Sprawozdanie - Laboratorium 13
Szacowanie całek niewłaściwych przy użyciu kwadratur Gaussa

Marta Dychała

11 czerwca 2021

1 Wstęp teoretyczny

Jednym z rodzajów metod całkowania numerycznego są kwadratury Gaussa, które w ogólności polegają na przybliżeniu wartości całki za pomocą sumy:

$$\int_a^b p(x)f(x)dx \approx \sum_{i=1}^{n} A_k f(x_k) \tag{1}$$

gdzie x_k to współrzędne węzłów kwadratury, zaś A_k to współczynniki kwadratury określone wzorem:

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

Funkcja podcałkowa w przypadku kwadratury Gaussa składa się z dwóch części, gdzie jedną z nich jest tzw. funkcja wagowa $p(x)$, charakterystyczna dla rodzaju kwadratury Gaussa. Do całkowania numerycznego tą metodą wykorzystuje się $N+1$ węzłów, a szukanymi są takie położenia położenia węzłów x_k oraz współczynniki A_k, aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Do wyznaczenia kwadratur Gaussa używa się wielomianów ortogonalnych, czyli takiego ciągu wielomianów:

$$\{\varphi_n(x)\} = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), ...\varphi_n(x)\}$$

dla którego w przedziale [a,b] zachodzi związek:

$$(\varphi_r, \varphi_s) = \int_a^b p(x)\varphi_r(x)\varphi_s(x)dx = 0$$

W zależności od postaci funkcji wagowej $p(x)$ wyróżniamy różne rodzaje kwadratur Gaussa, m.in:

- **kwadraturę Gaussa-Legendre'a** - przyjmującą za funkcję wagową $p(x) = 1$. Stosowana jest do całek oznaczonych o przedziale całkowania $[a, b]$, gdzie $a, b \in \mathbb{R}$. Wielomiany Legendre'a są postaci:

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

- **kwadraturę Gaussa-Hermite'a** - przyjmującą za funkcję wagową $p(x) = \exp(-x^2)$. Stosowana jest do całek oznaczonych o przedziale całkowania $(-\infty, \infty)$. Wielomiany Hermite'a są postaci:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2}\frac{d^n}{dx^n}e^{-x^2}. \tag{3}$$

- **kwadraturę Gaussa-Laguerre'a** - przyjmującą za funkcję wagową $p(x) = \exp(-x)$. Stosowana jest do całek oznaczonych o przedziale całkowania $[0, \infty)$. Wielomiany Laguerre'a są postaci:

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n}\left(e^{-x}x^n\right). \tag{4}$$

2 Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

Celem zajęć laboratoryjnych było obliczenie wartości całek niewłaściwych wykorzystując w tym celu kwadratury Gaussa wymienione we wstępie teoretycznym. Do realizacji zadania wykorzystano bibliotekę Numerical Recipes napisaną w języku C, w którym także powstał program. Pliki pochodzące z tej biblioteki, które załączono do projektu, to:

- *nrutil.h*, *nrutil.c* - podstawowe funkcjonalności biblioteki takie jak tablica `vector` indeksowana od 1
- *gauleg.c* - do obliczenia kwadratury Gaussa-Legendre'a,
- *gauher.c* - do wyznaczenia kwadratury Gaussa-Hermite'a,
- *gammln.c* oraz *gaulag.c* - do wyznaczenia kwadratury Gaussa-Laguerre'a.

Następnie w celu zobrazowania jaki wpływ na wynik ma liczba węzłów, dla każdej z funkcji należało określić funkcję błędu w zależności od liczby węzłów ($f(n)$), czyli moduł z różnicy między obliczoną numerycznie wartością całki dla danej liczby węzłów (c_i) a jej wartością analityczną ($c_{i,a}$):

$$f(n) = |c_i - c_{i,a}| \tag{5}$$

Na początku rozważono całkę postaci:

$$c_1 = \int_1^2 \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} dx \tag{6}$$

Do jej obliczenia wykorzystano metodę Gaussa-Legendre'a, w celu której zaimplementowania wykorzystano procedurę `gauleg(float x1,float x2, float x[],float w[],int n)` pochodzącą z pliku gauleg.c. Funkcja wagowa dla tej metody ma postać $p(x) = 1$, z tego powodu nie była konieczna zmiana postaci funkcji podcałkowej, którą określa wzór:

$$g_1(x) = \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} \tag{7}$$

Obliczenia wykonano dla parametru $n = 2, 3, ..., 100$. Wartością dokładną tej całki jest $c_{1,a} = \frac{\pi}{3}$.

Kolejna całka była wyrażona wzorem:

$$c_2 = \int_0^\infty \ln(x) \exp(-x^2) dx \tag{8}$$

Należało ją obliczyć na dwa sposoby:

- Pierwszym z nich było wykorzystanie kwadratury Gaussa-Hermite'a. Ponieważ funkcja wagowa dla tej metody wynosi $p(x) = e^{-x^2}$, a przedział całkowania to $(-\infty, \infty)$, do dalszych obliczeń funkcję podcałkową należało przekształcić do postaci:

  $$g_2(x) = \frac{1}{2} \ln(|x|) \tag{9}$$

  Tak przygotowaną funkcję można było wykorzystać w procedurze `gauher(float x[],float w[],int n)` pochodzącej z pliku gauher.c. Obliczenia wykonano dla parzystej liczby węzłów $n = 2, 4, 6, ..., 100$.

