Laboratorium 6

Całkowanie numeryczne cd.

Krzysztof Solecki

17 Kwietnia 2023

1 Treści zadań

1.1 Zadania

1. Obliczyć przybliżoną wartość całki:

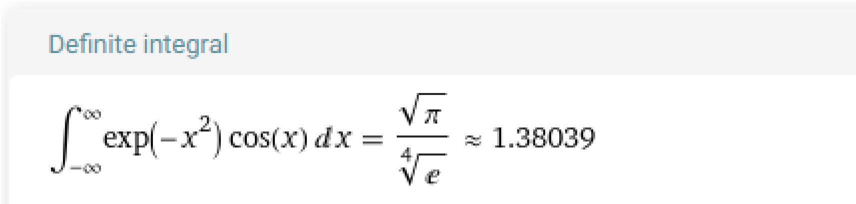
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} cos(x) dx$$

   (a) przy pomocy złożonych kwadratur (prostokątów, trapezów, Simpsona)
   (b) przy pomocy całkowania adaptacyjnego
   (c) przy pomocy kwadratury Gaussa-Hermite'a, obliczając wartości węzłów i wag

   Porównać wydajność dla zadanej dokładności.

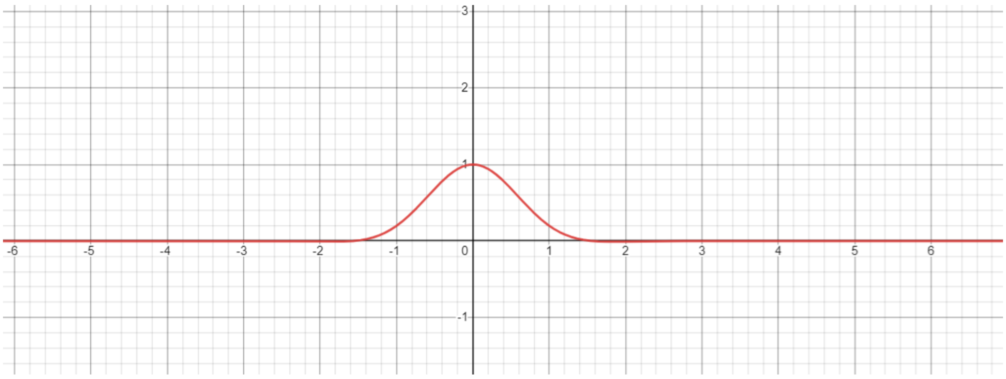
2 Rozwiązania zadań

Dokładna wartość całki wynosi:

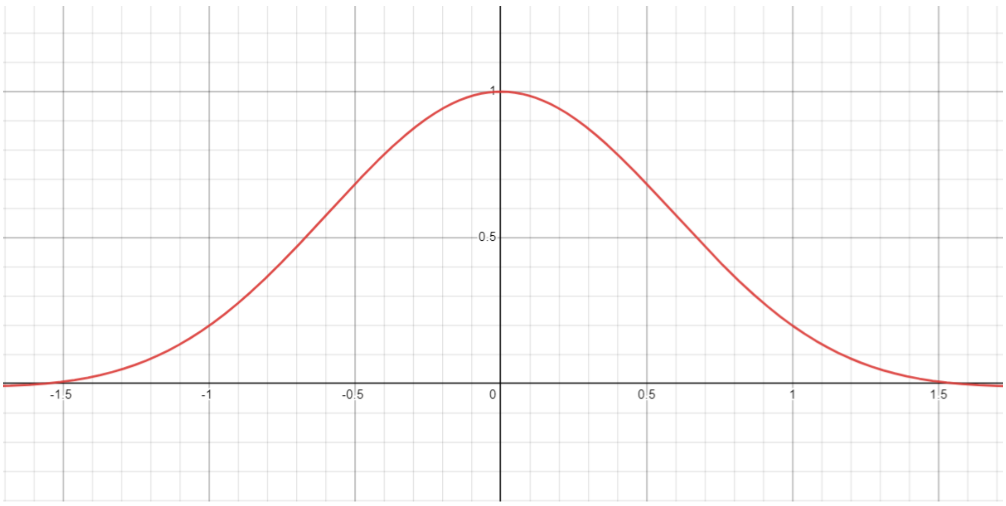


Rys. 1: Przybliżona wartość całki za pomocą programu Wolfram Alpha

Dokładniejszy wynik - z dokładnością do 17 miejsc po przecinku wynosi: 1.38038844704314297



