



**AKADEMIA GÓRNICZO-HUTNICZA
IM. STANISŁAWA STASZICA
W KRAKOWIE**

Sprawozdanie - laboratorium nr 13

Całkowanie w czterech wymiarach przy użyciu kwadratur Gaussa

Klaudia Fil, 31.05.2019 r.

1. Wstęp teoretyczny

Całkowanie numeryczne oznacza zastosowanie metod numerycznych w celu znalezienia przybliżonej wartości całki oznaczonej:

$$C = \int_a^b f(x) dx \quad (1)$$

Rozpatrując kwadratury typu:

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

, gdzie

$$A_k = \int_a^b p(x) \Phi_k(x) dx \quad (3)$$

jest współczynnikami kwadratury z wagą $p(x)$.

Postępujemy następująco:

- ustalamy funkcję wagową $p(x)$,
- liczbę węzłów $(N+1)$,
- poszukujemy położenia węzłów oraz współczynników A_k ,

tak, aby rząd kwadratury był jak najniższy. Kwadratura tego typu nosi nazwę kwadratury Gaussa. Do jej wyznaczenia używa się ciągu wielomianów ortogonalnych:

$$\{\varphi(x)\} = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_N(x)\}, \quad (4)$$

który nazywany jest ortogonalnym w przedziale $[a, b]$, jeżeli zachodzi:

$$(\varphi_r, \varphi_s) = \int_a^b p(x) \varphi_r(x) \varphi_s(x) dx = 0, \quad r \neq s. \quad (5)$$

Prawdziwe są następujące twierdzenia:

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

Metoda kwadratur Gaussa jest zbieżna do każdej funkcji ciągłej w $[a, b]$, a kwadratury te są dokładne dla wielomianów stopnia $2N+1$.

Wykorzystując tożsamość Christoffela-Darboux:

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

gdzie

$$\alpha_k = \frac{\beta_{k+1}}{\beta_k} \quad \text{oraz} \quad \gamma_k = \int_a^b p(x) \varphi_k^2(x) dx, \quad (7)$$

β_k - współczynnik stojący w wielomianie φ_k przy zmiennej w najwyższej potęgze.

Podstawiając za y zero wielomianu n -tego stopnia $y = d_j$ oraz mnożąc przez $\int_a^b dx p(x) \varphi_0(x)$ i całkując otrzymujemy:

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

Korzystając z definicji wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a:

$$f(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x), \quad (9)$$

$$l_j(x) = \frac{w_n(x)}{(x - a_j) w_n'(a_j)} \quad \text{- wielomian węzłowy,} \quad (10)$$

wybieramy przypadek spełniający:

$$w_n(x) = \varphi_n(x), \quad (11)$$

wykorzystujemy fakt, że:

$$\varphi_0(x) = 1. \quad (12)$$

Otrzymujemy współczynniki A_k równe:

$$A_k = - \frac{2}{(N+2) P_{N+2}(x_k) P'_{N+1}(x_k)}. \quad (13)$$

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

$$p(x) = e^{-x^2}. \quad (14)$$

Gdzie ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (15)$$

dla których obowiązuje relacja rekurencyjna:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}. \quad (16)$$

Przy całkowaniu funkcji wielu zmiennych pojawiają się problemy:

- I. Konstrukcja wielomianów interpolacyjnych jest możliwe tylko dla odpowiednio położonych węzłów i regularnych obszarów całkowania.
- II. Czas obliczeń rośnie bardzo szybko wraz z liczbą zmiennych.

Zakładamy, że obszar całkowania $\Omega \subset R^M$ można opisać układem nierówności:

$$\begin{aligned} a_1 &\leq x_1 \leq b_1 \\ a_2(x_1) &\leq x_2 \leq b_2(x_1) \\ &\dots \\ a_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1}) &\leq x_M \leq b_M(x_1, x_2, \dots, x_{M-1}) \end{aligned} \quad (17)$$

Szukamy wartości całki wielokrotnej:

$$I(f) = \int \underbrace{\dots}_{\Omega} \int f(x_1, x_2, \dots, x_M) dx_1 \dots dx_M, \quad (18)$$

której wartości oblicza się poprzez M-krotne zastosowanie kwadratur jednowymiarowych, np.

