

Metody numeryczne

Sprawozdanie nr 13 z zajęć laboratoryjnych

Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur Gaussa

1. Wstęp teoretyczny

Kontynuując temat **całkowania numerycznego**, inną powszechniej stosowaną kwadraturą jest **kwadratura Gaussa**. Z początku jest podobna do kwadratury Newtona-Cotesa, bowiem operuje się na tożsamych wzorach i $N + 1$ węzłach:

$$A_k = \int_a^b w(x) \cdot \phi_k(x) dx, \quad (1)$$

Oznaczenia:
 $w(x)$ – funkcja wagowa

$$S_f = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k), \quad (2)$$

Oznaczenia:
 A_k – współczynniki kwadratury

jednakże konieczne jest ustalenie funkcji wagowej $w(x)$, a także położenia węzłów (nie ma tu założenia o węzłach równoodległych, jak w przypadku poprzedniej kwadratury). Przy wyznaczaniu **kwadratur Gaussa**, istotne są tzw. wielomiany ortogonalne $\varphi_n(x)$ na przedziale $[a, b]$, takie że:

$$r \neq s, \quad (\varphi_r, \varphi_s) = \int_a^b p(x) \cdot \varphi_r(x) \cdot \varphi_s(x) dx = 0. \quad (3)$$

Rząd tej kwadratury jest wysoki z uwagi na $N + 1$ węzłów oraz $N + 1$ współczynników kombinacji liniowej wielomianów ortogonalnych, które należy wyznaczyć – w rezultacie daje to $2N + 2$ parametrów swobodnych, określających ów rząd (możliwość dopasowania lepszego wielomianu interpolacyjnego).

Innymi słowy, **kwadratura Gaussa** polega na przybliżaniu całki sumą:

$$\int_a^b w(x) \cdot f(x) dx \approx S_f. \quad (4)$$

Istnieje kilka rodzajów **kwadratur Gaussa**, każda spełniająca inne wymagania dotyczące przedziału całkowania.

Korzystając m.in. z tożsamości Christoffela-Darboux oraz wielomianów Lagrange'a, można otrzymać wzór na współczynniki **kwadratury Gaussa-Legendre'a**:

$$A_k = -\frac{2}{(N+2) \cdot P_{N+2}(x_k) \cdot P'_{N+1}(x_k)}, \quad (5)$$

Oznaczenia:

$P_n(x) = 2^{-n} \cdot \sum_{i=0}^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} (-1)^i \binom{n}{i} \binom{2n-2i}{n} x^{n-2i}$ – wielomian Legendre'a

w której węzłami są pierwiastki $P_{N+1}(x)$ (by je znaleźć, należy dobrać odpowiednią metodę poszukiwania miejsc zerowych wielomianów). Konieczne jest także rozszerzenie przedziału na ten, w którym prowadzone są obliczenia, tzn.:

$$[-1, 1] \rightarrow [a, b] \Rightarrow S_f = \frac{b-a}{2} \cdot \sum_{k=0}^N A_k f(t_k), \quad (6)$$

$$t_k = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} \cdot x_k, x_k \in [-1, 1], -\infty < a < b < \infty.$$

Waga (funkcja wagowa $w(x) = 1$) jest już uwzględniona we współczynnikach kwadratury.

Kwadratura Gaussa-Laguerre'a przydaje się, gdy mamy do czynienia z osobliwością w przedziale, tzn. $[a, b] = [0, \infty)$. Jako funkcję wagową przyjmuje się wówczas:

$$w(x) = x^\alpha \cdot e^{-x}, \quad (7)$$

Oznaczenia:

α – parametr stowarzyszonych wielomianów Laguerre'a

a ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Laguerre'a:

$$L_{n+1}^\alpha = \begin{cases} 1, n = -1 \\ 1 - x, n = 0 \\ \frac{(2n+1-x) \cdot L_n^\alpha - L_{n-1}^\alpha}{n+1}, n \geq 1 \end{cases} \quad (8)$$

lub inaczej:

$$L_n(x) = (-1)^n \cdot e^x \cdot \frac{d^n}{dx^n} (x^n \cdot e^{-x}). \quad (9)$$

Współczynniki tej kwadratury to:

$$A_k = \frac{[(N+1)!]^2}{L'_{N+1}(x_k) \cdot L_{N+2}(x_k)}, \quad (10)$$

a jej węzłami są pierwiastki wielomianu Laguerre'a $L_{N+1}(x)$.

