



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 по дисциплине «Вычислительная математика»

Студент:	Новичкова Мария Алексеевна
Группа:	РК6-56Б
Тип задания:	лабораторная работа
Тема:	Численное дифференцирование и интегрирование

Студент

подпись, дата

Новичкова М.А.
Фамилия, И.О.

Преподаватель

подпись, дата

Фамилия, И.О.

Москва, 2022

Содержание

Численное дифференцирование и интегрирование	3
Задание	3
Цель выполнения лабораторной работы	4
1 Базовая часть	4
Разработка функции, вычисляющей значение первой производной	4
Исследование зависимости абсолютной погрешности дифференцирования от шага дифференцирования	5
Разработка функции, вычисляющей значение интеграла с помощью составной формулы Симпсона	6
Исследование зависимости абсолютной погрешности интегрирования от шага интегрирования	7
2 Продвинутая часть	8
Вывод центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка	8
Разработка функции, вычисляющей значение первой производной	10
Исследование зависимости абсолютной погрешности дифференцирования от шага дифференцирования	10
Анализ порядка точности составной формулы Симпсона	14
Вывод квадратуры Гаусса, имеющей степень точности 5	15
Разработка функции, вычисляющей значение интеграла с помощью квадратуры Гаусса пятой степени точности	16
Доказательство, что степень точности квадратуры Гаусса равна 5	16
Заключение	18

Численное дифференцирование и интегрирование

Задание

Даны функция

$$g_1(x) = xe^x,$$

с узлом $x_0 = 2$ и функция

$$g_2(x) = x^2 \sin(3x),$$

заданная на интервале $x \in [0; \pi]$.

Требуется(базовая часть):

1. Написать функцию `diff2(x_0, h, f)`, которая возвращает значение первой производной функции f на основе центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка в точке x_0 для шага дифференцирования h .

2. Рассчитать производную $g'_1(x)$ в точке $x_0 = 2$ для множества значений $h \in [10^{-16}; 1]$ с помощью функции `diff2`. Постройте log-log графики зависимости абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования.

3. Написать функцию `composite_simpson(a, b, n, f)` численного интегрирования функции f на интервале $[a; b]$ по n узлам с помощью составной формулы Симпсона.

4. Рассчитать интеграл $\int_0^\pi g_2(x)dx$ с помощью составной формулы Симпсона для множества значений $n \in [3; 9999]$. Постройте log-log график зависимости абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования.

Требуется (продвинутая часть):

1. Вывести общую центральную формулу численного дифференцирования 4-го порядка вместе с остаточным членом, аппроксимирующую первую производную по 5 узлам:

$$f'(x_0) \approx Af(x_0 - 2h) + B(x_0 - h) + Cf(x_0) + Df(x_0 + h) + Ef(x_0 + 2h).$$

Продемонстрируйте, что формула действительно имеет 4-й порядок точности.

2. Написать функцию `diff4(x_0, h, f)`, которая возвращает значение первой производной функции f на основе центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка в точке x_0 для шага дифференцирования h .

3. Рассчитать производную $g'_1(x)$ в точке $x_0 = 2$ для множества значений $h \in [10^{-16}; 1]$ с помощью функции `diff4`. Добавьте log-log график зависимости абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования к соответствующему графику для `diff2`. Для каждого случая (`diff2` и `diff4`) ответьте на следующие вопросы: – Каким образом на log-log графике можно увидеть порядок формулы дифференцирования? Докажите это формульно и продемонстрируйте на графике по аналогии с лекциями.

– Совпадает ли порядок выведенной формулы дифференцирования на log-log графике с ее действительным порядком?

– Каков оптимальный шаг дифференцирования, при котором абсолютная погрешность минимальна? С чем связано существование такого минимума? Обоснуйте свой ответ, ссылаясь на данные log-log графика.

– Сравните оптимальный шаг дифференцирования и соответствующую минимально достижимую погрешность для формул 2-го и 4-го порядка. Как вы думаете, чем обоснована разница между ними?

4. Сравните порядок формулы, полученный с помощью графика для составной формулы Симпсона, с аналитическим порядком точности составной формулы Симпсона. Существует ли оптимальный шаг интегрирования для данной формулы, минимизирующий достижимую погрешность? Обоснуйте свой ответ.

5. С помощью теоремы о корнях многочленов Лежандра, доказанной в лекциях, вывести квадратуру Гаусса, имеющую степень точности 5. Сколько узлов необходимо для использования такой квадратуры?

6. Написать функцию `gauss_quad5(f)` численного интегрирования функции `f` с помощью квадратуры Гаусса пятой степени точности.

