

Pracownia z analizy numerycznej

Sprawozdanie do zadania **P2.19**

Prowadzący: dr hab. prof. Paweł Woźny

Martyna Firgolska, Michał Dymowski

Wrocław, 19 stycznia 2020

Wstęp

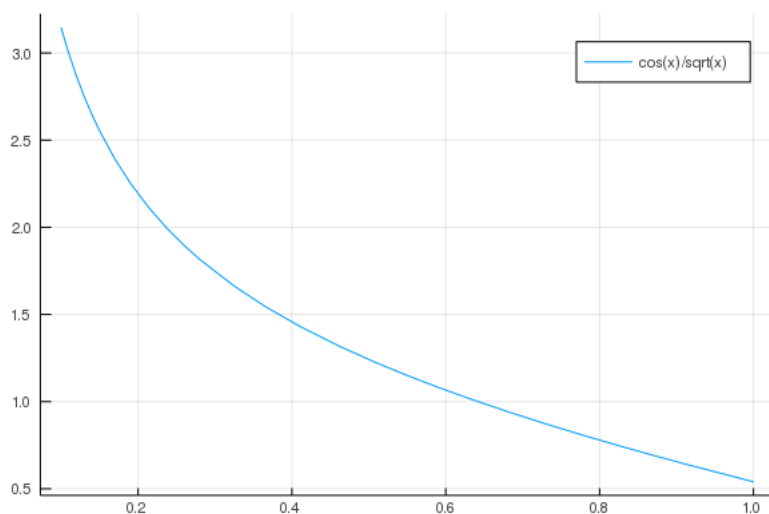
Liczenie wartości całki oznaczonej jest istotnym zagadnieniem matematycznym wykorzystywanym w fizyce i innych naukach ścisłych. Dla niektórych funkcji f jesteśmy w stanie łatwo znaleźć funkcję pierwotną F czyli taką, że $F' = f$. Jeśli umiemy w łatwy sposób obliczyć wartość F w danym punkcie to możemy obliczyć wartość całki oznaczonej: $\int_a^b f(x)dx = F(b) - F(a)$. Niestety dla niektórych funkcji f znalezienie F i jej wartości dla danych punktów nie jest łatwe. Z tego powodu chcielibyśmy w jakiś sposób przybliżać wartości całek oznaczonych obliczając wartości znanej nam funkcji f . Metody numeryczne, które obliczają te przybliżone wartości nazywamy kwadraturami. Poniższe sprawozdanie dotyczy porównania dokładności różnych kwadratur dla niżej opisanych funkcji.

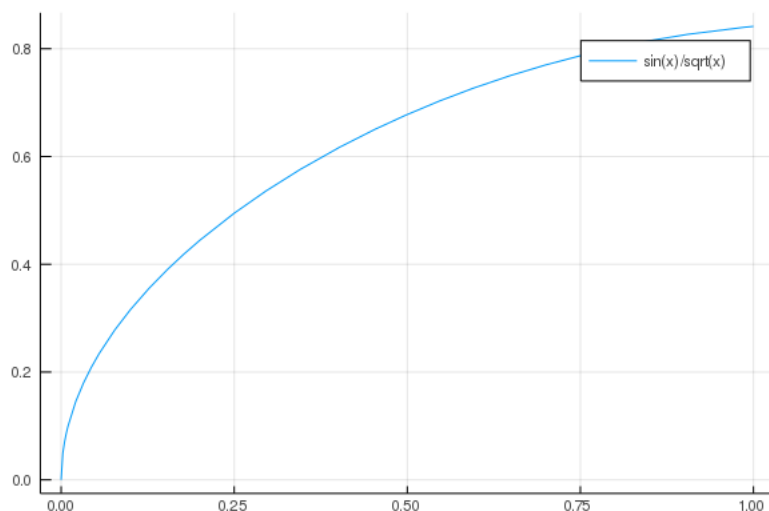
Badane funkcje

W tym sprawozdaniu zbadamy skuteczność różnych metod numerycznych w obliczaniu przybliżonych wartości całek dla funkcji $C = \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}}$ i $S = \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}}$ na przedziale $[0, 1]$. Całkowane funkcje nie są zdefiniowane w 0, na potrzeby obliczeń przyjmujemy, że wartości tych funkcji w 0 są równe 0.

$$I_C = \int_0^1 \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} dx \approx 1.8090484758005441629... \quad (1)$$

$$I_S = \int_0^1 \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} dx \approx 0.6205366034467622036... \quad (2)$$