Rys. 2: Wykres dla x: -6 do 6 - z użyciem programu Desmos



Rys. 3: Wykres dla x: -1.5 do 1.5 - z użyciem programu Desmos

Można zauważyć, że funkcja ta przyjmuje wartości wyraźnie większe od zera w przedziale od ok. -1.5 do 1.5.

2.1 Kwadratury złożone

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} cos(x)dx = 2\int_{0}^{\infty} e^{-x^2} cos(x)dx$$

Przyjąłem za ograniczenie górne b = 10^4 Ograniczenie dolne a = 0 liczba przedzialow tworzonych:

1. $n_0 = 10^6$
2. $n_1 = 5 \cdot 10^6$
3. $n_3 = 7,5 \cdot 10^6$
4. $n_4 = 10^7$

(a) Kwadratura złożona prostokątów

$$2\int_0^\infty e^{-x^2} cos(x)dx = \frac{2(b-a)}{n}\sum_{i=0}^{n-1} f\left(x_i + \frac{b-a}{2n}\right)$$

(b) Kwadratura złożona trapezów

$$2\int_0^\infty e^{-x^2} cos(x)dx = \frac{b-a}{n}\sum_{i=0}^{n-1}\left(f\left(x_i\right) + f\left(x_{i+1}\right)\right)$$

(c) Kwadratura złożona Simpsona

$$2\int_0^\infty e^{-x^2} cos(x)dx = \frac{2h}{3}\sum_{i=1}^{\frac{n}{2}}\left(f\left(x_{2i-2}\right) + 4f\left(x_{2i-1}\right) + f\left(x_{2i}\right)\right), h = \frac{b-a}{n}$$

Obliczenia powyższych kwadratur wykonałem przy pomocy poniższego programu w Pythonie:

```
import numpy as np
from math import cos, e, pi, sqrt, exp
import time

def f(x):
    return (e ** (-x ** 2)) * cos(x)


def rectangle(a, b, n):
    h = (b - a) / n
    args = np.linspace(a, b - h, n) + h / 2
    res = 2 * sum(map(lambda x: f(x) * h, args))
    ans = [res, abs(real_ans - res)]
    return ans


def trapeze(a, b, n):
    h = (b - a) / n
    args = np.linspace(a, b, n + 1)
```

```
    res = 2 * sum((h / 2) * (f(args[i]) + f(args[i - 1])) for i in range(1, n + 1))
    return [res, abs(real_ans - res)]


def simpson(a, b, n):
    if n % 2 != 0:
        n += 1 # aby suma ponizej sie zgadzala
    h = (b - a) / n
    args = np.linspace(a, b, n + 1)
    res = ((2 * h) / 3) * sum(f(args[2 * i - 2]) + 4 *
                              f(args[2 * i - 1]) + f(args[2 * i]) for i in range(1, (n //
                                  2) + 1))
    return [res, abs(real_ans - res)]


if __name__ == "__main__":
    a = 0
    b = 10000
    N = [10 ** 6, 5 * 10 ** 6, int(7.5 * 10 ** 6), 10 ** 7]
    for n in N:
        print("n=", n)
        real_ans = sqrt(pi) / exp(1 / 4)
        print("Metoda prostokatow ")
        rect_time_st = time.time()
        ans = rectangle(a, b, n)
        rect_time_end = time.time()
        print("wynik ", ans[0])
        print("blad bezwzgledny ", ans[1])
        print("czas dziaania ",rect_time_end-rect_time_st)
        print("Metoda trapezow ")
        trap_time_st = time.time()
        ans = trapeze(a, b, n)
        trap_time_end = time.time()
        print("wynik ", ans[0])
        print("blad bezwzgledny ", ans[1])
        print("czas dziaania ", trap_time_end - trap_time_st)
        print("Metoda Simpsona ")
        simpson_time_st = time.time()
        ans = simpson(a, b, n)
        simpson_time_end = time.time()
        print("wynik ", ans[0])
        print("blad bezwzgledny ", ans[1])
        print("czas dziaania ", simpson_time_end - simpson_time_st)
```