7. Доказать, что квадратура Гаусса имеет степень точности 5, с помощью следующего вычислительного эксперимента:

– постройте последовательность полиномов $P_0(x), P_1(x), P_2(x), P_3(x), P_4(x), P_5(x), P_6(x)$, имеющих степени соответственно 0, 1, 2, 3, 4, 5 и 6, используя случайно сгенерированные значения коэффициентов полиномов;

– проинтегрируйте их на интервале $[0; 2]$ аналитически и с помощью выведенной квадратуры Гаусса;

– посчитайте абсолютную погрешность и сделайте вывод о степени точности выведенной квадратуры;

– все выкладки и посчитанные значения должны быть в отчете.

Цель выполнения лабораторной работы

Цель выполнения лабораторной работы: исследование формул вычислительного дифференцирования и интегрирования и анализ их вычислительной устойчивости.

1 Базовая часть

Разработка функции, вычисляющей значение первой производной

Функция `diff2(x_0, h, f)` была реализована на основе центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка в точке x_0 с шагом h [1]:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi), \quad (1)$$

где $\xi \in (x_0 - h; x_0 + h)$.

Ниже приведен листинг 1, содержащий код функции `diff2(x_0, h, f)`, которая возвращает значение первой производной функции `f` в точке x_0 для шага дифференцирования h .

Листинг 1. Функция вычисления значения первой производной с помощью центральной формулы численного дифференцирования второго порядка

```
1 def diff2(x_0, h, f):  
2     return (f(x_0+h)-f(x_0-h))/(2*h)
```

Исследование зависимости абсолютной погрешности дифференцирования от шага дифференцирования

Абсолютная погрешность дифференцирования находится по формуле:

$$\Delta(f'(x_0)) = |f'(x_0) - \tilde{f}'(x_0)|.$$

Для вычисления погрешности дифференцирования функции $g_1(x)$ с помощью функции f в точке x_0 с шагом h была реализована функция `err_dif(x_0, h, f)`, код которой представлен в листинге 2.

Листинг 2. Функция вычисления погрешности дифференцирования

```
1 def err_dif(x_0, h, f):  
2     g1_d_real = np.exp(x_0) + x_0 * np.exp(x_0)  
3     g1_d = f(x_0, h, g1)  
4     return abs(g1_d - g1_d_real)
```

На рисунке 1 представлен график зависимости абсолютной погрешности дифференцирования функции $g_1(x) = xe^x$, в точке $x_0 = 2$ от шага дифференцирования h , который варьируется в промежутке от 1 до 10^{-16} .

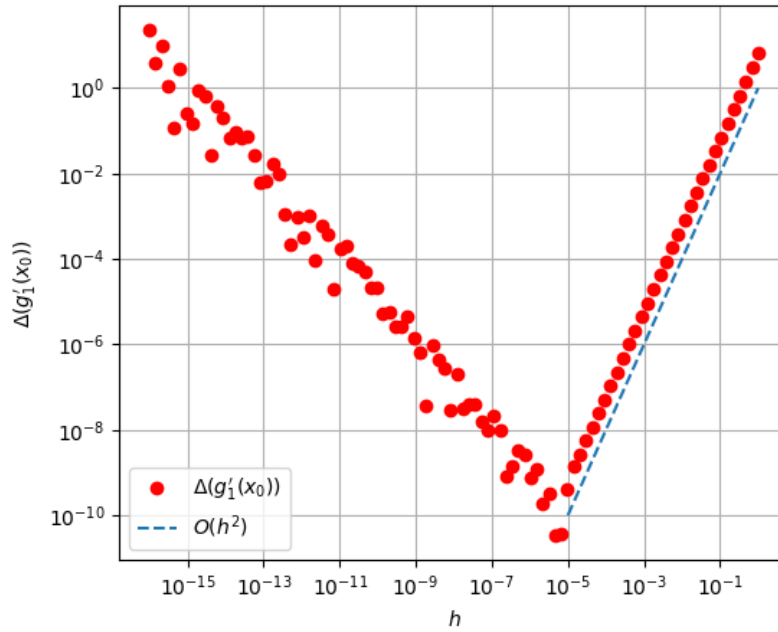


Рис. 1. Зависимость абсолютной погрешности дифференцирования функции $g_1(x)$ в точке x_0 с помощью центральной формулы 2-го порядка от шага дифференцирования h (красные точки)

Рисунок демонстрирует, что при уменьшении шага погрешность дифференцирования убывает пропорционально h^2 до некоторого малого h , после чего начинает возрастать. Это свидетельствует о вычислительной неустойчивости дифференцирования.

Разработка функции, вычисляющей значение интеграла с помощью составной формулы Симпсона

Функция `composite_simpson(a, b, n, f)` была реализована на основе составной формулы Симпсона [1]:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} \left[f(x_1) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i+1}) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i}) + f(x_{n+1}) \right] - \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \quad (2)$$

где n - четное число промежутков, $h = \frac{b-a}{n}$, $\xi \in (a; b)$, $x_i = a + (i+1)h$.

Ниже приведен листинг 3, содержащий код функции `composite_simpson(a, b, n, f)`, которая возвращает значение интеграла $\int_a^b f(x)dx$, вычисленного с помощью составной формулы Симпсона по n узлам.

