Национальный исследовательский университет ИТМО
Факультет информационных технологий и программирования
Информационные системы и технологии

Численное дифференцирование и интегрирование

Отчёт по лабораторной работе №1

Работу выполнили:
Борздун А. В., студентка M32051
Деревицкая П. К., студентка M32081
Фирсова Д. А., студентка M32081

Преподаватель:
Свинцов М. В.

Санкт-Петербург
2023

Оглавление

Введение

Цель работы: знакомство с численными методами дифференцирования и интегрирования.

Задачи, решаемые во время выполнения работы:

1. Реализация данных методов на Python 3.
2. Аналитическое вычисление производных и значений определенных интегралов.
3. Нахождение среднеквадратичного отклонения численных от истинных значений.
4. Построение графиков производной и исходной функции, вычисленных значений в узлах сетки, зависимости отклонения от величины шага.

Численное дифференцирование
Постановка задачи

Пусть функция $f(x)$ определена, непрерывна и непрерывно дифференцируема на промежутке $[a, b]$ и точка x лежит на этом промежутке, в частности, может совпадать с одним из его концов. Будем предполагать, что нам известны точно вычисленные значения функции $f(x)$ в точках: $a = x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n = b$. Требуется найти значение производной $f'(x)$ в точке x .

Введем пространство дискретных функций.

Пусть $x_{i=0}^{N}$ набор точек, расчетная сетка, где:
Шаг сетки: $h = x_{i+1} - x_i$
Равномерная сетка: $x_{i+1} - x_i = x_i - x_{i-1}$
Сеточная функция: $f(x_i) = f_i$

Тогда первую производную можно вычислить по формулам **правой разностной** $\dfrac{df}{dx_{числ}} = \dfrac{f_{i+1} - f_i}{h}$ и **левой разностной** $\dfrac{df}{dx_{числ}} = \dfrac{f_i - f_{i-1}}{h}$ **производных.**

Рассмотрим погрешность приближенного дифференцирования. Для этого изучим сам метод погрешности производной, считая, что $f(x)$ нужное число раз непрерывно дифференцируема.

$$\frac{df}{dx_{числ}} = \frac{f_{i+1} - f_i}{h}$$

Для оценки воспользуемся разложением в ряд Тейлора.

$$f_{i+1} = f(x_i + 1) = f(x_i + h) = f_i + f_i'h + f_i''\frac{h^2}{2!} + O(h^3)$$

Подставим данное выражение в формулу правой разностной производной.

$$\frac{df}{dx_{числ}} = \frac{f_i + f_i'h + f_i''\frac{h^2}{2!} + O\left(h^3\right) - f_i}{h} = f_i' + f_i\frac{h}{2!} + O\left(h^2\right),$$

где f_i' — точное значение производной; $f_i\dfrac{h}{2!} + O(h^2)$ — погрешность метода; $f_i''\dfrac{h}{2!}$ — главный член погрешности.

$$\Delta_{method} \le \frac{h}{2} max\left|f_i''\right| \qquad \textbf{или} \qquad \Delta_{method} \le \frac{h}{2} M_2$$

Отсюда следует, что это метод первого порядка аппроксимации. Аналогично для левой разностной производной.

Рассмотрим, что ещё может повлиять на точность численного дифференцирования. Пусть существует некая функция $f\left(x_i\right)$ с неустранимой погрешность δ для каждого i .

$$\frac{df}{dx_{числ}} = \frac{f_{i+1} \pm \delta - f_i \pm \delta}{h}$$

Получается, что в идеальном случае $\Delta_{\text{неустр}} = \dfrac{2\delta}{h}$.

Тогда $\Delta_{полная} = \Delta_{method} + \Delta_{неустр} = \dfrac{h}{2}M_2 + \dfrac{2\delta}{h}$.

Следовательно, существует значение шага h, при котором погрешность минимальная. Установим её на примере, описанном выше.

$$\left(\Delta_{полная}\right)_h^{\prime} = \frac{1}{2}M_2 - \frac{2\delta}{h^2} = 0$$

Приравняв производную к нулю, найдём экстремум, соответствующий оптимальному шагу численного дифференцирования.

$$h_{опт} = 2\sqrt{\frac{\delta}{M_2}}$$

<u>*Замечание.*</u> Величина $h_{опт}$ вычисляется персонально для каждой функции.

Рассмотрим метод центральной разностной производной и его порядок точности.

$$\frac{df}{dx_{числ}} = \frac{f_{i+1} - fi - 1}{2h}$$

$$f_{i\pm1} = f\left(x_{\{i\pm1\}}\right\} = f\left(x_i \pm h\right) = f_i \pm f_i^{\prime}h + f_i^{\prime\prime}\frac{h^2}{2!} \pm f_i^{\prime\prime\prime}\frac{h^3}{3!} + O\left(h^3\right)$$

$$\frac{df}{dx_{\text{числ}}} = \frac{f_{i+1} - f_i - 1}{2h} = \frac{f_i + f_i^{\prime}h + f_i^{\prime\prime}\frac{h^2}{2!} + f_i^{\prime\prime\prime}\frac{h^3}{3!} - \left(f_i - f_i^{\prime}h + f_i^{\prime\prime}\frac{h^2}{2!} - f_i^{\prime\prime\prime}\frac{h^3}{3!} + O(h^3)\right)}{2h} = f_i^{\prime} + f_i^{\prime\prime\prime}\frac{h^2}{6} + O(h^2)$$

Следовательно, данный метод второго порядка аппроксимации.

