Szacowanie całek niewłaściwych przy użyciu kwadratur Gaussa

Yuliya Zviarko

03.06.2024

Spis treści

1 Wstęp teoretyczny

1.1 Kwadratury Gaussa

Kwadratury Gaussa to jedna z technik, służąca do przybliżonego obliczania wartości całek poprzez aproksymację za pomocą sumowania wartości funkcji w odpowiednio ważonych punktach w przedziale całkowania.
Rozważamy kwadratury w postaci:

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

oraz współczynniki kwadratury z wagą p(x):

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

Definiujemy funkcję wagową $p(x)$ oraz liczbę węzłów jako $(N+1)$.
Poszukujemy lokalizacji węzłów i współczynników A_k, tak, aby rząd kwadratury był najwyższy. Tego rodzaju kwadratura nazywa się kwadraturą Gaussa. Do wyznaczania kwadratur Gaussa wykorzystują się wielomiany ortogonalne.

Ciąg wielomianów**(3)** nazywamy ortogonalnymi w przedziale $[a, b]$, jeżeli zachodzi między nimi związek**(4)**:

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

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

Twierdzenie 1 *Wielomiany ortogonalne mają wyłącznie pierwiastki rzeczywiste, które leżą w przedziale* $[a, b]$.

Twierdzenie 2 *Nie istnieje kwadratura Gaussa o rzędzie wyższym niż* $2(N+1)$. *Kwadratura Gaussa ma rząd* $2(N+1)$ *wtedy i tylko wtedy, gdy węzły* x_k *są pierwiastkami wielomianu* $P_{N+1}(x)$.

Twierdzenie 3 *Wszystkie współczynniki* A_k *w kwadraturze Gaussa są dodatnie.*

Rząd kwadratury Gaussa jest tak wysoki, ponieważ musimy ustalić położenia $N+1$ węzłów oraz współczynniki kombinacji liniowej $N+1$ wielomianów ortogonalnych. Daje to $2N+2$ parametrów swobodnych, co określa rząd metody (ponieważ możemy dobrać lepszy wielomian interpolacyjny). Metoda kwadratur Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w $[a, b]$. Kwadratury te są dokładne dla wielomianów stopnia $2N+1$.

1.2 Kwadratura Gaussa-Legendre'a

Kwadratura Gaussa-Legendre'a jest używana do przybliżonego obliczania wartości całek na przedziale skończonym. W przypadku tej metody, przyjmujemy przedział całkowania jako **[-1,1]**, a funkcję wagową **p(x)** jako **1**.

W tym przedziale ciąg wielomianów ortogonalnych tworzy wielomiany Legendre'a, zdefiniowane jako:

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n \cdot n!} \frac{d^n}{dx^n} (x^2 - 1)^n \tag{5}$$

Relacja rekurencyjna między kolejnymi wielomianami Legendre'a jest postaci:

$$(n+1)P_{n+1} = (2n+1)xP_n - nP_{n-1}, \tag{6}$$

gdzie pierwsze dwa elementy ciągu to:
$P_0 = 1,$
$P_1 = x.$

Węzły x_k stanowią pierwiastki wielomianu $P_{N+1}(x)$. Znajdujemy je, stosując metodę poszukiwania zer wielomianów.
W praktyce rzadko korzysta się z kwadratur o wysokim rzędzie. Zamiast tego preferowanym podejściem jest stosowanie kwadratur złożonych, czyli kwadratur niskiego rzędu w każdym podprzedziale, a następnie zsumowanie uzyskanych wyników.
Należy jednak pamiętać, że podczas sumowania pomijamy wagę – jest ona już uwzględniona we współczynnikach A_k.

