

ANÁLISIS COMPARATIVO DE DIFERENTES REGLAS DE CUADRATURA CON INTEGRANDOS ESPECIALES

Ana E. Rosso^a, Claudia C. Denner^a, Marcela E. Daniele^b y Guillermo Frascetti^b

^aDepartamento de Matemática, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba,
arosso@exa.unrc.edu.ar, cdenner@exa.unrc.edu.ar

^bDepartamento de Computación, Universidad Nacional de Río Cuarto, Córdoba, Argentina,
marcela@dc.exa.unrc.edu.ar, gfrascetti@dc.exa.unrc.edu.ar

Palabras clave: reglas adaptivas, reglas gaussianas, reglas de cuadratura

Resumen. El cálculo numérico de integrales definidas se puede realizar usando reglas de cuadratura, que permiten obtener aproximaciones tan buenas como se deseen, dependiendo de la precisión requerida. A pesar de la disponibilidad en bibliotecas científicas de rutinas de cálculo eficientes, en ellas no siempre se consideran las ventajas y/o particularidades de las funciones que intervienen. Así, centramos nuestro interés en realizar un estudio que permita caracterizar las ventajas y propiedades de diferentes algoritmos de cuadratura, en particular cuando se utilizan para funciones con comportamiento oscilatorio o decaimiento exponencial. Nos interesa especialmente el caso donde la función $F_0(x)$ es parte del integrando, analizando las transformaciones cuando se utilizan equivalencias con la función error, $\text{erf}(x)$ y con la función esférica de Bessel $j_0(x)$. Debido al comportamiento oscilatorio de las funciones esféricas de Bessel, hay una importante pérdida de precisión en algunos cálculos donde ellas están presentes. Por eso, hacemos una comparación entre diferentes reglas de cuadratura gaussianas y reglas adaptivas, a fin de estudiar su comportamiento y analizar la conveniencia de uso en función de los tiempos de cálculo y de la tolerancia requerida.

1. INTRODUCCIÓN

Para el cálculo numérico de integrales definidas existen en la literatura reglas de cuadratura que permiten obtener aproximaciones tan buenas como se deseen, dependiendo de la precisión requerida. Estudios realizados sobre reglas existentes y sus implementaciones computacionales indican que, a pesar de la disponibilidad en bibliotecas científicas de rutinas de cálculo eficientes, en ellas no siempre se toman en cuenta las ventajas y/o particularidades de las funciones que intervienen. Por eso, nuestro interés se centra en realizar un estudio que permita caracterizar las ventajas y propiedades de diferentes algoritmos de cuadratura, en particular cuando se aplican a funciones que tienen comportamiento oscilatorio o decaimiento exponencial.

En ciertos problemas de la física cuántica aparecen expresiones donde está presente la función

$$F_m(x) = \int_0^1 u^{2m} \exp(-xu^2) du = \frac{1}{2x^{m+\frac{1}{2}}} \Gamma(m + \frac{1}{2}, x)$$

que pertenece a la clase de funciones gamma incompleta reducida, en particular, cuando tomamos $m = 0$ se tiene la función $F_0(x)$. Dicha función es parte del integrando en numerosas expresiones, entre ellas el cálculo de la energía potencial de repulsión, el cálculo de las integrales bielectrónicas cuatricéntricas y tricéntricas que permite calcular la mínima energía de un sistema. Para realizar esos cómputos es posible obtener distintas expresiones transformando el integrando mediante el uso de algunas equivalencias.

La expresión para el cálculo de la energía potencial, McWeeny and Sutcliffe (1969):

$$V_{ij}(\vec{R}_n) = z_n \int_{IR^3} \phi_i(\vec{r}) \phi_j(\vec{r}) \frac{1}{|\vec{r} - \vec{R}_n|} d\vec{r} \quad (1)$$

donde

$$\phi_i(\vec{r}) = \left(\frac{\alpha_i}{\pi}\right)^{\frac{1}{2}} \exp\left(-\alpha_i |\vec{r} - \vec{R}_i|\right) \quad (2)$$

$$\phi_j(\vec{r}) = \left(\frac{2\alpha_j}{\pi}\right)^{\frac{3}{4}} \exp\left(-\alpha_j |\vec{r} - \vec{R}_j|^2\right) \quad (3)$$

