Ćwiczenia z Metod Numerycznych I A
rok akademicki 2004/2005
Kwadratury Gaussa

Piotr Rączka Janusz Rosiek Tomasz Pawłowski
Jakub Narębski Piotr Bielewicz

11 grudnia 2004 roku

1 Ogólne informacje o kwadraturach

1.1 Definicje i oznaczenia

Funkcjonał liniowy, którym jest całka, oznaczamy przez $I(f)$:

$$I_p(f) = \int_a^b p(x)f(x)\,\mathrm{d}x \;, \tag{1}$$

gdzie $p(x)$ jest tzw. *funkcją wagową* (i określa ogólne zachowanie funkcji, np. osobliwości funkcji podcałkowej lub szybkość malenia w nieskończonościach gdy przedział całkowania jest nieograniczony). Funkcja wagowa jest nieujemna na przedziale całkowania (odcinku $[a, b]$), zeruje się na nim najwyżej w skończonej ilości punktów i jest całkowalna, tzn. $\int_a^b p(x)\,\mathrm{d}x < \infty$.

Przybliżone obliczanie całek można traktować jako aproksymację funkcjonału I jakimiś prostszymi do obliczania funkcjonałami. W rachunku numerycznym musimy mieć możliwość obliczania ich wartości za pomoca skończonej liczby działań arytmetycznych. Funkcjonałem tego typu jest funkcjonały Q, tzw. *kwadratury liniowe*, postaci:

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{n_0} A_{i,0} f(x_{i,0}) + \sum_{i=0}^{n_1} A_{i,1} f'(x_{i,1}) + \cdots + \sum_{i=0}^{n_k} A_{i,k} f^{(k)}(x_{i,k}) \tag{2}$$

W dalszych rozważaniach ograniczymy się do kwadratur korzystających tylko z wartości funkcji f, tzn. postaci:

$$Q(f) = \sum_{i=0}^{N} A_i f(x_i) \;, \tag{3}$$

gdzie x_i nazywamy *węzłami kwadratury*, a A_i — *współczynnikami kwadratury*

Definicja 1 ***Resztę kwadratury*** *definiujemy jako błąd przybliżenia całki kwadraturą (błąd metody):*

$$R(f) = I_p(f) - Q(f) \;. \tag{4}$$

Definicja 2 *Mówimy, że kwadratura Q jest **rzędu n** jeśli:*
1) jest ona dokładna dla wszystkich wielomianów stopnia mniejszego od n,
$I_p(w) = Q(w)$ dla $w \in W_{n-1}$,
2) istnieje wielomian w_n stopnia n, dla którego $I_p(w_n) \neq Q(w_n)$.

Kwadraturę, która jest sumą kwadratur na podprzedziałach nazywamy **kwadraturą złożoną** (lub rozszerzoną).

1.2 Warunki zbieżności kwadratur

Niech dany będzie ciąg kwadratur

$$Q_n(f) = \sum_{i=0}^{n} A_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) \,, \tag{5}$$

Wówczas zachodzi następujące twierdzenie

Twierdzenie 1 *Ciąg kwadratur postaci* (5) *jest zbieżny do całki dla dowolnych funkcji $f \in \mathcal{C}([a,b])$ ciągłych na odcinku $[a,b]$ (przedziale całkowania)*

$$\lim_{n\to\infty} Q_n(f) = I_p(f)$$
$$\Updownarrow$$
$$\lim_{n\to\infty} \sum_{i=0}^{n} A_i^{(n)} f(x_i^{(n)}) = \int_a^b p(x) f(x)\,\mathrm{d}x$$

wtedy i tylko wtedy, gdy:
1) ciąg kwadratur Q_n jest zbieżny dla dowolnego wielomianu,
2) istnieje taka stała K niezależna od n, taka że

$$B_n = \sum_{i=0}^{n} \left| A_i^{(n)} \right| \leqslant K, \quad \textit{dla } n = 0, 1, \ldots$$

Jeśli wszystkie współczynniki (wagi) $A_i^{(n)}$ ciągu kwadratur (5) są nieujemne, to warunek 2) może być opuszczony, tzn. warunkiem koniecznym i dostatecznym zbieżności tego ciągu dla dowolnej funkcji $f \in \mathcal{C}([a,b])$ jest jego zbieżność dla dowolnych wielomianów.