Листинг 3. Функция вычисления значения интеграла с помощью составной формулы Симпсона

```

1  def composite_simpson(a, b, n, f):
2      x = np.linspace(a, b, n)
3      h = (b-a)/(n-1)
4      return h/3 *(f(x[0]) + 2*np.sum(f(x[2:-1:2])) + 4*np.sum(f(x[1::2])) + f(x[-1]))

```

Исследование зависимости абсолютной погрешности интегрирования от шага интегрирования

Абсолютная погрешность интегрирования находится по формуле:

$$\Delta(I) = |I - \tilde{I}|,$$

где I - точное значение интеграла, а \tilde{I} - приближенное.

Для вычисления погрешности интегрирования функции $g_2(x) = x^2 \sin(3x)$ с пределами интегрирования a и b с применением составной формулы Симпсона реализована функция `err_int(a, b, n)`, код которой представлен в листинге 4.

Листинг 4. Функция вычисления погрешности интегрирования

```

1  def err_int(a, b, n):
2      g2_int_real = (-b ** 2 * np.cos(3 * b) + a ** 2 * np.cos(3 * a))/3 + (2 * b *
3          np.sin(3 * b) - 2 * a * np.sin(3*a))/9 + (2*np.cos(3 * b) - 2 * np.cos(3 * a))/ 27
4      g2_int = composite_simpson(a, b, n, g2)
5      return np.abs(g2_int_real - g2_int)

```

На рисунке 2 представлен график зависимости абсолютной погрешности вычисления интеграла $\int_0^\pi g_2(x)dx$ от шага интегрирования h при количестве узлов n , изменяющемся от 3 до 9999.

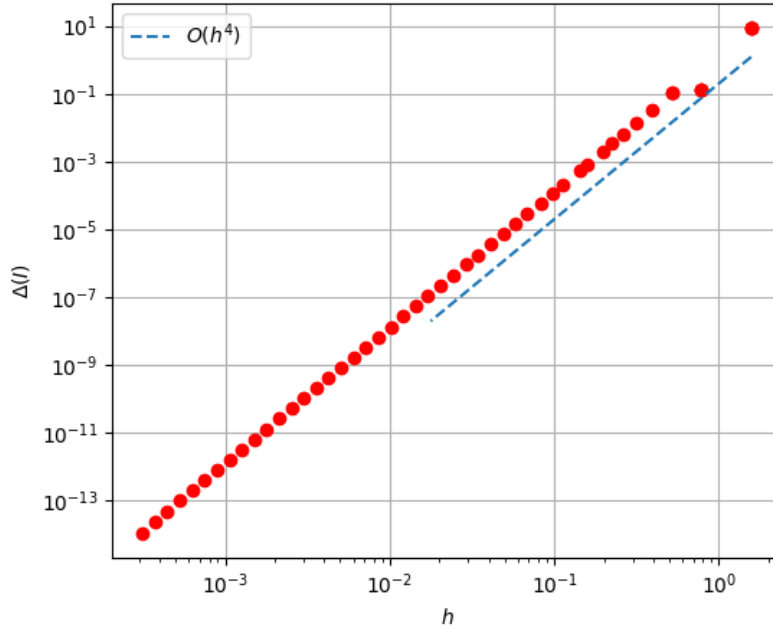


Рис. 2. Зависимость абсолютной погрешности вычисления интеграла $\int_0^\pi g_2(x)dx$ с помощью составной формулы Симпсона от шага интегрирования h (красные точки)

Рисунок демонстрирует, что погрешность интегрирования убывает пропорционально h^4 и не возрастает, что свидетельствует о вычислительной устойчивости интегрирования.

2 Продвинутая часть

Вывод центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка

Для вывода центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка вместе с остаточным членом, аппроксимирующей первую производную по 5 узлам, было использовано разложение функции в ряд Тейлора в точке x_0 :

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{3!}(x - x_0)^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{4!}(x - x_0)^4 + \frac{f^{(5)}(\xi)}{5!}(x - x_0)^5. \quad (3)$$

Далее были вычислены значения ряда (3) в узлах $x_0 - 2h$, $x_0 - h$, $x_0 + h$, $x_0 + 2h$:

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - 2hf'(x_0) + 2h^2f''(x_0) - \frac{4}{3}h^3f'''(x_0) + \frac{2}{3}h^4f^{(4)}(x_0) - \frac{4}{15}h^5f^{(5)}(\xi_1), \quad (4)$$

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2f''(x_0) - \frac{1}{6}h^3f'''(x_0) + \frac{1}{24}h^4f^{(4)}(x_0) - \frac{1}{120}h^5f^{(5)}(\xi_2), \quad (5)$$

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{1}{2}h^2 f''(x_0) + \frac{1}{6}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{24}h^4 f^{(4)}(x_0) + \frac{1}{120}h^5 f^{(5)}(\xi_3), \quad (6)$$

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + 2hf'(x_0) + 2h^2 f''(x_0) + \frac{4}{3}h^3 f'''(x_0) + \frac{2}{3}h^4 f^{(4)}(x_0) + \frac{4}{15}h^5 f^{(5)}(\xi_4), \quad (7)$$

где $\xi_1, \xi_2, \xi_3, \xi_4 \in [x_0 - 2h; x_0 + 2h]$.

