

## 1 Wstęp teoretyczny

### 1.1 Kwadratury Gaussa

W tej metodzie rozpatrujemy kwadratury typu:

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

w których współczynniki  $A_k$  wynoszą:

$$A_k = \int_a^b p(x) \varphi_k(x) dx \quad (2)$$

gdzie  $p(x)$  jest funkcją wagową. Ustalamy liczbę węzłów  $N+1$  oraz  $p(x)$  szukając położenia węzłów oraz wszystkich  $A_k$ , aby osiągnąć maksymalny rząd kwadratury. Ten typ kwadratury nosi nazwę Gaussowskiej. Ciąg wielomianów:

$$\{\varphi_n(x)\} = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_N(x)\} \quad (3)$$

nazywamy ortogonalnymi w przedziale  $[a, b]$ , gdy zachodzi związek:

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

W celu wyznaczenia kwadratur Gaussa używa się wielomianów ortogonalnych. Metoda kwadratur Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w  $[a, b]$ , a kwadratury są dokładne dla wielomianów stopnia  $2N + 1$ . W następnym kroku korzystamy z tożsamości Christoffela-Darboux:

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

gdzie:

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

$\beta_k$  - współczynnik stojący w wielomianie  $\varphi_k$  przy zmiennej o najwyższej potęgze. Podstawiamy zero wielomianu  $n$ -tego stopnia za  $y$ :  $y = d_j$ , oraz mnożymy obustronnie przez  $p(x) \varphi_0(x)$

$$\sum_{k=0}^n \frac{\varphi_k(x) \varphi_k(d_j)}{\gamma_k} = -\frac{\varphi_n(x) \varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n (x - d_j)} / p(x) \varphi_0(x) \quad (6)$$

Następnie całkujemy otrzymane równanie:

$$\varphi_0(d_j) = -\frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} \int_b^a p(x) \frac{\varphi_0(x) \varphi_n(x)}{x - d_j} dx \quad (7)$$

Dalej korzystając z wielomianu interpolacyjnego Langrange'a:

$$f(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x); \quad l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - \alpha_j) \omega'_n(\alpha_j)} \quad (8)$$

Wybieramy przypadek spełniający równość  $\omega_n(x) = \varphi_n(x)$ , wykorzystując fakt, że  $\varphi_0(x) = 1$  otrzymujemy współczynnik  $A_k$ :

$$A_k = -\frac{2}{(N+2)P_{N+2}(x_k)P'_{N+1}(x_k)} \quad (9)$$

## 1.2 Kwadratura Gaussa-Hermite'a

Kwadratura Gaussa-Hermite'a odnosi się do całkowania na przedziale  $(-\infty, \infty)$  z funkcją wagową  $p(x)$ :

$$p(x) = e^{-x^2}$$

W tym przypadku ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{-x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \quad (10)$$

## 2 Całkowanie w czterech wymiarach przy użyciu kwadratur Gaussa

### 2.1 Zadanie

Całkę z której mieliśmy numerycznie wyznaczyć wartość określamy jako:

$$V = \iint_{-\infty}^{\infty} d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 \frac{\rho_1(\vec{r}_1) \rho_2(\vec{r}_2)}{r_{12}} \quad (11)$$

gdzie:

$$\rho_1(\vec{r}_1) = \exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{R}_{10})^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{(x_1 - X_{10})^2 + (y_1 - Y_{10})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (12)$$

$$\rho_2(\vec{r}_2) = \exp\left(-\frac{(\vec{r}_2 - \vec{R}_{20})^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{(x_2 - X_{20})^2 + (y_2 - Y_{20})^2}{2\sigma^2}\right) \quad (13)$$

$$r_{12} = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \quad (14)$$

Analityczną wartość całki  $V$  obliczamy ze wzoru:

$$V_{dok} = (2\pi)^2 \sigma^4 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} \exp\left(-\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) \quad (15)$$

gdzie  $I_0(x)$  to modyfikowana funkcja Bessela 1-wszego rodzaju, a  $r_0 = |R_{10} - R_{20}|$  czyli odległość między środkami Gaussianów. Gdy dokonamy podstawienia w całce (11) i wydzielimy funkcje wagowe (12, 13) zmianie ulega postać funkcji podcałkowej:

$$f(x_1, y_1, x_2, y_2) = \frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2 + x_{20}^2 + (y_1 - y_2)^2)}} \quad (16)$$