$$I(f) = \int \int_{\Omega} f(x_1, x_2) dx_1 dx_2 = \sum_{n=0}^{N_1} \sum_{v=0}^{N_{2,n}} A_n B_{v,n} f(x_{1,n}, x_{2,v}) + R_{N_1}(g) + \sum_{n=0}^{N_{2,n}} A_n R_{N_{2,n}}(f_n), \quad (19)$$

gdzie $R_{N_1}(g)$ - reszta kwadratury $I_{N_1}(g)$, $R_{N_{2,n}}$ - reszta kwadratury $I_{N_{2,n}}(f_n)$.

2. Zadanie do wykonania

2.1. Opis problemu

Celem zadania jest numeryczne wyznaczenie wartości całki:

$$V = \iint_{-\infty}^{\infty} d^2 \vec{r}_1 d^2 \vec{r}_2 \frac{\rho_1(\vec{r}_1) \rho_2(\vec{r}_2)}{r_{12}}, \quad (20)$$

gdzie

$$\rho_1(\vec{r}_1) = \exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{R}_{10})^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{((x_1 - X_{10})^2 + (y_1 - Y_{10})^2)}{2\sigma^2}\right), \quad (21)$$

$$\rho_2(\vec{r}_2) = \exp\left(-\frac{(\vec{r}_2 - \vec{R}_{20})^2}{2\sigma^2}\right) = \exp\left(-\frac{((x_2 - X_{20})^2 + (y_2 - Y_{20})^2)}{2\sigma^2}\right) \text{ oraz} \quad (22)$$

$$r_{12} = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2}, \quad (23)$$

wykorzystując kwadraturę Gaussa-Hermite'a. Funkcje gaussowskie są funkcjami wagowymi, a właściwą funkcją podcałkową jest wyraz $1/r_{12}$. Wyraz ten posiada osobliwość we wszystkich punktach dla których zachodzi $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$.

Dokładną wartość całki V można wyznaczyć analitycznie:

$$V_{dok} = (2\pi)^2 \sigma^4 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} \exp\left(-\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right). \quad (24)$$

Należy wyznaczyć wartość numeryczną całki dla liczby węzłów odpowiednio $n = 5, 10, 15, 20, 25, 30, 35$ oraz dla każdego n wartość x_{20} zmienia się w zakresie $[0.1, 6.0]$ z krokiem $\Delta x = 0.1$. Przyjąć ponadto $\sigma = 1/\sqrt{2}$.

Do obliczenia całki numerycznie zastosować złożenie 4 kwadratur jednowymiarowych:

$$V_{num} = \sum_{i=1}^n \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^n \sum_{l=1}^m \frac{w_i w_j w_k w_l}{\sqrt{(x_i - x_j + x_{20})^2 + (y_k - y_l)^2}}, \quad (25)$$