Из выражения (7) было вычтено выражение (4):

$$f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h) = 4hf'(x_0) + \frac{8}{3}h^3 f'''(x_0) + \frac{4}{15}h^5 (f^{(5)}(\xi_1) + f^{(5)}(\xi_4)). \quad (8)$$

Предположим, что $f(x) \in C^5[x_0 - 2h; x_0 + 2h]$. Тогда по теореме о промежуточном значении существует такое $\xi \in (x_1 - h, x_1 + h)$, что

$$f^{(5)}(\xi) = \frac{1}{2} [f^{(5)}(\xi_2) + f^{(5)}(\xi_3)].$$

Тогда выражение (8) принимает вид:

$$f(x_0 + 2h) - f(x_0 - 2h) = 4hf'(x_0) + \frac{8}{3}h^3 f'''(x_0) + \frac{8}{15}h^5 f^{(5)}(\xi). \quad (9)$$

Из выражения (6) было вычтено выражение (5):

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + \frac{1}{3}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{120}h^5 (f^{(5)}(\xi_2) + f^{(5)}(\xi_3)). \quad (10)$$

Предположим, что $f(x) \in C^5[x_0 - 2h; x_0 + 2h]$. Тогда по теореме о промежуточном значении существует такое $\xi \in (x_1 - h, x_1 + h)$, что

$$f^{(5)}(\xi) = \frac{1}{2} [f^{(5)}(\xi_2) + f^{(5)}(\xi_3)].$$

Тогда выражение (10) принимает вид:

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2hf'(x_0) + \frac{1}{3}h^3 f'''(x_0) + \frac{1}{60}h^5 f^{(5)}(\xi). \quad (11)$$

Далее выражение (11) было домножено на 8 и вычтено из выражения (9):

$$f(x_0 + 2h) - 8f(x_0 + h) + 8f(x_0 - h) - f(x_0 - 2h) = -12hf'(x_0) + \frac{2}{5}h^5 f^{(5)}(\xi).$$

Тогда центральная формула численного дифференцирования по пяти узлам имеет вид:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h} + \frac{1}{30}h^4 f^{(5)}(\xi). \quad (12)$$

Остаточный член пропорционален h^4 , следовательно формула имеет четвертый порядок точности.

Разработка функции, вычисляющей значение первой производной

Функция `diff4(x_0, h, f)` была реализована на основе центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка, аппроксимирующей первую производную по пяти узлам, в точке x_0 с шагом h :

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h} + \frac{1}{30}h^4 f^{(5)}(\xi),$$

где $\xi \in (x_0 - 2h; x_0 + 2h)$.

Ниже приведен листинг 5, содержащий код функции `diff4(x_0, h, f)`, которая возвращает значение первой производной функции f в точке x_0 для шага дифференцирования h .

Листинг 5. Функция вычисления значения первой производной с помощью центральной формулы численного дифференцирования четвертого порядка

```
1 def diff4(x_0, h, f):  
2     return (f(x_0-2*h)-8*f(x_0-h)+8*f(x_0+h)-f(x_0+2*h))/(12*h)
```

Исследование зависимости абсолютной погрешности дифференцирования от шага дифференцирования

Для вычисления погрешности численного дифференцирования была использована функция `err_dif(x_0, h, f)`, представленная в листинге 2. В качестве аргумента f ей передается функция `diff4`.

На рисунке 3 представлен график зависимости абсолютной погрешности дифференцирования функции $g_1(x) = xe^x$ в точке $x_0 = 2$ от шага дифференцирования h , который варьируется в промежутке от 1 до 10^{-16} .

