



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:	Долженко Анастасия Тимофеевна
Группа:	РК6-22Б
Тип задания:	лабораторная работа
Тема:	Численное дифференцирование и интегрирование

Студент

подпись, дата

Долженко А.Т.

Фамилия, И.О.

Преподаватель

подпись, дата

Фамилия, И.О.

Москва, 2025

Содержание

Численное дифференцирование и интегрирование	3
1 Задание	3
2 Цель выполнения лабораторной работы	5
3 Выполненные задачи	5
4 Разработка функции <code>diff2(x_0, h, f)</code>	5
5 Анализ зависимости абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования	6
6 Разработка функции <code>composite_simpson(a, b, n, f)</code>	10
7 Анализ зависимости абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования	11
8 Вывод общей центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка вместе с остаточным членом	13
9 Разработка функции <code>diff4(x_0, h, f)</code>	16
10 Анализ зависимости абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования	16
11 Вывод квадратуры Гаусса степени точности 5	19
12 Разработка функции <code>gauss_quad5(f, a, b)</code>	20
13 Проведение эксперимента с квадратурой Гаусса	21
14 Заключение	23

Численное дифференцирование и интегрирование

1 Задание

Даны функции

$$g1(x) = xe^x, \quad (1)$$

с узлом $x_0 = 2$,

$$g2(x) = x^2 \sin(3x), \quad (2)$$

где $x \in [0; \pi]$ и

$$g3(x) = \sin\left(\frac{\pi}{x}\right), \quad (3)$$

где $x \in (0; 1]$.

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 производные $g'_1(x)$ в точке $x_0 = 3$ и $g'_3(x)$ в точке $x_0 = 0.01$ для множества значений $h \in [10^{-16}; 1]$ с помощью функции `diff2`. Постройте log-log графики зависимости абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования для двух указанных случаев.

3. Ответьте на вопросы согласно п. 10.

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

5. Рассчитать интегралы $\int_0^\pi g_2(x)dx$ и $\int_\epsilon^1 g_3(x)dx$, где $0 < \epsilon < 0.01$, с помощью составной формулы Симпсона для множества значений $n \in [3; 9999]$. Постройте log-log графики зависимостей абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования.

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

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

$$f'(x_0) \approx Af(x_0+2h) + Bf(x_0+h) + Cf(x_0) + Df(x_0-h) + Ef(x_0-2h) \quad (4)$$

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

Продвинутая часть:

8. 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 .

9. Рассчитать производные $g'_1(x)$ в точке $x_0 = 3$ и $g'_3(x)$ в точке $x_0 = 0.01$ 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.

10. Ответьте на следующие вопросы, для случая применения функции `diff2` (базовая часть) и для случая применения функции `diff4` (продвинутая часть).

- Каким образом на log-log графике можно увидеть порядок точности формулы дифференцирования? Представьте аналитическое доказательство, а также продемонстрируйте порядок точности на графике.

- Совпадает ли порядок точности выведенной формулы численного дифференцирования на log-log графике с её фактическим порядком точности?

- 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 точности. Как вы думаете, чем обоснована разница между ними?

11. С помощью теоремы о корнях многочленов Лежандра, вывести квадратурную формулу Гаусса (далее квадратура Гаусса), имеющую степень точности 5. Сколько узлов необходимо для использования такой формулы?

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

13. 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, 6, используя случайно сгенерированные значения коэффициентов полиномов;

- проинтегрируйте их на интервале $[0; 2]$ аналитически и с помощью функции `gauss_quad5(f)`;

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

2 Цель выполнения лабораторной работы

Целью базовой части задания лабораторной работы является исследование формул численного дифференцирования 2-ого и 4-ого порядков и составной формулы Симпсона, в то время как целью продвинутой части является вывод и исследование квадратуры Гаусса степени точности 5.

3 Выполненные задачи

1. На языке программирования Python были написаны функции $\text{diff2}(x_0, h, f)$ и $\text{diff4}(x_0, h, f)$ - функции численного дифференцирования 2-ого и 4-ого порядков соответственно. Перед написанием функции diff4 был проведен её вывод в аналитическом виде.

2. С помощью языка программирования Python были построены log-log графики зависимостей абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования для функций diff2 и diff4 и график зависимости абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования. Было доказано, что формулы имеют соответствующие порядки точности.

3. Было проведено исследование оптимального шага дифференцирования и интегрирования для формул численного дифференцирования и интегрирования соответственно.

4. Была выведена формула квадратуры Гаусса, которая имеет степень точности 5, а также была написана соответствующая функция $\text{gauss_quad5}(f)$ на языке программирования Python, вычисляющая эту квадратуру.

5. Было доказано, что полученная квадратура Гаусса действительно имеет степень точности 5 с помощью предложенного в задании 7 продвинутой части эксперимента.

4 Разработка функции $\text{diff2}(x_0, h, f)$

Согласно пункту 1 задания базовой части необходимо разработать функцию $\text{diff2}(x_0, h, f)$, которая возвращает значение первой производной функции f на основе центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка в точке x_0 для шага дифференцирования h .

Центральная формула численного дифференцирования 2-го порядка в точке x_0 для шага дифференцирования h имеет вид:

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (5)$$

Таким образом, на языке программирования Python была разработана функция $\text{diff2}(x_0, h, f)$. На вход функции подаются: точка x_0 , в которой проводится дифференцирование, шаг дифференцирования h и функция f , которую необходимо про-

дифференцировать. Функция возвращает значение первой производной переданной ей функции в точке x_0 .

Программная реализация формулы 5 представлена на листинге 1:

Листинг 1. Программная реализация функции diff2(x_0, h, f)

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

5 Анализ зависимости абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования

Согласно пункту 2 задания базовой части необходимо рассчитать производные $g'_1(x)$ в точке $x_0 = 3$ и $g'_3(x)$ в точке $x_0 = 0.01$ для множества значений $h \in [10^{-16}; 1]$ с помощью функции diff2, а также построить log-log графики зависимостей абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования для двух указанных случаев.

Для построения графика точные значения производных функций $g_1(x) = xe^x$ и $g_3(x) = \sin(\frac{\pi}{x})$ были вычислены аналитически:

$$g'_1(x) = (xe^x)' = e^x + xe^x = (x + 1)e^x \quad (6)$$

$$g'_3(x) = -\frac{\pi \cdot \cos(\frac{\pi}{x})}{x^2} \quad (7)$$

Приближённые значения производных были вычислены с помощью функции diff2.

