



Министерство науки и высшего образования Российской Федерации
федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего профессионального образования
«Московский государственный технический университет имени
Н.Э. Баумана (национальный исследовательский университет)»
(МГТУ им. Н.Э. Баумана)

ФАКУЛЬТЕТ «Робототехники и комплексной автоматизации»
КАФЕДРА «Системы автоматизированного проектирования (РК-6)»

ОТЧЕТ О ВЫПОЛНЕНИИ ЛАБОРАТОРНОЙ РАБОТЫ №2

по дисциплине «Вычислительная математика»

Студент:	Турунов Дмитрий Николаевич
Группа:	РК6-53Б
Тип задания:	Лабораторная работа
Тема:	Использование аппроксимаций для численной оптимизации

Студент

подпись, дата

Турунов Д.Н.

Фамилия, И.О.

Преподаватель

подпись, дата

Фамилия, И.О.

Москва, 2023

Содержание

Использование аппроксимаций для численной оптимизации	3
Задание	3
Цель выполнения лабораторной работы	3
1 Базовая часть	4
1. Разработка функций ‘composite_simpson’ и ‘composite_trapezoid’	4
2. Расчет интеграла для $y(x)$	5
3. Построение log – log графиков абсолютной погрешности	6
4. Определение порядка точности формулы по графику	7
5. Сравнение аналитических и экспериментальных порядков точности	7
6. Оптимальный шаг интегрирования	8
2 Продвинутая часть	8
1. Преобразование задачи о минимизации функционала к полудискретной форме	8
2. Преобразование задачи к полностью дискретной форме	8
3. Минимизация функционала	9
4. Анализ погрешности решения	11
3 Опциональные задания	11
5. Применение метода градиентного спуска и автоматического дифференцирования в численном решении задачи оптимизации	11
6. Использование интерполяции кубическими сплайнами	12
4 Заключение	13

Использование аппроксимаций для численной оптимизации

Задание

Требуется (базовая часть):

1. Разработать функции `composite_simpson(a, b, n, f)` и `composite_trapezoid(a, b, n, f)` численного интегрирования некоторой функции f на интервале $[a; b]$ по n узлам с помощью составной формулы Симпсона и составной формулы трапеций соответственно.

2. Рассчитать интеграл (18) для функции $y(x)$, соответствующей кривой наискорейшего спуска, с помощью составной формулы Симпсона и составной формулы трапеций для множества значений $n \in [3; 9999]$.

3. На одной координатной плоскости постройте $\log - \log$ графики зависимостей абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования для обеих формул.

4. Объясните, каким образом по полученному графику можно определить порядок точности формулы.

5. Для обеих формул сравните известные аналитические порядки точности с порядками точности, получаемыми с помощью соответствующих графиков. Обоснуйте алгоритм сравнения.

6. Существует ли оптимальный шаг интегрирования для первой или второй формулы, минимизирующий достижимую погрешность? Обоснуйте свой ответ.

Требуется (продвинутая часть):

1. Используя кусочно-линейную интерполяцию с равноудалёнными узлами, преобразовать задачу о минимизации функционала к полудискретной форме, где аргументами минимизации будут параметры кусочно-линейной интерполяции.

2. Далее, используя составную формулу Симпсона, преобразовать задачу к полностью дискретной форме.

3. Решить полученную задачу минимизации, используя различные конфигурации дискретизации: с шагом интерполяции и шагом интегрирования от 10^{-3} до 1.

4. Используя $\log - \log$ графики и линии уровня, оценить зависимость погрешности решения от шага интерполяции и шага интегрирования.

Опциональные задания:

5. Использовать метод градиентного спуска и автоматическое дифференцирование для численного решения задачи оптимизации.

6. Использовать интерполяцию кубическими сплайнами (возможно, с модификациями) вместо кусочно-линейной интерполяции.