Przyjrzyjmy się wykresom badanych funkcji na podanym przedziale. Zauważamy, że C w zerze rozbiega do nieskończoności, a S w zerze zbiega do 0. Rzeczywiście obliczenie granic daje wyniki zgodne z wykresami funkcji:

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(x)}{\sqrt{x}} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\cos(0)}{\sqrt{x}} = +\infty \quad (3)$$

$$\lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{\sqrt{x}} = \lim_{x \rightarrow 0} \frac{\sin(x)}{x} \sqrt{x} = 0 \quad (4)$$

Na podstawie tej informacji możemy przypuszczać, że obliczenie całki I_S będzie łatwiejsze niż obliczenie I_C , ponieważ S jest ograniczona, a jej wartość w 0 zgadza się z jej granicą w tym punkcie. C jest nieograniczona i w zerze przyjmuje 0, ale jej granica w tym punkcie wynosi $+\infty$ zatem obliczenie całki w okolicy 0 może być niedokładne.

Możemy zmienić postać całek I_C i I_S za pomocą podstawienia $x = t^2$ Wtedy:

$$I_C = \int_0^1 \frac{\cos(t^2)}{\sqrt{t^2}} 2t dt = \int_0^1 2\cos(t^2) \quad (5)$$

$$I_S = \int_0^1 \frac{\sin(t^2)}{\sqrt{t^2}} 2t dt = \int_0^1 2\sin(t^2) \quad (6)$$

Otrzymujemy w ten sposób nowe funkcje pod całką $S_{new}(x) = 2\sin(x^2)$ i $C_{new}(x) = 2\cos(x^2)$. Nowe funkcje mają określone wartości dla wszystkich punktach z przedziału $[0, 1]$ i obie funkcje są ograniczone, więc nie mamy takiego problemu jak przy funkcji C .

Całki Fresnela

Badane całki to całki Fresnela - używane w fizyce do badania zjawiska dyfrakcji Fresnela. Całki Fresnela można zapisać jako szeregi:

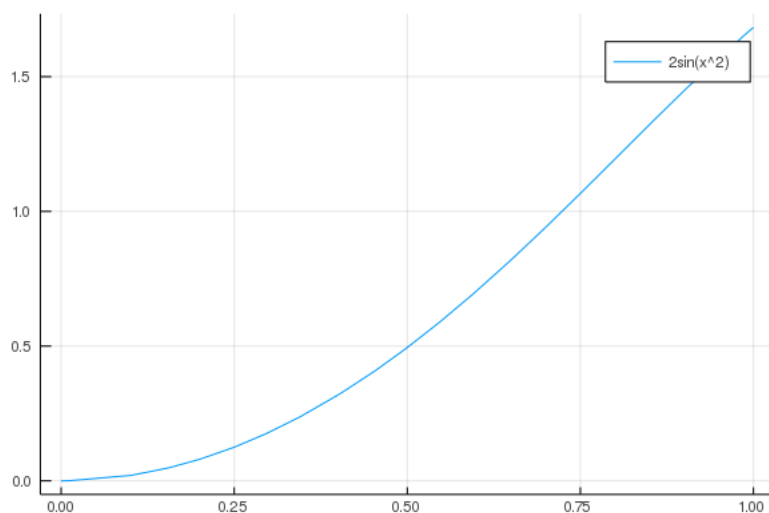
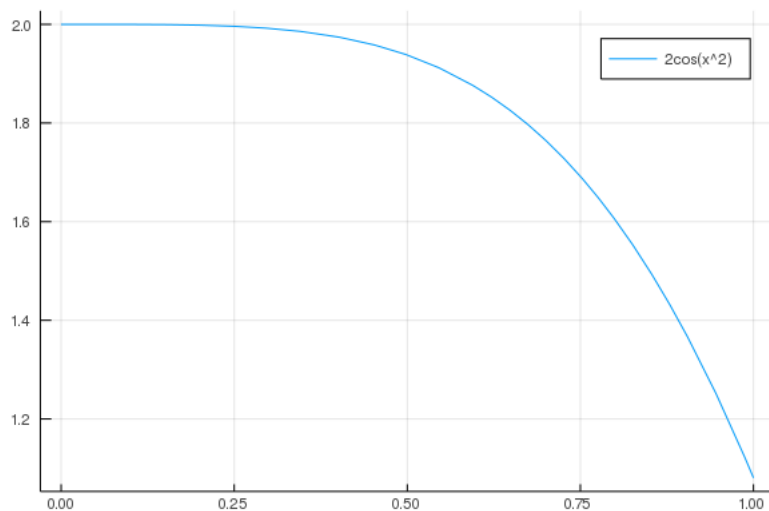
$$\int_0^x \sin(t^2) dt = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{4n+3}}{(2n+1)!(4n+3)} \quad (7)$$

$$\int_0^x \cos(t^2) dt = \sum_{n=0}^{\infty} (-1)^n \frac{x^{4n+1}}{(2n)!(4n+1)} \quad (8)$$

