



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

Metody Numeryczne Laboratoria

Sprawozdanie nr 13

Szacowanie całek niewłaściwych przy użyciu kwadratur Gaussa

Łukasz Wajda, 01.06.2021 r.

1. Wstęp teoretyczny

Kwadratura

Kwadraturą nazywa się funkcjonał liniowy:

$$S(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i), \quad (1)$$

gdzie:

x_1, x_2, \dots, x_n – węzły kwadratury,
 A_i – współczynniki kwadratury,

który oznacza skończoną sumę. Za pomocą kwadratur oblicza się numerycznie przybliżoną wartość całek oznaczonych:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \sum_{i=0}^n A_i f(x_i). \quad (2)$$

Kwadraturę opartą na węzłach o łącznej krotności $n + 1$ nazywa się kwadraturą interpolacyjną.

Kwadratury Gaussa

Rozpatruje się kwadratury typu:

$$S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k), \quad (3)$$

w których współczynniki z wagą $p(x)$ wynoszą:

$$A_k = \int_a^b p(x) \Phi_k(x) dx. \quad (4)$$

Ustalono funkcję wagową $p(x)$ oraz liczbą węzłów ($N + 1$), szukając położenia węzłów oraz współczynników A_k , tak aby rząd kwadratury był jak najwyższy. Kwadratura tego typu nosi nazwę kwadratury Gaussa.

Do wyznaczenia kwadratur Gaussa używa się wielomianów ortogonalnych. Ciąg wielomianów:

$$\{\varphi_n(x)\} = \{\varphi_0(x), \varphi_1(x), \dots, \varphi_N(x)\}, \quad (5)$$

nazywa się ortogonalnymi w przedziale $[a, b]$ jeśli zachodzi pomiędzy nimi związek:

$$(\varphi_r, \varphi_s) = \int_a^b p(x) \varphi_r(x) \varphi_s(x) dx = 0, \quad r \neq s \quad (6)$$

Najważniejsze twierdzenia dotyczące kwadratur Gaussa i wielomianów ortogonalnych:

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

Wysoki rząd spowodowany jest koniecznością ustalenia położenia $N + 1$ węzłów oraz współczynników kombinacji liniowej $N + 1$ wielomianów. Daje to $2n+2$ parametrów swobodnych co określa rząd metody.

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

Tożsamość Christoffela-Darboux:

$$\sum_{k=0}^n \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(y)}{\gamma_k} = \frac{\varphi_{n+1}(x)\varphi_{n+1}(y) - \varphi_n(x)\varphi_n(y)}{\alpha_n \gamma_n (x-y)}, \quad (7)$$

gdzie:

$$\alpha_k = \frac{\beta_{k+1}}{\beta_k}, \quad (8)$$

$$\gamma_k = \int_a^b p(x) \varphi_k^2(x) dx, \quad (9)$$

gdzie β_k jest współczynnikiem stojącym w wielomianie φ_k przy zmiennej w najwyższej potęgze.

Podstawia się za y zero wielomianu n -tego stopnia

$$y = d_j, \quad (10)$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} \frac{\varphi_k(x)\varphi_k(d_j)}{\gamma_k} = - \frac{\varphi_n(x)\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n (x-d_j)}, \quad \int dx p(x) \varphi_0(x) \cdot/. \quad (11)$$

Po wykonaniu mnożenia a następnie całkowania otrzymuje się:

$$\frac{\varphi_0(d_j)}{\gamma_0} \gamma_0 = - \frac{\varphi_{n+1}(d_j)}{\alpha_n \gamma_n} \int_a^b p(x) \frac{\varphi_0(x)\varphi_n(x)}{(x-d_j)} dx, \quad (12)$$

Korzystając z definicji wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a:

$$f(x) = \sum_{j=0}^n f(x_j) l_j(x), \quad (13)$$

$$l_j(x) = \frac{\omega_n(x)}{(x - \alpha_j) \omega_n'(\alpha_j)} \quad (14)$$

Wybiera się przypadek, taki że:

$$\omega_n(x) = \varphi_n(x) \quad (15)$$

oraz korzysta się z faktu:

$$\varphi_0(x) = 1 \quad (16)$$

Otrzymuje się współczynniki A_k postaci:

$$A_k = - \frac{2}{(N+2)P_{N+2}x_k P_{N+1}'x_k} \quad (17)$$

Kwadratury Gaussa-Laguerre'a

Kwadratura Gaussa- Laguerre'a dotyczy całkowania

- na przedziale $[a, b] = [0, \infty]$
- z funkcją wagową $p(x) = e^{-x}$.