Kwadratura Gaussa-Hermite'a pozwala oszacować całkę, której przedział to $(-\infty, \infty)$. Zakłada funkcję wagową:

$$w(x) = e^{-x^2}. \quad (11)$$

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n \cdot e^{x^2} \cdot \frac{d^n}{dx^n} (e^{-x^2}), \quad (12)$$

w których można wskazać zależność:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}, \quad (13)$$

a pierwiastki wielomianu $H_N(x)$ wyznaczają węzły.

Współczynniki tej kwadratury są zadane następująco [1]:

$$A_k = \frac{2^{N-1} \cdot N \cdot \sqrt{\pi}}{N^2 \cdot [H_{N-1}(x_k)]^2}. \quad (14)$$

Podsumowanie różnych rodzajów **kwadratur Gaussa** znajduje się w tabeli 1.

rodzaj (Gaussa-)	funkcja wagowa	współczynniki A_k	węzły kwadratury	stosowana gdy
Legendre'a	$w(x) = 1$	$\frac{-2}{(N+2) \cdot P_{N+2}(x_k) \cdot P'_{N+1}(x_k)}$	pierwiastki $P_{N+1}(x)$	$-\infty < a < b < \infty$
Laguerre'a	$w(x) = x^\alpha \cdot e^{-x}$	$\frac{[(N+1)!]^2}{L'_{N+1}(x_k) \cdot L_{N+2}(x_k)}$	pierwiastki $L_{N+1}(x)$	$[a, b] = [0, \infty)$
Hermite'a	$w(x) = e^{-x^2}$	$\frac{2^{N-1} \cdot N \cdot \sqrt{\pi}}{N^2 \cdot [H_{N-1}(x_k)]^2}$	pierwiastki $H_N(x)$	$[a, b] = (-\infty, \infty)$

Tabela 1. Zestaw najważniejszych informacji o wybranych **kwadraturach Gaussa**.

Należy pamiętać, że funkcja wagowa „nasuwa” ogólny wzór funkcji podcałkowej. W ten sposób łatwiej oddzielić ją od funkcji wagowej.

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Naszym zadaniem było znalezienie oszacowań kilku całek:

$$c_1 = \int_1^2 \frac{dx}{x \cdot \sqrt{x^2 - 1}}, \quad (15)$$

$$c_2 = \int_0^\infty \ln(x) \cdot e^{-x^2} dx, \quad (16)$$

$$c_3 = \int_0^\infty \sin(2x) \cdot e^{-3x} dx, \quad (17)$$

stosując poznane **kwadratury Gaussa**:

całka	użyta metoda	liczba użytych węzłów	wartość dokładna
c_1	Gaussa-Legendre'a	$n = 2, 3, \dots, 100$	$c_{1,a} = \frac{\pi}{3}$
c_2	Gaussa-Hermite'a	$n = 2, 4, 6, \dots, 100$	$c_{2,a} = -0.8700577$
	Gaussa-Legendre'a	$n = 2, 3, \dots, 100$	
c_3	Gaussa-Laguerre'a	$n = 2, 3, \dots, 20$	$c_{3,a} = \frac{2}{13}$

Tabela 2. Zadane całki, ich wartości oraz sposób, w jaki należy je obliczyć (wraz z podaniem liczby węzłów).