Metoda trapezów (A)

Metoda trapezów jest kwadraturą wyrażoną wzorem:

$$\int_a^b f(x) dx \approx \frac{1}{2}(b-a)(f(a) + f(b)) \quad (9)$$



Rozumowanie użyte w tej metodzie jest następujące: skoro nie potrafimy łatwo obliczyć całki funkcji $f(x)$ to zastąpmy ją podobną funkcją, którą potrafimy zcałkować - wielomianem. Stosujemy więc interpolację (np. korzystając z wzoru Lagrange'a) i liczymy całkę z obliczonego wielomianu interpolacyjnego.

$$w(x) = \sum_{i=0}^n f(x_i) l_i(x) \quad (10)$$

gdzie

$$l_i(x) = \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} \quad (11)$$

$$\int_a^b f(x) dx \approx \int_a^b w(x) dx = \sum_{i=0}^n f(x_i) \int_a^b l_i(x) \quad (12)$$

Jeśli węzłami interpolacji będą punkty postaci $x_i = a + \frac{b-a}{n} i$ to powyższy wzór nazywamy wzorem Newtona-Cotesa. Dla $n = 1$ czyli interpolując f w 2 punktach: $x_0 = a$ i $x_1 = b$ otrzymujemy wyżej wspomniany wzór trapezów.

Zauważmy, że ta kwadratura jest dokładna dla f , które są wielomianami co najwyżej pierwszego stopnia. Można udowodnić, że błąd metody trapezów wynosi:

$$R = -\frac{1}{12}(b-a)^3 f''(\xi) \quad (13)$$

gdzie $\xi \in (a, b)$. Błąd jest więc zależny od długości przedziału całkowania. Aby uzyskać dokładniejszy wynik możemy podzielić przedział (a, b) na mniejsze przedziały, na przykład na n przedziałów długości $h = \frac{(b-a)}{n}$, i zastosować na każdym z nich wzór trapezów. W ten sposób otrzymujemy złożony wzór trapezów

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{1}{2}h(f(a) + 2 \sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + f(b)) \quad (14)$$

Którego błąd wynosi:

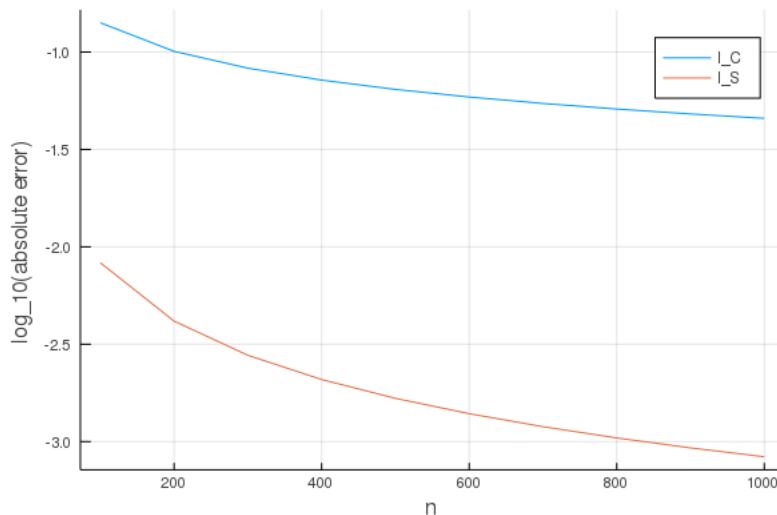
$$R = -\frac{1}{12n^2}(b-a)^3 f''(\xi) \quad (15)$$

gdzie $\xi \in (a, b)$. Metodę nazywamy metodą trapezów, ponieważ geometrycznie możemy myśleć o tym że przybliżamy pole pod wykresem (całkę) trapezami o wierzchołkach w punktach $(a, 0)$, $(a, f(a))$, $(b, 0)$, $(b, f(b))$.

