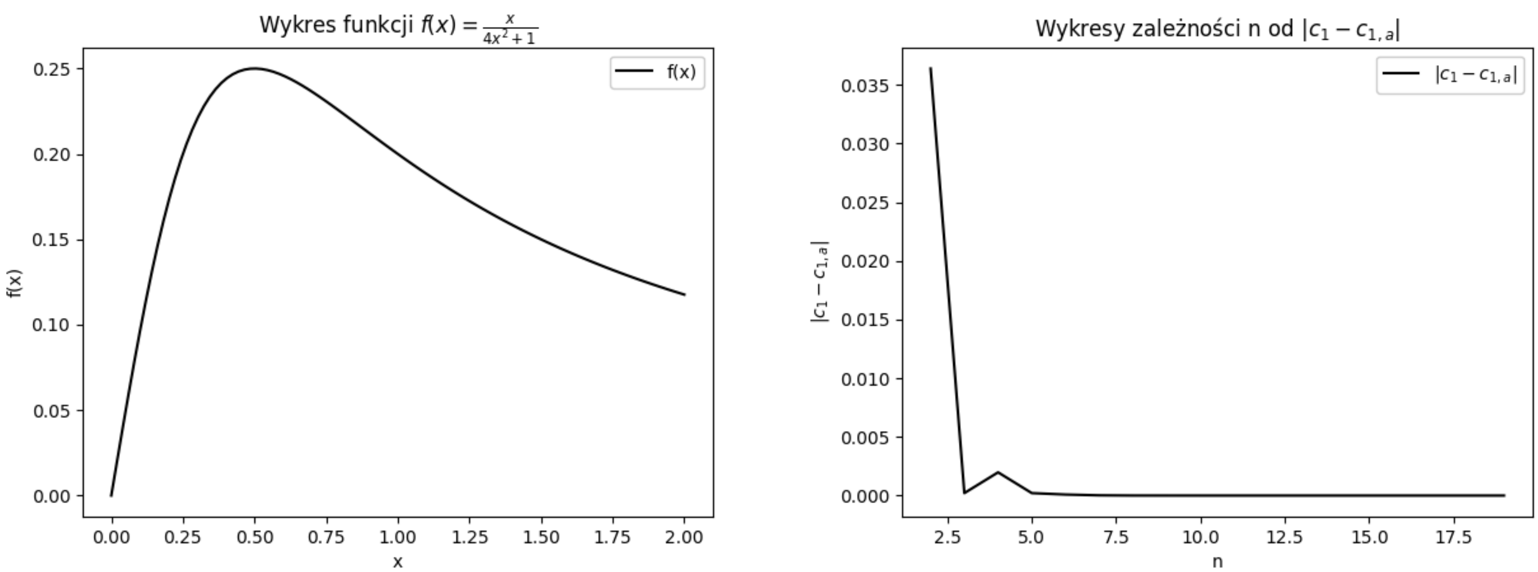
$$c_3 = \int_{-\infty}^{-\infty} \int_{-\infty}^{-\infty} sin^2(x)sin^4(y)exp(-x^2 - y^2)dxdy \tag{22}$$

W tym przypadku za wartość dokładna przyjmujemy liczbę $c_{dok} = 0.1919832644$ Na sam koniec prac rysujemy wykres:

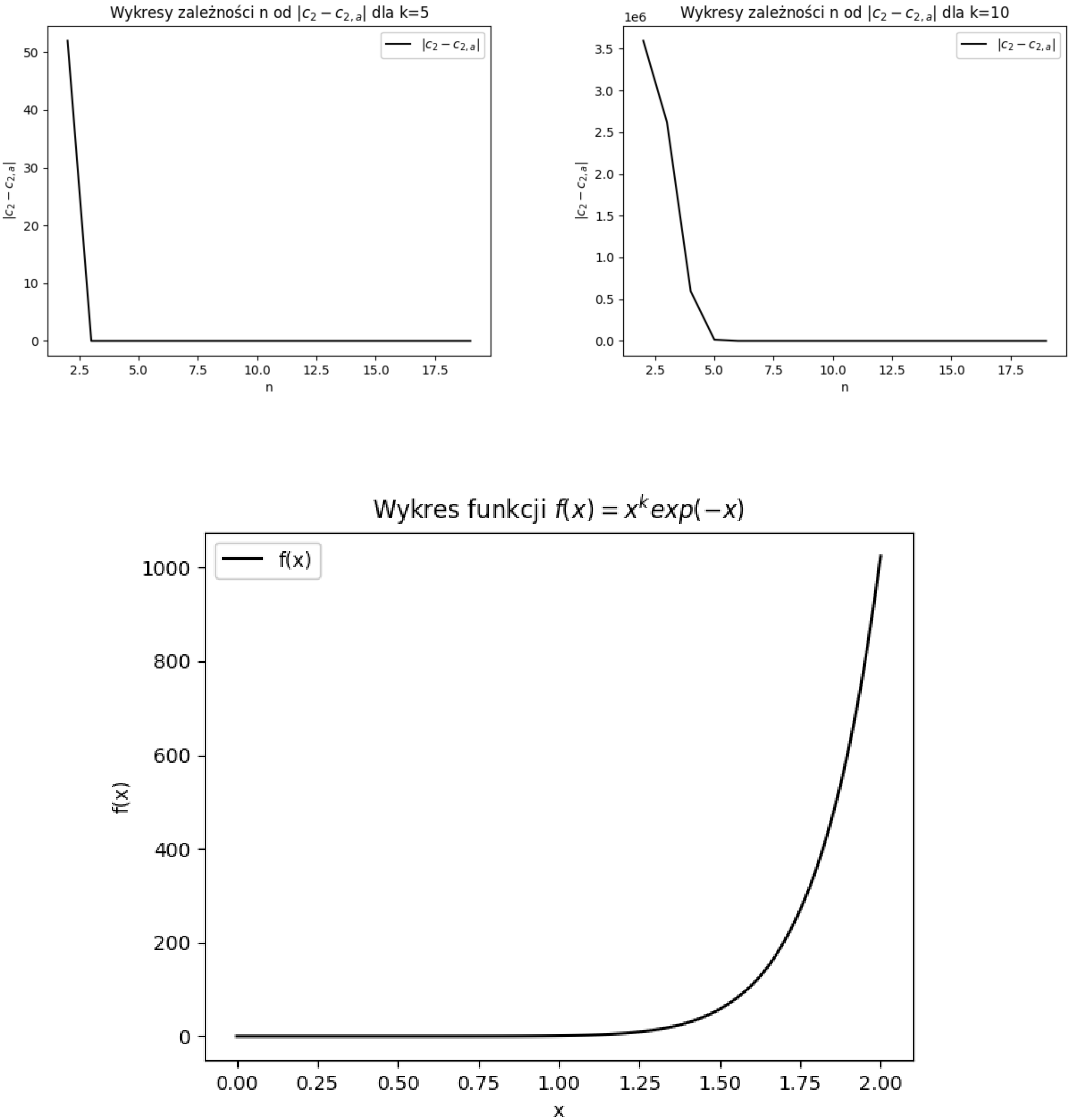
- całkowanej funkcji
- $|c_3 - c_{dok}| = f(n)$ dla węzłów $n = 2, \cdots, 30$