Практическое решение задачи

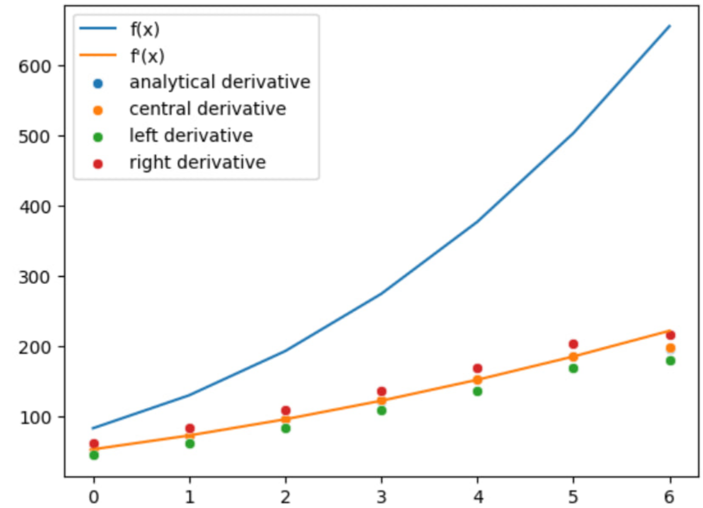
Для тестирования мы выбрали две функции: $f(x) = x^3 + 5x - 1$ и $f(x) = \frac{1}{x^3}$.

Для каждой из них были вычислены аналитические производные. Используемые подходы: правая разностная производная, левая разностная производная – методы первого порядка точности. В целях повышения точности воспользовались третьим подходом — центральной разностной производной, который имеет второй порядок точности. Посчитанные значения производных мы сохранили в массив, по ним после построили график. На том же графике была указана фактическая функция и ее производная.

- **Полученные значения для кубической функции** $f(x) = x^3 + 5x - 1$

```
Array of right derivative values: [62.5625, 83.9375, 108.6875, 136.8125, 168.3125, 203.1875, 215.5625]
Array of left derivative values: [44.5625, 62.5625, 83.9375, 108.6875, 136.8125, 168.3125, 179.5625]
Array of central derivative values: [53.5625, 73.25, 96.3125, 122.75, 152.5625, 185.75, 197.5625]
Array of derivative values: [53.0, 72.6875, 95.75, 122.1875, 152.0, 185.1875, 197]
```

Построенный график:



Проанализировав полученные результаты, мы убедились, что метод центральной разностной производной является наиболее точным.

Далее мы нашли среднеквадратичное отклонение между прогнозируемыми и фактическими значениями:

```
Now h is:  0.75
Central deviation: 51.155889824882436
Left deviation: 51.155889824882436
Right deviation: 54.29289191270712
```

Были также построены графики при уменьшении шага в 2, 4, 8 и 16 раз. При увеличении количества узлов среднеквадратичное отклонение убывало при использовании метода правых производных. При расчете с использованием методов левых и центральных производных значения изменялись меньше, но также линейно убывали:

```
Now h is:  0.375
Central deviation: 46.437896110724374
Left deviation: 46.437896110724374
Right deviation: 47.870139888752675

Now h is:  0.1875
Central deviation: 44.96293557684247
Left deviation: 44.96293557684247
Right deviation: 45.654858819897264

Now h is:  0.09375
Central deviation: 43.073126839767184
Left deviation: 43.073126839767184
Right deviation: 43.40633057084186

Now h is:  0.046875
Central deviation: 42.618575542494526
Left deviation: 42.618575542494526
Right deviation: 42.78340484614979
```

График значений, полученных с помощью метода правой разностной производной. На графике по оси X указаны значения h, последовательно уменьшаемые. По оси Y расположены значения посчитанных среднеквадратичных отклонений:

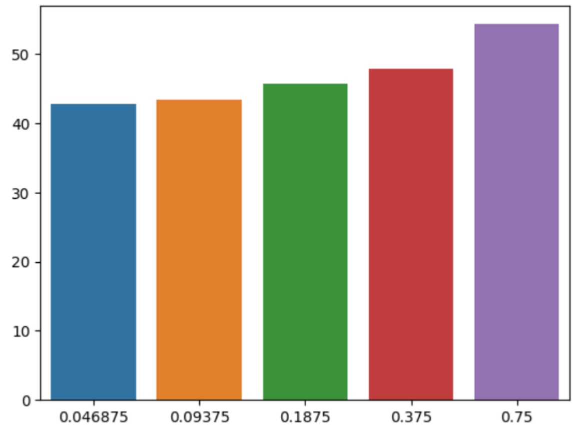


График значений, полученных с помощью метода левой разностной производной:

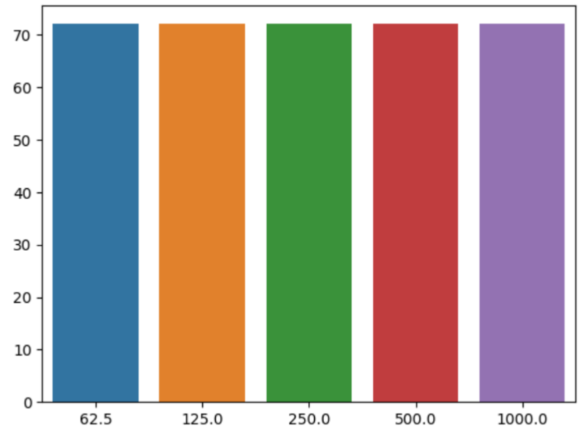
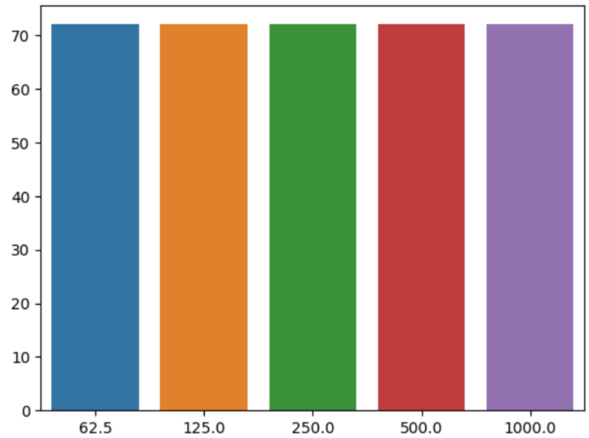


График значений, полученных с помощью метода центральной разностной производной:



Опираясь на полученные данные, мы убедились, что методы левых и центральных производных при заданной кубической функции наиболее точны.

- **Полученные значения для гиперболы** $f(x) = \frac{1}{x^3}$

Значения рассчитанных производных:

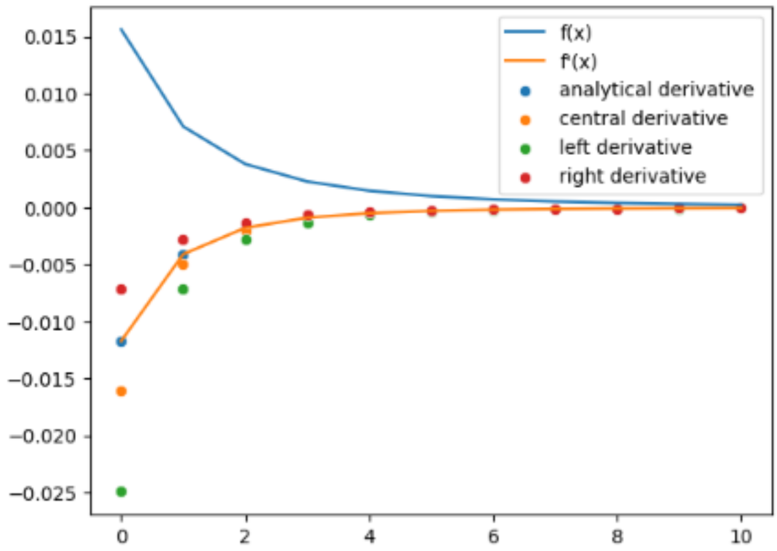
Array of right derivative values: [-0.0070941909421939, -0.0027477280031186, -0.0012805569987026624, -0.0006755142888924256, -0.00038950976709241136, -0.0002401831268221573, -0.00015607748880001036, -0.00010578752197197014, -7.422572575057998e-05, -5.3608949155281964e-05, -5.090561950119264e-05]

Array of left derivative values: [-0.024940779883381933, -0.0070941909421939, -0.0027477280031186, -0.001280556998702663, -0.0006755142888924256, -0.00038950976709241136, -0.0002401831268221573, -0.00015607748880001028, -0.00010578752197197014, -7.422572575057998e-05, -7.017565221450038e-05]

Array of central derivative values: [-0.01601748541278792, -0.00492095947265625, -0.002014142500910631, -0.0009780356437975443, -0.0005325120279924185, -0.00031484644695728436, -0.00019813030781108383, -0.00013093250538599022, -9.000662386127506e-05, -6.391733745293097e-05, -6.054063585784651e-05]

Array of derivative values: [-0.01171875, -0.004103060116942683, -0.0017881393432617183, -0.0008992219212559758, -0.0005002539956287138, -0.0003, -0.00019065542352144943, -0.00012689207933549968, -8.769314004861054e-05, -6.252797918641997e-05, -5.925925925925926e-05]

Полученный график:



Среднеквадратичное отклонение:

```
Now h is:  1.2
Central deviation: 0.004552271858574604
Left deviation: 0.0033412941201599045
Right deviation: 0.002026545125956749
```

Среднеквадратичное отклонение при уменьшении шага:

```
Now h is:  0.6
Central deviation: 0.003049279595425084
Left deviation: 0.0028404682604745452
Right deviation: 0.002179441063708274

Now h is:  0.3
Central deviation: 0.0026117406389617793
Left deviation: 0.0025682201798548523
Right deviation: 0.0022427711914120877

Now h is:  0.15
Central deviation: 0.0024290008834008015
Left deviation: 0.00241913224603865
Right deviation: 0.0022593441776234983

Now h is:  0.075
Central deviation: 0.0023527303304820184
Left deviation: 0.00235037502438645 9
Right deviation: 0.002271114686491066
```

График значений, полученных с помощью метода правых производных:

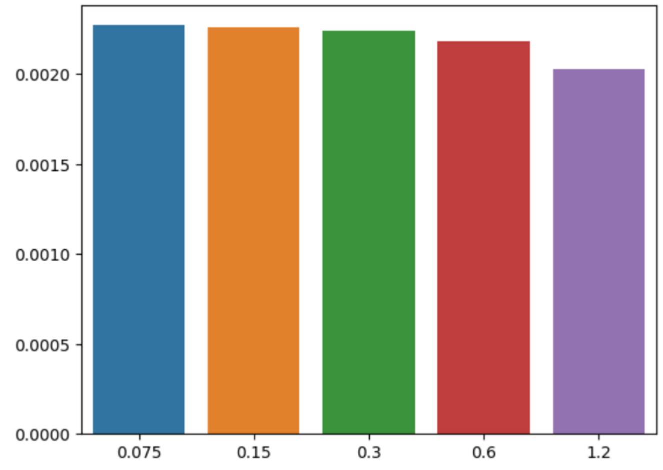


График значений, полученных с помощью метода левых производных:

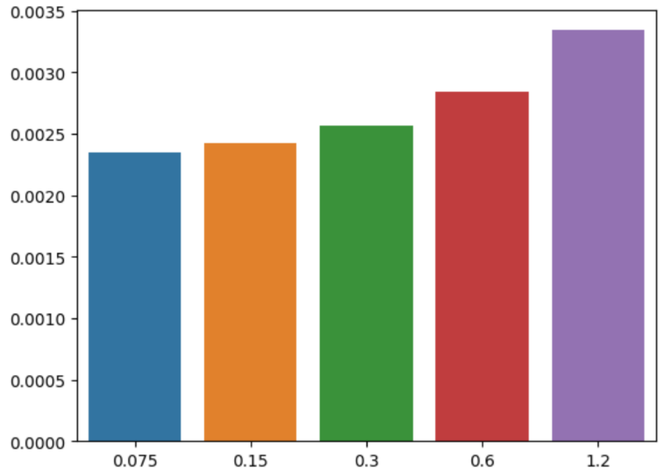
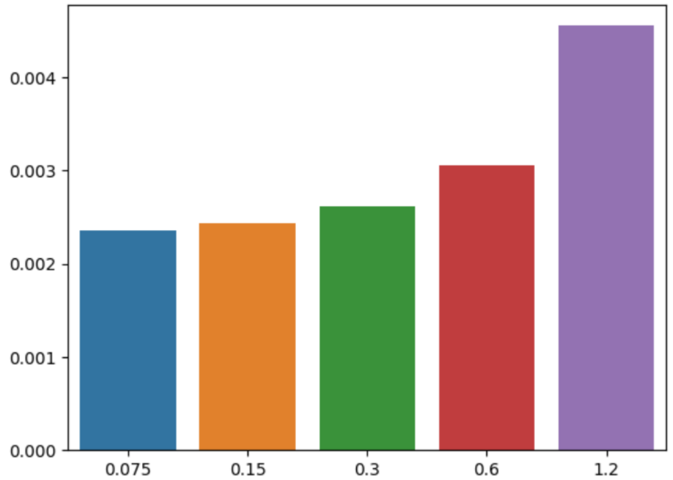


График значений, полученных с помощью метода центральных производных:



В данном случае наименьшее отклонение мы получаем при использовании метода правых производных.

Численное интегрирование
Постановка задачи

Основная идея большинства методов численного интегрирования состоит в замене подынтегральной функции на более простую, интеграл от которой легко вычисляется аналитически. При этом для оценки значения интеграла получаются формулы вида:

$$I \approx \sum_{i=1}^{n} w_i f(x_i),$$

где n — число точек, в которых вычисляется значение подынтегральный функции. Точки x_i называются узлами метода, числа w_i весами узлов. При замене подынтегральной функции на полином нулевой, первой и второй степени получаются соответственно методы прямоугольников, трапеций и парабол (Симпсона).

Частным случаем является метод построения интегральных квадратурных формул для равномерных сеток, известный как формулы Котеса. Основной идеей метода является замена подынтегральной функции каким-либо интерполяционным многочленом. После взятия интеграла можно написать:

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=0}^{n} H_i f(x_i) + r_n(f),$$

где числа H_i называются коэффициентами Котеса и вычисляются как интегралы от соответствующих многочленов, стоящих в исходном интерполяционном многочлене для подынтегральной функции при значении функции в узле $x_i = a + ih$;
$h = \dfrac{b-a}{n}$ — шаг сетки, n — число узлов сетки.
Слагаемое $r_n(f)$ учитывают не всегда. Это погрешность метода, которая может быть найдена разными способами.

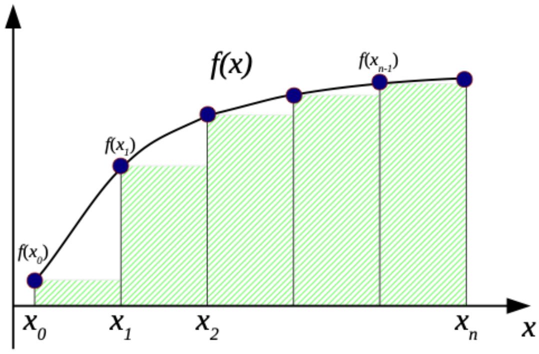
Частные случаи формулы Котеса: n = 0 — Формулы прямоугольников
n = 1 — Формулы трапеций
n = 2 — Формулы Симпсона

- **Метод прямоугольников**

Пусть требуется определить значение интеграла функции на отрезке $[a, b]$. Этот отрезок делится точками $x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n$ на n равных отрезков длиной $\Delta x = \dfrac{b-a}{n}$. Обозначим через $y_0, y_1, \ldots, y_{n-1}, y_n$ значение функции f(x) в точках $x_0, x_1, \ldots, x_{n-1}, x_n$. Далее составляем суммы $y_0\Delta x + y_1\Delta x + \ldots + y_{n-1}\Delta x$. Каждая из сумм — интегральная сумма для $f(x)$ на $[a, b]$ и поэтому приближенно выражает интеграл.