son los orbitales de Slater (STO) y orbitales gaussianos (GTO) respectivamente, centrados en \vec{R}_i y \vec{R}_j , vectores de \mathbb{R}^3 , α_i y α_j los coeficientes orbitales, y z_n una constante, puede ser reescrita usando la función F_0 como:

$$V_{ij}(\vec{R}_n) = \hat{k} \int_0^\infty \exp(-x^2) F_0 \left(\frac{|\vec{R}_n - \vec{R}_i \alpha_i^2 + 4x^2 \alpha_j (\vec{R}_n - \vec{R}_j)|^2}{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2 \alpha_j)} \right) \\ \times \exp\left(\frac{-\alpha_i^2 \alpha_j}{\alpha_i^2 + 4x^2 \alpha_j} |\vec{R}_i - \vec{R}_j|^2\right) \frac{x^2}{\alpha_i^2 + 4x^2 \alpha_j} dx$$

La norma utilizada en todos los casos es la norma euclídea.

Ya que estamos interesados en estudiar diferentes equivalencias de la función $F_0(x)$, compararemos expresiones donde interviene la función error, $erf(x)$, y la función esférica de Bessel, $j_0(x)$. En este último caso, los cálculos de la energía potencial pueden ser mejorados aplicando

técnicas estudiadas por integrantes del grupo, tales como separación de variables y aceleración de convergencia. Analizamos a continuación las dos equivalencias que nos interesan en esta oportunidad.

La primera equivalencia surge de utilizar la expresión que relaciona la función $F_0(x)$ con la función error, (Shavitt, 1963):

$$F_0(x) = \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{x}} \operatorname{erf}(\sqrt{x})$$

Así la función F_0 , en los parámetros intervinientes en la expresión de $V_{ij}(\vec{R}_n)$, resulta:

$$F_0 \left(\frac{\left| (\vec{R}_n - \vec{R}_i)\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j(\vec{R}_n - \vec{R}_j) \right|^2}{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)} \right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \frac{\sqrt{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)}}{\left| (\vec{R}_n - \vec{R}_i)\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j(\vec{R}_n - \vec{R}_j) \right|} \times \operatorname{erf} \left(\sqrt{\frac{\left| (\vec{R}_n - \vec{R}_i)\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j(\vec{R}_n - \vec{R}_j) \right|^2}{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)}} \right) \quad (4)$$

Debido a las optimizaciones existentes en las rutinas de programación para la función $\operatorname{erf}(x)$, la expresión (4) se utilizará para obtener el valor de referencia en este trabajo.

Para la segunda equivalencia utilizamos la relación entre la función F_0 y la función esférica de Bessel $j_0(x)$, Shavitt and Karplus (1965),

$$F_0(ap^2) = \left(\frac{1}{\pi a} \right)^{1/2} \int_0^\infty j_0(pr) \exp\left(-\frac{r^2}{4a}\right) dr$$

Tomando

$$a = \frac{1}{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)} \quad (5)$$

y

$$p = \left| (\vec{R}_n - \vec{R}_i)\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j(\vec{R}_n - \vec{R}_j) \right| \quad (6)$$

resulta

$$F_0 \left(\frac{\left| (\vec{R}_n - \vec{R}_i)\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j(\vec{R}_n - \vec{R}_j) \right|^2}{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)} \right) = \left(\frac{4x^2(\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)}{\pi} \right)^{1/2} \times \int_0^\infty j_0 \left(\left| (\vec{R}_n - \vec{R}_i)\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j(\vec{R}_n - \vec{R}_j) \right| r \right) \exp(-r^2 x^2 (\alpha_i^2 + 4x^2\alpha_j)) dr$$

Para realizar las comparaciones, es necesario aproximar la integral impropia por una integral definida, determinando el límite superior de truncamiento L en función de la precisión requerida. Así se prueba que:

Lema 1 Dada la tolerancia requerida, $tol > 0$, puede determinarse el valor de L necesario para que

$$\left| \int_0^\infty j_0(pr) \exp(-ar^2) dr - \int_0^L j_0(pr) \exp(-ar^2) dr \right| \leq tol \quad (7)$$

según la condición

$$L > \max \left\{ \sqrt{\frac{\ln(2 a p tol)}{(-a)}}, 1 \right\} \quad (8)$$

donde p y a están dados por (6) y (5).