1.3 Kwadratury interpolacyjne

Jedną z metod otrzymywania kwadratur postaci (3) jest całkowanie wielomianu lub funkcji sklejanej interpolującej funkcję podcałkową (na zadanych punktach $x_i^{(n)}$, będących zadanymi węzłami kwadratury). Dokładniej przez **kwadratury interpolacyjne** rozumie się kwadratury otrzymane przez całkowanie wielomianów interpolacyjnych Hermite'a funkcji f (w szczególności Lagrange'a by uzyskać kwadraturę zależną tylko od wartości funkcji f).

Dla dużych N (dużego stopnia kwadratury) kwadratura interpolacyjna jest mało odporna na niedokładności obliczeń.

Kwadratury interpolacyjne otrzymane przez całkowanie wielomianu interpolacyjnego Lagrange'a funkcji f opartego na równoodległych węzłach

$$x_0 = a, x_1 = a + h, \ldots, x_n = a + Nh = b \,, \tag{6}$$

nazywamy **kwadraturami („zamkniętymi") Newtona–Cotesa**. Kwadratury Newtona–Cotesa oparte na $N+1$ węzłach są kwadraturami rzędu $2\lfloor N/2 \rfloor + 2$.

2 Całkowanie za pomocą kwadratur Gaussa

Kwadratury Gaussa są to kwadratury maksymalnego rzędu oparte na ustalonej liczbie węzłów. Kwadratury Gaussa uzyskujemy dobierając zarówno współczynniki (wagi), jak i węzły kwadratury.

Niech ciąg wielomianów,

$$(P_n(x)) \equiv P_0(x), P_1(x), \ldots, P_N(x), \ldots \tag{7}$$

gdzie stopień wielomianu $P_n(x)$ jest równy n, będzie ciągiem wielomianów ortogonalnych na przedziale $[a,b]$ z wagą $p(x)$, tzn.

$$(P_r|P_s) = \int_a^b p(x)\, P_r(x) P_s(x)\, \mathrm{d}x = 0 \quad \text{dla } r \neq s \tag{8}$$

Twierdzenie 2 *Wielomiany ortogonalne z ciągu* (7) *mają tylko pierwiastki rzeczywiste jednokrotne, leżące wewnątrz przedziału* $[a,b]$.

Twierdzenie 3 *Kwadraturą postaci* (3) *o* $N+1$ *węzłach* $x_0, \ldots, x_N$ *o maksymalnym rzędzie (równym* $2(N+1)$*) jest kwadratura interpolacyjna, której węzłami są pierwiastki* $(n+1)$*-go wielomianu ortogonalnego* P_{N+1} *z ciągu* (7).

Kwadratury takie nazywamy kwadraturami Gaussa. Dla kwadratur tego rodzaju mamy $x_i \in (a,b)$, $A_i \geqslant 0$.

Dla kwadratur interpolacyjnych współczynniki (wagi) kwadratury można wyznaczyć ze wzoru

$$A_i = \int_a^b p(x) \prod_{\substack{j=0 \\ j\neq i}}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j}\, \mathrm{d}x \tag{9}$$

Dla kwadratur Gaussa

$$A_i = \frac{a_{n+1}}{a_n} \frac{\left\|P_n\right\|^2}{P'_{n+1}(x_i) P_n(x_i)} = \frac{1}{\sum_{k=0}^{n} \left(\tilde{P}_k(x_i)\right)^2}, \tag{10}$$

gdzie a_k jest współczynnikiem przy najwyższej potędze k-tego wielomianu ortogonalnego, zaś $\tilde{P}_k$ są wielomianami ortogonalnymi.

2.1 Kwadratury Gaussa–Legendre'a

Kwadraturę dla przedziału $[-1,1]$ z wagą $p(x)$ nazywamy *kwadraturą Gaussa–Legendre'a*:

$$I(f) = \int_{-1}^{1} f(x)\, \mathrm{d}x\,, \tag{11}$$

gdzie odpowiednimi wielomianami ortogonalnymi są wielomiany Legendre'a.