Należy jednak pamiętać o zastosowaniu odpowiednich modyfikacji przy implementowaniu wybranych metod (patrz: tabela 2). Obliczenie całki c_2 metodą **Gaussa-Hermite’a** wymaga podzielenia funkcji podcałkowej przez 2, ponieważ całkujemy „tylko połowę” z przedziału określonego dla tej metody (patrz: tabela 1). Ponieważ funkcja podcałkowa zawiera już w sobie człon, będący funkcją wagową, wystarczy przyjąć, jakoby funkcja podcałkowa miała postać:

$$f_2(x) = \frac{\ln|x|}{2}. \quad (18)$$

Należy też podkreślić, że w przeciwieństwie do pozostałych metod, ta zawiera tylko parzystą liczbę węzłów. Wynika to z faktu, że dla nieparzystego n , otrzymanoby położenie w 0, a to z kolei prowadziłoby do osobliwości, gdyż: $\lim_{x \rightarrow 0^+} \ln x = -\infty$.

Z podobnego powodu należy wydzielić funkcję podcałkową od wagowej w c_3 , a zatem:

$$f_3(x) = \sin(2x) \cdot e^{-2x}. \quad (19)$$

W metodzie **Gaussa-Legendre’a**, z uwagi na jej warunek co do przedziału, zastosowano całkę na „skróconym” przedziale:

$$\int_0^5 \ln(x) \cdot e^{-x^2} dx. \quad (20)$$

Implementacja funkcji (generują położenia węzłów oraz współczynniki) kwadratur z tabeli 1 znajduje się w bibliotece *Numerical Recipes*, a tabela 3 przedstawia ich parametry.

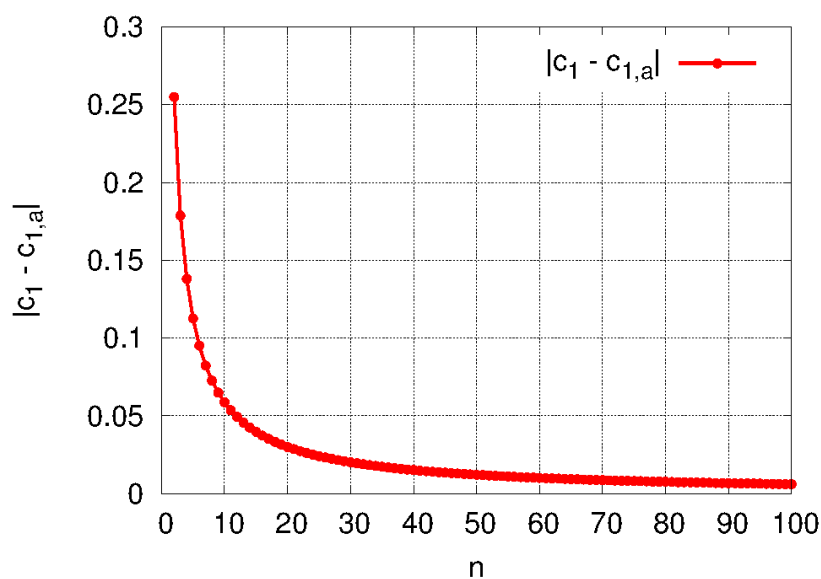
kwadratura (Gaussa-)	nazwa funkcji	parametry wywołania
Legendre’a	<i>gauleg</i>	<ul style="list-style-type: none"> ❖ x_1 – dolna granica całkowania ❖ x_2 – górna granica całkowania ❖ x – tablica, która zostanie nadpisana położeniami węzłów ❖ w – tablica, która zostanie nadpisana współczynnikami kwadratury ❖ n – liczba węzłów
Laguerre’a	<i>gaulag</i>	<ul style="list-style-type: none"> ❖ x – tablica, która zostanie nadpisana położeniami węzłów ❖ w – tablica, która zostanie nadpisana współczynnikami kwadratury ❖ n – liczba węzłów ❖ α – parametr wielomianów Laguerre’a (tu: $\alpha = 0$)
Hermite’a	<i>gauher</i>	<ul style="list-style-type: none"> ❖ x – tablica, która zostanie nadpisana położeniami węzłów ❖ w – tablica, która zostanie nadpisana współczynnikami kwadratury ❖ n – liczba węzłów

Tabela 3. Funkcje realizujące kwadratury Gaussa (z biblioteki *Numerical Recipes*) i ich parametry.