- Drugim sposobem było wykorzystanie kwadratury Gaussa-Legendre'a z tą różnicą, że przedział całkowania ograniczono do $x \in [0, 5]$. Całkowanie przeprowadzono analogicznie jak w przypadku pierwszej całki, wykorzystując procedurę `gauleg()`, dla liczby węzłów $n = 2, 3, 4, ..., 100$.

Wartość dokładna całki (8) to $c_{2,a} = -0.8700577$.

Ostatnia całka była postaci:

$$c_3 = \int_0^{\infty} \sin(2x) e^{3x} dx \tag{10}$$

Do jej obliczenia wykorzystano procedurę `gaulag(float x[],float w[],int n, float alfa)` z pliku gaulag.c. Ponieważ funkcja wagowa dla tej kwadratury ma postać $p(x) = e^{-x}$, to funkcja wykorzystana w procedurze jest postaci:

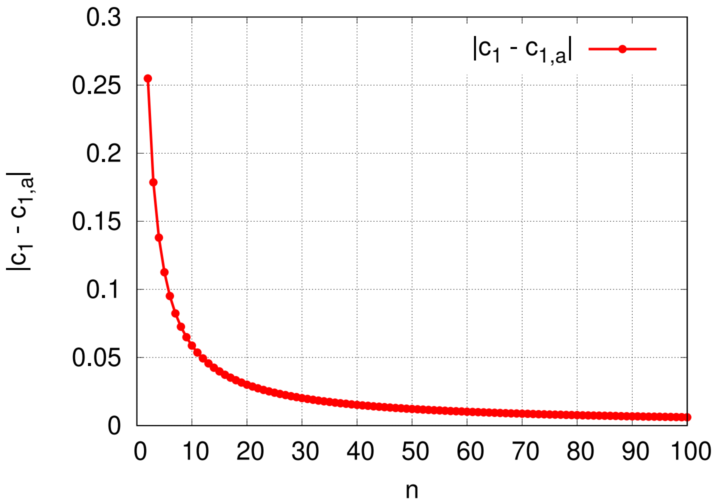
$$g_3(x) = \sin(3x) e^{-2x} \tag{11}$$

Obliczenia dla tej całki zostały wykonane dla $n = 2, 3, 4, ..., 20$. Jej dokładna wartość wynosi zaś $c_{3,a} = \frac{2}{13}$.

Do pliku tekstowego dla każdej z całek zapisano wartości parametru n oraz funkcji błędu w zależności od liczby węzłów.

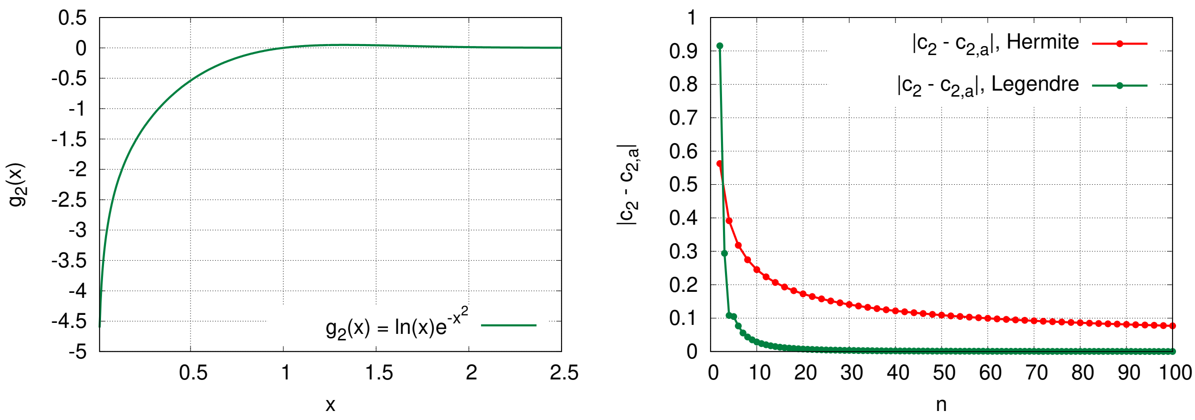
2.2 Wyniki

Poniżej znajdują się uzyskane funkcje błędu $f(n)$ od liczby węzłów n (wzór (5)) dla każdej z całek. Wszystkie wykresy wygenerowano w programie Gnuplot.