Wyniki obliczania całek za pomocą złożonego wzoru trapezów

liczba przedziałów	I_C	I_S
100	1.6677256034277628	0.6288262828757042
200	1.7082394599682968	0.6246912988653139
300	1.726399997150005	0.6233107905275299
400	1.7372928699596446	0.6226195323389588
500	1.7447564299910763	0.6222043082298286
600	1.750281758632448	0.6219272438774593
700	1.7545855714753669	0.6217291960934527
800	1.7580609258924103	0.6215805696160139
900	1.7609438155984576	0.6214649112045778
1000	1.7633856545771385	0.6213723429157811

Wyniki otrzymane za pomocą metody trapezów są coraz lepsze wraz ze wzrostem n . Zauważamy jednak, że polepszenie wyniku kosztem zwiększenia n (co wiąże się ze zwiększeniem ilości obliczeń - czyli dłuższym obliczaniem wyniku i większymi błędami wynikającymi z zaokrąglenia liczb) jest niewielkie. Jak widzimy na rysunku 1 logarytmy błędów maleją dość wolno. Logarytmy dziesiętne błędów oznaczają ile miejsc po przecinku wyniku jest dokładnych. Widzimy więc że w przypadku I_C mamy ok. 1 cyfrę dokładną, a w przypadku I_S mamy około 2 dokładne cyfry po przecinku. Zauważamy również, że metoda trapezów gorzej radzi sobie z funkcją C niż z S .



Rysunek 1: logarytm z błędów bezwzględnych obliczenia całek I_C i I_S wzorem złożonym trapezów dla różnych n

Modyfikacja złożonego wzoru trapezów (B)

Sprawdzamy czy na dokładność otrzymanego wyniku wpłynie zmiana sposobu całkowania danych funkcji w pewnym otoczeniu punktu 0, a poza tym otoczeniem stosujemy złożony wzór trapezów. Do całkowania na przedziale $[0, h]$ dla małych wartości h stosujemy odpowiednio przekształconą tożsamość

$$\int_0^1 x^{-1/2} f(x) dx \approx \frac{4}{3} f(0) + \frac{2}{3} f(1),$$

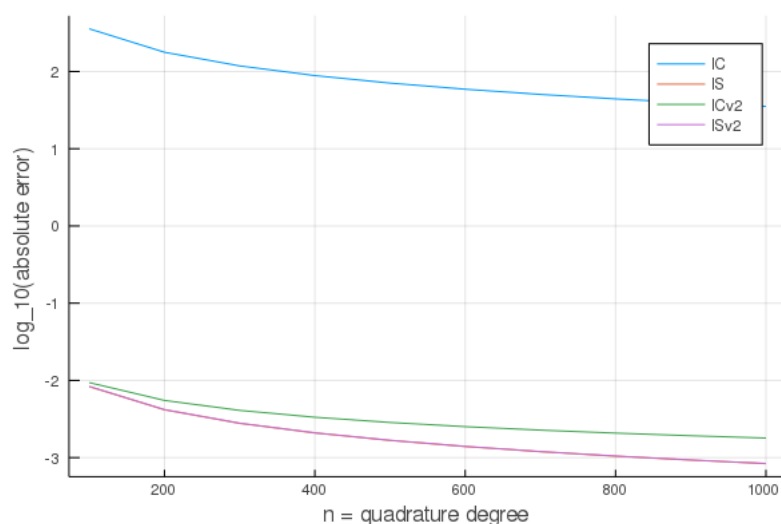
otrzymując

$$I_C = \int_0^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx = \int_h^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx + \int_0^h \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx \approx \int_h^1 \frac{\cos x}{\sqrt{x}} dx + \frac{2\sqrt{h}}{3} (2 \cos 0 + \cos h)$$

$$I_S = \int_0^1 \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx \approx \int_h^1 \frac{\sin x}{\sqrt{x}} dx + \frac{2\sqrt{h}}{3} (2 \sin 0 + \sin h)$$

