Sprawozdanie - laboratorium nr 13
Całkowanie w czterech wymiarach przy użyciu kwadratur Gaussa.

Damian Płóciennik

29 maja 2019

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Kwadratury Gaussa

Rozpatrywano kwadratury typu:

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

w których współczynniki z wagą $p(x)$ wynoszą:

$$A_k = \int_a^b p(x)\Phi_k(x)\mathrm{d}x. \tag{2}$$

Ustalono funkcję wagową $p(x)$ oraz liczbą węzłów $(N+1)$, szukając położenia węzłów oraz współczynników A_k, tak aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Kwadratura tego typu nosi nazwę kwadratury Gaussa.

Do wyznaczenia kwadratur Gaussa używa się wielomianów ortogonalnych. Ciąg wielomianów:

$$\{\varphi_n(x)\} = \{\varphi_0(x, \varphi_1(x), \ldots, \varphi_N(x)\} \tag{3}$$

nazywa się ortogonalnymi w przedziale $[a, b]$, jeśli zachodzi pomiędzy nimi związek:

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

Można wyszczególnić najważniejsze twierdzenia dotyczące kwadratur Gaussa i wielomianów ortogonalnych:

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 pierwiastkami wielomianu $P_{N+1}(x)$
3. Wszystkie współczynniki A_k w kwadraturach Gaussa są dodatnie.

Tak wysoki rząd $(2n+2)$ spowodowany jest koniecznością ustalenia położenia $N+1$ węzłów oraz współczynników kombinacji liniowej $N+1$ wielomianów. Metoda kwadratur Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w [a, b], a kwadratury są dokładne dla wielomianów stopnia $2N+1$.

Skorzystano następnie z tożsamości Christoffela-Darboux:

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

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

gdzie β_k jest współczynnikiem stojącym w wielomianie φ_k przy zmiennej w najwyższej potędze.

Podstawiono za y zero wielomianu n-tego stopnia:

$$y = d_j, \tag{7}$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(d_j)}{\gamma_k} = -\frac{\varphi_n(x)\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n\gamma_n(x-d_j)} / \cdot\, p(x)\varphi_0(x). \tag{8}$$

Po wykonania mnożenia a następnie całkowania otrzymano:

$$\frac{\varphi_0(d_j)}{\gamma_0}\gamma_0 = -\frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n\gamma_n}\int_a^b p(x)\frac{\varphi_0(x_0)\varphi_n(x)}{x-d_j}\mathrm{d}x. \tag{9}$$

Korzystając z definicji wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a:

$$f(x) = \sum_{j=0}^{n} f(x_j)l_j(x), \tag{10}$$

$$l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x-\alpha_j)\omega_n'(a_j)}. \tag{11}$$

Wybrano przypadek spełniający:

$$w_n(x) = \varphi_n(x). \tag{12}$$

Z wykorzystaniem faktu:

$$\varphi_0(x) = 1 \tag{13}$$

otrzymano współczynniki A_k:

$$A_k = -\frac{2}{(N+2)P_{N+2}(x_k)P_{N+1}'(x_k)} \tag{14}$$

1.2 Kwadratura Gaussa-Hermite'a

Kwadratura Gaussa-Hermite'a dotyczy całkowania na przedziale $(a,b) = (-\infty,\infty)$ z funkcją wagową:

$$p(x) = e^{-x^2}. \tag{15}$$

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}x^n}e^{-x^2} \tag{16}$$

oraz relacja rekurencyjna:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}. \tag{17}$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Zadaniem do wykonania było numeryczne wyznaczenie wartości całki:

$$\iint_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{r_1}d^2\vec{r_2}\frac{\rho_1(\vec{r_1})\rho_2(\vec{r_2})}{r_{12}}, \tag{18}$$

gdzie:

$$\rho_1(\vec{r_1}) = \exp\Big(-\frac{(\vec{r_1}-\vec{R_{10}})^2}{2\sigma^2}\Big) = \exp\Big(-\frac{(x_1-X_{10})^2+(y_1-Y_{10})^2}{2\sigma^2}\Big), \tag{19}$$