Таким образом, были построены графики зависимостей абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования для функций $g_1(x)$ и $g_3(x)$. Полученные графики представлены на рисунках 1-2:

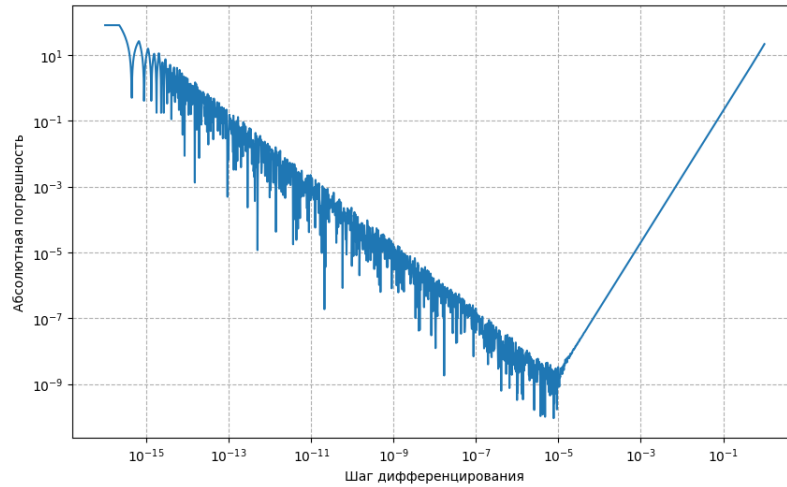


Рис. 1. Зависимость абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования для функции $g_1(x)$

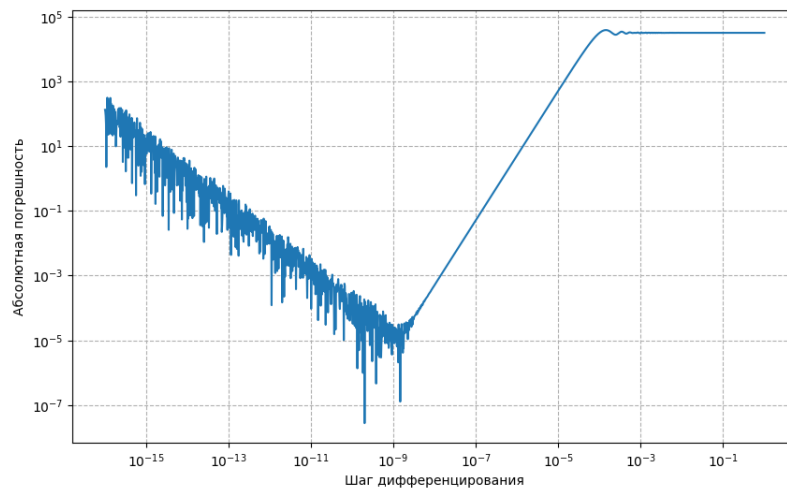


Рис. 2. Зависимость абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования для функции $g_3(x)$

Согласно пункту 3 задания базовой части необходимо ответить на ряд вопросов о применении функции `diff2`.

1. Каким образом на log-log графике можно увидеть порядок точность формулы дифференцирования? Представьте аналитическое доказательство, а также продемонстрируйте порядок точности на графике.

По определению порядком точности формулы дифференцирования называют оценку зависимости остаточного члена от шага дифференцирования.

По определению центральная формула численного дифференцирования с остаточным членом для функции $f(x)$ в точке x_0 имеет вид:

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi), \quad (8)$$

где h - шаг дифференцирования, $\xi \in (x_0 - h; x_0 + h)$.

Таким образом, погрешность формулы имеет второй порядок точности ($O(h^2)$), так как остаточный член пропорционален h^2 .

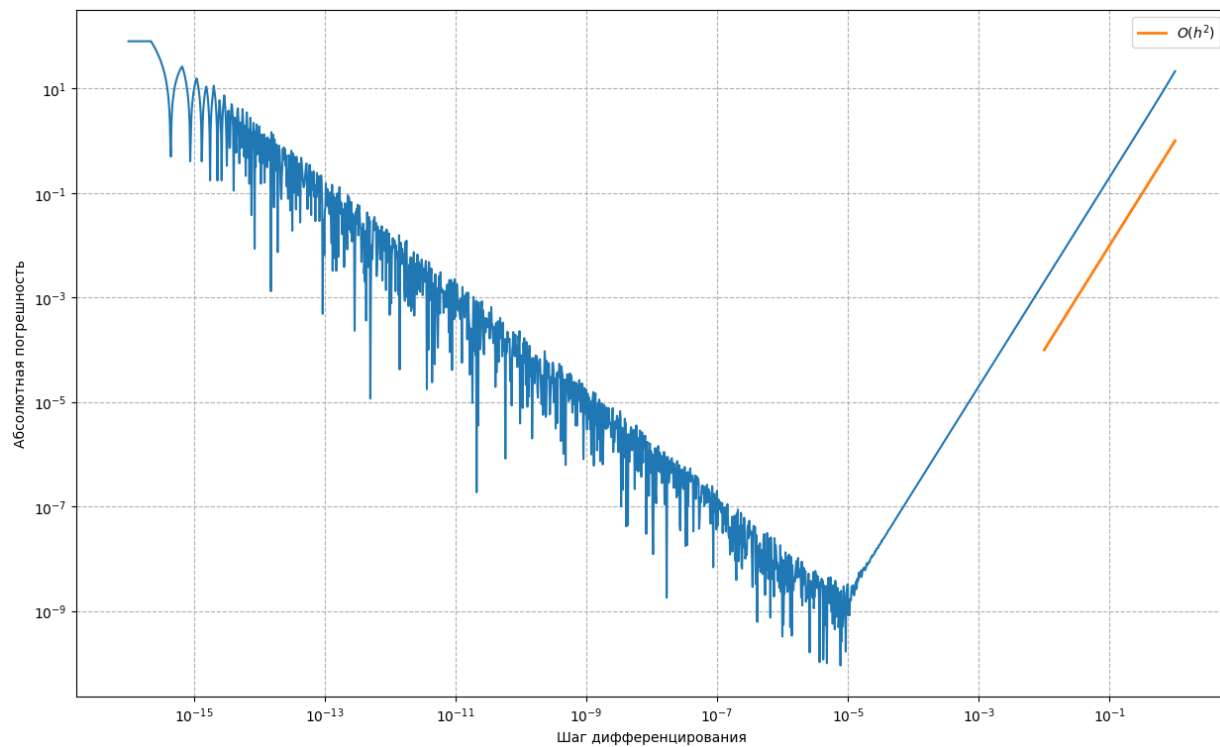


Рис. 3. Зависимость абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования для функции $g_1(x)$