n	x_i	A_i
2	$\pm\frac{1}{3}\sqrt{3}$	1
3	0	$\frac{8}{9}$
	$\pm\frac{1}{5}\sqrt{15}$	$\frac{5}{9}$
4	$\pm\frac{1}{35}\sqrt{525-70\sqrt{30}}$	$\frac{1}{36}(18+\sqrt{30})$
	$\pm\frac{1}{35}\sqrt{525+70\sqrt{30}}$	$\frac{1}{36}(18-\sqrt{30})$
5	0	$\frac{128}{255}$
	$\pm\frac{1}{21}\sqrt{245-14\sqrt{70}}$	$\frac{1}{900}(322+13\sqrt{70})$
	$\pm\frac{1}{21}\sqrt{245+14\sqrt{70}}$	$\frac{1}{900}(322-13\sqrt{70})$

Tabela 1: Analityczne wartości węzłów i wag kwadratur Gaussa–Legendre'a

Kwadratury te stosujemy przy całkowaniu funkcji regularnej na przedziale zamkniętym za pomocą liniowej zamiany zmiennych. Kwadratury te są też stosowane do przedziałów niewłaściwych za pomocą odpowiedniej zamiany zmiennych.

Tabela 1 z analitycznymi wartościami węzłów i wag (współczynników) kwadratury Gaussa–Legendre'a została wzięta z Eric W. Weisstein "Gaussian Quadrature", ze strony MathWorld–A Wolfram Web Resource.
URL: `http://mathworld.wolfram.com/GaussianQuadrature.html`

Numeryczne wartości węzłów i wag (współczynników) kwadratur Gaussa–Legendre'a w tabeli 2 zostały wzięte z książki Charles C. Dyer i Peter S. S. Ip, "An Elementary Introduction to Scientific Computing" z rozdziału "Gaussian Quadrature", dostępnej on–line.

Wagi i węzły dla brakujących stopni zostały wzięte z formularza "Abscissas and Weights of Gauss-Legendre Integration" na stronie `http://www.efunda.com`. Wspomniana strona pozwala na wyliczanie wag i węzłów dla kwadratury Gaussa–Legendre'a dowolnego stopnia.

Kwadratur wysokiego rzędu używa się rzadko. W praktyce stosuje się kwadratury złożone ze wzorami niskiego rzędu na każdym podprzedziale.

n	x_i	A_i
2	0.57735027	1.0
3	0.0	0.88888889
	0.77459667	0.55555555
4	0.33998104	0.65214515
	0.86113631	0.34785485
5	0.0	0.56888889
	0.53846931	0.47862867
	0.90617985	0.23692689
6	0.23861918	0.46791393
	0.66120939	0.36076157
	0.93246951	0.17132449
7	0.0	0.41795918
	0.40584515	0.38183005
	0.74153119	0.27970539
	0.94910791	0.12948497
8	0.18343464	0.36268378
	0.52553241	0.31370665
	0.79666648	0.22238103
	0.96028986	0.10122854
9	0.0	0.33023936
	0.32425342	0.31234708
	0.61337143	0.26061070
	0.83603111	0.18064816
	0.96816024	0.08127439
10	0.14887434	0.29552422
	0.43339539	0.26926672
	0.67940957	0.21908636
	0.86506337	0.14945135
	0.97390653	0.06667134

Tabela 2: Numeryczne wielkości węzłów i wag kwadratur Gaussa–Legendre'a

2.2 Inne kwadratury Gaussa

Poniżej wypisane zostały nazwy kwadratur Gaussa dla innych funkcji wagowych:

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}} \quad \text{Gaussa–Czebyszewa} \tag{12a}$$

$$\int_{-1}^{1} f(x)\,(1-x)^{\alpha}(1+x)^{\beta} \quad \text{Gaussa–Jacobiego dla } \alpha,\beta > -1 \tag{12b}$$

$$\int_{0}^{\infty} f(x)\,e^{-x}\,\mathrm{d}x \quad \text{Gaussa–Laguerre'a} \tag{12c}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(x)\,e^{-x^2}\,\mathrm{d}x \quad \text{Gaussa–Hermite'a} \tag{12d}$$

Dla symetrycznych funkcji wagowych węzły są rozłożone symetrycznie względem środka przedziału i mają odpowiednio te same wagi.

Dla kwadratur Gaussa–Czebyszewa (które są szczególnym przypadkiem kwadratury Gaussa–Jacobiego dla $\alpha = \beta = -1/2$) współczynniki i węzły tych kwadratur są dane następującymi wzorami:

$$A_k = \frac{\pi}{N+1} \qquad x_k = \cos\frac{(2k+1)\pi}{2N+2} \tag{13}$$

Odpowiednim wielomianem ortogonalnym jest wielomian Czebyszewa pierwszego rodzaju $T_n(x) = \cos(n \arccos x)$.