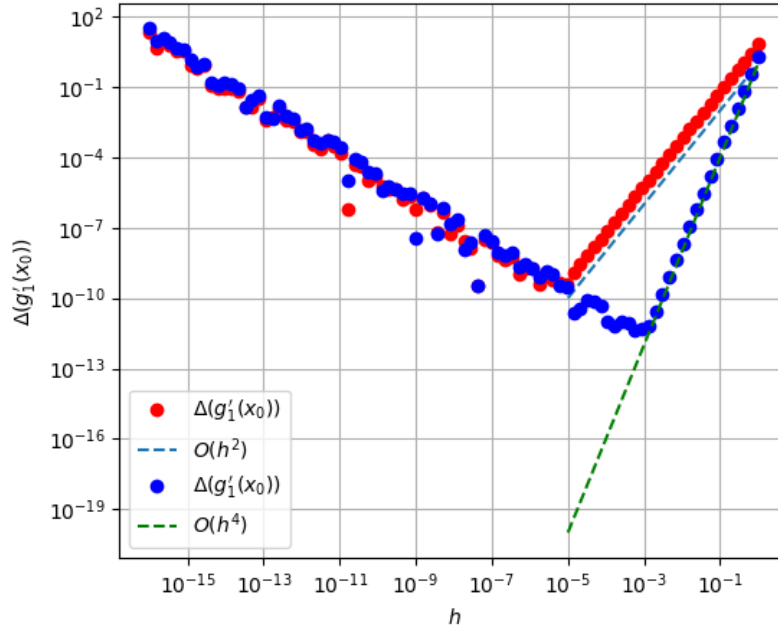


Рис. 3. Зависимость абсолютной погрешности дифференцирования функции $g_1(x)$ в точке x_0 с помощью центральной формулы 2-го (красные точки) и 4-го порядка (синие точки) от шага дифференцирования h

На графиках, построенных в логарифмической шкале, можно продемонстрировать порядок формулы дифференцирования, если построить на том же графике $O(h^n)$. Тогда, если график абсолютной погрешности при уменьшении шага дифференцирования убывает параллельно $O(h^n)$, то формула имеет порядок n .

На рисунке 3 продемонстрировано, что формула (1) имеет порядок точности 2, а формула (12) имеет 4-ый порядок точности, что соответствует остаточным членам этих формул.

Далее приведен вывод оптимального шага для формулы дифференцирования второго порядка (1).

Пусть погрешности при вычислении значений $f(x_0 + h)$ и $f(x_0 - h)$ равны $e(x_0 + h)$ и $e(x_0 - h)$ соответственно. Тогда

$$f(x_0 - h) = \tilde{f}(x_0 - h) + e(x_0 - h),$$

$$f(x_0 + h) = \tilde{f}(x_0 + h) + e(x_0 + h).$$

Погрешность дифференцирования рассчитывается следующим образом:

$$E = \left| f'(x_0) - \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \right| = \left| \frac{e(x_0 + h) - e(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi) \right|.$$

По правилу треугольника модуль суммы меньше или равен сумме модулей, следовательно можно оценить верхнюю границу погрешности:

$$E \leq \frac{|e(x_0 + h)| + |e(x_0 - h)|}{2h} + \frac{h^2}{6} |f^{(3)}(\xi)|.$$

Пусть вычислительная погрешность $e(x_i)$ ограничена ε (например, машинным эпсилон) и $f^{(3)}(\xi)$ ограничена M_3 . Тогда верным является следующее неравенство:

$$E \leq \frac{\varepsilon}{h} + \frac{h^2}{6} M_3.$$

Можно отметить, что при $h \rightarrow 0$ погрешность будет стремиться к бесконечности, что обуславливает вычислительную неустойчивость численного дифференцирования. Выражение справа имеет минимум в точке $\left(\frac{3\varepsilon}{M_3}\right)^{1/3}$. Тогда оптимальный шаг дифференцирования по формуле 2-го порядка:

$$h_{opt} = \left(\frac{3\varepsilon}{M_3}\right)^{1/3}. \quad (13)$$

Тогда минимально достижимая погрешность вычисляется по формуле:

$$E_{min} = \frac{\varepsilon}{h_{opt}} + \frac{h_{opt}^2}{6} M_3. \quad (14)$$

Далее приведен вывод оптимального шага для центральной формулы дифференцирования четвертого порядка (12).

Пусть погрешности при вычислении значений $f(x_0 - 2h)$, $f(x_0 - h)$, $f(x_0 + h)$ и $f(x_0 + 2h)$ равны $e(x_0 - 2h)$, $e(x_0 - h)$, $e(x_0 + h)$ и $e(x_0 + 2h)$ соответственно. Тогда

$$f(x_0 - 2h) = \tilde{f}(x_0 - 2h) + e(x_0 - 2h),$$

$$f(x_0 - h) = \tilde{f}(x_0 - h) + e(x_0 - h),$$

$$f(x_0 + h) = \tilde{f}(x_0 + h) + e(x_0 + h),$$

$$f(x_0 + 2h) = \tilde{f}(x_0 + 2h) + e(x_0 + 2h).$$

Погрешность дифференцирования рассчитывается следующим образом:

$$\begin{aligned} E &= \left| f'(x_0) - \frac{f(x_0 - 2h) - 8f(x_0 - h) + 8f(x_0 + h) - f(x_0 + 2h)}{12h} \right| = \\ &= \left| \frac{e(x_0 - 2h) - 8e(x_0 - h) + 8e(x_0 + h) - e(x_0 + 2h)}{12h} - \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi) \right|. \end{aligned}$$

По правилу треугольника модуль суммы меньше или равен сумме модулей, следовательно можно оценить верхнюю границу погрешности:

$$E \leq \frac{|e(x_0 - 2h)| + 8|e(x_0 - h)| + 8|e(x_0 + h)| + |e(x_0 + 2h)|}{12h} + \frac{h^4}{30} |f^{(5)}(\xi)|.$$