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Laguerre'a:

$$L_n(x) = (-1)^n e^x \frac{d^n}{dx^n} (x^n e^{-x}) \quad (18)$$

Relacja rekurencyjna dla stowarzyszonych wielomianów Laguerre'a.

Funkcja wagowa ma postać:

$$p(x) = x^\alpha e^{-x} \quad (19)$$

Współczynniki kwadratury określa wzór:

$$A_k = \frac{((N+1)!)^2}{L'_{N+1}(x_k)L_{N+2}(x_k)} \quad (20)$$

A kwadratura ma postać:

$$\int_0^\infty e^{-x} f(x) dx \approx S(f) = \sum_{k=0}^N A_k f(x_k), \quad (21)$$

gdzie węzły x_k są zerami wielomianu $L_{N+1}(x)$.

Kwadratury Gaussa-Hermite'a

Kwadratura Gaussa- Hermite'a dotyczy całkowania

- na przedziale $[a, b] = [-\infty, \infty]$
- z funkcją wagową $p(x) = e^{-x^2}$.

Ciąg wielomianów ortogonalnych stanowią wielomiany Hermite'a:

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \frac{d^n}{dx^n} e^{-x^2}, \quad (22)$$

dla których obowiązuje relacja rekurencyjna:

$$H_{n+1} = 2xH_n - 2nH_{n-1}. \quad (23)$$

2. Zadanie do wykonania

2.1 Opis problemu

1) Obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Legendre'a wartość całki:

$$c_1 = \int_1^2 \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}} dx \quad (24)$$

Wartość dokładna całki: $c_{1,a} = \pi/3$.

Wykonać wykres $|c_1 - c_{1,a}| = f(n)$, dla liczby węzłów $n = 2, 3, \dots, 100$.

2) Obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Hermite'a wartość całki:

$$c_2 = \int_0^\infty \ln(x) \exp(-x^2) dx \quad (25)$$

a) Stosując kwadraturę Gaussa-Hermite'a dla: $n = 2, 4, 6, 8, \dots, 100$.

b) Stosując kwadraturę Gaussa-Legendre's dla: $n = 2, 3, 4, 5, \dots, 100$ oraz $x \in [0, 5]$.

Wartość dokładna całki $c_{2,a} = -0.8700577$.

Dla podpunktów (a) i (b) wykonać wykres $|c_2 - c_{2,a}| = f(n)$.

3) Obliczyć numerycznie przy użyciu kwadratury Gaussa-Laguerre'a wartość całki:

$$c_3 = \int_0^\infty \sin(2x) e^{-3x} dx \quad (26)$$

Wartość dokładna całki: $c_{3,a} = 2/13$.

Wykonać wykres $|c_3 - c_{3,a}| = f(n)$, dla liczby węzłów $n = 2, 3, \dots, 10$.