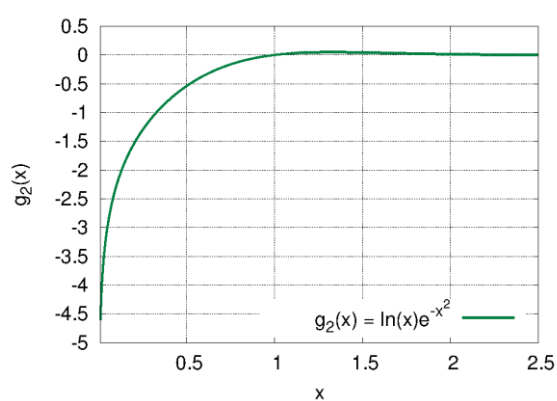
Następnie odbywa się sumowanie odpowiednich elementów tablic $x[]$ oraz $w[]$ (A_k we wzorze (2)) zgodnie ze wzorem (2), a wynikiem jest (przybliżona) wartość całki.

2.2 Wyniki

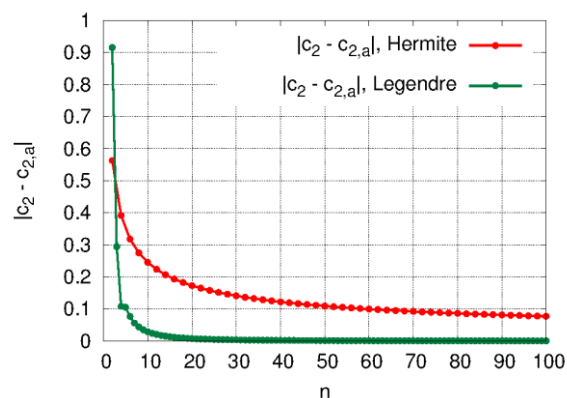
Znając dokładną (analityczną) wartość całek oraz stosując zmienną liczbę używanych węzłów, można zbadać wielkość błędu oszacowania. Specjalnie przygotowany skrypt pozwolił wygenerować wykresy zależności błędu bezwzględnego od liczby węzłów za pomocą programu Gnuplot. Do oddzielnego pliku zostały zapisane położenia węzłów, aby przeanalizować ich rozmieszczenie dla każdej z metod.



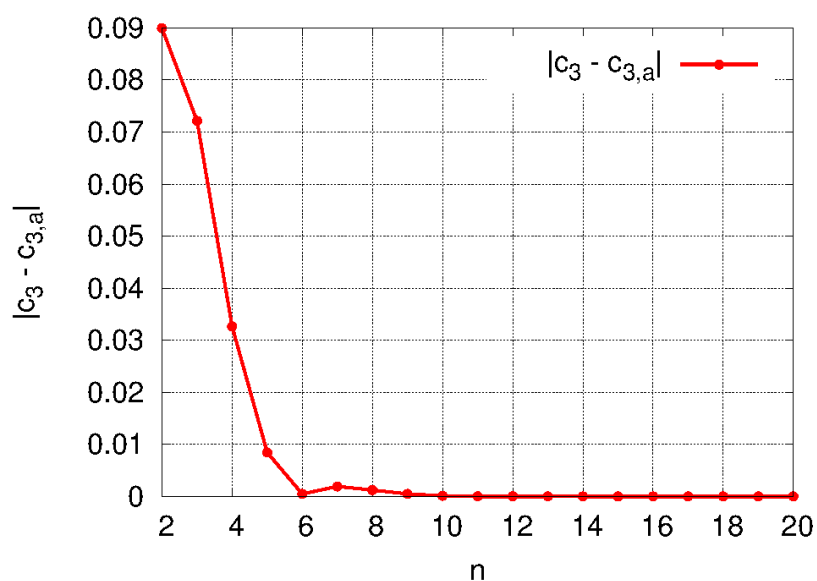
Rysunek 1. Błąd bezwzględny przybliżenia całki c_1 otrzymany metodą Legendre'a.