Demostración

Como

$$\left| \int_0^\infty j_0(pr) \exp(-ar^2) dr - \int_0^L j_0(pr) \exp(-ar^2) dr \right| = \left| \int_L^\infty j_0(pr) \exp(-ar^2) dr \right|$$

acotemos

$$\left| \int_L^\infty j_0(pr) \exp(-ar^2) dr \right|$$

como $j_0(pr) = \frac{\text{sen}(pr)}{pr}$, entonces

$$\begin{aligned} \left| \int_L^\infty j_0(pr) \exp(-ar^2) dr \right| &\leq \int_L^\infty \left| \frac{\text{sen}(pr)}{pr} \exp(-ar^2) \right| dr \\ &\leq \int_L^\infty \left| \frac{\text{sen}(pr)}{pr} \right| |\exp(-ar^2)| dr \\ &\leq \int_L^\infty \left| \frac{1}{pr} \right| |\exp(-ar^2)| dr \\ &= \frac{1}{p} \int_L^\infty \frac{1}{r} \exp(-ar^2) dr \end{aligned}$$

Para acotar esta última integral suponemos $L \geq 1$, así

$$\begin{aligned} \frac{1}{p} \int_L^\infty \frac{1}{r} \exp(-ar^2) dr &\leq \frac{1}{p} \int_L^\infty r \exp(-ar^2) dr \\ &= \lim_{T \rightarrow +\infty} \left[-\frac{1}{2ap} \exp(-ar^2) \right]_L^T \\ &= \frac{1}{2ap} \exp(-aL^2) \end{aligned}$$

luego

$$\left| \int_L^\infty j_0(pr) \exp(-ar^2) dr \right| \leq \frac{1}{2ap} \exp(-aL^2) < tol$$

con tal de considerar

$$L > \text{máx} \left\{ \sqrt{\frac{\ln(2 a p \text{ tol})}{(-a)}}, 1 \right\} \diamond$$

Debido al comportamiento oscilatorio de las funciones esféricas de Bessel, hay una importante pérdida de precisión en algunos cálculos donde ellas están presentes. Por eso, hacemos un estudio comparativo de diferentes reglas de cuadratura para estudiar su comportamiento y analizar la conveniencia de su uso en función de los tiempos de cálculo y de la precisión necesaria.

En este trabajo consideramos la regla de cuadratura gaussiana basada en los polinomios ortogonales de Legendre, Gauss-Legendre, Heath (2002), en la que se varía el grado del polinomio ortogonal determinando los pesos y los nodos. De las reglas adaptivas de Newton-Cotes se consideró la regla de Simpson, Gander (2000); Loan (2000). Entre las reglas adaptivas basadas en reglas gaussianas se consideró la regla de Gauss-Lobatto y la extensión de Kronrod de la fórmula de Gauss-Lobatto, Gander (2000), que utilizan los polinomios ortogonales de Jacobi para el caso de $\alpha = \beta = 1$

Para obtener los valores de las tablas se utilizaron rutinas propias y las implementaciones que provee Matlab 7.0. En la implementación propia de la regla adaptiva de Simpson, para realizar las llamadas recursivas se considera el criterio sugerido por Gander (2000):

$$(is + (i1 - i2) == is) \text{ or } (a + b)/2 \leq a \text{ or } b \leq (a + b)/2$$

siendo $i1$ e $i2$ dos aproximaciones de la integral con diferentes métodos e

$$is = \frac{(b - a)}{8} (f(a) + f(b) + f(\frac{a + b}{2})) + \sum_{i=1}^5 f(\xi_i)$$

donde a y b se actualizan en cada etapa de la iteración según la regla de cuadratura adaptiva utilizada y ξ es un vector de números aleatorios en (a, b) . Este criterio garantiza que el número de recursiones no sea mayor que el necesario.

2. RESULTADOS

Los resultados mostrados a continuación surgen de considerar $x = 0,33437015$ y el valor de referencia obtenido con la expresión 4, $VR = 0,9058810729718350$. Consideramos dicho valor de x para contrastar la aproximación con la existente en la bibliografía, Abramowitz and Stegun (1972).

En primer lugar mostramos la Tabla 1 con los valores de los límites de integración para truncar la integral impropia, obtenidos usando 8. Para las diferentes tolerancias los valores son:

tolerancia	Valor de L
10^{-6}	9,87
10^{-8}	11,22
10^{-10}	12,42
10^{-12}	13,52

Tabla 1: Límite de integración

Si bien hemos realizado pruebas con diferentes precisiones, en las siguientes tablas sólo mostramos los resultados para las tolerancias 10^{-6} y 10^{-10} .

