Całkowanie w czterech wymiarach przy użyciu kwadratur Gaussa

Tomasz Chwiej

13 stycznia 2016

1 Opis problemu

Naszym zadaniem jest numeryczne wyznaczenie wartości całki:

$$V = \iint_{-\infty}^{\infty} d^2\vec{r}_1 d^2\vec{r}_2 \frac{\rho_1(\vec{r}_1)\rho_2(\vec{r}_2)}{r_{12}} \tag{1}$$

gdzie:

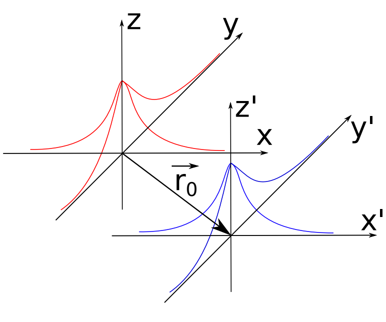
$$\rho_1(\vec{r}_1) = exp\left(-\frac{(\vec{r}_1 - \vec{R}_{10})^2}{2\sigma^2}\right) = exp\left(-\frac{(x_1 - X_{10})^2 + (y_1 - Y_{10})^2}{2\sigma^2}\right) \tag{2}$$

$$\rho_2(\vec{r}_2) = exp\left(-\frac{(\vec{r}_2 - \vec{R}_{20})^2}{2\sigma^2}\right) = exp\left(-\frac{(x_2 - X_{20})^2 + (y_2 - Y_{20})^2}{2\sigma^2}\right) \tag{3}$$

oraz

$$r_{12} = \|\vec{r}_1 - \vec{r}_2\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2} \tag{4}$$

W liczniku funkcji podcałkowej znajduje się iloczyn czterech funkcji gaussowskich co pozwala nam obliczyć wartość całki stosując kwadraturę Gaussa-Hermite'a (a dokładniej będzie to iloczyn 4 kwadratur jednowymiarowych). Funkcje gaussowskie stanowią w naszym przypadku funkcje wagowe, a właściwą funkcją podcałkową jest wyraz $1/r_{12}$. Wyraz ten posiada osobliwość we wszystkich punktach dla których zachodzi $\vec{r}_1 = \vec{r}_2$ - więc przy całkowaniu należy: a) przesunąć funkcje gaussowskie tak jak pokazano na rysunku, lub b) dla funkcji ρ_1 i ρ_2 wybrać inny zestaw węzłów (np. dla ρ_1 n węzłów a dla ρ_2 n+1 węzłów) - wówczas węzły obu kwadratur nie pokryją się.



Rysunek 1: Funkcja $\rho_2(\vec{r})$ jest przesunięta względem $\rho_1(\vec{r})$ o wektor $\vec{r}_0$. Dzięki temu węzły kwadratur nie pokrywają się i omijamy osobliwość pod całką.

Dokładną wartość całki V można wyznaczyć analitycznie:

$$V_{dok} = (2\pi)^2\sigma^4 \frac{\sqrt{\pi}}{2\sigma} exp\left(-\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) I_0\left(\frac{r_0^2}{8\sigma^2}\right) \tag{5}$$

gdzie: $I_0(x)$ jest modyfikowaną funkcją Bessel'a pierwszego rodzaju (**jej wartość można wyznaczyć stosując funkcję bessi0(float x) z Numerical Recipes**), a r_0 jest odległością pomiędzy środkami gaussianów $r_0 = |\vec{R}_{10} - \vec{R}_{20}|$.

2 Zadania do wykonania

1. Należy wyznaczyć wartość numeryczną całki V_n dla liczby węzłów kwadratury Gaussa-Hermite'a równej $n = 5,\ 10,\ 15,\ 20,\ 25,\ 30,\ 35$ (dla funkcji ρ_1, dla funkcji ρ_2 ustalamy liczbę węzłów na $m = n+1$ - tak aby nie pokryły się położenia węzłów obu kwadratur) oraz ustalonego położenia funkcji gaussowskich: $\vec{R}_{10} = (0,0)$, $\vec{R}_{20} = (x_{20}, 0)$. Dla każdego n wartość x_{20} będziemy zmieniać w zakresie od 0.1 do 6.0 z krokiem $\Delta x = 0.1$.

2. Przyjąć $\sigma = 1/\sqrt{2}$

3. Jeśli dokonamy podstawienia $x_2' = x_2 - x_{20}$ w całce (1) i w funkcjach (2,3,4) to wówczas funkcje wagowe są takie same i węzły oraz wagi dla kwadratury Gaussa-Hermite'a możemy liczyć dla tego samego układu odniesienia. Zmianie ulega jedynie postać funkcji podcałkowej:

$$\frac{1}{r_{12}} = \frac{1}{\sqrt{(x_1 - x_2 + x_{20})^2 + (y_1 - y_2)^2}} \tag{6}$$

   Wartość całki liczymy stosując złożenie 4 kwadratur jednowymiarowych:

$$V_{num} = \sum_{i=1}^{n} \sum_{j=1}^{m} \sum_{k=1}^{n} \sum_{l=1}^{m} \frac{w_i w_j w_k w_l}{\sqrt{(x_i - x_j + x_{20})^2 + (y_k - y_l)^2}} \tag{7}$$

   gdzie: w_i, w_j, w_k, w_l są wagami a x_i, x_j, y_k, y_l są położeniami węzłów kwadratur.

4. Dla każdej wartości n i x_{20} wyznaczyć błąd względny jako $\varepsilon = \left|\frac{V_{dok} - V_n}{V_{dok}}\right|$. Wyniki zapisać do pliku.

5. Sporządzić wykresy wartości błędów ε w funkcji x_{20} dla każdej wartości n. Wykresy umieścić na jednym rysunku.

3 Procedury NR

1. Do całkowania w przedziale $(-\infty, \infty)$ z wagą $exp(-x^2)$ służy kwadratura Gaussa-Hermite'a. Do wyznaczenia położenia węzłów i współczynników kwadratury można użyć procedury **gauher**:

```
gauher(float x[],float w[],int n)
```

   gdzie: x[] - wektor zawierający położenia węzłów kwadratury, w[] - współczynniki kwadratury, n - liczba wezłów kwadratury