Wyniki dla zmodyfikowanej metody

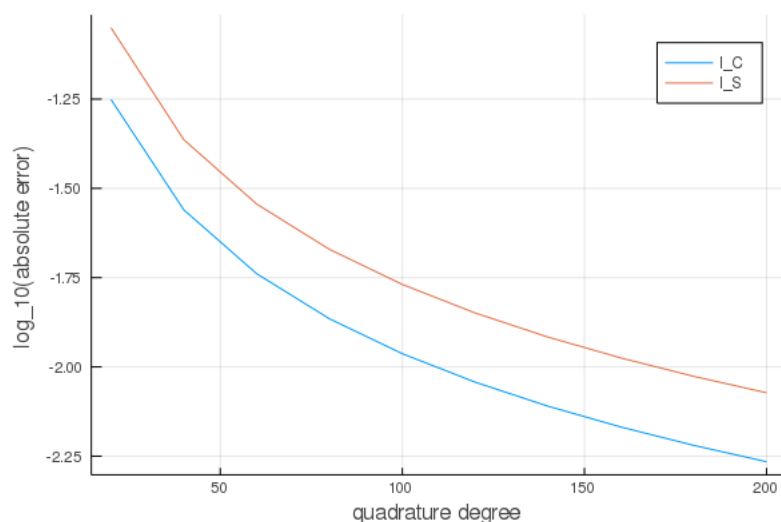
Poniższy wykres przedstawia wyniki dwóch sposobów wyboru długości h przedziału, dla którego nie używamy złożonej metody trapezów. W pierwszym przypadku stałe $h = 2e-10$ niezależnie od ilości węzłów użytych w złożonej metodzie trapezów (krzywe IS, IC na wykresie). W drugim przypadku kładziemy $h = \frac{1}{n}$, gdzie n jest liczbą węzłów używanych w obecnym kroku w złożonej metodzie trapezów (krzywe $IS2, IC2$).



Krzywe IS i $IS2$ pokrywają się. Wyniki obliczenia całki I_S nie różnią się ilością cyfr dokładnych od wyników uzyskanych przy pomocy złożonego wzoru trapezów, natomiast w przypadku całki I_C zastosowanie metody 2. daje 2-3 cyfry dokładne (złożony wzór trapezów dawał tylko jedną). Tak duża różnica w dokładności otrzymanego wyniku pomiędzy podejściem 1. i 2. dla całki I_C oraz $n = 1000$ węzłów jest niespodziewana, ponieważ chociaż w metodzie 2. przedział na którym nie używamy metody trapezów jest dłuższy niż w metodzie 1. to w tym przypadku różnica długości tych przedziałów jest rzędu $2e-16$, a więc jest znacznie mniejsza niż różnica uzyskanych wyników, a przecież całkujemy funkcje o wartościach w przedziale $[-1, 1]$.

Metoda trapezów po podstawieniu $x = t^2$ (C)

Po wykonaniu podstawień (5) i (6) otrzymujemy nowe funkcje podcałkowe $2 \sin x^2$ i $2 \cos x^2$ pozbawione osobliwości w punkcie 0. Można spodziewać się, że zastosowanie złożonego wzoru trapezów dla funkcji ciągłych na całym przedziale całkowania da lepsze wyniki, ponieważ skoro nasz przedział jest ograniczony, to funkcje które całkujemy są na nim jednostajnie ciągłe.



Przedziałem (ilością węzłów) do sprawdzenia przy użyciu tej metody było 20:20:200. Wyniki uzyskane na tym przedziale są bardzo zbliżone do wyników (na tym samym przedziale) otrzymywanych za pomocą zmodyfikowanej metody trapezów.

Kwadratury Gaussa-Legendre'a

Wagę nazywam funkcję ciągłą, która nie jest tożsamościowo równa 0.

Kwadratura Gaussa-Legendre'a

Kwadratura w której węzły x_0, x_1, \dots, x_n są pierwiastkami $n + 1$ -szego wielomianu ortogonalnego w_{n+1} na przedziale $[a, b]$ (z wagą $p \equiv 1$), a współczynniki są równe

$$A_i = \int_a^b \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx$$

. O istnieniu wystarczająco wielu pierwiastków wielomianu ortogonalnego, oraz zasadności takiego doboru węzłów mówią następujące twierdzenia:

Twierdzenie 1 *Jeśli niezerowa funkcja $f \in C[a, b]$ jest ortogonalna w tym przedziale z wagą w względem wszystkich wielomianów klasy Π_n , to w (a, b) zmienia znak co najmniej $n + 1$ razy.*

Dowód $1 \equiv w \in \Pi_n$, więc $\int_a^b f(x)w(x)dx = 0$, co oznacza, że f musi zmieniać znak co najmniej raz. Przypuśćmy, że f zmienia znak tylko r razy, gdzie $r \leq n$. Zatem istnieją punkty $a = a_0 < a_1 < \dots < a_{r+1} = b$ takie, że w każdym z przedziałów (a_i, a_{i+1}) funkcja f ma stały znak. Wielomian $\prod_{i=1}^r (x - a_i) = b(x) \in \Pi_n$ ma tę samą własność, więc ponieważ f jest niezerowa, a $f(x)b(x)$ jest ciągła to powinno być $\int_a^b f(x)b(x)w(x)dx \neq 0$, co jest sprzeczne z założeniem, że $\int_a^b f(x)b(x)w(x)dx = 0$.