N	Kwadratury Gaussa–Laguerre'a			Kwadratury Gaussa–Hermite'a		
	k	Węzły x_k	Wagi A_k	k	Węzły x_k	Wagi A_k
1	0	0.585786	0.853553	0; 1	$\mp$0.707107	0.886227
	1	3.414214	0.146447			
2	0	0.415775	0.711093	0; 2	$\mp$1.224745	0.295409
	1	2.294280	0.278518	1	0	1.181636
	2	6.289945	0.010389			
3	0	0.322548	0.603154	0; 3	$\mp$1.650680	0.081313
	1	1.745761	0.357419	1; 2	$\mp$0.534648	0.804914
	2	4.536620	0.038888			
	3	2.395071	0.000539			
4	0	0.263560	0.521756	0; 4	$\mp$2.020183	0.019953
	1	1.413403	0.398667	1; 3	$\mp$0.958572	0.393619
	2	3.596426	0.075942	2	0	0.945309
	3	7.085810	0.003612			
	4	12.640801	0.000032			

Tabela 3: Numeryczne wielkości wag i współczynników dla kwadratur dla przedziału nieskończonego

Do obliczania całek na przedziale nieskończonym stosujemy często kwadratury Gaussa–Laguerre'a lub Gaussa–Hermite'a. W tablicy 3 podano węzły i współczynniki tych kwadratur dla $N = 1, 2, 3, 4$.

A Informacje dodatkowe

A.1 Zamiany zmiennych całkowania

Przy całkowaniu numerycznym warto często sprowadzić całkę do wygodniejszej postaci, czy to za pomocą całkowania przez części, czy też za pomocą zamiany zmiennych całkowania.

Zamiana zmiennych z całkowania po przedziale $[a, b]$ na całkowanie po przedziale $[-1, 1]$:

$$\int_a^b f(x)\,\mathrm{d}x = \frac{b-a}{2}\int_{-1}^{1} f\left(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2}\right)\,\mathrm{d}t \tag{14}$$

Zamiana zmiennych z całkowania po przedziale nieograniczonym $[0, \infty]$ na całkowanie po przedziale $[0, 1]$:

$$\int_0^\infty f(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^1 f\left(\frac{1-t}{t}\right)\frac{1}{t^2}\,\mathrm{d}t \tag{15}$$

$$\int_0^\infty f(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^1 f(-\ln(t))\frac{1}{t}\,\mathrm{d}t \tag{16}$$

$$\int_0^\infty f(x)\,\mathrm{d}x = \int_0^1 f\left(\sqrt{-\ln(t)}\right)\frac{1}{2}\frac{1}{t\sqrt{-\ln(t)}}\,\mathrm{d}t \tag{17}$$

Zamiana zmiennych z całkowania po przedziale obustronnie nieograniczonym $[-\infty, \infty]$ na całkowanie po przedziale $[-1, 1]$. Może być także użyta do zamiany całkowania po $[0, \infty]$ na całkowanie po $[0, 1]$:

$$\int_{-\infty}^\infty f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^1 f\left(\frac{2t}{1-t^2}\right)\frac{2(1+t^2)}{(1-t^2)^2}\,\mathrm{d}t \tag{18}$$

$$\int_{-\infty}^\infty f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^1 f\left(\tan(t\,\pi/2)\right)\frac{\pi/2}{\cos^2(t\,\pi/2)}\,\mathrm{d}t \tag{19}$$

$$\int_{-\infty}^\infty f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-1}^1 f(\operatorname{arctanh}(t))\frac{1}{1-t^2}\,\mathrm{d}t \tag{20}$$

A.2 Przykładowe funkcje do testowania

$$\int_0^1 x^\alpha \log(1/x)\,\mathrm{d}x = \frac{1}{1+\alpha}$$

$$\int_{-\infty}^\infty \exp\left(-x-x^2\right)\mathrm{d}x = \sqrt{\pi}\exp(1/4)$$

$$\int_0^\infty \frac{\log(x)}{1+100x^2}\,\mathrm{d}x = -\frac{\log(10)}{20}$$

Przygotował: Jakub Narębski