1.3 Kwadratura Gaussa-Laguerre'a

Kwadratura Gaussa-Laguerre'a jest wykorzystywana do obliczeń na przedziale jednostronnie nieskończonym.
Przedział $[a, b]$ rozpatrujemy jako $[0, \infty)$, a funkcję wagową $p(x)$ definiujemy jako e^{-x}. Wielomiany ortogonalne tworzą ciąg wielomianów Laguerre'a, wyrażonych jako:

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n}(x^n e^{-x}) \tag{7}$$

Relacja rekurencyjna między kolejnymi wielomianami ma postać:

$$(n+1)L_{n+1}^{\alpha} = (2n+1-x)L_n^{\alpha} - nL_{n-1}^{\alpha} \tag{8}$$

gdzie pierwsze cztery elementy ciągu to:
$L_0(x) = 1,$
$L_1(x) = 1 - x,$
$L_2(x) = \frac{x^2-4x+2}{9},$
$H_3(x) = \frac{-x^3+9x^2-18x+6}{6}.$

1.4 Kwadratura Gaussa-Hermite'a

Kwadratura Gaussa-Hermite'a jest przeznaczona do całkowania na przedziale obustronnie nieskończonym.
W przypadku tej kwadratury rozważamy przedział całkowania $(a, b) = (-\infty, \infty)$ oraz funkcję wagową $p(x) = e^{-x^2}$.
Ciąg wielomianów ortogonalnych tworzą wielomiany Hermite'a, zdefiniowane jako:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2} \tag{9}$$

Relacja rekurencyjna między kolejnymi wielomianami ma postać:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1} \tag{10}$$

gdzie pierwsze cztery elementy ciągu to:
$H_0(x) = 1,$
$H_1(x) = 2x,$
$H_2(x) = 4x^2 - 2,$
$H_3(x) = 8x^3 - 12x.$

1.5 Porównanie kwadratur Gaussa i Newtona-Cotesa

1. Kwadratury Gaussa oferują większą dokładność w porównaniu do kwadratur Newtona-Cotesa, uwzględniając tę samą liczbę węzłów.

2. Dla (N+1) węzłów, kwadratury Gaussa mają rząd $r = 2N + 2$, podczas gdy kwadratury Newtona-Cotesa osiągają ten sam rząd dla $(2N + 1)$ węzłów.
3. Po ustaleniu rzędu kwadratury, stosuje się wzory złożone dla coraz mniejszych kroków całkowania, aż do uzyskania stabilnego przybliżenia.
4. W przypadku całkowania stabilizowanej funkcji podcałkowej, lepszym wyborem może być użycie kwadratury Newtona-Cotesa, ponieważ użycie kwadratur Gaussa może wymagać dodatkowej interpolacji.

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Zadaniem było numeryczne obliczenie wartości trzech całek przy użyciu kwadratur Gaussa.

1. Pierwsza całka ma postać:
$$c_1 = \int_1^2 \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}}dx \tag{11}$$
Obliczenia przeprowadzono z wykorzystaniem kwadratury Gaussa-Legendre'a. Wartość dokładna tej całki wynosi $c_{1,a} = \frac{\pi}{3}$. Liczbę węzłów ustalono jako $n = 2, 3, \ldots, 100$.

2. Druga całka jest określona przez wyrażenie:
$$c_2 = \int_0^\infty \ln(x)\exp(-x^2)dx \tag{12}$$
Obliczenia wykonano z zastosowaniem kwadratury Gaussa-Hermite'a dla $n = 2, 4, 6, \ldots, 100$ oraz kwadratury Gaussa-Legendre'a dla $n = 2, 3, 4, 5, \ldots, 100$ na przedziale $x \in [0, 5]$.
Wartość dokładna tej całki wynosi $c_{2,a} = 0.8700577$.

3. Trzecia całka ma postać:
$$c_3 = \int_0^\infty \sin(2x)e^{-3x}dx \tag{13}$$
Obliczenia wykonano z wykorzystaniem kwadratury Gaussa-Laguerre'a. Wartość dokładna tej całki wynosi $c_{3,a} = \frac{2}{13}$. Liczbę węzłów ustalono jako $n = 2, 3, \ldots, 10$.