2.2 Wyniki

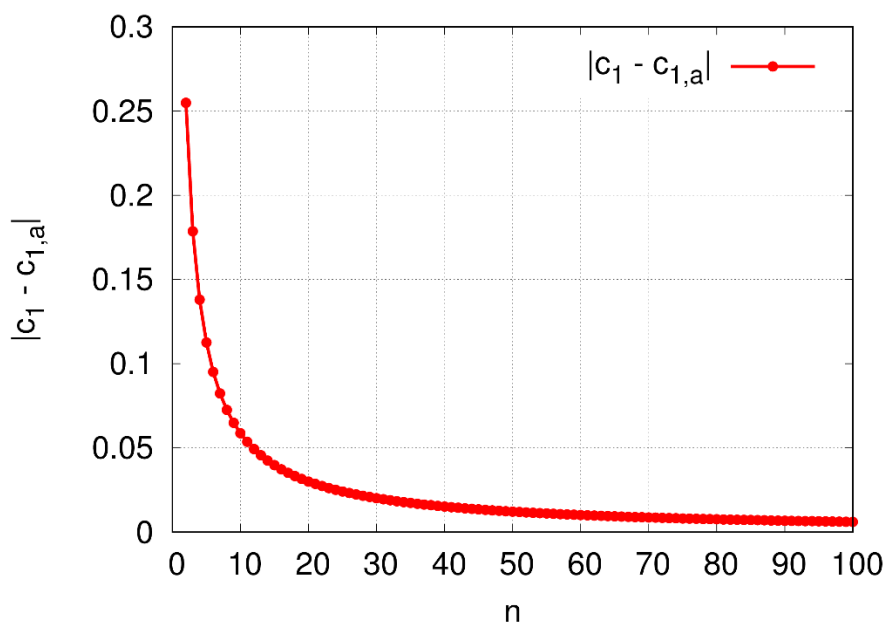
Napisany program rozwiązujący powyższe problemy korzysta z dodatkowej biblioteki numerycznej *Numerical Recipes*.

Do obliczenia

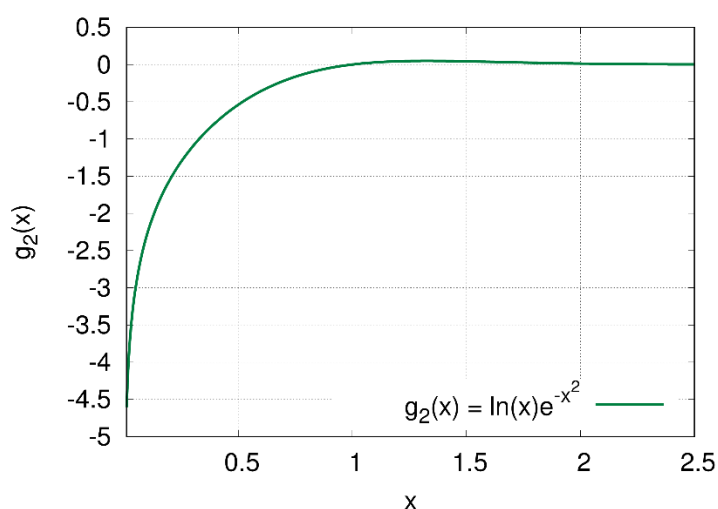
- współrzędnych węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Legendre'a wykorzystano procedurę *gauleg*
- współrzędnych węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Hermite'a : *gauher*
- współrzędnych węzłów i współczynników kwadratury Gaussa-Laguerre'a : *gaulag*

Otrzymane wyniki obliczeń zapisane zostały w plikach *.dat:

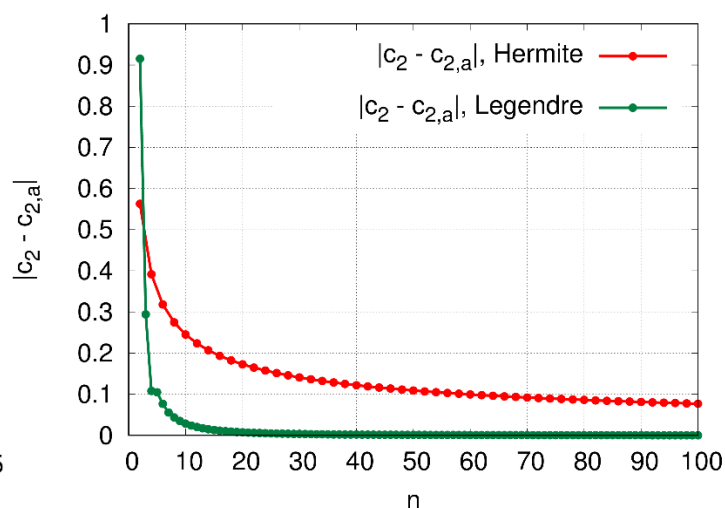
Następnie na podstawie tych danych za pomocą skryptu Gnuplot'a wygenerowano poniższe wykresy:



Rysunek 1. Wyniki całkowania funkcji $g_1(x) = \frac{1}{x\sqrt{x^2-1}}$ w przedziale $[1, 2]$: błąd bezwzględny całkowania $|c_1 - c_{1,a}|$, gdzie $c_{1,a} = \frac{\pi}{3}$ jest rozwiązaniem analitycznym.