Цель выполнения лабораторной работы

Цель данной лабораторной работы - развить и углубить навыки в численных методах интегрирования и оптимизации. Основные задачи включают разработку функций

для численного интегрирования по формулам Симпсона и трапеций, а также применение этих методов для вычисления интегралов специфических функций. Особое внимание уделяется анализу погрешности этих методов и определению их точности через графический анализ. Дополнительно, работа включает продвинутые задачи по оптимизации функционалов с использованием различных методов интерполяции и минимизации. Целью этих заданий является понимание влияния шага интерполяции и интегрирования на точность решения, а также применение современных методов численной оптимизации. Это даст понимание ключевых аспектов численного анализа и его применения в решении сложных математических задач.

1 Базовая часть

1. Разработка функций ‘composite_simpson’ и ‘composite_trapezoid’

Функция ‘composite_simpson(a, b, n, f)’

Функция ‘composite_simpson’ (листинг 1) реализует составную формулу Симпсона для численного интегрирования функции f на интервале $[a, b]$ с использованием n равноотстоящих узлов. Формула Симпсона основана на аппроксимации подынтегральной функции параболой на каждом подинтервале. Математически это выражается как:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} f(x_{2j}) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(x_n) \right]$$

где $h = \frac{b-a}{n}$ и $x_j = a + jh$ являются точками узлов.

Листинг 1. Функция ‘composite_simpson’

```

1 def composite_simpson(a, b, n, f):
2     if n % 2 != 0:
3         n += 1
4     h = (b - a) / n
5     x = np.linspace(a, b, n+1)
6     y = f(x)
7
8     result = y[0] + y[-1]
9     result += 2 * np.sum(y[2:-1:2])
10    result += 4 * np.sum(y[1::2])
11
12    return (h / 3) * result

```

Функция ‘composite_trapezoid(a, b, n, f)’

Функция ‘composite_trapezoid’ (листинг 2) использует составную формулу трапеций для численного интегрирования функции f . Этот метод основан на аппроксимации подынтегральной функции линейной функцией на каждом подинтервале. Формула выглядит следующим образом:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{2} \left[f(x_0) + 2 \sum_{j=1}^{n-1} f(x_j) + f(x_n) \right]$$

где, как и в предыдущем случае, $h = \frac{b-a}{n}$ и $x_j = a + jh$.

Листинг 2. Функция ‘composite_trapezoid’

```

1 def composite_trapezoid(a, b, n, f):
2     h = (b - a) / n
3     x = np.linspace(a, b, n+1)
4     y = f(x)
5
6     result = y[0] + y[-1]
7     result += 2 * np.sum(y[1:-1])
8
9     return (h / 2) * result

```

2. Расчет интеграла для $y(x)$

Расчет интеграла для функции $y(x)$, соответствующей кривой наискорейшего спуска (брахистохроны, рис. 1), с использованием обеих составных формул (Симпсона и трапеций) включает следующие шаги:

- Определение функции $y(x)$ и ее производной $y'(x)$.
- Реализация функции $Fy(x) = \sqrt{\frac{1+(y'(x))^2}{2gy(x)}}$, которая используется как подынтегральная функция.
- Применение обеих составных формул численного интегрирования для вычисления интеграла $\mathcal{F}[y]$ на интервале от a до b для различных значений n в диапазоне от 3 до 9999.