Otrzymano wyniki (odpowiednio dla metod prostokatów, trapezów, Simpsona):

```
n= 1000000
Metoda prostokatow
wynik  1.380388447043143
blad bezwzgledny  0.0
czas działania  2.953843116760254
Metoda trapezow
wynik  1.3803884470431436
```

```
blad bezwzgledny  6.661338147750939e-16
czas działania  2.6458895206451416
Metoda Simpsona
wynik  1.380388447043142
blad bezwzgledny  8.881784197001252e-16
czas działania  2.043142318725586
n= 5000000
Metoda prostokatow
wynik  1.3803884470431371
blad bezwzgledny  5.773159728050814e-15
czas działania  6.824414968490601
Metoda trapezow
wynik  1.3803884470431378
blad bezwzgledny  5.10702591327572e-15
czas działania  13.73323392868042
Metoda Simpsona
wynik  1.3803884470431382
blad bezwzgledny  4.6629367034256575e-15
czas działania  10.562037944793701
n= 7500000
Metoda prostokatow
wynik  1.380388447043143
blad bezwzgledny  0.0
czas działania  10.246145009994507
Metoda trapezow
wynik  1.3803884470431371
blad bezwzgledny  5.773159728050814e-15
czas działania  20.723728895187378
Metoda Simpsona
wynik  1.3803884470431385
blad bezwzgledny  4.440892098500626e-15
czas działania  16.364118576049805
n= 10000000
Metoda prostokatow
wynik  1.3803884470431373
blad bezwzgledny  5.551115123125783e-15
czas działania  13.688271522521973
Metoda trapezow
wynik  1.380388447043131
blad bezwzgledny  1.199040866595169e-14
czas działania  27.119884490966797
Metoda Simpsona
wynik  1.3803884470431418
blad bezwzgledny  1.1102230246251565e-15
czas działania  22.310924291610718
```

2.2 Całkowanie adaptacyjne

Wykorzystamy adaptacyjną kwadraturę Simpsona.

```
def simpson(f, a, b):
    h = b - a
    middle = (a + b) / 2
    return h * (f(a) + 4 * f(middle) + f(b)) / 6


def adaptive_quadrature(f, a, b, epsilon):
    mid = (a + b) / 2
    diff = abs(simpson(f, a, b) - simpson(f, a, mid) - simpson(f, mid, b))
    if diff < 15 * epsilon:
        return simpson(f, a, mid) + simpson(f, mid, b)
    return adaptive_quadrature(f, a, mid, epsilon / 2) + adaptive_quadrature(f, mid,
        b, epsilon / 2)
```

Funkcja "adaptive quadrature"oblicza przybliżoną wartość całki z funkcji f na przedziale [a, b] z dokładnością do epsilon używając adaptacyjnej metody Simpsona. Oto jak działa krok po kroku:

(a) Obliczamy środek przedziału mid jako średnią wartość a i b:

$$mid = \frac{a+b}{2}$$

(b) Obliczamy różnicę diff jako wartość bezwzględną z różnicy między kwadraturą Simpsona na całym przedziale [a, b] a sumą kwadratur Simpsona na dwóch podprzedziałach [a, mid] i [mid, b]: diff = |simpson(f, a, b)(simpson(f, a, mid)+simpson(f, mid, b))|

(c) Sprawdzamy, czy różnica diff jest mniejsza od 15 razy epsilon. Jeśli tak, to zwracamy sumę kwadratur Simpsona na podprzedziałach [a, mid] i [mid, b] jako przybliżoną wartość całki. Wybór wartości 15 w nierówności diff $< 15 \cdot$ epsilon pochodzi z analizy błędu metody adaptacyjnej kwadratury Simpsona. Wybranie tej wartości pozwala na uzyskanie odpowiedniej granicy błędu w przypadku adaptacyjnego całkowania.