W szczególności wielomian w_{n+1} spełnia założenia powyższego twierdzenia, więc musi mieć dokładnie $n + 1$ pierwiastków jednokrotnych.

Twierdzenie 2 *Jeśli węzły x_0, x_1, \dots, x_n są zerami $n + 1$ -szego wielomianu ortogonalnego w_{n+1} na przedziale $[a, b]$ z wagą w , to kwadratura o współczynnikach*

$$A_i = \int_a^b w(x) \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx$$

jest dokładana dla każdego wielomianu $f \in \Pi_{2n+1}$.

Dowód Niech r będzie resztą z dzielenia wielomianu f przez w_{n+1} : ($q, r \in \Pi_n$)

$$f = qw_{n+1} + r.$$

Stąd $r(x_i) = f(x_i)$. Ponieważ kwadratura Gaussa-Legendre'a jest z założenia dokładna dla wielomianów postaci $\sum_{i=0}^n B_i \prod_{j=0, j \neq i}^n \frac{x-x_j}{x_i-x_j}$, to jest dokładna dla wszystkich wielomianów z Π_n . Dla takich wielomianów kwadratura oblicza dokładną wartość całki wielomianu interpolacyjnego danego wielomianu w węzłach x_0, x_1, \dots, x_n . Ponieważ liczba użytych węzłów jest większa niż stopień wyjściowego wielomianu to otrzymany wielomian interpolacyjny jest mu równy. Ponieważ w_{n+1} jest ortogonalny względem wszystkich wielomianów stopnia co najwyżej n , to

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

Nie da się skonstruować kwadratury, która przy użyciu $n+1$ węzłów będzie dokładna dla wielomianów stopnia wyższego niż $2n+1$. Niech będą dane pewne $x_0, x_1, \dots, x_n, A_0, A_1, \dots, A_n$, kwadratura $Q(f) = \sum_{i=0}^n A_i f(x_i)$ nie jest dokładna dla wielomianu $\prod_{i=0}^n (x-x_i)^2$.

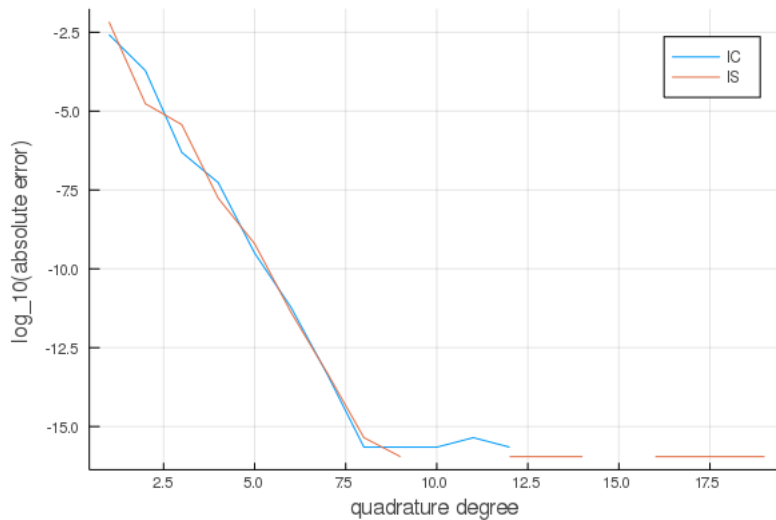
Twierdzenie 3 Błąd kwadratury Gaussa-Legendre'a stopnia n dla funkcji f na przedziale $[a, b]$ jest równy