2.2 Wykonanie zadania

Dla obliczenia wartości całek przy użyciu kwadratur Gaussa, zastosowano poniższe procedury z biblioteki **Numerical Recipes**:

1. **Do całkowania w przedziale** $[a, b]$**, gdzie** $-\infty < a, b < \infty$ **z wagą równą 1**
Kwadratura Gaussa-Legendre'a: gauleg(float x1, float x2, float x[], float w[], int n)
Gdzie:
x1 - dolna granica całkowania,
x2 - górna granica całkowania,
x[] - wektor położeń węzłów kwadratury,
w[] - współczynniki kwadratury,
n - liczba węzłów kwadratury.

2. **Do całkowania w przedziale** $[0, \infty)$ **z wagą** $\exp(-x)$
Kwadratura Gaussa-Laguerre'a: gaulag(float x[], float w[], int n, float alfa)
Gdzie:
x[] - wektor położeń węzłów kwadratury,
w[] - współczynniki kwadratury,
n - liczba węzłów kwadratury,
alfa - parametr stowarzyszonego wielomianu Laguerre'a.

3. **Do całkowania w przedziale** $(-\infty, \infty)$ **z wagą** $\exp(-x^2)$
Kwadratura Gaussa-Hermite'a: gauher(float x[], float w[], int n)
Gdzie:
x[] - wektor położeń węzłów kwadratury,
w[] - współczynniki kwadratury,
n - liczba węzłów kwadratury.

Ogólny wzór całkowania z wykorzystaniem kwadratur Gaussa ma postać:

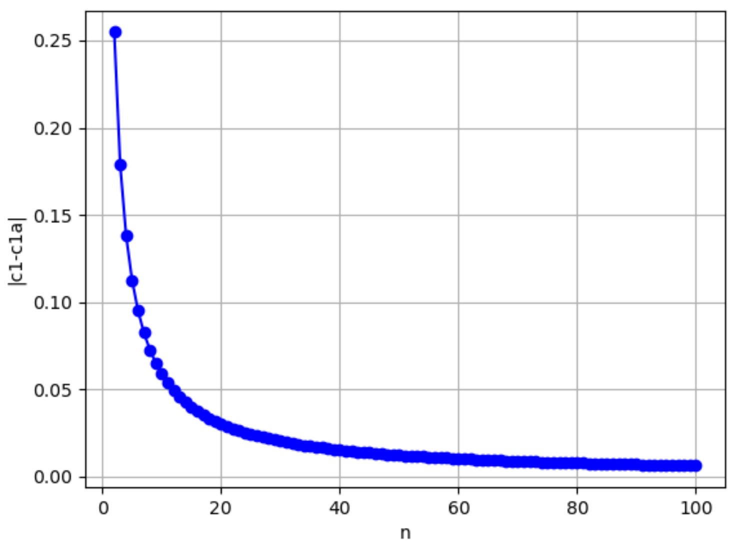
$$I \approx \sum_{i=1}^{n} w_i g(x_i), \tag{14}$$

gdzie w_i oraz x_i to wagi i położenia danej kwadratury.