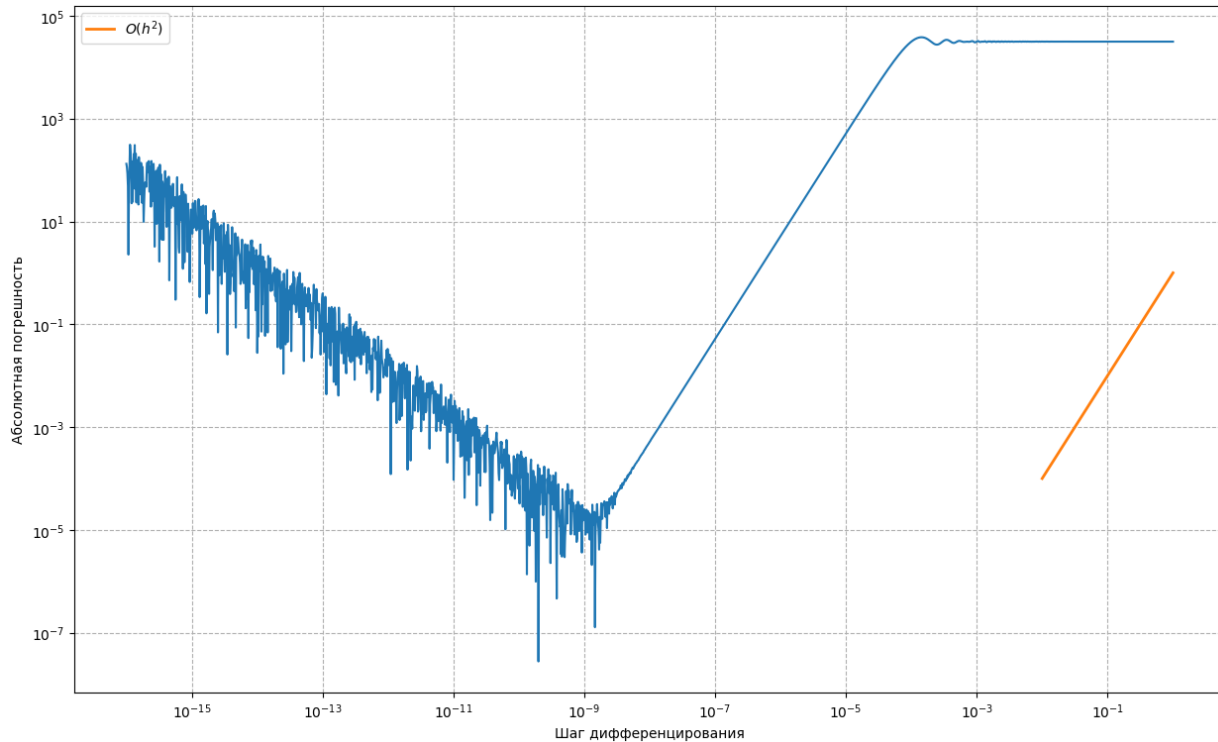


Рис. 4. Зависимость абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования для функции $g_3(x)$

На log-log графиках (рисунки 3-4) зависимости погрешности от h :

- При больших h (правые части графиков) наклон прямой равен $2 - \log(E) \sim 2\log(h)$, где E - общая погрешность вычислений.
- При малых h (левые части графиков) наклон меняется ввиду роста влияния ошибок округления на общую погрешность.

2. Совпадает ли порядок точности выведенной формулы численного дифференцирования на log-log графике с её фактическим порядком точности?

Порядок точности на графиках (рисунки 3-4) совпадает с теоретическим ($O(h^2)$) в области, где доминирует численная ошибка:

- Наклон 2 для $h \in [10^{-5}; 10^0]$ для функции $g_1(x)$
- Наклон 2 для $h \in [10^{-8}; 10^0]$ для функции $g_3(x)$

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

Для очень малых значений h общая погрешность E начинает возрастать из-за ошибок округления, вызванных ограниченной точностью представления чисел

в компьютере. Это связано с тем, что разность близких значений $f(x_0 + h)$ и $f(x_0 - h)$ становится сопоставимой с ошибками округления.

Оптимальный шаг - h_{opt} - точка минимума на графике зависимости абсолютной погрешности от шага дифференцирования.

Из log-log графиков (рисунки 3-4) зависимостей погрешностей от h :

- $h_{\text{opt}} \approx 10^{-5}$ для функции $g_1(x)$
- $h_{\text{opt}} \approx 10^{-8}$ для функции $g_3(x)$

6 Разработка функции `composite_simpson(a, b, n, f)`

Согласно пункту 4 задания базовой части необходимо разработать функцию `composite_simpson(a, b, n, f)` численного интегрирования функции f на интервале $[a; b]$ по n узлам с помощью составной формулы Симпсона.

Составная формула Симпсона численного интегрирования функции $f(x) \in C^4[a; b]$ на интервале $[a; b]$ по n узлам имеет вид:

$$\int_a^b f(x)dx = \frac{h}{3} \left[f(x_1) + 2 \sum_{i=1}^{n/2-1} f(x_{2i+1}) + 4 \sum_{i=1}^{n/2} f(x_{2i}) + f(x_{n+1}) \right] + \frac{(b-a)h^4}{180} f^{(4)}(\xi), \quad (9)$$

где $\xi \in (a; b)$, $x_i = a + (i-1)h$, $h = \frac{b-a}{n}$ - шаг интегрирования, и $i = 1, 2, \dots, n+1$, где n - чётное число.

Таким образом, на языке программирования Python была разработана функция `composite_simpson(a, b, n, f)`. На вход функции подаются: границы отрезка интегрирования a и b , шаг дифференцирования h и функция f , которую необходимо проинтегрировать. Функция возвращает значение определенного интеграла функции f на отрезке $[a; b]$.

Программная реализация формулы (5) представлена на листинге 2:

Листинг 2. Программная реализация функции `composite_simpson(a, b, n, f)`

```

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

```

7 Анализ зависимости абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования

Согласно пункту 5 задания базовой части необходимо рассчитать интегралы $\int_0^\pi g_2(x)dx$ и $\int_\epsilon^1 g_3(x)dx$, где $0 < \epsilon < 0.01$, с помощью составной формулы Симпсона для множества значений $n \in [3; 9999]$. Также необходимо построить log-log графики зависимостей абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования.

Для построения графиков точные значения интегралов $\int_0^\pi g_2(x)dx$ и $\int_\epsilon^1 g_3(x)dx$, где $0 < \epsilon < 0.01$, были вычислены аналитически.

$$\begin{aligned}\int_0^\pi g_2(x) dx &= \int_0^\pi x^2 \sin(3x) dx = \\ &= \left(-\frac{x^2 \cos(3x)}{3} + \frac{2x \sin(3x)}{9} + \frac{2 \cos(3x)}{27} \right) \Big|_0^\pi = \frac{\pi^2}{3} - \frac{4}{27}\end{aligned}$$

Точное значение $\int_\epsilon^1 g_3(x)dx$ было найдено для $\epsilon = 0.001$.

Была выполнена замена переменной:

$$t = \frac{\pi}{x}, \quad dx = -\frac{\pi}{t^2} dt$$

Пределы интегрирования:

$$x = 0.001 \Rightarrow t = \frac{\pi}{0.001} = 1000\pi$$

$$x = 1 \Rightarrow t = \pi$$

Преобразованный интеграл:

$$\int_{0.001}^1 g_3(x)dx = \pi \int_\pi^{1000\pi} \frac{\sin t}{t^2} dt$$

Приближённое значение интеграла было вычислено с помощью функции `composite_simpson`.

