Programowanie i metody numeryczne

Ćwiczenia 10.

Całkowanie: kwadratury interpolacyjne II.

Zadanie 1. Kwadratury interpolacyjne a całki podwójne.

Będziemy się zajmować elektrodynamiką klasyczną w przestrzeni jednowymiarowej. Rozważmy układ dwóch ładunków elektrycznych w postaci paczek gaussowskich: ich gęstości ładunku to, odpowiednio,

$$\rho_1(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-(x-d_1)^2/\sigma^2} \qquad \text{oraz} \qquad \rho_2(x) = \frac{1}{\sigma\sqrt{\pi}}\mathrm{e}^{-(x-d_2)^2/\sigma^2},$$

gdzie d_1, d_2 i σ są ustalonymi parametrami. Energia oddziaływania elektrycznego tego układu to

$$E = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\rho_1(x_1)\,\rho_2(x_2)}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+\mu^2}}\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2 = \frac{1}{\sigma^2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-(x_1-d_1)^2/\sigma^2}\mathrm{e}^{-(x_2-d_2)^2/\sigma^2}}{\sqrt{(x_1-x_2)^2+\mu^2}}\,\mathrm{d}x_1\mathrm{d}x_2,$$

przy czym wybraliśmy wygodny układ jednostek, by zminimalizować liczbę stałych, a w celu uniknięcia osobliwości wprowadziliśmy dodatkową, stałą wielkość rzeczywistą μ, nazywaną regulatorem. Zastępując zmienne całkowania $(x_1,\, x_2)$ nowymi zmiennymi $(y_1,\, y_2)$, określonymi równościami

$$y_1 = \frac{x_1-d_1}{\sigma} \qquad \text{oraz} \qquad y_1 = \frac{x_2-d_2}{\sigma},$$

otrzymamy

$$E = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{e}^{-y_1^2}\mathrm{e}^{-y_2^2}}{\sqrt{(\sigma y_1-\sigma y_2+d_1-d_2)^2+\mu^2}}\,\mathrm{d}y_1\mathrm{d}y_2.$$

Całkę podwójną po prawej stronie tego wzoru można obliczyć, łącząc dwie kwadratury jednowymiarowe:

$$E \approx S \equiv \frac{1}{\pi}\sum_{n_1=0}^{N_1}\sum_{n_2=0}^{N_2} w_{n_1}w_{n_2} f\left(q_{n_1},\, q_{n_2}\right),$$

gdzie w_n i q_n to, odpowiednio, wagi i węzły użytej kwadratury, zaś N_1 i N_2 to liczby węzłów dla całkowania po, odpowiednio, y_1 i y_2. Ze względu na symetryczną postać funkcji podcałkowej oraz to, że obie całki pojedyncze są obliczane na tym samym przedziale, możemy dla obu posłużyć się tym samym zestawem wag i węzłów.

Przyjmiemy

$$d_1 = 1, \qquad d_2 = 3, \qquad \sigma = 2, \qquad \mu = 0,5.$$

Wykorzystamy również tę samą liczbę węzłów dla obu zmiennych całkowania:

$$N_1 = N_2 \equiv N.$$

a) Postać całki, którą musimy obliczyć, sugeruje wykorzystanie kwadratury Gauusa–Hermite'a.

   Napisz funkcję `qel_h`, obliczającą energię E omówioną wyżej metodą numeryczną, wykorzystując N–punktową kwadraturę Gaussa–Hermite'a. Liczba węzłów, N, powinna być przekazywana funkcji jako argument. Wartości wag i węzłów dla kilku wartości N możesz umieścić na stałe w kodzie funkcji lub napisać odpowiednią funkcję pomocniczą, która będzie je obliczała.

b) Gdy narysujemy wykres funkcji podcałkowej, łatwo przekonamy się, że bardzo szybko ona znika – nie popełnimy zatem dużego błędu, jeśli ograniczymy przedział całkowania (zarówno dla y_1, jak i y_2) do $[-5, 5]$, a następnie wykorzystamy kwadraturę Gaussa–Legendre'a.