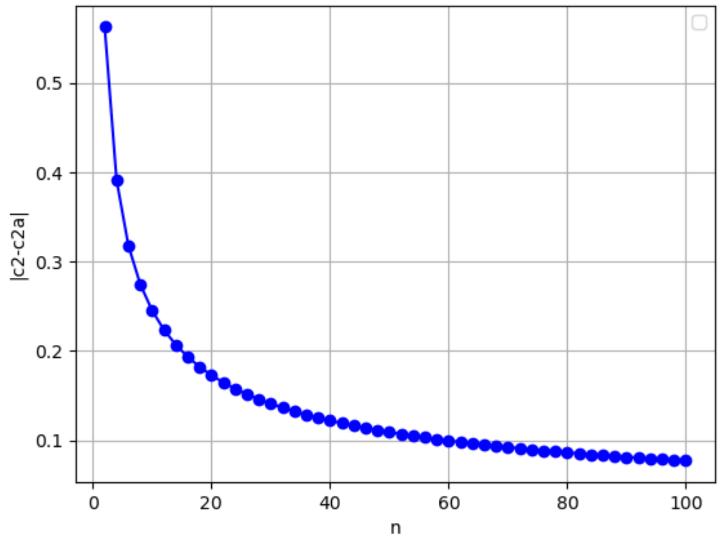
Dla pierwszej całki funkcja wagowa wynosi **1**, a więc $g(x_i) = \frac{1}{x_i\sqrt{x_i^2-1}}$.
Drugą całkę obliczano dwoma sposobami. Dla kwadratury Hermite'a funkcja wagowa to $\exp(-\mathbf{x^2})$, zatem $g(x_i) = \ln(|x_i|)$. W przypadku kwadratury Legendre'a $g(x_i) = \ln(|x_i|)\exp(-x_i^2)$. Za granice całkowania przyjęto $x_1 = 0$, $x_2 = 5$.
Trzecią całkę obliczono poprzez podzielenie funkcji podcałkowej przez $\exp(-x)$, co oznaczało podstawienie $g(x_i) = \sin(2x_i)\exp(-2x_i)$.

Dla każdego podpunktu sporządzono wykresy modułu różnicy między całką numeryczną a analityczną.

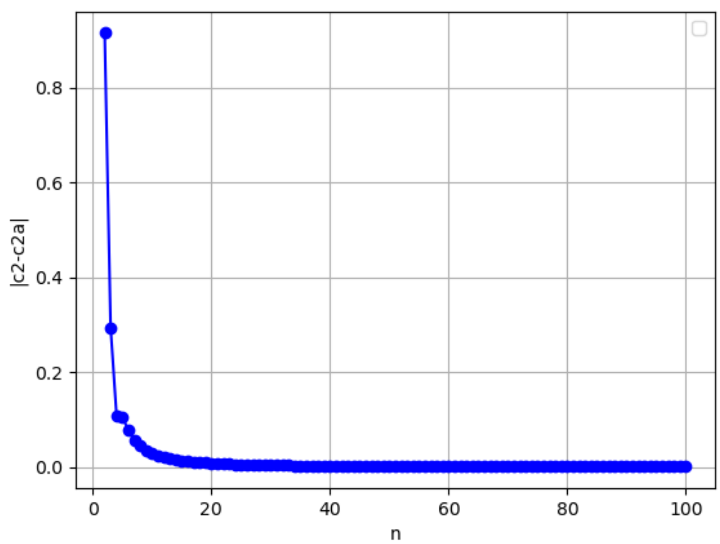
2.3 Wyniki



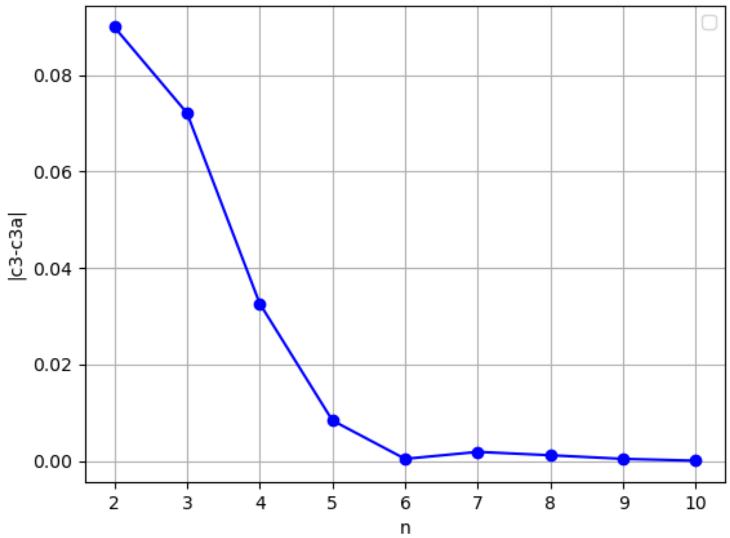
Rysunek 1: Moduł różnicy między wartością całki C_1 obliczoną przy pomocy kwadratury Gaussa-Legendre'a a wartością dokładną $C_{1,a}$ w zależności od liczby węzłów n.