Пусть вычислительная погрешность $e(x_i)$ ограничена ε (например, машинным эпсилон) и $f^{(5)}(\xi)$ ограничена M_5 . Тогда верным является следующее неравенство:

$$E \leq \frac{18\varepsilon}{12h} + \frac{h^4 M_5}{30}.$$

Можно отметить, что при $h \rightarrow 0$ погрешность будет стремиться к бесконечности, что обуславливает вычислительную неустойчивость численного дифференцирования. Выражение справа имеет минимум в точке $\left(\frac{45\varepsilon}{4M_5}\right)^{1/5}$. Тогда оптимальный шаг дифференцирования по центральной формуле 4-го порядка:

$$h_{opt} = \left(\frac{45\varepsilon}{4M_5}\right)^{1/5}. \quad (15)$$

Тогда минимально достижимая погрешность вычисляется по формуле:

$$E_{min} = \frac{18\varepsilon}{12h_{opt}} + \frac{h_{opt}^4 M_5}{30}. \quad (16)$$

Далее программно были посчитаны значения оптимальных шагов для формул численного дифференцирования 2-го и 4-го порядков по формулам (13) и (15) соответственно. Для расчета ε была принята как машинное эпсилон, M_5 как значение пятой производной от функции $g_1(x)$ в точке x_0 , M_3 как значение третьей производной от функции $g_1(x)$ в точке x_0 . В листинге 6 приведен код для подсчета значений оптимального шага.

Листинг 6. Подсчет значений оптимального шага

```

1  M_3 = 5*np.exp(2)
2  M_5 = 7*np.exp(2)
3  h_opt2 = (3.*(np.finfo(np.float64).eps)/M_3)**(1./3)
4  h_opt4 = (45. * (np.finfo(np.float64).eps) / (4*M_5)) ** (1./5)

```

Тогда вычисленные значения оптимального шага:

для формулы дифференцирования 2-го порядка: $2.622210209782995 \cdot 10^{-6}$,

для формулы дифференцирования 4-го порядка: 0.0005454829101818735 .

Также были вычислены значения минимально достижимой погрешности по формулам (14) и (16) для численного дифференцирования 2-го и 4-го порядков соответственно:

для формулы дифференцирования 2-го порядка: $1.2701762282250847 \cdot 10^{-10}$,

для формулы дифференцирования 4-го порядка: $2.5441287983132867 \cdot 10^{-13}$.

Эти значения соответствуют графикам, приведенным на рисунке 3. Можно заметить, что для формулы 2-го порядка значение оптимального шага меньше, чем для формулы 4-го порядка. Но минимально-достижимая погрешность для формулы 2-го порядка больше, чем для формулы 4-го порядка. Таким образом, формула 4-го порядка дает большую точность вычислений, при меньшем шаге дифференцирования.

Анализ порядка точности составной формулы Симпсона

На рисунке 2 было продемонстрировано, что составная формула Симпсона имеет 4-ый порядок точности, что соответствует аналитическому порядку точности формулы (2).

Далее приведено формульное доказательство вычислительной устойчивости численного интегрирования с помощью составной формулы Симпсона [1]. Пусть при округлении значения $f(x_i)$ возникает вычислительная погрешность $e(x_i)$:

$$f(x_i) = \tilde{f}(x_i) + e(x_i), i = 1, \dots, n + 1. \quad (17)$$

Тогда полная погрешность округления, накапливаемая составной формулой Симпсона (2), может быть оценена следующим образом:

$$\begin{aligned} e(h) &= \frac{h}{3} \left[e_1 + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} e_{2i+1} + 4 \sum_{i=1}^{n/2} e_{2i} + e_{n+1} \right] \\ &\leq \frac{h}{3} \left[|e_1| + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} |e_{2i+1}| + 4 \sum_{i=1}^{n/2} |e_{2i}| + |e_{n+1}| \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

Пусть погрешность округления ограничена машинным эpsilon: $|e_i| \leq \epsilon, i = 1, \dots, n + 1$. Тогда полная погрешность округления может быть оценена следующим образом:

$$e(h) \leq \frac{h\epsilon}{3} \left[1 + 2 \left(\frac{n}{2} - 1 \right) + 4 \frac{n}{2} + 1 \right]; \quad (19)$$

$$\frac{h\epsilon}{3} \left[1 + 2 \left(\frac{n}{2} - 1 \right) + 4 \frac{n}{2} + 1 \right] = nh\epsilon = (b - a)\epsilon. \quad (20)$$

Этот результат доказывает, что верхняя допустимая грань погрешности округления не зависит от n и h . Из этого следует, что численное интегрирование с помощью составной формулы Симпсона вычислительно устойчиво, что также подтверждает рисунок 2.