Таким образом, были построены log-log графики зависимостей абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования для функций $g_2(x)$ и $g_3(x)$. Полученные графики представлены на рисунках 5-6:

Согласно пункту 5 задания базовой части необходимо сравнить порядок точности составной формулы Симпсона, полученный “с помощью log-log графика”, с аналитическим порядком точности этой формулы. Также необходимо ответить на вопрос: "Существует ли оптимальный шаг интегрирования для данной формулы, минимизирующий достижимую погрешность?".

Погрешность составной формулы Симпсона определяется остаточным членом:

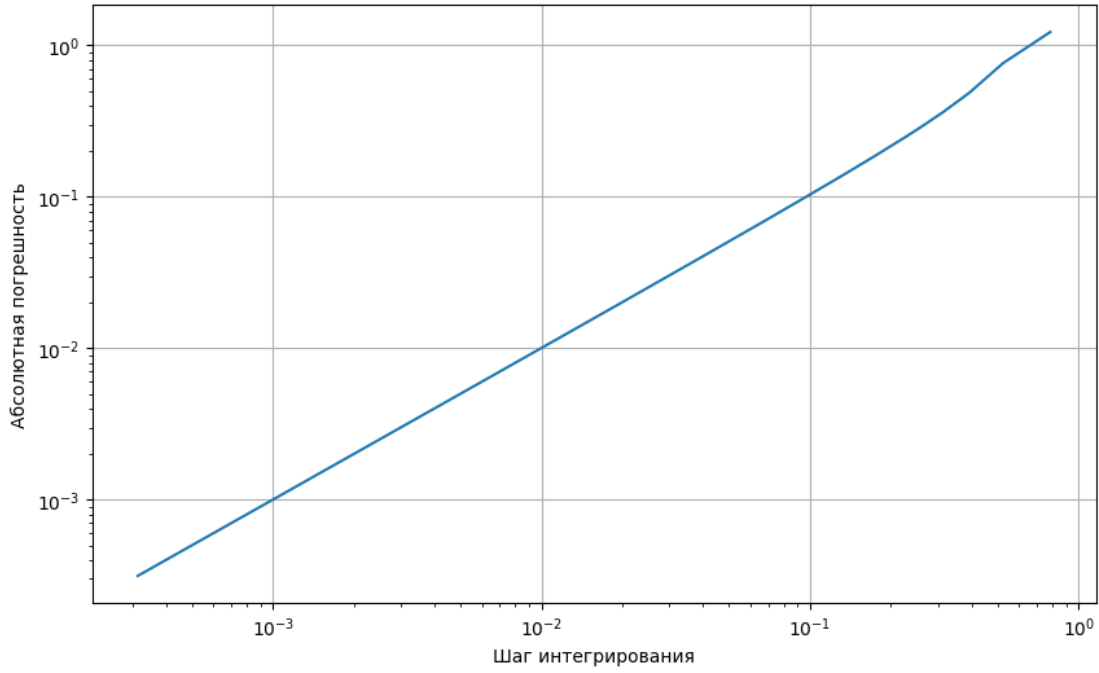


Рис. 5. Зависимость абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования для функции $g_2(x)$

$$E_n = -\frac{(b-a)}{180} h^4 f^{(4)}(\xi), \quad \xi \in (a; b), \quad (10)$$

где a, b - пределы интегрирования, h - шаг интегрирования.

Из выражения 10 следует, что составная формула Симпсона имеет 4-ый порядок точности ($O(h^4)$) для достаточно гладких функций ($f(x) \in C^4[a; b]$).

Подтверждение аналитической оценки представлено на рисунке 7.

Суммарная погрешность численного интегрирования складывается из:

- Численной погрешности: $E_n \sim C_1 h^4$
- Погрешности округления: $E_{round} \sim C_2 \epsilon / h$

где ϵ - машинная точность.

Оптимальный шаг h_{opt} находится из условия минимума суммарной погрешности:

$$\frac{d}{dh}(E_{trunc} + E_{round}) = 0 \Rightarrow h_{opt} \sim \epsilon^{1/5} \approx 6e-4$$

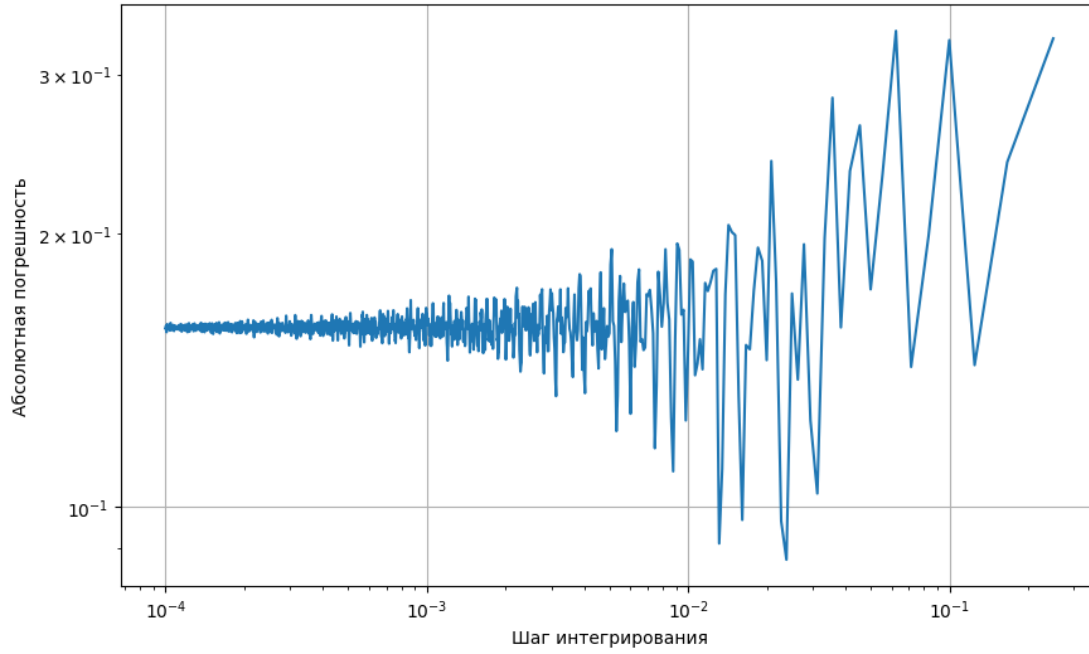


Рис. 6. Зависимость абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования для функции $g_3(x)$

8 Вывод общей центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка вместе с остаточным членом

Согласно пункту 7 задания базовой части необходимо вывести общую центральную формулу численного дифференцирования 4-го порядка вместе с остаточным членом, аппроксимирующую первую производную по 5 узлам:

$$f'(x_0) \approx Af(x_0 - 2h) + Bf(x_0 - h) + Cf(x_0) + Df(x_0 + h) + Ef(x_0 + 2h) \quad (11)$$

Также необходимо продемонстрировать, что формула 11 действительно имеет 4-й порядок точности.