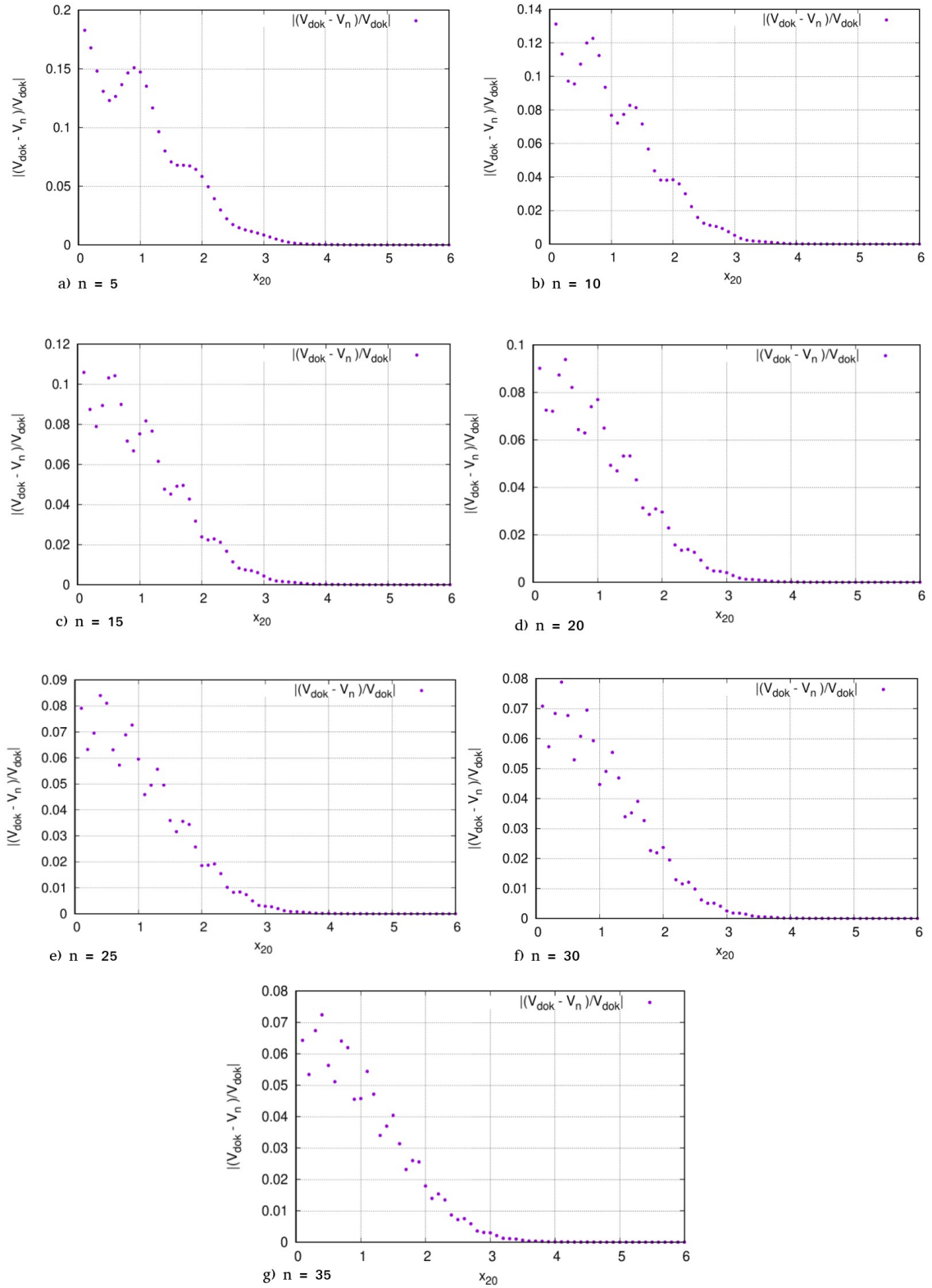
gdzie w_i, x_j, w_k, w_l są wagami, a x_i, x_j, y_k, y_l położeniami węzłów kwadratur.

Następnie dla każdej wartości n , x_{20} wyznaczyć błąd względny jako $\varepsilon = \left| \frac{V_{dok} - V_{num}}{V_{dok}} \right|$

i narysować wykresy wartości błędów ε w funkcji x_{20} dla każdej wartości n .

2.2. Wyniki

Dzięki programowi w języku C wykorzystującemu bibliotekę numeryczną Numerical Recipes, oraz przy pomocy skryptu Gnuplot wygenerowano:



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

3. Wnioski

Łatwo zauważyć dla każdego przypadku funkcja ta przypomina funkcję logarytmiczną, pomimo początkowych rozbieżności. Jak można był się spodziewać wraz z wzrostem liczby węzłów, funkcja ta przyjmuje wartości dokładniejsze w początkowych iteracjach x_{20} , co skutkuje minimalizacją błędu względnego, jednak finalnie dla każdego n błąd względny osiągnął pożądaną wartość w tym samym momencie. Już dla x_{20} w przybliżeniu większego niż 3.2 na rysunkach 1. a) - g) błąd ten przyjmuje wartość zerową, a więc wynik jest zgodny z wartością analityczną.

Obliczanie całek niewłaściwych wykorzystując kwadratury Gaussa-Hermite'a jest efektywne i łatwe do zaimplementowania, co więcej niezależnie od n dla każdego przypadku udało zminimalizować się błąd względny po odpowiedniemu zwiększeniu x_{20} .