En la Tabla 2 registramos los valores obtenidos usando la regla de Gauss-Legendre variando el grado del polinomio ortogonal. En la columna *puntos* mostramos el rango de valores para los cuales se verifica esa tolerancia.

Tolerancia	Aproximación	cifras significativas	puntos
10^{-6}	0,905881085	7	20 – 200
10^{-6}	0,905881077	8	300 – 500
10^{-10}	0,90588110	6	20 – 200
10^{-10}	0,905881072972	12	300 – 500

Tabla 2: Cuadratura de Gauss-Legendre

En la Tabla 3 mostramos los resultados obtenidos con las reglas adaptivas. Hemos considerando las reglas adaptivas de Simpson (Quad: Rutina de MatLab, e implementación propia) y de Gauss-Lobatto, para los diferentes requerimientos de tolerancia.

Regla	tolerancia	Aproximación	cifras significativas	evaluaciones
Simpson(Quad)	10^{-6}	0,90588122	7	53
Gauss-Lobatto	10^{-6}	0,90588108	8	48
Simpson	10^{-6}	0,90588114	7	62
Simpson(Quad)	10^{-10}	0,905881072975	12	309
Gauss-Lobatto	10^{-10}	0,905881072972	13	168
Simpson	10^{-10}	0,905881072974	12	338

Tabla 3: Reglas adaptivas

Como además de la precisión nos interesa reducir el tiempo de cómputo, comparamos los tiempos que cada regla requiere para lograr la tolerancia solicitada. En la siguiente tabla mostramos esos valores, para $tol = 10^{-10}$.

Regla	Aproximación	cifras significativas	evaluaciones	tiempo (seg)
Gauss-Legendre	0,905881072972	13	300	0,0013
Simpson(Quad)	0,905881072975	12	309	0,0145
Gauss-Lobatto	0,905881072972	13	168	0,0096
Simpson	0,905881072974	12	338	0,0230

Tabla 4: Tiempos de cómputo

3. CONCLUSIONES

En base a los resultados obtenidos podemos establecer los siguientes puntos:

- ◇ La variación de los valores de x no modifica la cantidad de cifras significativas mostradas en las tablas en el caso de las reglas adaptivas. Para mantener la cantidad de cifras significativas, en la integración de Gauss-Legendre hay que modificar la

cantidad de puntos de integración, a medida que x crece hace falta considerar más puntos para lograr la tolerancia requerida.

◊ Con los valores de L obtenidos, para los diferentes valores de tolerancia requeridas, en todos los casos obtenemos aproximaciones con mayor cantidad de cifras significativas. Esto habilita un estudio posterior para refinar la cota de truncamiento del límite de integración.

◊ Fijada la tolerancia en 10^{-6} , la regla de Gauss-Legendre es la que requiere menor cantidad de evaluaciones, (20 eval), entre las reglas adaptivas consideradas, esa condición la cumple la regla de Gauss-Lobatto, (48 eval). Esta propiedad no se mantiene cuando se aumenta la tolerancia, por ejemplo, para $tol = 10^{-10}$, registramos 300 evaluaciones en Gauss-Legendre contra 168 de Gauss-Lobatto.

◊ Comparando tiempos, el Método de Gauss-Legendre supera a los demás, pero presenta el inconveniente de tener que conocer de antemano con cuantos puntos se logra dicha tolerancia.

REFERENCIAS

- McWeeny R and Sutcliffe B. *Methods of Molecular Quantum Mechanics*. Academic Press, 1969.
- Heath M. *Scientific Computing: An Introductory Survey*. Mc. Graw-Hill, 2002.
- Shavitt I, *The Gaussian-Function in Calculation of Statistical Mechanics and Quantum Mechanics*. *Computational Physics. Advances in Research and Applications*, volume 2. Quantum Mechanics. Academic Press, 1963.
- Shavitt I and Karplus M. *Gaussian-Transform Method for Molecular Integrals .I. Formulation for Energy Integrals*, volume 43. The Journal of Chemical Physics, 1965.
- Loan C.V. *Introduction to Scientific Computing*. Prencite Hall, 2000.
- Abramowitz M and Stegun I. *Handbook of Mathematical Functions an Tables, Bessel function of fractional order*. Ed National Bureau of Standards, App Math. Series, Dover, NY, 1972.
- Gander W. and Gautschi W. *Adaptive Quadrature-Revisited*, volume 40. BIT Numerical Mathematics. Swets Zeitlinger, 2000.