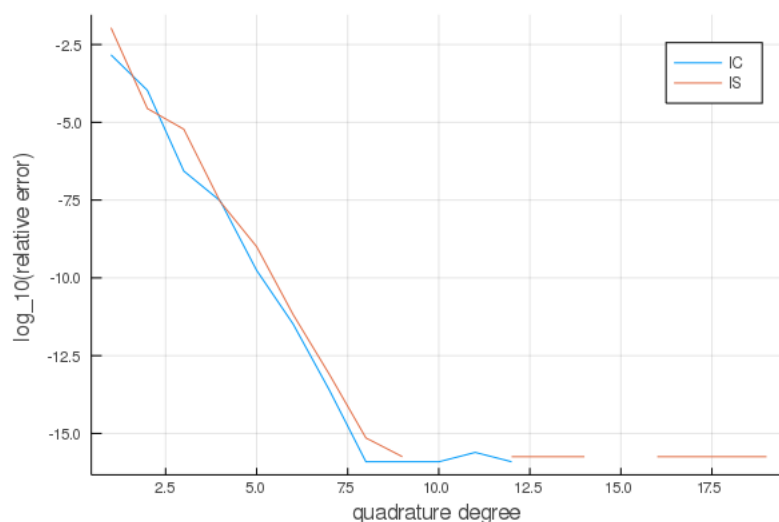
$$\frac{(b-a)^{2n+1} (n!)^4}{(2n+1) [(2n)!]^3} f^{(2n)}(\xi)$$

dla pewnego punktu ξ należącego do przedziału całkowania [?].

Otrzymane wyniki

Kwadratury Gaussa-Legendre'a wykorzystaliśmy do obliczenia wartości całek z funkcji S_{new} i C_{new} równych odpowiednio całkom I_S, I_C .

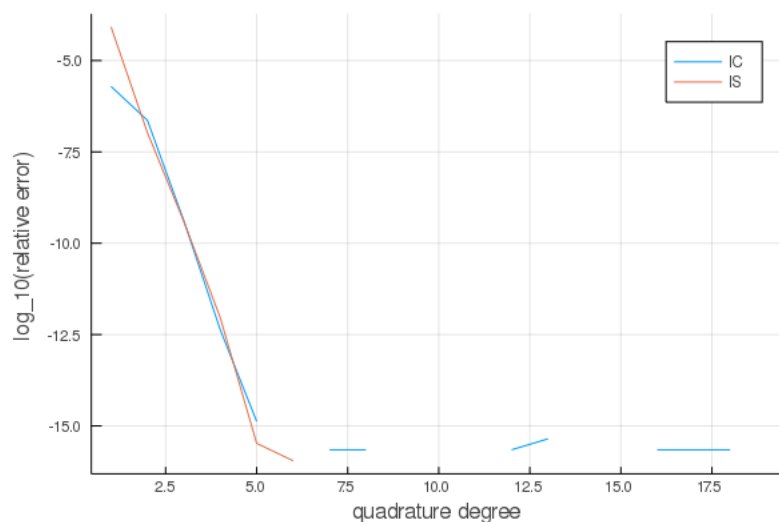




W punktach, w których wykres błędu bezwzględnego znika obliczona wartość jest równa reprezentacji wartości całki (odpowiednio I_C lub I_S) w arytmetyce Float64. Ciąg kwadratur Gaussa-Legendre'a z funkcji ciągłej na przedziale jest zbieżny do wartości całki z tej funkcji (tw. Stieltjes'a), więc tak długo można się było spodziewać, że używanie kwadratur wyższych stopni będzie poprawiać dokładność otrzymanego wyniku, ale nawet wyniki dla bardzo niskich stopni kwadratur dają rezultaty znacznie dokładniejsze niż wcześniej użyte metody, wymagające wykonania wielokrotnie większej ilości obliczeń.

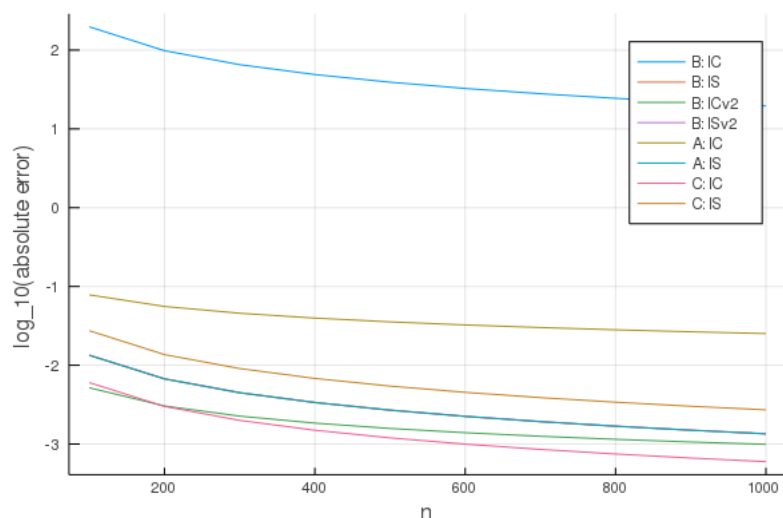
Złożne kwadratury Gaussa-Legendre'a

Dzielimy przedział $[-1, 1]$ n punktami równnodległymi, a następnie całkę z danej funkcji obliczamy osobno na każdym z powstałych $n - 1$ przedziałów, za każdym razem stosując kwadraturę Gaussa-Legendre'a.