Для получения аппроксимации первой производной 4-го порядка по пяти точкам функция $f(x)$ была разложена в ряд Тейлора до 5 порядка включительно в точке x_0 :

$$f(x) = f(x_0) + f'(x_0)(x - x_0) + \frac{f''(x_0)}{2}(x - x_0)^2 + \frac{f'''(x_0)}{6}(x - x_0)^3 + \frac{f^{(4)}(x_0)}{24}(x - x_0)^4 + \frac{f^{(5)}(\xi)}{120}(x - x_0)^5, \quad (12)$$

где $\xi \in [x_0; x]$.

Далее были вычислены значения выражения 12 в точках $x_0 - 2h, x_0 - h, x_0 + h, x_0 + 2h$.

Для $x = x_0 - 2h$:

$$f(x_0 - 2h) = f(x_0) - 2hf'(x_0) + 2h^2f''(x_0) - \frac{4h^3}{3}f'''(x_0) + \frac{2h^4}{3}f^{(4)}(x_0) - \frac{4h^5}{15}f^{(5)}(\xi_1), \quad (13)$$

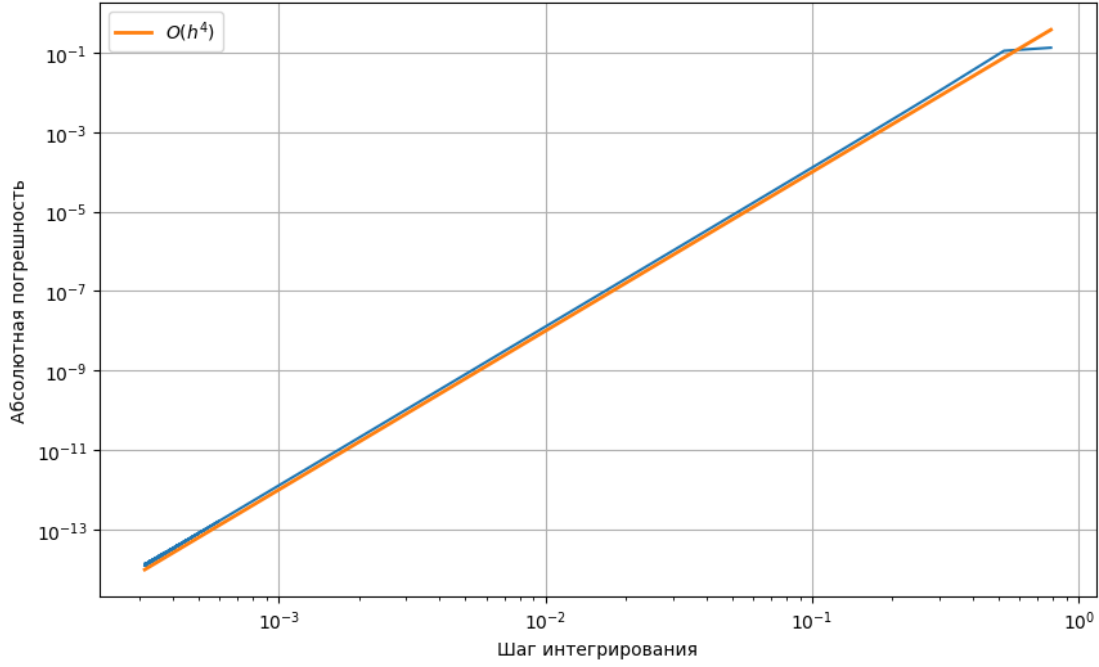


Рис. 7. Зависимость абсолютной погрешности численного интегрирования от шага интегрирования для функции $g_2(x)$

где $\xi_1 \in (x_0 - 2h; x_0)$.

Для $x = x_0 - h$:

$$f(x_0 - h) = f(x_0) - hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) - \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) - \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi_2), \quad (14)$$

где $\xi_2 \in (x_0 - h; x_0)$.

Для $x = x_0 + h$:

$$f(x_0 + h) = f(x_0) + hf'(x_0) + \frac{h^2}{2}f''(x_0) + \frac{h^3}{6}f'''(x_0) + \frac{h^4}{24}f^{(4)}(x_0) + \frac{h^5}{120}f^{(5)}(\xi_3), \quad (15)$$

где $\xi_3 \in (x_0; x_0 + h)$.

Для $x = x_0 + 2h$:

$$f(x_0 + 2h) = f(x_0) + 2hf'(x_0) + 2h^2f''(x_0) + \frac{4h^3}{3}f'''(x_0) + \frac{2h^4}{3}f^{(4)}(x_0) + \frac{4h^5}{15}f^{(5)}(\xi_4), \quad (16)$$

где $\xi_4 \in (x_0; x_0 + 2h)$.

Далее выражения 13-16 были подставлены в 11. Для получения верного выражения коэффициенты при $f(x_0, f''(x_0), f'''(x_0), f^{(4)}(x_0))$ должны равняться 0, в то время как коэффициент при $f'(x_0)$ должен равняться 1.

Так, была получена система уравнений:

$$\begin{cases} A + B + C + D + E = 0, \\ -2A - B + D + 2E = \frac{1}{h}, \\ 2A + \frac{B}{2} + \frac{D}{2} + 2E = 0, \\ -\frac{4A}{3} - \frac{B}{6} + \frac{D}{6} + \frac{4E}{3} = 0, \\ \frac{2A}{3} + \frac{B}{24} + \frac{D}{24} + \frac{2E}{3} = 0. \end{cases} \quad (17)$$

Решение системы уравнений 17 имеет вид:

$$A = \frac{1}{12h}, \quad B = -\frac{2}{3h}, \quad C = 0, \quad D = \frac{2}{3h}, \quad E = -\frac{1}{12h} \quad (18)$$

После подстановки разложений 13-16 в формулу 11 для первой производной, остаточные члены из каждого узла образуют общий остаточный член, имеющий вид:

$$R = A \cdot \left(-\frac{(2h)^5}{120} f^{(5)}(\xi_1) \right) + B \cdot \left(-\frac{h^5}{120} f^{(5)}(\xi_2) \right) + D \cdot \left(\frac{h^5}{120} f^{(5)}(\xi_3) \right) + E \cdot \left(\frac{(2h)^5}{120} f^{(5)}(\xi_4) \right) \quad (19)$$

После подстановки коэффициентов 18 выражение 19 примет вид:

$$R = -\frac{h^4}{45} f^{(5)}(\xi_1) - \frac{h^4}{180} f^{(5)}(\xi_2) + \frac{h^4}{180} f^{(5)}(\xi_3) - \frac{h^4}{45} f^{(5)}(\xi_4) \quad (20)$$

Пусть $f(x) \in C^{(5)}[x_0 - 2h; x_0 + 2h]$. Тогда по теореме о промежуточном значении $\exists \xi \in (x_0 - 2h; x_0 + 2h)$:

$$\sum_{i=1}^n c_i f^{(5)}(\xi_i) = \left(\sum_{i=1}^n c_i \right) f^{(5)}(\xi) \quad (21)$$

Тогда:

$$R = \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi) \quad (22)$$

Таким образом, итоговое выражение общей центральной формулы численного дифференцирования 4-го порядка вместе с остаточным членом имеет вид:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} f(x_0 - 2h) + \frac{2}{3h} f(x_0 - h) + \frac{2}{3h} f(x_0 + h) + \frac{1}{12h} f(x_0 + 2h) + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi), \quad (23)$$

где $f(x) \in C^{(5)}[a; b]$; $x_0 - 2h, x_0 - h, x_0 + h, x_0 + 2h \in [a; b]$; $\xi \in (x_0 - 2h; x_0 + 2h)$.