   Napisz funkcję `qel_l`, obliczającą energię E omówioną wyżej metodą numeryczną, wykorzystując N–punktową kwadraturę Gaussa–Legendre'a. Liczba węzłów, N, powinna być przekazywana funkcji jako argument. Wartości wag i węzłów dla kilku wartości N możesz umieścić na stałe w kodzie funkcji lub napisać odpowiednią funkcję pomocniczą, która będzie je obliczała.

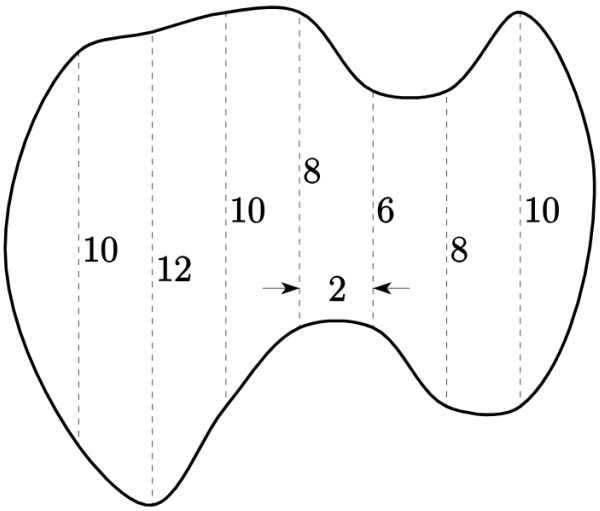
c) Napisz program `qeln`, który – wykorzystując powyższe funkcje – sporządzi dwa wykresy: zależności $E = E(N)$ (czyli obliczonej energii od liczby węzłów) dla dostępnych wartości N, wykreślając na jednym rysunku krzywe dla obu kwadratur, oraz zależności od N wielkości $|E(N) - E(N-1)|$ dla dostępnych wartości N, również wykreślając na jednym rysunku krzywe dla obu kwadratur.

   Na podstawie tych rysunków znajdź najmniejszą wartość N, dla której zwiększanie liczby węzłów nie wpływa na poprawę jakości wyniku.

d) Napisz program `qel`, który – wykorzystując powyższe funkcje – przygotuje dwukrotnie wykres $E = E(d)$, gdzie $d = d_1 - d_2$, dla $d \in [0,1; 50]$, za każdym razem używając innej kwadratury. Porównaj otrzymaną zależność z oddziaływaniem kulombowskim dwóch ładunków punktowych w odległości d – odpowiadającą mu zależność również nanieś na każdy z wykresów.

Zadanie 2. Kwadratury interpolacyjne i obliczanie pól powierzchni.

Na rysunku przedstawiona jest figura geometryczna o dosyć skomplikowanym kształcie. Nie są znane jej wymiary, znamy jedynie długości odcinków zaznaczonych na rysunku przerywanymi liniami – długości te, wyrażone w metrach, podane są tuż obok odpowiedniego odcinka. Sąsiednie odcinki są odległe o 2 metry.



Napisz program `narea`, który obliczy numeryczne przybliżenie pola powierzchni figury z rysunku. Mamy do dyspozycji wyłącznie dyskretny zestaw długości mierzonych w równych odstępach, zatem najbardziej odpowiednim narzędziem numerycznego całkowania będą kwadratury Newtona–Cotesa – wykorzystaj złożoną kwadraturę Simpsona. Twój program powinien wypisywać na standardowe wyjście wyznaczone pole powierzchni oraz oszacowanie jego błędu.

Rysunek jest modyfikacją rysunku pochodzącego z: Feldman J., Rechnitzer A., Yeager E., „CLP-2 Integral Calculus", sekcja 1.11 „Numerical Integration", `https://clp.math.uky.edu/clp2/sec_numeric_int.html`, *udostępnionego na licencji CC BY-NC-SA 4.0 (informacje o licencji:* `https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/4.0/`*).*

Opracowanie: Bartłomiej Zglinicki.