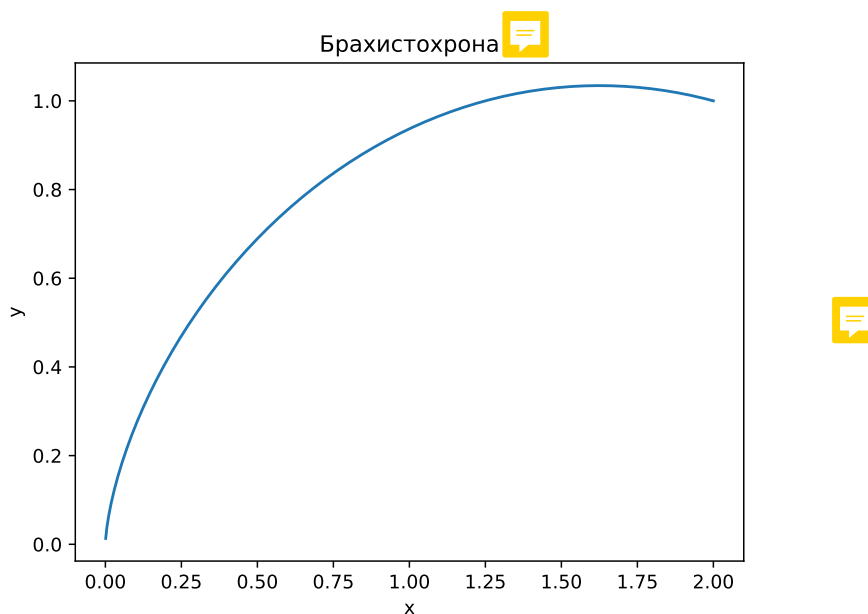


Рис. 1. График функции $y(x)$, представляющий кривую брахистохроны.

3. Построение log – log графиков абсолютной погрешности

Построение графиков зависимости абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования (выраженного через количество узлов n) для обеих методик производится следующим образом:

- Вычисление абсолютной погрешности для каждого значения n , сравнивая полученные значения интегралов с 'точным' значением интеграла, полученным с использованием очень мелкого шага.
- Построение log – log графика (рис. 2), где по горизонтальной оси откладываются значения n , а по вертикальной — соответствующие абсолютные погрешности.
- На том же графике можно отобразить ожидаемые линии ошибок для каждой методики, основываясь на их теоретических порядках точности ($1/4$ для Симпсона и h^2 для трапеций).

Этот подход позволяет наглядно сравнить эффективность обеих методик и оценить, насколько хорошо экспериментальные данные соответствуют теоретическим ожиданиям.

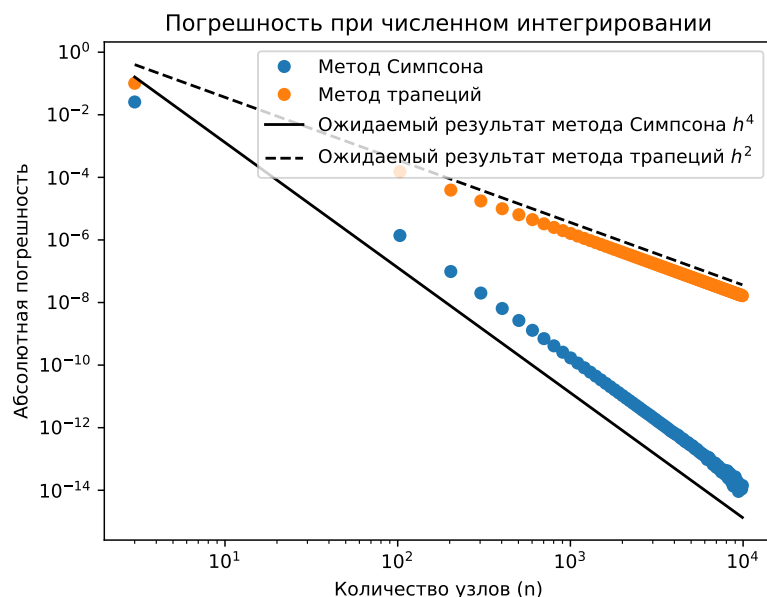


Рис. 2. График абсолютной погрешности численного интегрирования методами Симпсона и трапеций в зависимости от количества узлов n .

4. Определение порядка точности формулы по графику


Определение порядка точности на графике основано на оценке наклона кривых, отображающих абсолютную погрешность от количества узлов n в логарифмическом масштабе. В логарифмическом масштабе прямая линия соответствует степенной зависимости между погрешностью и шагом сетки h , то есть погрешность $\propto h^n$. Наклон этой линии равен показателю степени n . Таким образом, если на графике прямая линия имеет наклон -4, это означает, что погрешность уменьшается пропорционально h^4 по мере уменьшения шага сетки. Сравнивая наклон реальных данных (точек на графике) с ожидаемым наклоном теоретических кривых, можно определить порядок точности для каждого метода.

5. Сравнение аналитических и экспериментальных порядков точности

Метод Симпсона и метод трапеций используются для численного интегрирования, и они имеют разную точность. Точность метода определяется тем, насколько быстро уменьшается его погрешность при уменьшении шага интегрирования h .