Остаточный член в выражении 25 пропорционален h^4 , что подтверждает 4-ый порядок точности формулы 25.

9 Разработка функции `diff4(x_0, h, f)`

Согласно пункту 8 задания продвинутой части необходимо разработать 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 .

На языке программирования Python в соответствии с формулой 25 была разработана функция `diff4(x_0, h, f)`. На вход функции подаются: точка, в которой вычисляется первая производная x_0 функции f , и шаг дифференцирования h .

Программная реализация формулы (5) представлена на листинге 3:

Листинг 3. Программная реализация функции `diff4(x_0, h, f)`

```
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)
```

10 Анализ зависимости абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-го порядка от шага дифференцирования

Согласно пункту 9 задания продвинутой части необходимо рассчитать производные $g'_1(x)$ в точке $x_0 = 3$ и $g'_3(x)$ в точке $x_0 = 0.01$ для множества значений $h \in [10^{-16}; 1]$ с помощью функции `diff4`, а также добавить log-log графики зависимостей абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования для двух указанных случаев.

Для построения графиков использовались точные значения производных 6 и Приближённые значения производных были вычислены с помощью функции `diff4`.

Таким образом, были построены графики зависимостей абсолютной погрешности численного дифференцирования от шага дифференцирования для функций $g_1(x)$ и $g_3(x)$. Полученные графики представлены на рисунках 8 и 9:

Согласно пункту 10 задания базовой части необходимо ответить на ряд вопросов о применении функции `diff4`.

1. Каким образом на log-log графике можно увидеть порядок точность формулы дифференцирования? Представьте аналитическое доказательство, а также продемонстрируйте порядок точности на графике.

По определению порядком точности формулы дифференцирования называют оценку зависимости остаточного члена от шага дифференцирования.

По определению центральная формула численного дифференцирования с остаточным членом для функции $f(x)$ в точке x_0 имеет вид:

$$f'(x) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{h^2}{6} f^{(3)}(\xi), \quad (24)$$

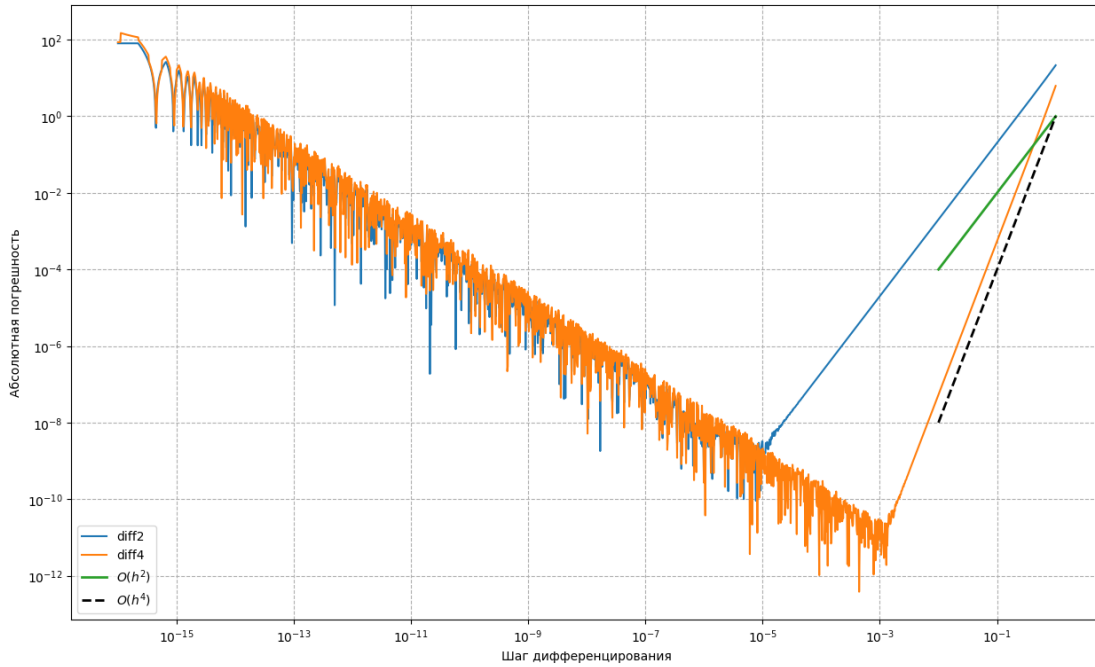


Рис. 8. Зависимость абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-ого и 4-го порядков от шага дифференцирования для функции $g_1(x)$

где h - шаг дифференцирования, $\xi \in (x_0 - h; x_0 + h)$.

Согласно формуле 25 остаточный член центральной формулы численного дифференцирования 4-ого порядка точности имеет вид:

$$f'(x_0) = \frac{1}{12h} f(x_0 - 2h) + \frac{2}{3h} f(x_0 - h) + \frac{2}{3h} f(x_0 + h) + \frac{1}{12h} f(x_0 + 2h) + \frac{h^4}{30} f^{(5)}(\xi), \quad (25)$$

где $f(x) \in C^{(5)}[a; b]$; $x_0 - 2h, x_0 - h, x_0 + h, x_0 + 2h \in [a; b]$; $\xi \in (x_0 - 2h; x_0 + 2h)$.

Таким образом, погрешность формулы имеет 4-ый порядок точности ($O(h^4)$), так как остаточный член пропорционален h^4 .

На log-log графиках (рисунки 8-9) зависимости погрешностей от h :

- При больших h (правые части графиков) наклон прямой равен 4 - $\log(E) \sim 4 \log(h)$, где E - общая погрешность вычислений.
- При малых h (левые части графиков) наклон меняется ввиду роста влияния ошибок округления на общую погрешность.

2. Совпадает ли порядок точности выведенной формулы численного дифференцирования на log-log графике с её фактическим порядком точности?