Следовательно, оптимального шага для минимизации полной погрешности данной формулы не существует. Однако, при приближении значения полной погрешности к машинному epsilon шаг перестает влиять на погрешность. Этот эффект представлен на рисунке 4, где интервал, в пределах которого изменялось количество узлов, был увеличен до отрезка $[3; 999900]$.

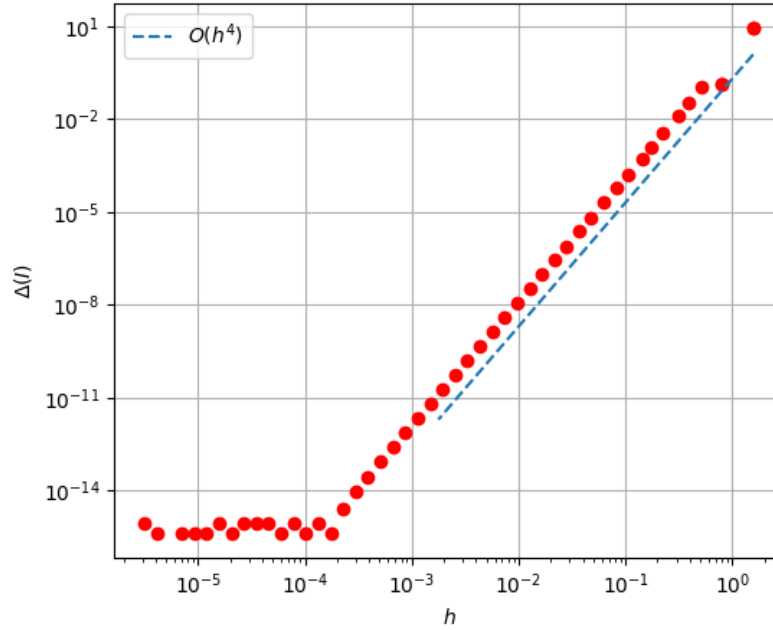


Рис. 4. Зависимость абсолютной погрешности вычисления интеграла $\int_0^\pi g_2(x)dx$ с помощью составной формулы Симпсона от шага интегрирования h (красные точки)

Вывод квадратуры Гаусса, имеющей степень точности 5

Согласно теореме Лежандра [1] верно равенство

$$\int_{-1}^1 P_m(x)dx = \sum_{i=1}^n c_i P_m(x_i),$$

где $P_m(x)$ - полином степени $m < 2n$, x_1, \dots, x_n - корни полинома Лежандра n -ой степени $\phi_n(x)$, а коэффициенты c_1, \dots, c_n определены следующим образом:

$$c_i = \int_{-1}^1 l_i(x)dx = \int_{-1}^1 \prod_{j=1, j \neq i}^n \frac{x - x_j}{x_i - x_j} dx.$$

Так как необходимо вывести квадратуру Гаусса степени точности 5, $m = 5$. Следовательно, $n = 3$, исходя из неравенства $m < 2n$. Тогда необходимо найти корни x_1, x_2, x_3 многочлена Лежандра 3-й степени $\phi_3(x)$.

$$\phi_3(x) = x^3 - \frac{3}{5}x \Rightarrow x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}; \quad x_2 = 0; \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

Коэффициенты c_i находятся по формулам:

$$c_1 = \int_{-1}^1 l_1(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{(x-x_2)(x-x_3)}{(x_1-x_2)(x_1-x_3)} dx = \int_{-1}^1 \frac{(x-0)\left(x-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)}{\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}-0\right)\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)} dx = \frac{5}{9},$$

$$c_2 = \int_{-1}^1 l_2(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{(x-x_1)(x-x_3)}{(x_2-x_1)(x_2-x_3)} dx = \int_{-1}^1 \frac{\left(x+\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\left(x-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)}{\left(0+\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\left(0-\sqrt{\frac{3}{5}}\right)} dx = \frac{8}{9},$$

$$c_3 = \int_{-1}^1 l_3(x) dx = \int_{-1}^1 \frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_3-x_1)(x_3-x_2)} dx = \int_{-1}^1 \frac{\left(x+\sqrt{\frac{3}{5}}\right)(x-0)}{\left(\sqrt{\frac{3}{5}}+\sqrt{\frac{3}{5}}\right)\left(\sqrt{\frac{3}{5}}-0\right)} dx = \frac{5}{9}.$$

Тогда квадратура Гаусса пятой степени точности имеет вид:

$$\int_{-1}^1 f(x) dx = \frac{5}{9} f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9} f(0) + \frac{5}{9} f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right). \quad (21)$$

Для использования такой квадратуры необходимо три узла.

Разработка функции, вычисляющей значение интеграла с помощью квадратуры Гаусса пятой степени точности

Функция `gauss_quad5(f)` была реализована на основе формулы (13) для квадратуры Гаусса степени точности 5. Функция возвращает значение интеграла от функции `f`, взятого на отрезке $[-1; 1]$. В листинге 7 представлен код этой функции.