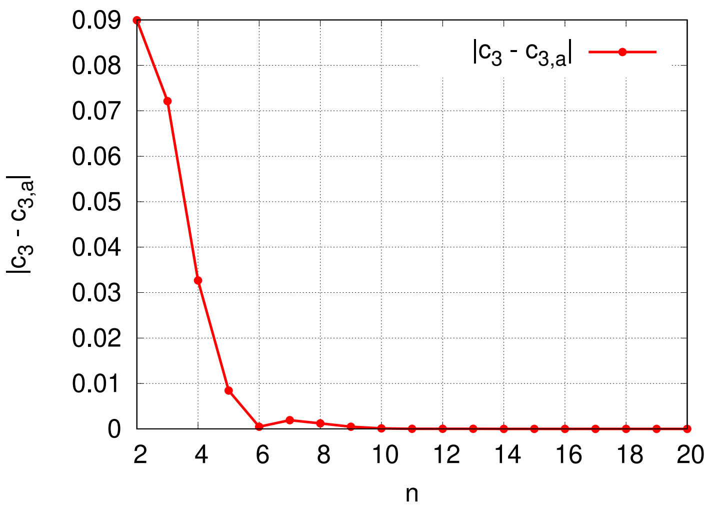
Rysunek 1: Wynik całkowania funkcji $g_1(x) = \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}}$ w przedziale $[1, 2]$ za pomocą metody Gaussa-Legendre'a

Wraz ze wzrostem liczby węzłów wartość błędu sukcesywnie maleje, przy czym można zaobserwować, że funkcja błędu tworzy pewną funkcję wykładniczą - wraz ze wzrostem parametru n spadek wartości błędu przybliżenia jest coraz mniej zauważalny. Dla wyższych wartości n wartości funkcji błędu znajdują się w pobliżu zera (dla przypadku $n = 100$ $f(n) = 0.00612712$), co świadczy o fakcie, że wraz ze wzrostem liczby parametrów maleje błąd przybliżenia.



Rysunek 2: Po lewej: wykres funkcji $g_2(x) = \ln(x)\exp(-x^2)$, po prawej: porównanie wyników całkowania funkcji g_2 w przedziale $[0, \infty]$ za pomocą metody Gaussa-Hermite'a oraz Gaussa-Legendre'a

W drugim przypadku porównano ze sobą dwie metody - kwadraturę Gaussa-Hermite'a oraz kwadraturę Gaussa-Legendre'a. Obserwując powyższe wykresy można dojść do wniosku, iż zawężenie przedziału całkowania do $[0, 5]$ dla kwadratury Gaussa-Legendre'a zadziałało skutecznie, bowiem wartości funkcji $g_2(x)$ w przedziale $x \in [1, \infty)$ znajdują się bardzo blisko zera, przez co aby wyznaczyć wartość całki z dużą dokładnością, nie jest potrzebne rozważanie całego przedziału $[0; \infty)$. Własność ta sprawia, że metoda Gaussa-Hermite'a poradziła sobie dużo gorzej niż metoda Gaussa-Legendre'a, bowiem z związku ze swoją specyfiką okazała się być bardziej podatna na drobne odchylenia wartości.



Rysunek 3: Wynik całkowania funkcji $g_3 = \sin(2x)\exp(-3x)$ za pomocą metody Gaussa-Laguerre'a

Metoda Gaussa-Laguerre'a okazuje się być bardzo skuteczną metodą dla tej konkretnej całki pomimo chwilowego wzrostu błędu - błąd przybliżenia wartości całki udało się zredukować już za pomocą niewielkiej liczby węzłów wynoszącej zaledwie $n = 16$. Jest to bardzo mała wartość w porównaniu do poprzednich metod.

3 Wnioski

Kwadratury Gaussa potrafią skutecznie wyznaczyć przybliżenie całek oznaczonych, pod warunkiem, że zostaną odpowiednio dopasowane do funkcji podcałkowej. Dla funkcji podcałkowych g_1 oraz g_3 dopasowane do nich metody okazały się wyjątkowo skuteczne, a przy g_3 zastosowanie metody Gaussa-Laguerre'a sprawiło wręcz, że wynik pokrywał się z analitycznym z dokładnością do 6 miejsc po przecinku. Nie zawsze jednak przy dobieraniu metody należy sugerować się przedziałem całkowania funkcji podcałkowej, jeśli przykładowo jej wartości od pewnego punktu oscylują w pobliżu zera - w przypadku funkcji $g_2(x)$ wystarczyło jedynie rozważyć przedział $[0, 5]$ a za razem wykorzystać metodę Gaussa-Legendre'a, ponieważ wartości funkcji g_2 w dalszych przedziałach są pomijalnie małe.

Dla każdej z omawianych metod prawdziwe jest stwierdzenie, że wraz z zastosowaniem większej liczby węzłów, zwiększa się dokładność wyznaczonej całki, choć dla metody Gaussa-Laguerre'a można było zaobserwować chwilowy wzrost wartości funkcji błędu. Krzywe rysowane przez metody Gaussa-Legendre'a oraz Gaussa-Hermite'a zdają się mieć kształt krzywej wykładniczej, co oznacza, że przy zwiększaniu liczby węzłów coraz trudniej jest dostrzec różnicę w wartości funkcji błędu.