Порядок точности на графиках (рисунки 8-9) совпадает с теоретическим ($O(h^4)$) в области, где доминирует численная ошибка:

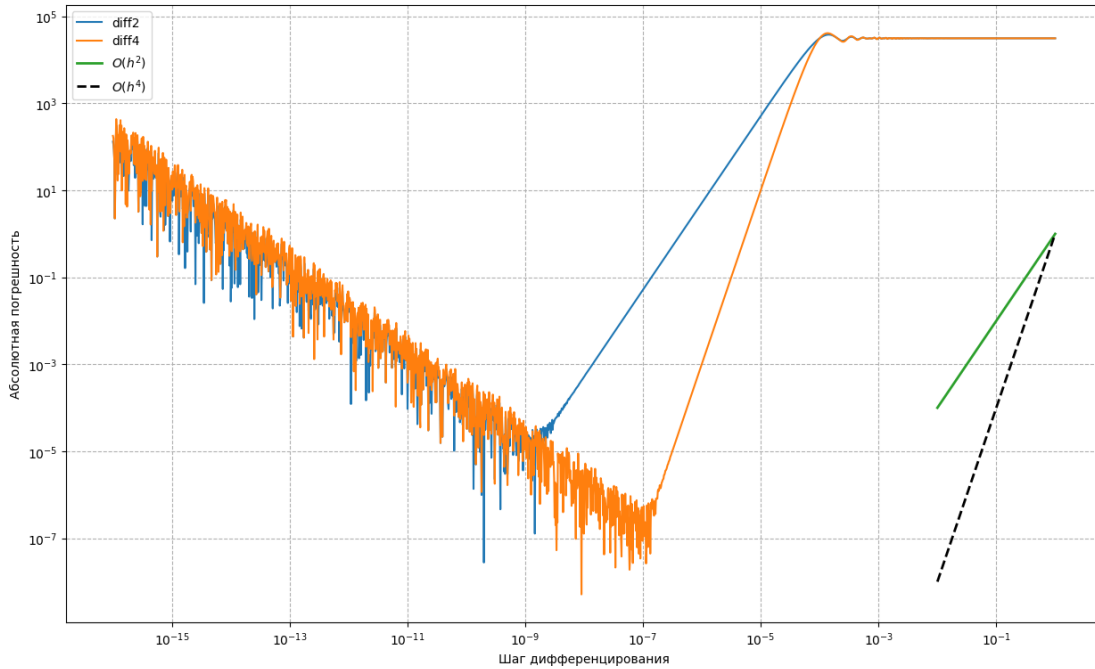


Рис. 9. Зависимость абсолютной погрешности центральной формулы численного дифференцирования 2-ого и 4-го порядков от шага дифференцирования для функции $g_3(x)$

- Наклон ≈ 4 для $h \in [10^{-3}; 10^0]$ для функции $g_1(x)$
 - Наклон ≈ 4 для $h \in [10^{-7}; 10^0]$ для функции $g_3(x)$
3. Каков оптимальный шаг дифференцирования, при котором абсолютная погрешность минимальна? С чем связано существование такого минимума? Обоснуйте свой ответ, ссылаясь на данные log-log графика.

Для очень малых значений h общая погрешность E начинает возрастать из-за ошибок округления, вызванных ограниченной точностью представления чисел в компьютере. Это связано с тем, что разность близких значений $f(x_0 + h)$ и $f(x_0 - h)$ становится сопоставимой с ошибками округления.

Оптимальный шаг - h_{opt} - точка минимума на графике зависимости абсолютной погрешности от шага дифференцирования.

Из log-log графиков (рисунки 8-9) зависимостей погрешностей от h :

- $h_{\text{opt}} \approx 10^{-5}$ для функции diff2 и $h_{\text{opt}} \approx 10^{-3}$ для функции diff4 в случае дифференцирования функции $g_1(x)$
- $h_{\text{opt}} \approx 10^{-9}$ для функции diff2 и $h_{\text{opt}} \approx 10^{-7}$ для функции diff4 в случае дифференцирования функции $g_3(x)$
- $E_{\text{min}} \approx 10^{-10}$ для функции diff2 и $E_{\text{min}} \approx 10^{-12}$ для функции diff4 в случае

дифференцирования функции $g_1(x)$, где E_{min} - минимально достижимая погрешность вычислений

- $E_{min} \approx 10^{-7}$ для функции diff2 и $E_{min} \approx 10^{-8}$ для функции diff4 в случае дифференцирования функции $g_3(x)$, где E_{min} - минимально достижимая погрешность вычислений

Разница значений обусловлена тем, что методы высшего порядка используют больше точек для вычисления, увеличивая вклад ошибок округления, однако при оптимальном шаге дифференцирования они показывают лучшую минимизацию общей погрешности вычисления.

11 Вывод квадратуры Гаусса степени точности 5

Согласно пункту 11 задания продвинутой части необходимо с помощью теоремы о корнях многочленов Лежандра, вывести квадратурную формулу Гаусса (далее квадратура Гаусса), имеющую степень точности 5.

Пусть $P_n(x)$ — многочлен Лежандра степени n . Тогда по теореме о корнях многочлена Лежандра:

1. $P_n(x)$ имеет ровно n различных вещественных корней, все они лежат в интервале $(-1; 1)$
2. Корни многочлена $P_n(x)$ симметричны относительно нуля
3. Между любыми двумя корнями $P_{n+1}(x)$ находится ровно один корень $P_n(x)$

Квадратурная формула Гаусса на отрезке $[-1; 1]$ имеет вид:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \sum_{i=1}^n c_i f(x_i), \quad (26)$$

где

$$x_i$$

- нули многочлена Лежандра степени n , c_i - соответствующие веса. Степень точности формулы 26 составляет $2n - 1$.

Для достижения степени точности 5 необходимо решить уравнение:

$$2n - 1 = 5 \implies n = 3.$$

Согласно теореме о корнях многочлена Лежандра, многочлен Лежандра 3-ей степени имеет ровно 3 корня в $(-1, 1)$.

Многочлен Лежандра $P_3(x)$ имеет вид:

$$P_3(x) = \frac{1}{2}(5x^3 - 3x) = x^3 - \frac{3}{5}x. \quad (27)$$

Нули многочлена Лежандра 3-ей степени (существующие по теореме о корнях многочлена Лежандра):

$$x^3 - \frac{3}{5}x = 0 \implies x \left(x^2 - \frac{3}{5} \right) = 0.$$

Таким образом, были получены три симметричных узла:

$$x_1 = -\sqrt{\frac{3}{5}}, \quad x_2 = 0, \quad x_3 = \sqrt{\frac{3}{5}}.$$

Общая формула для весов квадратуры Гаусса на $[-1; 1]$:

$$c_i = \frac{2}{(1 - x_i^2)(P'_3(x_i))^2}.$$

Производная многочлена:

$$P'_3(x) = 3x^2 - \frac{3}{5}.$$

Вычисление весов:

$$P'_3\left(\pm\sqrt{\frac{3}{5}}\right) = 3 \cdot \frac{3}{5} - \frac{3}{5} = \frac{6}{5},$$

$$1 - \left(\pm\sqrt{\frac{3}{5}}\right)^2 = \frac{2}{5},$$

$$c_1 = c_3 = \frac{2}{\frac{2}{5} \cdot \left(\frac{6}{5}\right)^2} = \frac{5}{9},$$

$$P'_3(0) = -\frac{3}{5},$$

$$c_2 = \frac{2}{1 \cdot \left(-\frac{3}{5}\right)^2} = \frac{50}{9} \approx \frac{8}{9}.$$

Таким образом, была получена итоговая формула квадратуры Гаусса степени точности 5:

$$\int_{-1}^1 f(x)dx \approx \frac{5}{9}f\left(-\sqrt{\frac{3}{5}}\right) + \frac{8}{9}f(0) + \frac{5}{9}f\left(\sqrt{\frac{3}{5}}\right). \quad (28)$$

12 Разработка функции gauss_quad5(f, a, b)

Согласно пункту 12 задания продвинутой части необходимо написать функцию gauss_quad5(f) численного интегрирования функции f с помощью квадратуры Гаусса пятой степени точности.