- Метод Симпсона имеет четвёртый порядок точности, что означает, что его погрешность уменьшается пропорционально h^4 . Это высокий порядок точности, и он обеспечивает более точные результаты при малых значениях h .

- Метод трапеций имеет второй порядок точности, что означает, что его погрешность уменьшается пропорционально h^2 . Это меньший порядок точности по сравнению с методом Симпсона, и поэтому он менее точен при тех же значениях h .

Эти порядки точности можно наблюдать на графике (рис. 2) погрешности: для метода Симпсона погрешность падает быстрее с уменьшением h , чем для метода трапеций. Это подтверждает, что метод Симпсона более точен, особенно при малых шагах интегрирования. 

6. Оптимальный шаг интегрирования

Оптимальный шаг интегрирования - это такой шаг, при котором достигается наилучшее сочетание точности и вычислительных ресурсов. Для метода трапеций и Симпсона оптимальный шаг будет зависеть от характера функции и желаемой точности.

На основе анализа данных с пороговым значением изменения ошибки $1 \cdot 10^{-6}$, оптимальное количество узлов n для метода Симпсона составляет 303, что соответствует шагу интегрирования h приблизительно 0.00627. Для метода трапеций оптимальное количество узлов n составляет 803, что соответствует шагу интегрирования h приблизительно 0.00237. Эти значения оптимального шага обеспечивают наилучшее сочетание точности и вычислительных ресурсов для каждого метода при заданных условиях и функции. 


Тем не менее, оптимальный шаг также зависит от конкретных требований к точности и доступных вычислительных ресурсов. Если высокая точность критична, оптимальный шаг будет меньше, но потребует больше ресурсов для вычислений. Если же допустима некоторая погрешность, можно выбрать больший шаг, что сократит время и ресурсы, необходимые для интегрирования.

2 Продвинутая часть

1. Преобразование задачи о минимизации функционала к полудискретной форме

Исходная задача минимизации функционала для брахистохроны была преобразована к полудискретной форме с использованием кусочно-линейной интерполяции. Рассмотренная брахистохрона задается функцией

$$\begin{bmatrix} x(t) \\ y(t) \end{bmatrix} = C \begin{bmatrix} t - \frac{1}{2} \sin(2t) \\ \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos(2t) \end{bmatrix}$$

где C и T - параметры брахистохроны. Для кусочно-линейной интерполяции были выбраны равноудаленные узлы на интервале $[0, T]$. Интерполяционная функция строится с использованием этих узлов, что приводит к аппроксимации исходной непрерывной функции кусочно-линейным отображением. 


2. Преобразование задачи к полностью дискретной форме

Для преобразования задачи в её дискретный аналог, интегральная часть функционала $\mathcal{F}[y]$ была заменена на приближение с использованием композитной формулы Симпсона. В этом контексте, вместо точного вычисления интеграла, он был аппроксимирован

путём суммирования значений функции в определённых точках. Это позволило вычислить значение функционала $\mathcal{F}[y]$ для приближённой кусочно-линейной функции $y(x)$ и определить параметры этой аппроксимации для минимизации функционала.

Следуя этому, с применением **композиционной** формулы Симпсона, исходный интеграл был преобразован в его дискретный аналог следующим образом:

$$\sum_{i=1}^{N-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt{1 + \left(\frac{Z'_i(x)}{2gZ_i(x)} \right)^2} dx \approx \sum_{i=1}^{N-1} \frac{h}{3} \left[f_i(x_1) + 2 \sum_{j=1}^{n/2-1} f_i(x_{2j+1}) + 4 \sum_{j=1}^{n/2} f_i(x_{2j}) + f_i(x_{n+1}) \right]$$

где $f_i(x) = \sqrt{1 + \left(\frac{Z'_i(x)}{2gZ_i(x)} \right)^2}$. 

Здесь h обозначает шаг сетки, а $f_i(x)$ представляет собой функцию под интегралом.