(d) Jeśli różnica diff jest większa niż 15 razy epsilon, rekurencyjnie wywołujemy funkcję adaptivequadrature na dwóch podprzedziałach: [a, mid] i [mid, b], z połową tolerancji błędu ($\frac{\epsilon}{2}$), a następnie zwracamy sumę ich wyników jako przybliżoną wartość całki.

Dla tolerancji $\epsilon = 10^{12} oraz a = 1000 i b = 1000$ wynik całki wynosi $\approx 1.380388447043143$

Aby stworzyć wykres wykorzystując podane całkowanie adaptacyjne, wykorzystamy dodatkową poniższą funkcję:

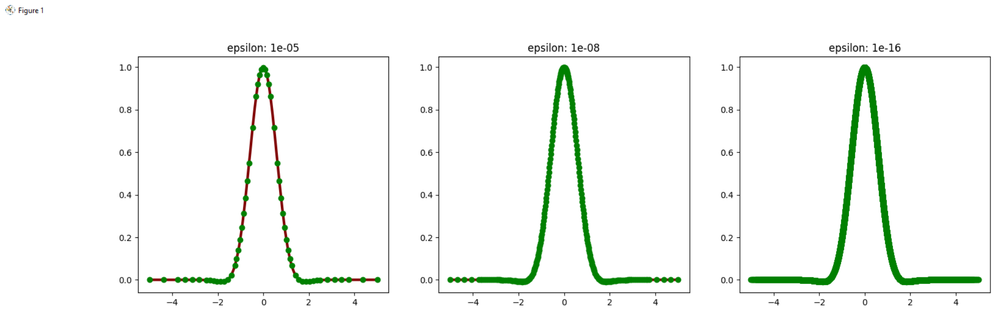
```
def adaptive_quadrature_points(f, a, b, epsilon, points):
    s_q = simpson
    mid = (a + b) / 2
    diff = abs(s_q(f, a, b) - s_q(f, a, mid) - s_q(f, mid, b))
    if diff < 15 * epsilon:
        points.update([a, mid, b])
        return s_q(f, a, mid) + s_q(f, mid, b)
    return adaptive_quadrature_points(f, a, mid, epsilon/ 2, points) +
        adaptive_quadrature_points(f,mid, b, epsilon / 2, points)
```

Kod generujący 3 wykresy wykorzystując całkowanie adaptacyjne z wyszczególnionymi punktami adaptacyjnymi:

```
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
from math import cos, e, pi, sqrt, exp
import time


def f(x):
    return np.exp(-x**2) * np.cos(x)


def simpson(f, a, b):
    h = b - a
    middle = (a + b) / 2
    return h * (f(a) + 4 * f(middle) + f(b)) / 6


def adaptive_quadrature(f, a, b, epsilon):
    mid = (a + b) / 2
    diff = abs(simpson(f, a, b) - simpson(f, a, mid) - simpson(f, mid, b))
    if diff < 15 * epsilon:
        return simpson(f, a, mid) + simpson(f, mid, b)
    return adaptive_quadrature(f, a, mid, epsilon / 2) + adaptive_quadrature(f, mid, b,
        epsilon / 2)


def adaptive_quadrature_points(f, a, b, epsilon, points):
    s_q = simpson
    mid = (a + b) / 2
    diff = abs(s_q(f, a, b) - s_q(f, a, mid) - s_q(f, mid, b))
    if diff < 15 * epsilon:
        points.update([a, mid, b])
        return s_q(f, a, mid) + s_q(f, mid, b)
    return adaptive_quadrature_points(f, a, mid, epsilon/ 2, points) +
        adaptive_quadrature_points(f,mid, b, epsilon / 2, points)


def plot_adaptive_points(f, a, b, epsilon, ax):
    points = set()
    adaptive_quadrature_points(f, a, b, epsilon, points)
    x_axis = np.linspace(a, b, 500)
    ax.plot(x_axis, f(x_axis), color='maroon',linewidth=3)
    points = np.array(list(points))
    ax.scatter(points, f(points), zorder=5, color="green")
    ax.set_title(f'epsilon: {epsilon}')


if __name__ == "__main__":
    a = -5
    b = 5
    _, ax = plt.subplots(1, 3, figsize=(18, 5))
```

```
plot_adaptive_points(f, a, b, 1e-5, ax[0])
plot_adaptive_points(f, a, b, 1e-8, ax[1])
plot_adaptive_points(f, a, b, 1e-16, ax[2])
plt.show()
```