A więc wartość całki liczymy ze złożenia 4 kwadratur 1-wymiarowych:

$$V_{num} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^m \frac{\omega_i \omega_j \omega_k \omega_l}{\sqrt{(x_i - x_j + x_{20}^2 + (y_k - y_l)^2}} \quad (17)$$

gdzie:  $\omega_{i,j,k,l}$  - wagi,  $x_{i,j}$   $y_{k,l}$  - położenia węzłów kwadratur. Należało wyznaczyć  $V_{num}$  dla liczby węzłów kwadratury Gaussa-Hermite'a  $n = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35$  oraz ustalonego położenia funkcji Gaussowskich:  $R_{10} = (0, 0)$ ,  $R_{20} = (x_{20}, 0)$ . Wartość  $x_{20}$  zmieniana była z krokiem 0.1 w zakresie  $[0.1, 6.0]$ . Ustaliliśmy wartość  $\sigma = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . Wyznaczyliśmy błąd względny  $\epsilon = \left| \frac{V_{dok} - V_n}{V_{dok}} \right|$  dla każdej wartości  $x_{20}$

## 2.2 Wyniki

Do wykonania zadania użyto programu napisanego w języku C. Do operacji na matematycznych użyto biblioteki Numerical Recipes. Na wykresie widzimy błąd względny całkowania -  $\epsilon$  jako funkcję zmiennej  $x_{20}$  dla wszystkich wartości  $n$

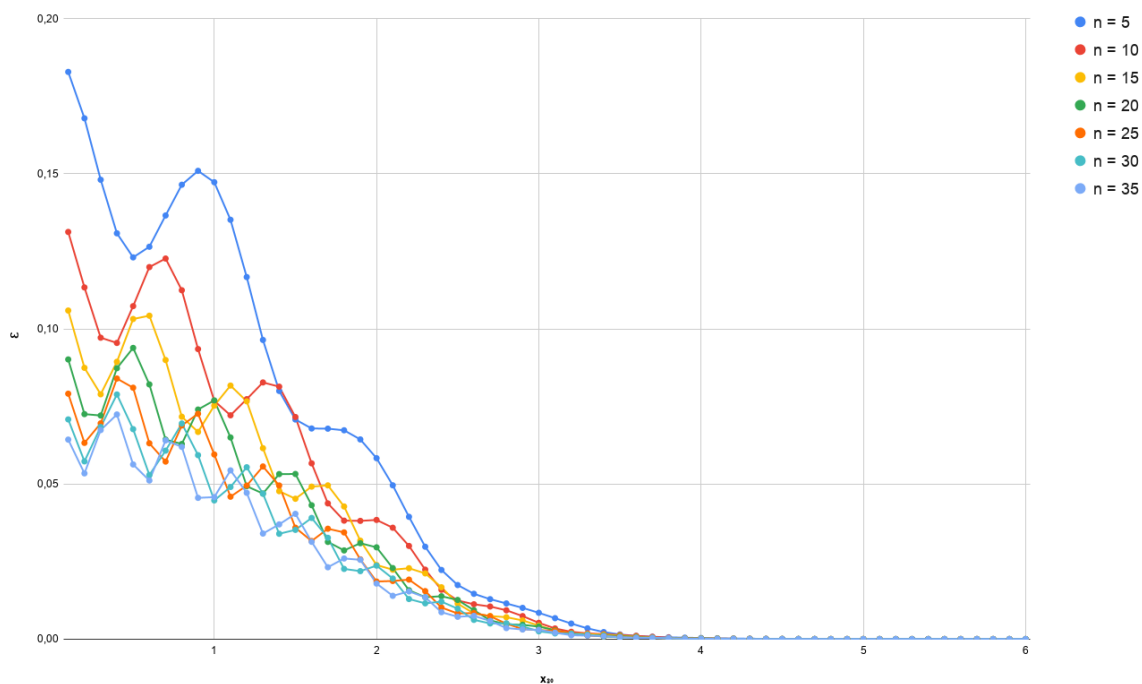
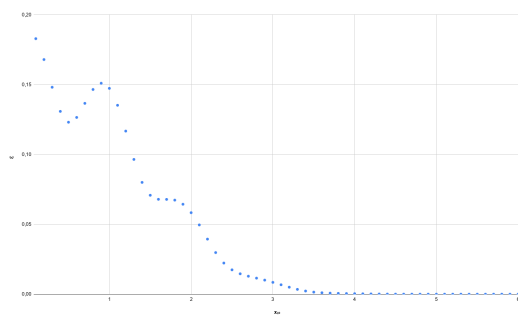
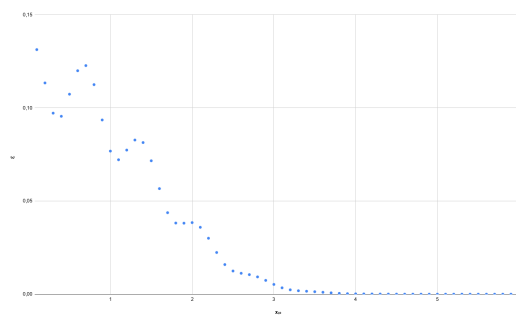