3 Wyniki

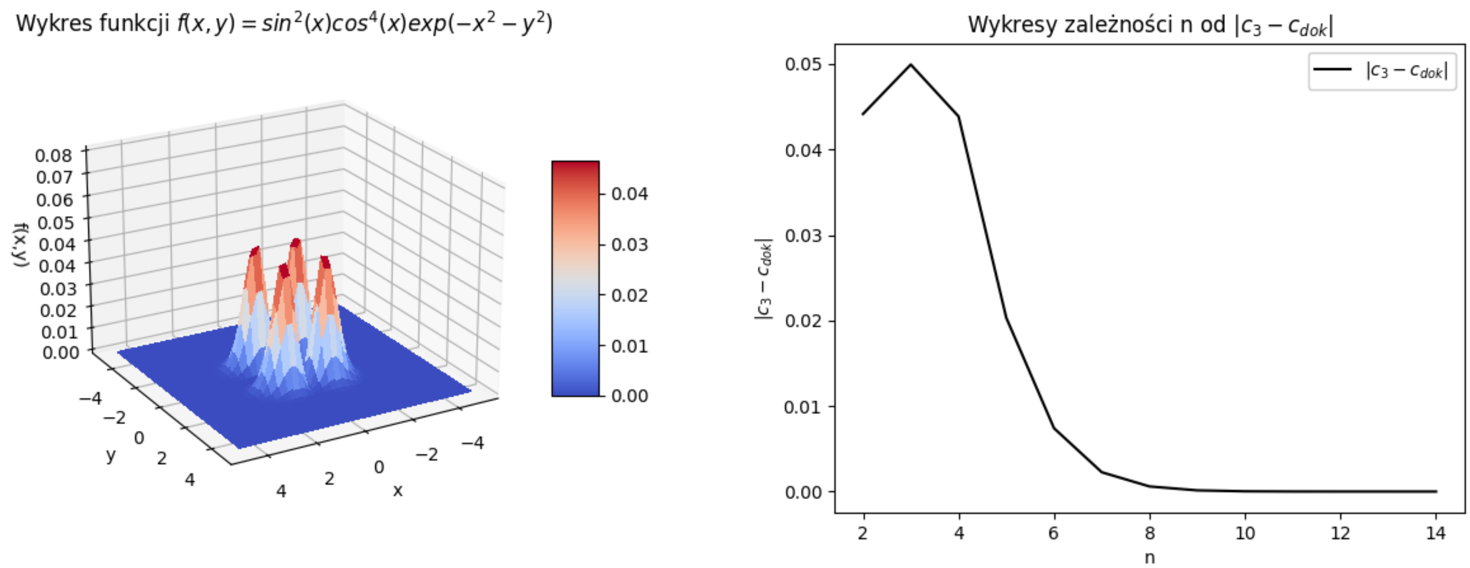
Cały program został napisany w języku Python. Umieściliśmy obliczone dane na poniższych wykresach na których widzimy dokładność całki oraz wykres funkcji całkowanej.



Rysunek 1: Wykres funkcji(lewo) oraz jej dokładności(prawo) dla całki z funkcji $\dfrac{x}{4x^2+1}$



Rysunek 2: Wykres funkcji(środek) oraz jej dokładności(prawo k=5, lewo k=10) dla całki z funkcji $x^k exp(-x)$



Rysunek 3: Wykres funkcji (lewo) oraz jej dokładności (prawo) dla całki z funkcji $sin^2(x)sin^4(y)exp(-x^2 - y^2)$

4 Podsumowanie

Podsumowując można powiedzieć że wykorzystanie kwadratur Gaussa pozwala nam na dokładne wyznaczenie wartości podanej całki a dokładność zależy od liczby węzłów.
Każda z wersji, niezależnie od n, zmierzała do błędu względnego całkowania równego 0.
Ilość węzłów miała znaczacy wpływ na początkowe wartości błędu przy małych n.
Dokładność obliczonej całki bardzo szybko wzrasta możemy to zauważyć na przykładnie z Rysunek 1 oraz 2 na którym widzimy. że już dla 5 węzłów dokładność jest rzędu 6 znaków po przecinku.
Dla przykładu 2 (k=5) wystarczą niespełna 3 węzły aby moduł spadł z ≈ 100 do 0. Podobne zjawisko wystąpiło w drugim przypadku.
Na podstawie wykresów widzimy, że metoda Legendre'a szybciej niż metoda Laguerre'a zbiega do dokładnej wartości.
Dla przykładu 3 z całką podwójna widzimy iż dokładność uzyskujemy już po 2 węzłach jednak dla węzłów $[1, 9]/\{4\}$ nie jest ona zadowalająca dopiero dla > 9 metoda osiąga pożądaną dokładność .
Całkowanie przy użyciu kwadratur Gaussa okazało się bardzo skuteczne w tym przypadku.
Niezależnie od wartości n wyniki osiągnęły zbieżność dla podobnej wartości.

5 Literatura

[1] Tomasz Chwiej, Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur
http://home.agh.edu.pl/ chwiej/mn/calkowanie_1819.pdf

[2] Wikipedia, Kwadratury Gaussa
https://www.wikiwand.com/pl/Kwadratury_Gaussa