Таким образом, в соответствии с формулой 28 на языке программирования Python была разработана функция `gauss_quad5(f, a, b)`. На вход функции подаются: пределы интегрирования a и b и функция f , которую необходимо проинтегрировать.

Для возможности проводить интегрирование на отрезке, отличном от $[-1; 1]$ было использовано преобразование преобразование узлов по следующей формуле:

$$t = 0.5(a + b) + 0.5(b - a) * x,$$

где x - узел до преобразования, t - узел после преобразования.

Программная реализация формулы представлена на листинге 3:

Листинг 4. Программная реализация функции `gauss_quad5(f, a, b)`

```

1 def gauss_quad5(f, a=-1, b=1):
2     # узлы и веса для стандартного интервала [-1, 1]
3     nodes = [-np.sqrt(3/5), 0, np.sqrt(3/5)]
4     weights = [5/9, 8/9, 5/9]
5
6     # преобразование узлов к интервалу [a, b]
7     if a != -1 or b != 1:
8         nodes = [0.5*(a + b) + 0.5*(b - a)*x for x in nodes]
9
10    return 0.5*(b - a) * sum(w * f(x) for x, w in zip(nodes, weights))

```

13 Проведение эксперимента с квадратурой Гаусса

Согласно пункту 12 задания продвинутой части необходимо доказать, что квадратура Гаусса имеет степень точности 5, с помощью следующего вычислительного эксперимента:

- построить 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, используя случайно сгенерированные значения коэффициентов полиномов;
- проинтегрировать их на интервале $[0; 2]$ аналитически и с помощью функции `gauss_quad5(f)`;
- посчитать абсолютную погрешность и сделать вывод о степени точности выведенной квадратуры;

Для генерации случайных коэффициентов была использована функция `numpy.random.randn` библиотеки Numpy. Для формирования полиномов была использована функция `numpy.poly1d` библиотеки Numpy.

Были сгенерированы следующие полиномы:

- $P_0(x) = -0.03286$
- $P_1(x) = -6.383x + 1.477$

- $P_2(x) = 10.23x^2 - 7.342x - 7.341$
- $P_3(x) = 10.79x^3 + 2.674x^2 - 9.695x + 0.4256$
- $P_4(x) = -9.634x^4 - 9.657x^3 - 2.58x^2 - 24.13x - 22.25$
- $P_5(x) = -10.62x^5 - 15.13x^4 - 1.858x^3 - 14.08x^2 - 19.12x + 9.656$
- $P_6(x) = -7.258x^6 - 4.325x^5 - 19.25x^4 - 10.44x^3 - 3.891x^2 - 16.51x - 1.243$

Была написана программа на языке программирования Python для проведения эксперимента. В результате выполнения программы был получен график зависимости абсолютной погрешности интегрирования от степени полинома. Полученный график представлен на рисунке 10:

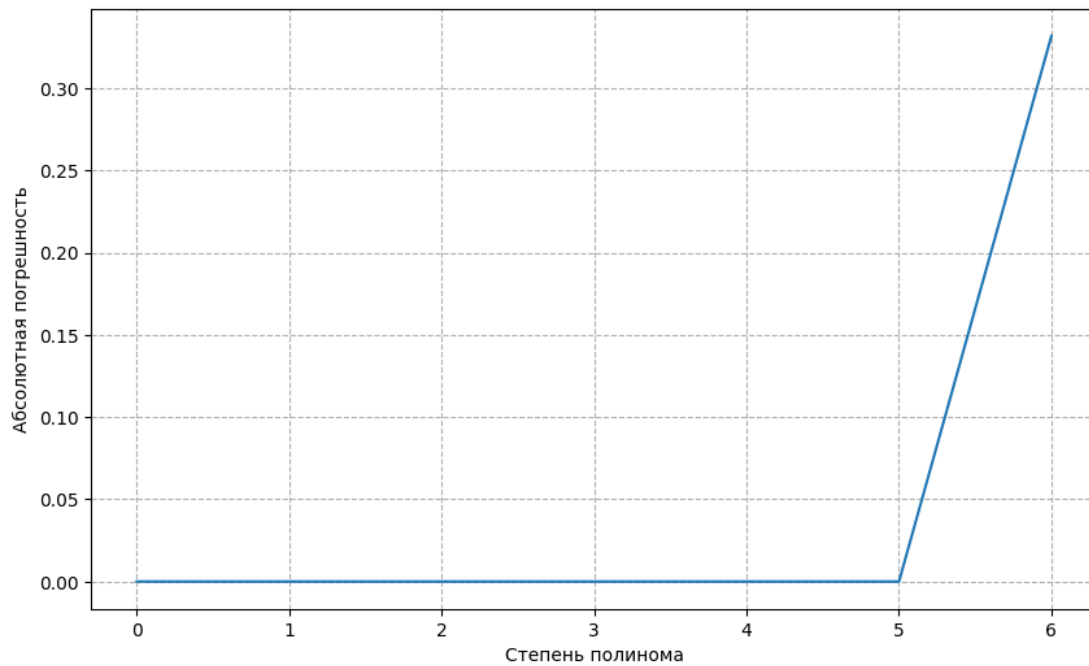


Рис. 10. Зависимость абсолютной погрешности численного интегрирования с помощью квадратуры Гаусса степени точности 5 от степени полинома

Данные графика 10 подтверждают степень точности формулы 28 - погрешность интегрирования растет для полиномов степени выше 5ой.

14 Заключение

В результате проведенного анализа и проделанной работы были сделаны следующие выводы.

1. Шаг численного дифференцирования влияет на погрешность дифференцирования. При этом существует оптимальный шаг дифференцирования, обусловленный наличием погрешностей округления.
2. Повышение порядка точности функции численного дифференцирования ведет к лучшей минимизации погрешности.
3. Шаг численного интегрирования влияет на погрешность интегрирования. При этом существует оптимальный шаг интегрирования, обусловленный наличием погрешностей округления.
4. Степень точности квадратуры Гаусса определяет максимальную степень полинома, которую возможно проинтегрировать с высокой точностью.

Список использованных источников

1. Першин А.Ю. Лекции по курсу «Вычислительная математика». Москва, 2018-2021. С. 140.
2. Richard L. Burden, J. Douglas Faires, Annette M. Burden. Numerical Analysis. Cengage Learning, 2015. P. 912.
3. М. Б. Лагутин. Наглядная математическая статистика. Москва. БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. С. 472.