$$\rho_2(\vec{r_2}) = \exp\Big(-\frac{(\vec{r_2}-\vec{R_{20}})^2}{2\sigma^2}\Big) = \exp\Big(-\frac{(x_2-X_{20})^2+(y_2-Y_{20})^2}{2\sigma^2}\Big) \tag{20}$$

oraz:

$$r_{12} = ||\vec{r_1}-\vec{r_2}|| = \sqrt{(x_1-x_2)^2+(y_1-y_2)^2}. \tag{21}$$

Dokładną wartość całki V wyznaczono ze wzoru:

$$V_{dok} = (2\pi)^2\sigma^4\frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma}\exp\Big(-\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\Big)I_0\Big(\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\Big), \tag{22}$$

gdzie: $I_0(x)$ jest modyfikowaną funkcją Bessel'a pierwszego rodzaju, a r_0 jest odległością pomiędzy środkami gaussianów $r_0 = |R_{10} - R_{20}|$.

Po dokonaniu podstawienia w całce (18) oraz w funkcjach (19, 20, 21) funkcj ewagowe są takie same i węzły oraz wagi dla kwadratury Gaussa-Hermite'a można liczyć dla tego samego układu odniesienia. Zmianie uległa jedynie postać funkcji podcałkowej:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{(x_1-x_2+x_{20})^2+(y_1-y_2)^2}}. \tag{23}$$

Wartość całki można obliczyć jako złożenie 4 kwadratur jednowymiarowych:

$$V_{num} = \sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{m}\sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{m}\frac{\omega_i\omega_j\omega_k\omega_l}{\sqrt{(x_i-x_j+x_{20})^2+(y_k-y_l)^2}}, \tag{24}$$

gdzie $\omega_i, \omega_j, \omega_k, \omega_l$ są wagami a x_i, x_j, y_k, y_l są położeniami węzłów kwadratur.
W zadaniu należało:

1. Wyznaczyć wartość numeryczną całki V_n dla liczby węzłów kwadratury Gaussa-Hermite'a równej $n = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35$ (dla funkcji ρ_1, dla funkcji ρ_2 ustalamy liczbę węzłów na $m = n + 1$ - tak aby nie pokryły się położenia węzłów obu kwadratur) oraz ustalonego położenia funkcji gaussowskich: $R_{10} = (0, 0)$, $R_{20} = (x_{20}, 0)$. Dla każdego n wartość x_{20} zmieniano w zakresie od 0.1 do 6.0 z krokiem $\Delta x = 0.1$.

2. Przyjąć $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$.

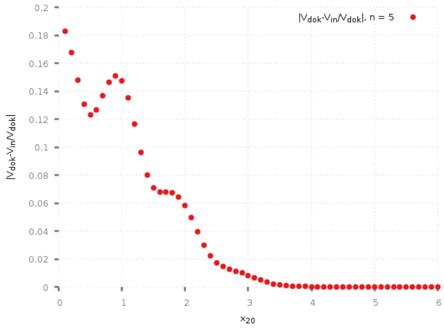
3. Dla każdej wartości n i x_{20} wyznaczyć błąd względny jako $\varepsilon = \Big|\Big|\frac{V_{dok}-V_n}{V_{dok}}\Big|\Big|$.

4. Sporządzić wykresy wartości błędów ε w funkcji x_{20} dla każdej wartości n.

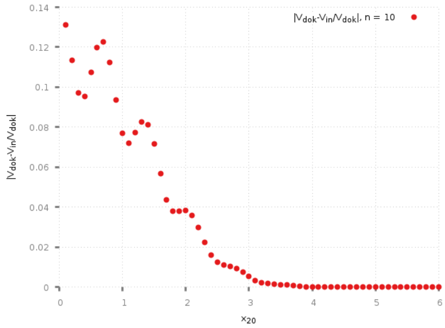
2.2 Wyniki

W celu zrealizowania zadania napisano program w języku C z wykorzystaniem biblioteki Numerical Recipes. Aby otrzymać wartość modyfikowanej funkcji Bessela pierwszego rodzaju wykorzystano funkcję bessi0(float x), natomiast do wyznaczenia położenia węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Hermite'a użyto procedury gauher(float x[], float w[], int n).