Листинг 7. Функция вычисления значения интеграла с помощью квадратуры Гаусса 5-ой степени точности на отрезке от -1 до 1

```
1 def gauss_quad5(f):
2     return (5/9)*f(-np.sqrt(3/5))+(8/9)*f(0)+(5/9)*f(np.sqrt(3/5))
```

Доказательство, что степень точности квадратуры Гаусса равна 5

Последовательность полиномов $P_0(x), P_1(x), P_2(x), P_3(x), P_4(x), P_5(x), P_6(x)$, имеющих степени соответственно 0, 1, 2, 3, 4, 5, 6 и случайные коэффициенты, была построена с использованием функции `np.random.randn()`. Так как необходимо проинтегрировать полиномы на отрезке $[0; 2]$, на основе функции `gauss_quad5(f)` (представлена в листинге 7) была разработана функция `gauss_quad5_ab(f, a, b)`, которая вычисляет значения интеграла с помощью квадратуры Гаусса на отрезке $[a; b]$. Для этого была использована следующая замена:

$$x = \frac{(a+b) + (b-a)t}{2},$$

где $t \in [-1; 1]$, $x \in [a, b]$.

Код функции `gauss_quad5_ab(f, a, b)` представлен в листинге 8.

Листинг 8. Функция вычисления значения интеграла с помощью квадратуры Гаусса 5-ой степени точности на отрезке от a до b

```
1 def gauss_quad5_ab(f, a, b):
2     x1 = (a+b)/2 + (b-a)*(-np.sqrt(3/5))/2
3     x2 = (a+b)/2
4     x3 = (a+b)/2 + (b-a)*(np.sqrt(3/5))/2
5     return (5/9)*f(x1)+(8/9)*f(x2)+(5/9)*f(x3)
```

Формула интеграла от многочлена имеет вид:

$$\int_a^b P_m(x) dx = \int_a^b \sum_{i=0}^m c_i x^i dx = \sum_{i=0}^m \frac{c_i b^{i+1}}{i+1} - \sum_{i=0}^m \frac{c_i a^{i+1}}{i+1}, \quad (22)$$

где m - степень полинома, c_i - коэффициент перед i -ым членом полинома, a и b - пределы интегрирования.

На основе формулы (14) была разработана функция `int_exact(kofs, a, b, k)` для вычисления значения многочлена аналитически. Она принимает на вход список коэффициентов полинома `kofs`, пределы интегрирования a и b и степень полинома k . В листинге 9 представлен код этой функции.

Листинг 9. Функция вычисления значения интеграла аналитически

```
1 def int_exact(kofs, a, b, k):
2     integral = 0
3     for i in range(k+1):
4         integral += (kofs[i] * b ** (i + 1) / (i + 1))
5         integral -= (kofs[i] * a ** (i + 1) / (i + 1))
6     return integral
```

Далее приведена таблица 1, в которой представлены значения вычисленных аналитически и численно с помощью квадратуры Гаусса интегралов для полиномов и погрешность вычисления степеней от 0 до 6.

Таблица 1. Таблица вычисленных значений интегралов и погрешностей

Степень	Аналитическое значение	Численное значение	Погрешность
0	-0.13108978921449552	-0.13108978921449552	0.0
1	3.8300084692474408	3.830008469247441	$4.440892098500626 \cdot 10^{-16}$
2	-0.6957391638877075	-0.6957391638877075	0.0
3	1.6914431318093095	1.6914431318093097	$2.220446049250313 \cdot 10^{-16}$
4	-18.44205037194982	-18.44205037194982	0.0
5	13.564011781292159	13.564011781292159	0.0
6	18.747915181141344	18.711555888334306	0.0363592928070382

По данным в таблице можно заметить, что погрешность вычислений для полиномов степеней меньше 6 равна нулю или сопоставима с машинным эпсилон. В то время как погрешность для полинома 6-ой степени значительно возрастает. Это подтверждает, что квадратура Гаусса имеет степень точности 5.

Заключение

1. В ходе лабораторной работы был сделан вывод о вычислительной неустойчивости численного дифференцирования по формулам 2-го и 4-го порядков. Были выведены формулы и рассчитаны значения для оптимального шага и минимальной вычислительной погрешности для этих формул.
2. Также было доказано формульно и продемонстрировано с помощью графиков, что численное интегрирование с помощью формулы Симпсона вычислительно устойчиво.
3. Была выведена квадратура Гаусса пятой степени точности. С помощью вычислительного эксперимента степень точности квадратуры была доказана.



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

Новичкова М.А. Отчет о выполнении лабораторной работы по дисциплине «Вычислительная математика». [Электронный ресурс] — Москва: 2022. — 19 с. URL: <https://sa2systems.ru:88> (система контроля версий кафедры РК6)

Постановка:  доцент кафедры РК-6, PhD А.Ю. Першин
 Решение и вёрстка:  студент группы РК6-56Б, Новичкова М.А.

2022, осенний семестр