Wynik działania programu:



Rys. 4: Wynik działania programu - użycie biblioteki Matplotlib

2.3 Kwadratura Gaussa-Hermita

$$2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} cos(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot f(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot cos(x_i)$$

Węzły $H_n(x)$ są to pierwiastki wielomianu stopnia n. Wagi natomiast możemy obliczyć wykorzystując wzór:

$$w_i = \frac{2^{n-1} \cdot n! \cdot \sqrt{\pi}}{n^2 \cdot [H_{n-1}(x_i)]^2}$$

- n - liczba węzłów,
- x_i - pierwiastki wielomianu Hermite'a stopnia n,
- H_n - wielomian Hermite'a stopnia n,

Aby obliczyć wagi i węzły, musimy wyznaczyć wielomiany Hermite'a:

$H_0(x) = 1$

$H_1(x) = 2$x

$H_n(x) = 2xH_n1(x)2(n1)H_n2(x)$

Następnie obliczamy H_2, H_3, H_4:

$H_2(x) = 4x^2 2$

$H_3(x) = 8x^3 12x$

$H_4(x) = 16x^4 48x^2 + 12$

Pierwiastki wielomianu H_4:

$x_1 = -\frac{\sqrt{3+\sqrt{6}}}{2} = -1.6507$

$x_2 = -\frac{\sqrt{-3+\sqrt{6}}}{2} = -0.5246$

$x_3 = \frac{\sqrt{-3+\sqrt{6}}}{2} = 0.5246$

$x_4 = \frac{\sqrt{3+\sqrt{6}}}{2} = 1.6507$

Obliczamy teraz wagi na podstawie powyższych pierwiastków wykorzystując wzór na wagi podany wcześniej:

$w_1 = 0.0813128354 = w4$

$w_2 = 0.8049140900 = w_3$

Liczymy całkę: $2\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} cos(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot f(x_i) = \sum_{i=1}^{n} w_i \cdot cos(x_i)$

0.0813128354 cos(1.6507)+ 0.8049140900 cos(0.5246) + 0.8049140900 cos(0.5246)+ 0.0813128354 cos(1.6507) = 1.3803649357

3 Wnioski:

Metoda prostokątów i metoda trapezów to podstawowe metody numerycznego całkowania, ale są one zwykle mniej dokładne niż bardziej zaawansowane metody, takie jak metoda Simpsona czy metoda całkowania adaptacyjnego. Metoda Gaussa-Hermita jest bardziej zaawansowaną metodą numerycznego całkowania, która jest używana w szczególnych przypadkach całkowania funkcji Gaussowskich.

Podsumowując, metoda całkowania adaptacyjnego i metoda Gaussa-Hermita są zwykle bardziej dokładne niż metody prostokątów, trapezów i Simpsona. Metoda prostokątów jest najprostszą z tych metod, ale może być niedokładna dla funkcji o gwałtownych zmianach. Metoda trapezów jest bardziej dokładna niż metoda prostokątów, ale nadal może być niedokładna dla funkcji o gwałtownych zmianach.

4 Bibliografia

1. Katarzyna Rycerz: Materiały wykładowe z przedmiotu Metody Obliczeniowe w Nauce i Technice

2. https://www.wolframalpha.com/

3. https://www.desmos.com/calculator?lang=pl

4. https://en.wikipedia.org/wiki/Numerical_integration