3. Минимизация функционала

Было проведено численное исследование для определения оптимальных параметров шагов интерполяции и интегрирования с целью минимизации погрешности аппроксимации функционала. Использовались различные конфигурации дискретизации в диапазоне от 10^{-3} до 1. Ошибка между приближенным значением функционала и его "точным" значением, вычисленным при высокой дискретизации, служила критерием оценки точности аппроксимации.

Анализ ошибки аппроксимации функционала для
различных комбинаций шагов интерполяции и интегрирования брахистохроны

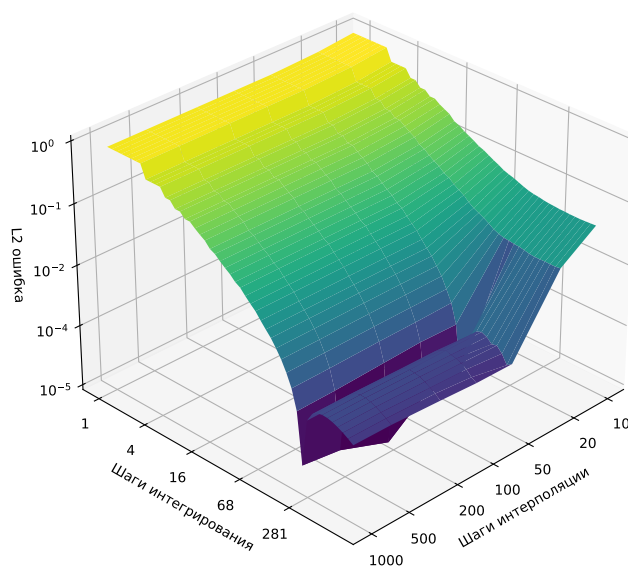


Рис. 3. Анализ ошибки аппроксимации функционала для различных комбинаций шагов интерполяции и интегрирования брахистохроны

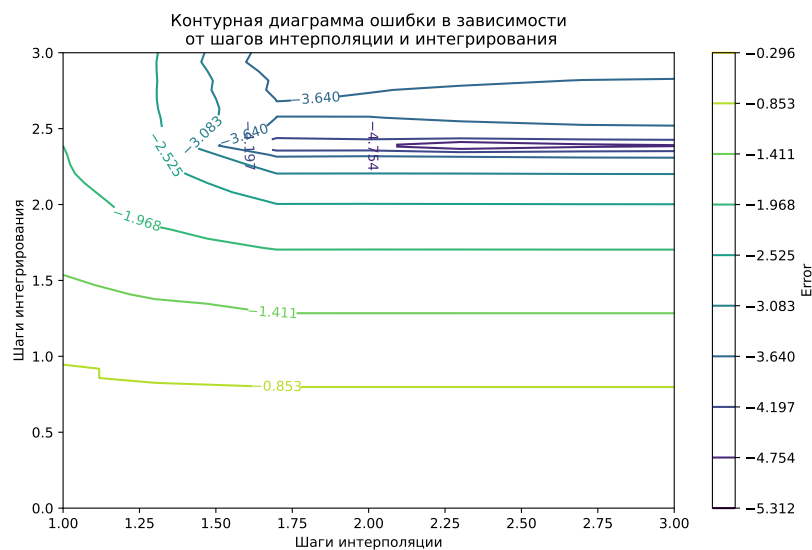


Рис. 4. Контурная диаграмма ошибки в зависимости от шагов интерполяции и интегрирования

4. Анализ погрешности решения

Из анализа графиков следует, что точность аппроксимации функционала тесно связана с выбором шагов интерполяции и интегрирования. На трехмерном графике (рис. 3) логарифмического масштаба видно, что с уменьшением шагов наблюдается значительное снижение ошибки аппроксимации. Это указывает на повышение точности при более тонкой дискретизации функционала. Контурная диаграмма (рис. 4) дополнительно подтверждает этот вывод, показывая линии уровня, которые соответствуют константным значениям ошибки.