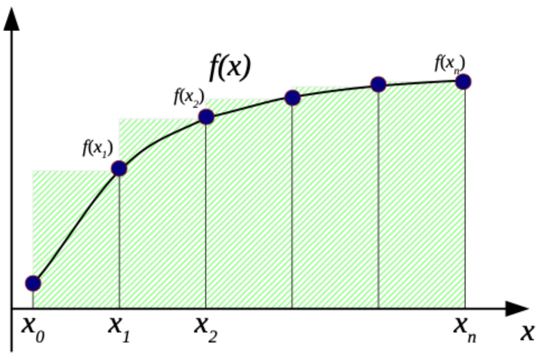
Если заданная функция положительная и возрастающая, то эта формула выражает площадь ступенчатой фигуры, составленной из «входящих» прямоугольников, также называемая ***формулой левых прямоугольников:***

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{n}(y_0 + y_1 + \ldots + y_{n-1}).$$



Формула, выражающая площадь ступенчатой фигуры, состоящей из «выходящих» прямоугольников, также называется ***формулой правых прямоугольников:***

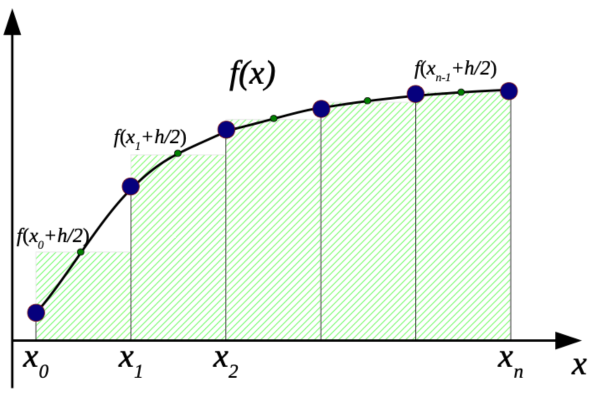
$$\int_a^b f(x)dx = \frac{b-a}{n}(y_1 + \ldots + y_{n-1} + y_n)$$



Чем меньше длина отрезков, на которые делится отрезок $[a, b]$, тем точнее значение, вычисляемое по этой формуле, искомого интеграла.

Очевидно, стоит рассчитывать на большую точность если брать, в качестве опорной точки для нахождения высоты, точку посередине промежутка. В результате получаем ***формулу средних прямоугольников:***

$$\int_a^b f(x)dx = h\sum_{i=1}^{n} f(x_{i-1} + \frac{h}{2}) = h\sum_{i=1}^{n} f(x_i - \frac{h}{2})$$

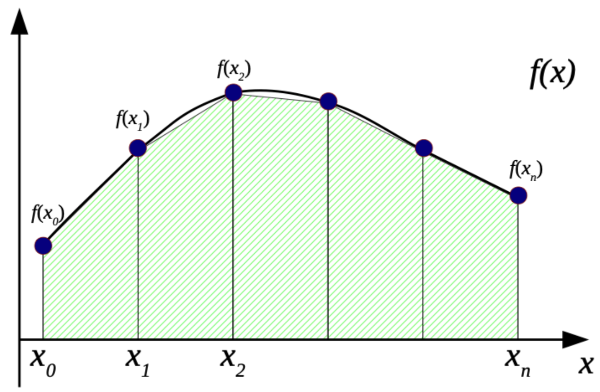


- **Метод трапеций**

  Если функцию на каждом из частичных отрезков аппроксимировать прямой, проходящей через конечные значения, то получим метод трапеций.

  Площадь трапеции на каждом отрезке:

$$I_i = h\frac{f(x_{i-1}) + f(x_i)}{2}$$



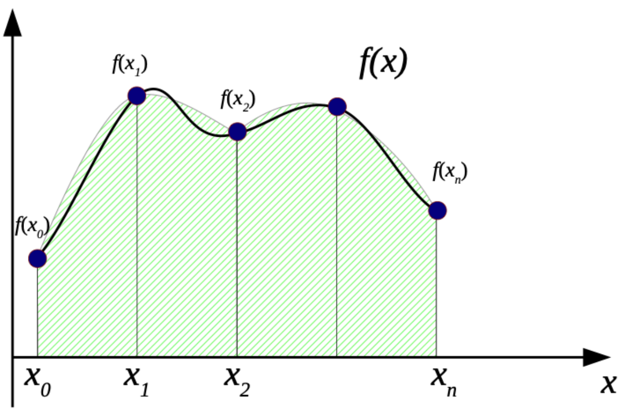
  Полная формула трапеций в случае деления всего промежутка интегрирования на отрезки одинаковой длины h:

$$I \approx h\left(\frac{f(x_0) + f(x_n)}{2} + \sum_{i=1}^{n-1} f(x_i)\right)$$

- **Метод Симпсона**

  Использовав три точки отрезка интегрирования, можно заменить подынтегральную функцию параболой. Обычно в качестве таких точек используют концы отрезка и его среднюю точку. В этом случае формула имеет очень простой вид:

$$I \approx \frac{b-a}{6}\left(f(a) + 4f\left(\frac{a+b}{2}\right) + f(b)\right)$$



Практическое решение задачи

Мы реализовали методы численного интегрирования. С помощью использования формул левых, правых, центральных прямоугольников, трапеций и Симпсона были посчитаны определенные интегралы для двух функций: $f(x) = x^3 + 5x - 1$ и $f(x) = \frac{1}{x^3}$. Вычисленные значения мы сравнивали с аналитическим расчетом.