Rysunek 2: Moduł różnicy między wartością całki C_2 obliczoną przy pomocy kwadratury Gaussa-Hermite'a a wartością dokładną $C_{2,a}$ w zależności od liczby węzłów n.



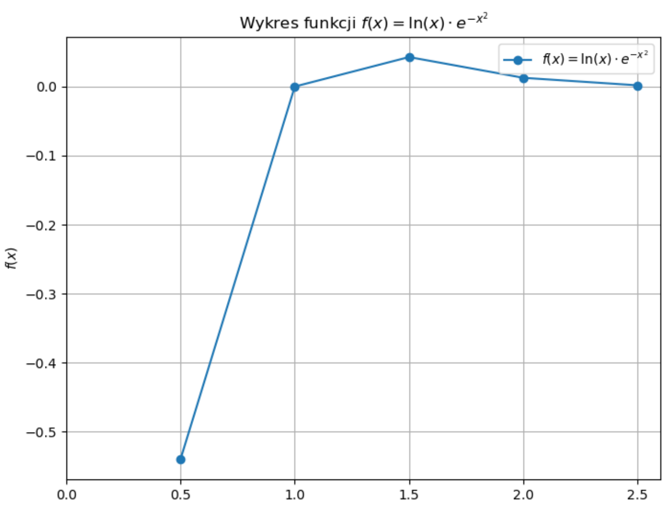
Rysunek 3: Moduł różnicy między wartością całki C_2 obliczoną przy pomocy kwadratury Gaussa-Legendre'a a wartością dokładną $C_{2,a}$ w zależności od liczby węzłów n.



Rysunek 4: Moduł różnicy między wartością całki c_3 obliczoną przy pomocy kwadratury Gaussa-Laguerre'a a wartością dokładną $c_{3,a}$ w zależności od liczby węzłów n. Wyniki uzyskane po podzieleniu funkcji podcałkowej przez e^{-x}:

3 Wnioski

Kwadratury Gaussa stanowią skuteczną metodę do przybliżania numerycznego wartości całek na różnorodnych przedziałach. Wartość tego przybliżenia jest ściśle uzależniona od liczby węzłów użytych w kwadraturze, przy czym im większa jest ich ilość, tym dokładniejsze jest oszacowanie, zbliżając się do wartości błędu bliskiej zeru.
W zadaniach 2a oraz 2b wyraźnie widoczna jest przewaga metody Gaussa-Legendre'a nad metodą Gaussa-Hermite'a dla analizowanej funkcji. Ta przewaga wynika z charakterystyki funkcji:



która znacząco zmienia swoje wartości jedynie w przedziale $(0, 2.5]$, a powyżej tych wartości dąży do zera.

Korzystając z kwadratury Gaussa-Legendre'a na przedziale $[0, 5]$, mamy pewność, że węzły są zagęszczone w obszarach, gdzie wartości funkcji zmieniają się gwałtownie. W przypadku kwadratury Gaussa-Hermite'a, węzły są rozproszone na znacznie szerszym przedziale, co powoduje mniejsze zagęszczenie w obszarze istotnych zmian wartości funkcji $(0, 2.5]$, co z kolei prowadzi do dalszego oddalenia się od wartości analitycznej.

4 Źródła

Podczas opracowywania tego sprawozdania korzystano z następujących źródeł:

- T. Chwiej, AGH, Wykład z Metod Numerycznych: `http://galaxy.agh.edu.pl/~chwiej/mn/wyk/calkowanie_22_23.pdf`.