Оптимальные значения шагов интерполяции и интегрирования, при которых достигается минимальная ошибка, составляют 200 шагов интерполяции и 244 шага интегрирования. Эти значения были определены на основе анализа данных и указывают на точки на контурных линиях с самыми низкими значениями ошибки. Таким образом, выбор этих параметров должен учитывать компромисс между уменьшением погрешности и вычислительными ресурсами. Эти выводы обусловлены характером зависимости ошибки от параметров дискретизации, которая может быть описана в терминах определенных функциональных отношений между шагами дискретизации и значениями функционала.

3 Опциональные задания

5. Применение метода градиентного спуска и автоматического дифференцирования в численном решении задачи оптимизации

В численном решении задачи оптимизации метод градиентного спуска, применяемый в сочетании с автоматическим дифференцированием, представляет собой значимый инструмент. Он позволяет эффективно находить оптимальные параметры для минимизации ошибки аппроксимации функционала.

- *Автоматическое дифференцирование*: Было использовано неявно через функцию ‘minimize’ из ‘scipy.optimize’, что позволяет точно и эффективно вычислять градиенты функции потерь. Это обеспечивает более точное направление для оптимизации без необходимости явного программирования вычислений градиентов.

- *Градиентный спуск*: С помощью метода L-BFGS-B, интегрированного в ‘minimize’, осуществляется итеративное обновление параметров в направлении, противоположном градиенту функции потерь. Это способствует эффективной минимизации значения функции потерь и нахождению наилучших значений параметров для задачи.

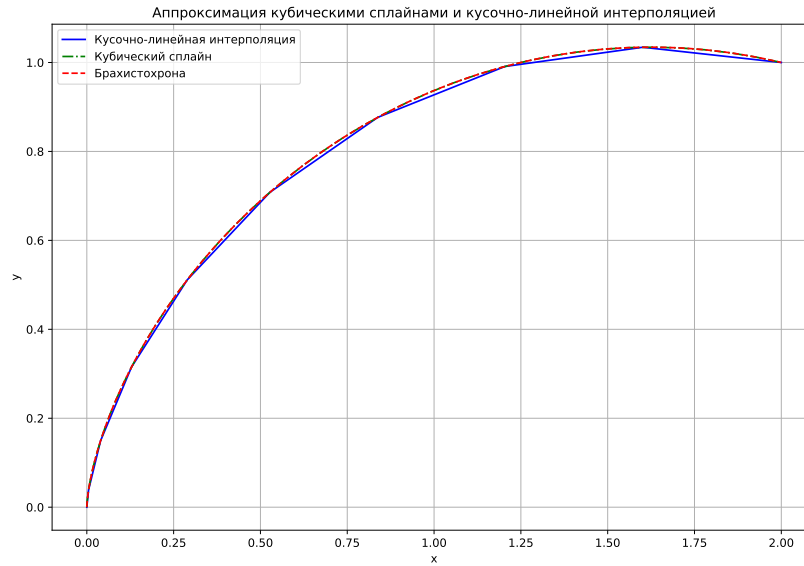


Рис. 5. Аппроксимация кубическими сплайнами и кусочно-линейной интерполяцией

6. Использование интерполяции кубическими сплайнами

Замена кусочно-линейной интерполяции на интерполяцию кубическими сплайнами является значительным улучшением в задачах, где требуется высокая точность и гладкость аппроксимации, что наглядно показано на рисунке 5.

- *Гладкость кривой*: Кубические сплайны обеспечивают непрерывность первой и второй производных, что ведет к более гладким и точным аппроксимациям. Это особенно значимо в задачах, где производные функции имеют физический или геометрический смысл.

- *Точность аппроксимации*: В результате исследования, как можно видеть на графике (рис. 6), была достигнута минимальная ошибка величиной примерно 3.49×10^{-4} при 10 шагах интерполяции и 14 шагах интегрирования. Это подтверждает, что интерполяция кубическими сплайнами обеспечивает значительно более точную аппроксимацию, чем кусочно-линейная интерполяция.

Таким образом, применение метода градиентного спуска с неявным использованием автоматического дифференцирования, а также использование кубических сплайнов для интерполяции, значительно повышает качество и точность численного решения задачи оптимизации.