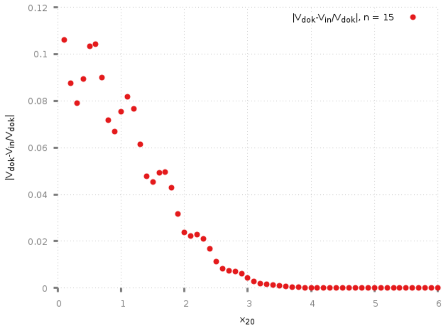
Na wykresach przedstawiono wyznaczony błąd względny całkowania ε w funkcji x_{20}.



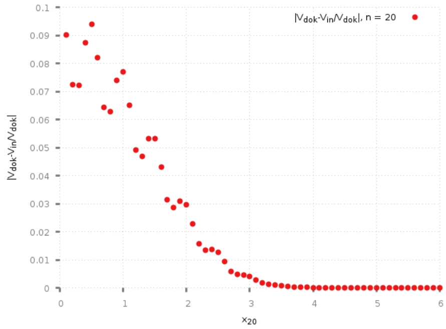
(a) $n = 5$



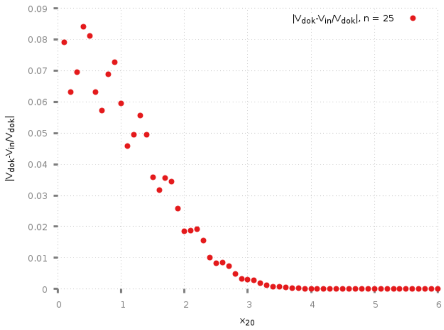
(b) $n = 10$



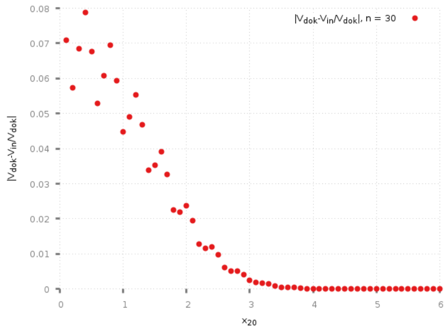
(c) $n = 15$



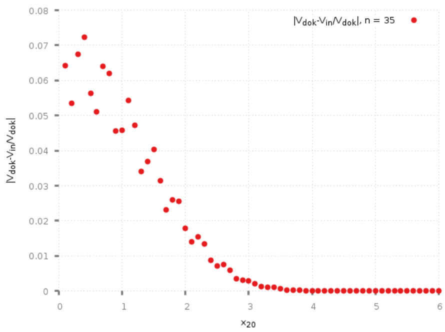
(d) $n = 20$



(e) $n = 25$



(f) $n = 30$



(g) $n = 35$

Rysunek 1: Błąd względny całkowania $\varepsilon = \left|\left|\frac{V_{dok} - V_n}{V_{dok}}\right|\right|$ w funkcji x_{20}.

Jak łatwo zobaczyć na przedstawionych wykresach dla małego n początkowa część wykresu jest dużo bardziej gładsza niż dla większych. Warto zauważyć, że niezależnie od ilości węzłów błąd zmierza do wartości równej 0, którą osiąga mniej więcej począwszy od $x_{20} = 3.5$ w każdym z przedstawionych przypadków.

3 Wnioski

Obliczenie całki czterowymiarowej z wykorzystaniem kwadratury Gaussa-Hermite'a jest dość proste i skuteczne. Niezależnie od przyjętej liczby węzłów, błąd względny osiągnął wartości bliskie zeru dla x_{20} większego lub równego 3.5.

Warte zauważenia jest, że obliczenia wykonywane przez program trwały kilka sekund - czas obliczeń rośnie bardzo szybko wraz z liczbą zmiennych i metoda ta zwykle nie jest stosowana dla większej liczby zmiennych niż 4. Przy dużej liczbie wymiarów lepiej jest posługiwać się znacznie wydajniejszą metodą Monte Carlo.

4 Bibliografia

- Chwiej Tomasz: Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur. [online]. [dostęp: 04.06.2019]. Dostęp w Internecie: `http://galaxy.agh.edu.pl/~chwiej/mn/calkowanie_1819.pdf`