- **Полученные значения для гиперболы** $f(x) = \frac{1}{x^3}$

```
Now h is:  1.2
Left rectangle method:  0.07960819967220108
Right rectangle method:  0.03988726779675024
Middle rectangle method:  0.05487623083575237
Trapezoid rectangle method:  0.05974773373447566
Simpson's formula:  0.0565000651353268
Analytic integral:  0.0290277777777778
```

Далее мы уменьшали шаг сетки в 2, 4, 8, 16 раз и рассматривали зависимость среднеквадратичного отклонения численного ответа от аналитического. Мы выяснили, что при уменьшении шага отклонение уменьшается.

```
Now h is:  0.6
Left rectangle method:  0.06545062906485007
Right rectangle method:  0.034258743007239606
Middle rectangle method:  0.04624416510488128
Trapezoid rectangle method:  0.04985468603604483
Simpson's formula:  0.0474476720819358
Analytic integral:  0.0290277777777778

Now h is:  0.3
Left rectangle method:  0.05912086100813599
Right rectangle method:  0.031691387371522585
Middle rectangle method:  0.042342605961409194
Trapezoid rectangle method:  0.045406124189829235
Simpson's formula:  0.04336377870421588
Analytic integral:  0.0290277777777778
```

```
Now h is:  0.15
Left rectangle method:  0.056158164499584426
Right rectangle method:  0.030472315995965598
Middle rectangle method:  0.04050165592797791
Trapezoid rectangle method:  0.043315240247775035
Simpson's formula:  0.04143951736791026
Analytic integral:  0.0290277777777778

Now h is:  0.075
Left rectangle method:  0.054728440830035634
Right rectangle method:  0.029879128289605966
Middle rectangle method:  0.03960907178965033
Trapezoid rectangle method:  0.04230378455982083
Simpson's formula:  0.04050730937970712
Analytic integral:  0.0290277777777778
```

График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода левых прямоугольников:

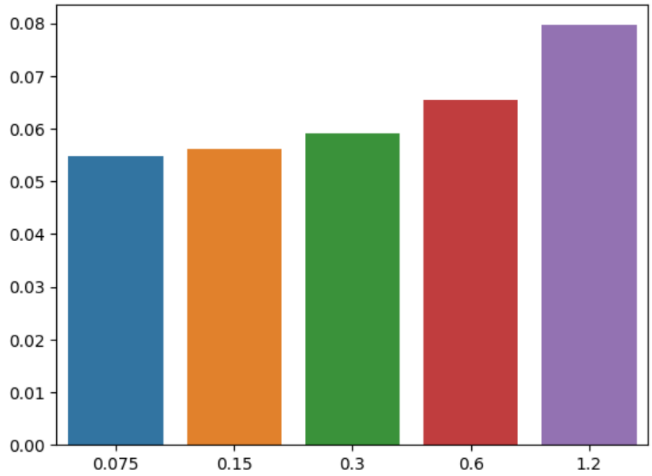


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода правых прямоугольников:

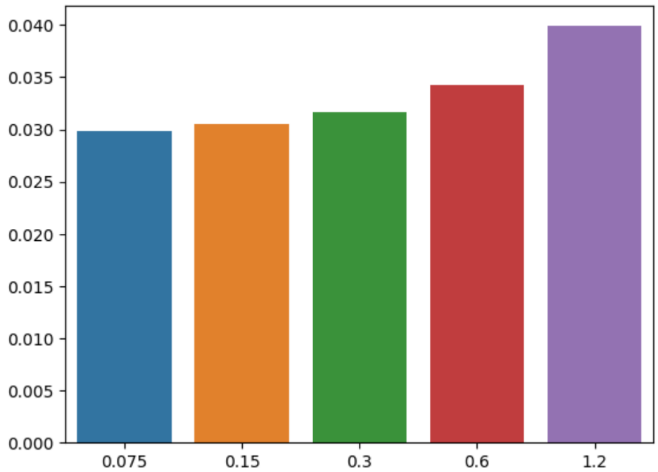


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода средних прямоугольников:

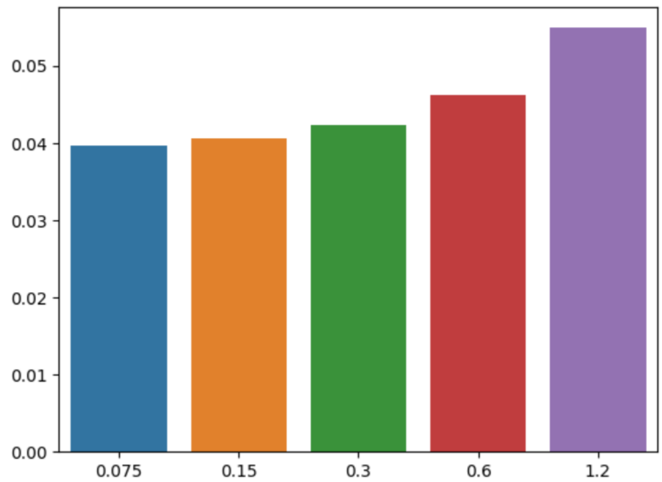


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода трапеций:

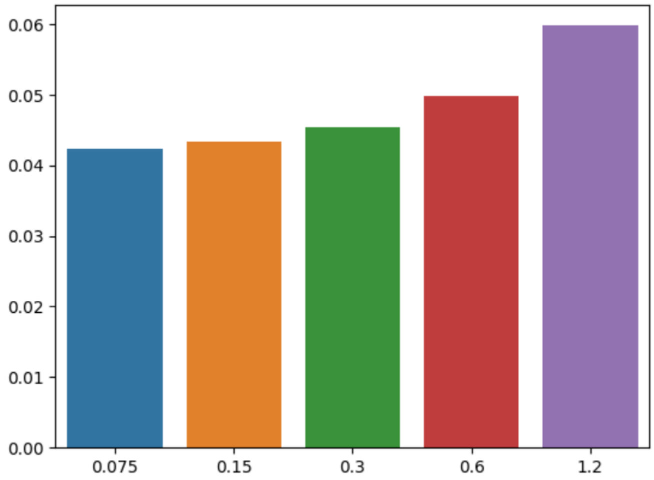
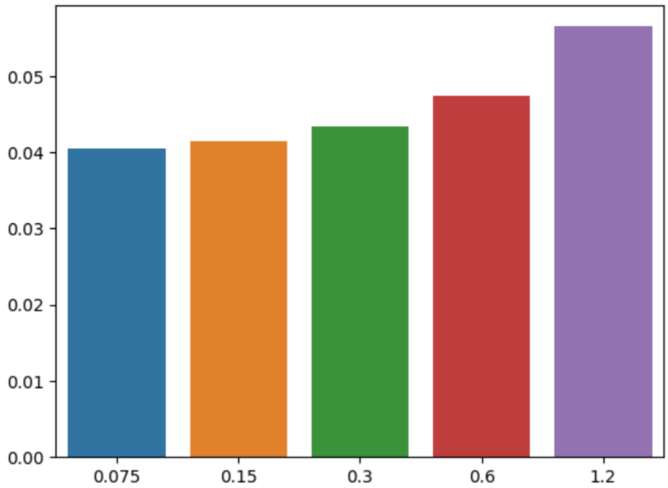


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода Симпсона:



Исходя из полученных результатов, можно сделать вывод, что для данной функции наиболее точным является метод правых прямоугольников.

- **Полученные значения для кубической функции** $f(x) = x^3 + 5x - 1$

```
Now h is:  0.75
Left rectangle method:  1078.30078125
Right rectangle method:  1662.03515625
Middle rectangle method:  1347.52734375
Trapezoid rectangle method:  1370.16796875
Simpson's formula:  1355.07421875
Analytic integral:  1076.0

Now h is:  0.375
Left rectangle method:  1177.215087890625
Right rectangle method:  1796.017822265625
Middle rectangle method:  1463.237548828125
Trapezoid rectangle method:  1486.616455078125
Simpson's formula:  1471.030517578125
Analytic integral:  1076.0

Now h is:  0.1875
Left rectangle method:  1122.590835571289
Right rectangle method:  1716.979751586914
Middle rectangle method:  1397.2413482666016
Trapezoid rectangle method:  1419.7852935791016
Simpson's formula:  1404.7559967041016
Analytic integral:  1076.0
```

```
Now h is:  0.09375
Left rectangle method:  1146.7094736099243
Right rectangle method:  1749.6191110610962
Middle rectangle method:  1425.4423685073853
Trapezoid rectangle method:  1448.1642923355103
Simpson's formula:  1433.0163431167603
Analytic integral:  1076.0

Now h is:  0.046875
Left rectangle method:  1132.8883972764015
Right rectangle method:  1729.6314430832863
Middle rectangle method:  1408.7483845353127
Trapezoid rectangle method:  1431.259920179844
Simpson's formula:  1416.2522297501564
Analytic integral:  1076.0
```

График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода правых прямоугольников:

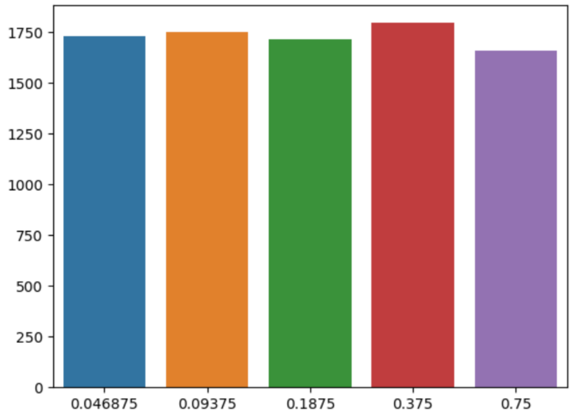


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода левых прямоугольников:

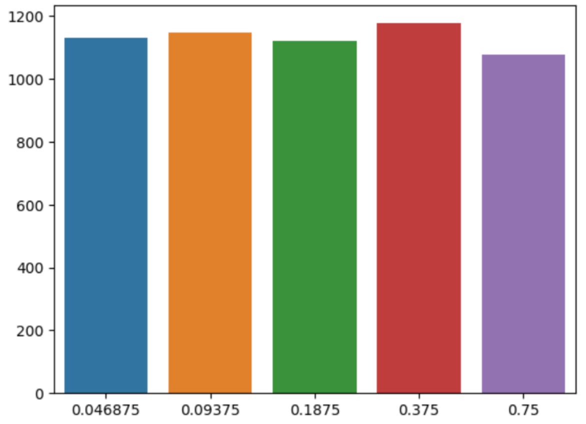


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода средних прямоугольников:

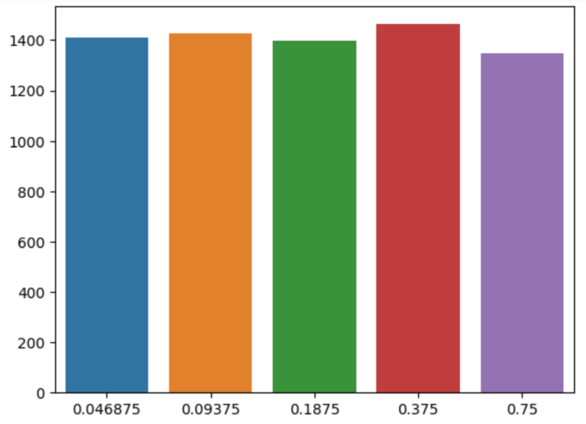


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода трапеций:

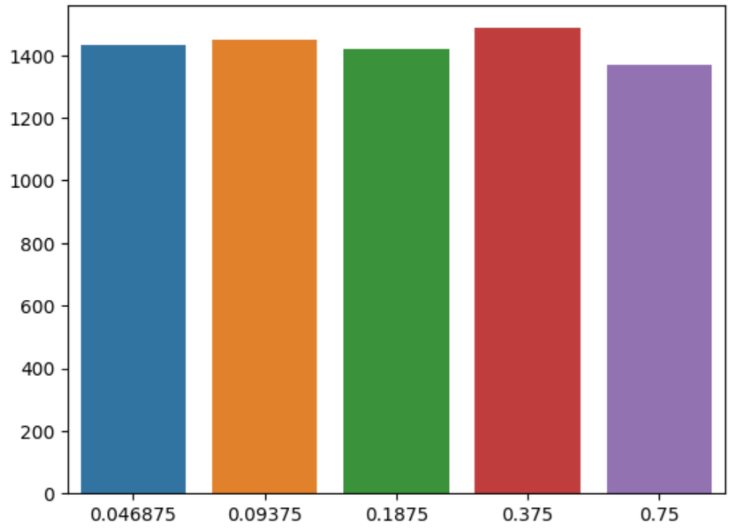
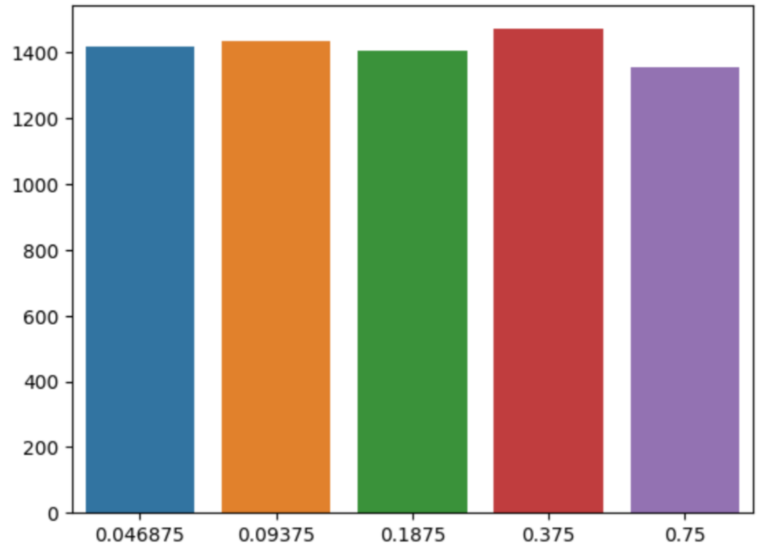


График зависимости среднеквадратичного отклонения от величины шага сетки h для метода Симпсона:



Исходя из полученных значений, можно сделать вывод, что для данной функции наиболее точным является метод левых прямоугольников.

Вывод

Во время выполнения лабораторной работы мы познакомились с численными методами дифференцирования и интегрирования. Реализовали их с помощью языка программирования Python 3, проанализировали точность различных формул на двух функциях с помощью вычисления среднеквадратичного отклонения численных значений от истинных, а также построили графики для каждого метода и сравнили их точность при разных значениях шага сетки.

Вычислив значения производной по четырем разным методам в узлах сетки и создав систему координат для графиков функций, производных и вычисленных точек, мы заметили, что точки вычисленной аналитически производной и метода центральной разностной производной совпадают, а для левой и правой, точки находятся выше графика производной и ниже соответственно. Для функции $f(x) = \frac{1}{x^3}$ на промежутке [9.5; 15] точки всех методов совпадают, в то время как для $f(x) = x^3 + 5x - 1$ погрешность методов на всём выбранном участке остается неизменной.

Реализовав методы численного интегрирования, мы заметили, что для выбранных нами функций, наиболее точным является метол левых прямоугольников, и это можно доказать с помощью приведенных значений среднеквадратичного отклонения - у него они самые маленькие. Также, рассмотрев полученные значения площадей при убывании параметра h, мы выяснили, что при некотором его значении метод Симпсона резко уменьшает свою погрешность ≈ в 2.5 раза и при $h < h_{\text{оптимальное}}$ погрешность снова начинает возрастать. Следовательно, можно сделать вывод о том, что и для численных интегральных методов есть своё оптимальное значение шага сетки.

Таким образом, мы узнали, что методы численного дифференцирования и интегрирования можно использовать, когда функцию невозможно или очень трудно продифференцировать или проинтегрировать аналитически. Кроме того, формулы этих методов широко используются при разработке вычислительных методов решения прикладных задач.