Rysunek 2. Wykres funkcji podcałkowej całki c_2 .



Rysunek 3. Porównanie błędów bezwzględnych przybliżeń całki c_2 dwoma metodami.



Rysunek 4. Błąd bezwzględny przybliżenia całki c_3 otrzymany metodą Laguerre'a.

3. Wnioski

- Całkowanie numeryczne w kwadraturze Gaussa polega na oszacowaniu całki sumą iloczynu funkcji wagowej oraz funkcji podcałkowej w jej węzłach.
- Na rysunku 1 widać, że błąd metody Gaussa-Legendre'a maleje wraz z liczbą węzłów. Po ok. $n = 60$, błąd spada poniżej rzędu 10^{-3} , co daje dobry wynik.
- Rysunek 3 zdradza, że metoda Gaussa-Legendre'a daje o wiele dokładniejsze wyniki niż metoda Gaussa-Hermite'a i to już począwszy od $n \geq 3$. Zachodzi tu ciekawa obserwacja, bowiem „zasymulowanie” całki tylko na przedziale $[0, 5]$ daje lepszy rezultat od oszacowania całki na przedziale $[0, \infty)$. Wynika to przede wszystkim z położenia węzłów w obu metodach oraz faktu, że funkcja podcałkowa w zerze jest osobliwa.
- Metoda Hermite'a „pracuje” na przedziale $(-\infty, \infty)$, więc generuje węzły symetryczne względem osi $x = 0$, a ze względu na fakt, że przedział to $[0, \infty)$ – który nie jest symetryczny – węzły są rzadziej rozmieszczone na przedziale całkowania (w porównaniu do innych metod). Poza tym warto zauważyć, że metoda ta „nie wie”, w którym momencie należy „zakończyć rozszerzanie” przedziału, oraz, że metoda ta bierze funkcję symetryczną względem osi OY , a następnie wynik całkowania jest dzielony przez 2 (w tym przypadku; uwzględniono ten fakt już przy definicji funkcji podcałkowej). Kwadratura Gaussa-Legendre'a generuje węzły na podanym przedziale, przez co wraz ze wzrostem n , węzły są coraz gęściej w nim ułożone. Na rysunku 2 przedstawiono wykres funkcji podcałkowej i, jak widać, asymptotycznie zmierza on do 0 dla $x \rightarrow \infty$, dlatego w tym przypadku „zasymulowana metoda” daje wyniki obarczone mniejszym błędem – jest po prostu dokładniejsza („odrzuć” przedziału $(5, \infty)$ nie ma większego wpływu na wynik).
- Kwadratura Gaussa-Hermite'a zdaje się wykazywać „powolną zbieżność do błędów niskich rzędów” (dla $n = 100$ błąd jest rzędu 10^{-2} i spada bardzo powoli), podczas gdy metoda Gaussa-Legendre'a w tym wypadku radzi sobie znacznie lepiej (dla porównania: rząd błędu jest równy 10^{-4} dla $n = 100$).
- Analiza rysunku 4 prowadzi do wniosku, że metoda Laguerre'a daje bardzo dobre wyniki już dla $n = 10$, gdzie błąd jest rzędu 10^{-4} , a w następnych iteracjach węzłów wartość ta nadal spada (dla $n = 20$ rząd błędu wynosi 10^{-9} , a więc jest on bardzo mały).
- Wartość oszacowań całek w kwadraturach silnie zależy od liczby i rozmieszczenia węzłów, użytej kwadratury oraz postaci funkcji podcałkowej, co zostało udowodnione na wykresach 1 – 4.

4. Bibliografia

¹ źródło: https://en.wikipedia.org/wiki/Gauss%E2%80%93Hermite_quadrature [data dostępu: 6 czerwca 2020]