Figure 1: Nałożone na jeden wykres wartości błędu  $\epsilon$  dla każdego  $n$

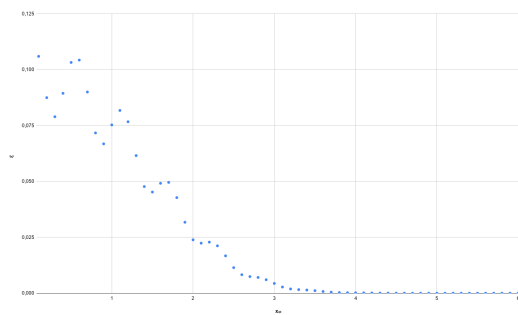
Poniżej widzimy błędy  $\epsilon$  dla poszczególnych wartości  $n$ :



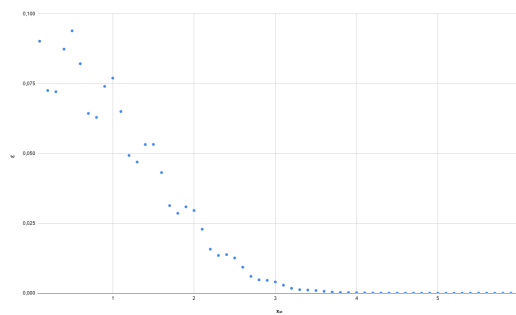
(a)  $n = 5$



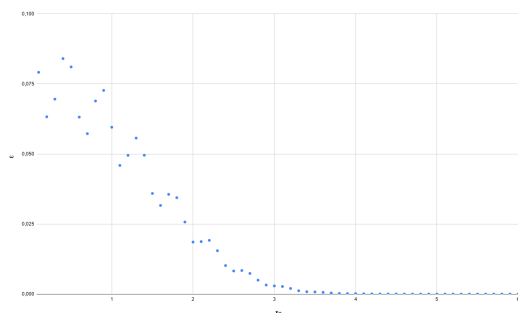
(b)  $n = 10$



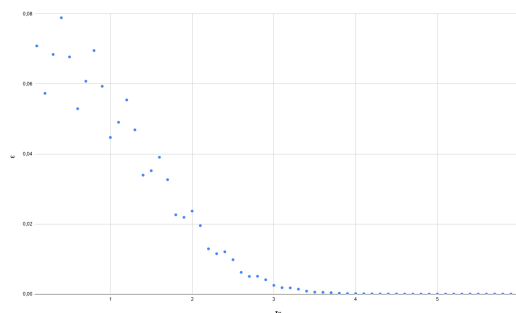
(c)  $n = 15$



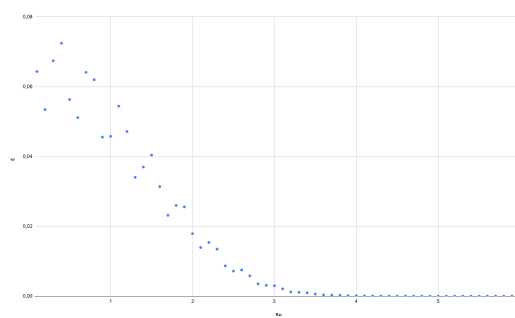
(d)  $n = 20$



(e)  $n = 25$



(f)  $n = 30$



(g)  $n = 35$

Figure 2: Błąd  $\epsilon$  dla każdej z testowanych ilości węzłów

Analizując wykresy łatwo zauważyć, że dla mniejszych wartości  $n$  pierwsza część wykresu jest zdecydowanie gładzsza. Niezależnie od ilości węzłów  $\epsilon \Rightarrow 0$ , zawsze przy wartości  $x_{20} \approx 3.5$

### 3 Wnioski

Obliczenie całki przy pomocy kwadratury Gaussa-Hermite'a jest stosunkowo proste w implementacji i bardzo skuteczne. Zwiększenie liczby węzłów aproksymacji nie zwiększyło dokładności wyniku osiągniętego numerycznie. Metoda ta jest jednak bardzo wymagająca obliczeniowo. Na stosunkowo szybkim procesorze domowym trwały one kilka sekund. Czas jest proporcjonalny do ilości zmiennych funkcji, dla której stosujemy algorytm. Patrząc na złożoność przy 4 zmiennych, prawdopodobnie nie chcielibyśmy używać tej metody przy funkcji o większej ich ilości.