Анализ ошибки аппроксимации функционала для различных комбинаций шагов интерполяции и интегрирования брахистохроны с применением метода градиентного спуска и кубических сплайнов

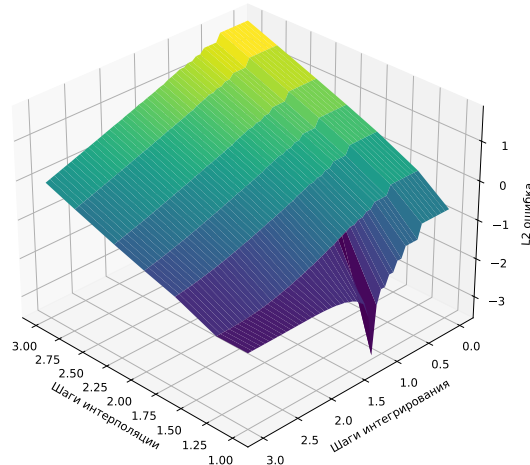


Рис. 6. Анализ ошибки аппроксимации функционала для различных комбинаций шагов интерполяции и интегрирования брахистохроны с применением метода градиентного спуска и кубических сплайнов

4 Заключение

- В ходе выполнения лабораторной работы были разработаны функции ‘composite_simpson’ и ‘composite_trapezoid’ для численного интегрирования, демонстрирующие различные подходы к аппроксимации интегралов. Эти методы показали свою эффективность и точность при различных значениях n .
- Анализ абсолютной погрешности численного интегрирования выявил соответствие между теоретическими и экспериментальными порядками точности для обеих методик, подтверждая четвёртый порядок точности для Симпсона и второй порядок для трапеций.
- Определение оптимального шага интегрирования показало, что точность методов зависит от выбора шага, подчеркивая важность баланса между точностью и вычислительными ресурсами.
- В продвинутой части работы было выполнено преобразование задачи минимизации функционала к полудискретной и затем к полностью дискретной форме, что позволило провести детальный анализ зависимости погрешности решения от шагов интерполяции и интегрирования.
- Анализ графиков и контурных диаграмм показал, что точность аппроксимации функционала значительно повышается при более мелкой дискретизации, что

важно для определения оптимальных параметров дискретизации.

- В целом, лабораторная работа подчеркнула важность точного выбора методов и параметров для численных расчетов, а также показала, как различные методы и подходы могут влиять на точность и эффективность решения сложных математических задач.

Список использованных источников

1. Першин А.Ю. Лекции по курсу «Вычислительная математика». Москва, 2018-2021. С. 140. URL: <https://archrk6.bmstu.ru/index.php/f/810046>.
2. Соколов, А.П. Инструкция по выполнению лабораторных работ (общая). Москва: Соколов, А.П., 2018-2021. С. 9. URL: <https://archrk6.bmstu.ru>. (облачный сервис кафедры РК6).
3. Соколов, А.П. Инструкция по выполнению заданий к семинарским занятиям (общая). Москва: Соколов, А.П., 2018-2022. С. 7. URL: <https://archrk6.bmstu.ru>. (облачный сервис кафедры РК6).
4. Першин А.Ю. Сборник задач семинарских занятий по курсу «Вычислительная математика»: Учебное пособие. / Под редакцией Соколова А.П. [Электронный ресурс]. Москва, 2018-2021. С. 20. URL: <https://archrk6.bmstu.ru>. (облачный сервис кафедры РК6).
5. Першин А.Ю., Соколов А.П. Сборник постановок задач на лабораторные работы по курсу «Вычислительная математика»: Учебное пособие. [Электронный ресурс]. Москва, 2021. С. 54. URL: <https://archrk6.bmstu.ru>. (облачный сервис кафедры РК6).

Выходные данные

Турунов Д.Н. Отчет о выполнении лабораторной работы №2 по дисциплине «Вычислительная математика». [Электронный ресурс] — Москва: 2023. — 14 с. URL: <https://sa2systems.ru:88> (система контроля версий кафедры РК6)

Постановка:



аспирант кафедры РК-6, Гудым А.В.

Решение и верстка:



студент группы РК6-53Б, Турунов Д.Н.

2023, осенний семестр