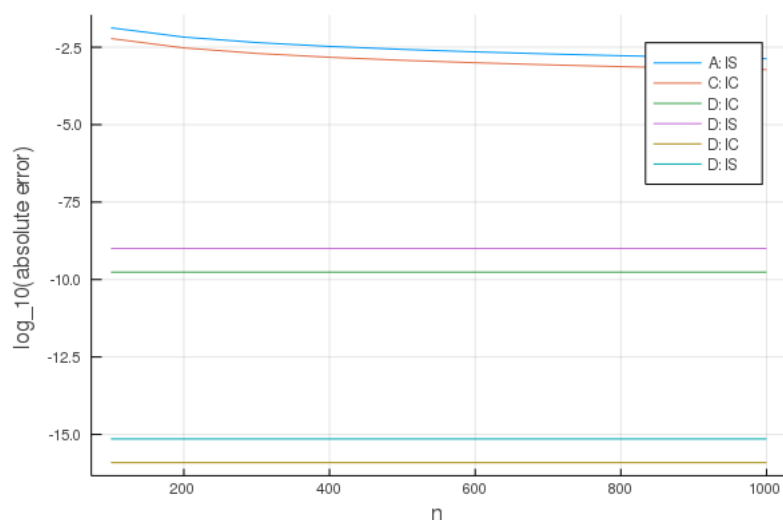
Powyżej widać wykres błędów względnego dla kwadratur rozbiwających przedział $[-1, 1]$ na trzy podprzedziały. Rozbijanie wyjściowego przedziału na większą ilość podprzedziałów nie wpływa na wyniki w sposób znaczący. Poprawia się jedynie dokładność otrzymanego wyniku dla kwadratur niższych stopni. W przypadku całki I_C otrzymujemy 16 cyfr dokładnych i wynik ten nie poprawia się, nawet gdy używamy ponad 100 podprzedziałów zamiast wyjściowego $[-1, 1]$. Dla 10 i więcej użytych podprzedziałów wyniki otrzymane przy obliczaniu całki I_C jest dokładną wartością I_C w arytmetyce Float64.

Podsumowanie wyników



Rysunek 2: porównanie wyżej opisanych metod korzystających z metody trapezów

Po przeprowadzeniu eksperymentów zauważamy, że gdy korzystaliśmy z metody trapezów otrzymywaliśmy od jednej do trzech dokładnych cyfr po przecinku (Rysunek 2). Najlepsze wyniki otrzymaliśmy dla I_C metodą C, metoda B działała dobrze tylko dla zmieniającego się h - dla stałego h nie dostaliśmy żadnej cyfry znaczącej. Dla całki I_S przybliżenia otrzymane metodami A i B były tak samo dokładne i lepsze niż przybliżenia otrzymane metodą C.



Rysunek 3: porównanie najlepszych wyników dla metody A-C z wynikami kwadratur Gaussa-Legendre'a dla stopni 5 i 8

Kwadratura Gaussa-Legendre'a daje dużo lepsze wyniki, przy wykonaniu mniejszej ilości obliczeń - możemy osiągnąć nawet 15-16 dokładnych liczb po przecinku. Złożonych kwadratur Gaussa-Legendre'a dla niskich stopni dają lepsze wyniki niż zwyczajna kwadratura Gaussa-Legendre'a, ale dla wysokich stopni różnica jest niewielka.

Literatura

- [1] David Kincaid, Ward Cheney *Analiza numeryczna - Wydawnictwo Naukowo-Techniczne, 2006.*

- [2] Wikipedia <https://www.wikipedia.org/>.
- [3] Pavel Holoborodko - metody numeryczne <http://www.holoborodko.com/pavel>
- [4] Wolfram Mathworld <http://mathworld.wolfram.com>
- [5] David Khaner, Cleve Moler, Stephen Nash *Numerical Methods and Software* - Prentice-Hall, 1989