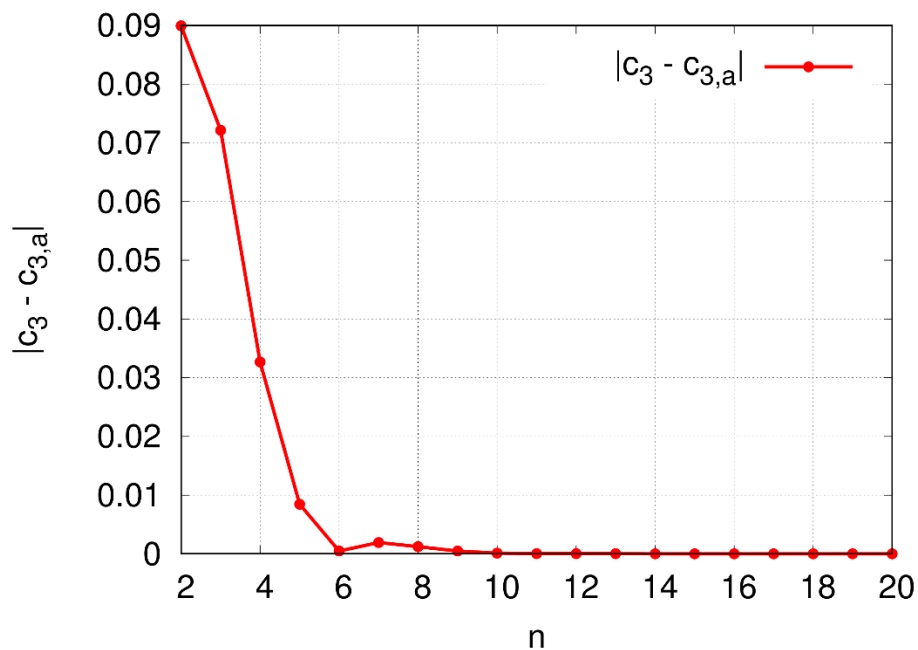


(a) Wykres funkcji $g_2(x)$



(b) błąd bezwzględny całkowania $|c_2 - c_{2,a}|$, gdzie $c_{2,a} = -0.0577$ jest rozwiązaniem analitycznym.

Rysunek 2. Wyniki całkowania funkcji $g_2(x) = \ln(x) \exp(-x^2)$ w przedziale $[0, \infty]$:



Rysunek 3. Wyniki całkowania funkcji $g_3(x) = \sin(2x)e^{-3x}$ w przedziale $[0, \infty]$: błąd bezwzględny całkowania $|c_3 - c_{3,a}|$, gdzie $c_{3,a} = \frac{2}{13}$ jest rozwiązaniem analitycznym.

3. Wnioski

Wykresy pokazują, że całkowanie kwadraturami Gaussa są skuteczne i każdą metodą udało się uzyskać błąd bezwzględny równy zero lub bliski zera.

Najlepszymi metodami do całkowania wybranych całek okazały się te wykorzystujące kwadratury:

- Legendre'a, gdzie błąd bezwzględny całkowania był równy zero dla $n = 20$
- Laguerre'a, gdzie błąd bezwzględny całkowania był równy stałemu zero już dla $n = 10$.

Źródła:

- Dr hab inż. Tomasz Chwiej – Notatki do wykładu „Całkowanie numeryczne przy użyciu kwadratur”. Dostępne w Internecie: http://galaxy.agh.edu.pl/~chwiej/mn/calowanie_1819.pdf