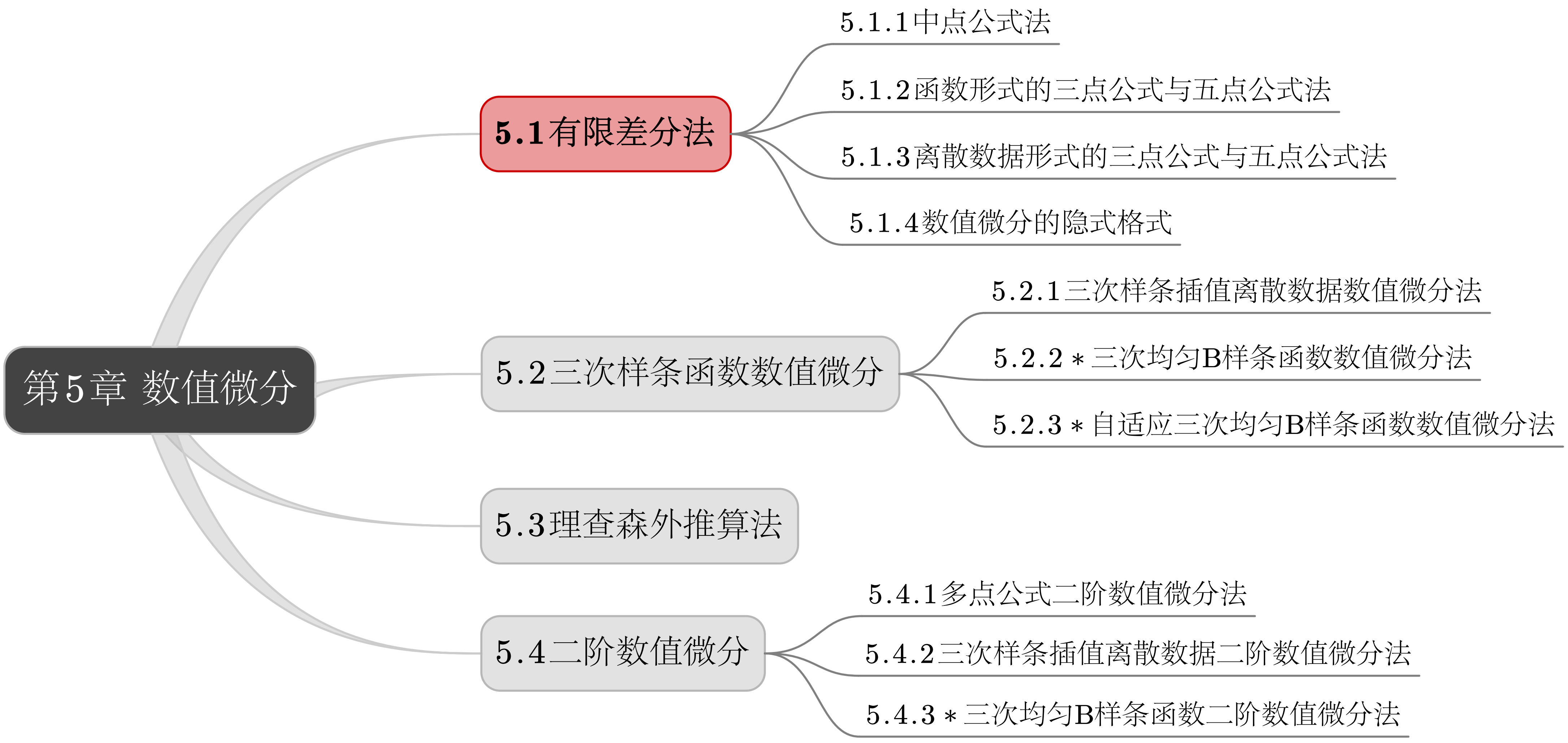
Python 数值分析 算法实践

Python Numerical Analysis Algorithm Practice

第5章 数值微分

讲授：X X X　　**日期**：2024年4月19日


第5章 数值微分
5.1有限差分法
5.1.1中点公式法
5.1.2函数形式的三点公式与五点公式法
5.1.3离散数据形式的三点公式与五点公式法
5.1.4数值微分的隐式格式
5.2三次样条函数数值微分
5.2.1三次样条插值离散数据数值微分法
5.2.2 * 三次均匀B样条函数数值微分法
5.2.3 * 自适应三次均匀B样条函数数值微分法
5.3理查森外推算法
5.4二阶数值微分
5.4.1多点公式二阶数值微分法
5.4.2三次样条插值离散数据二阶数值微分法
5.4.3 * 三次均匀B样条函数二阶数值微分法

5.1.1 中点公式法

数值微分最简单的方式是使用有限差分近似, 通常用差商代替微商. 一些常用的数值微分公式(如两点公式、三点公式、五点公式等)就是在等距步长情形下用插值多项式的导数作为近似值.

差商近似导数, 可得x_0处的一阶向前差商和向后差商:

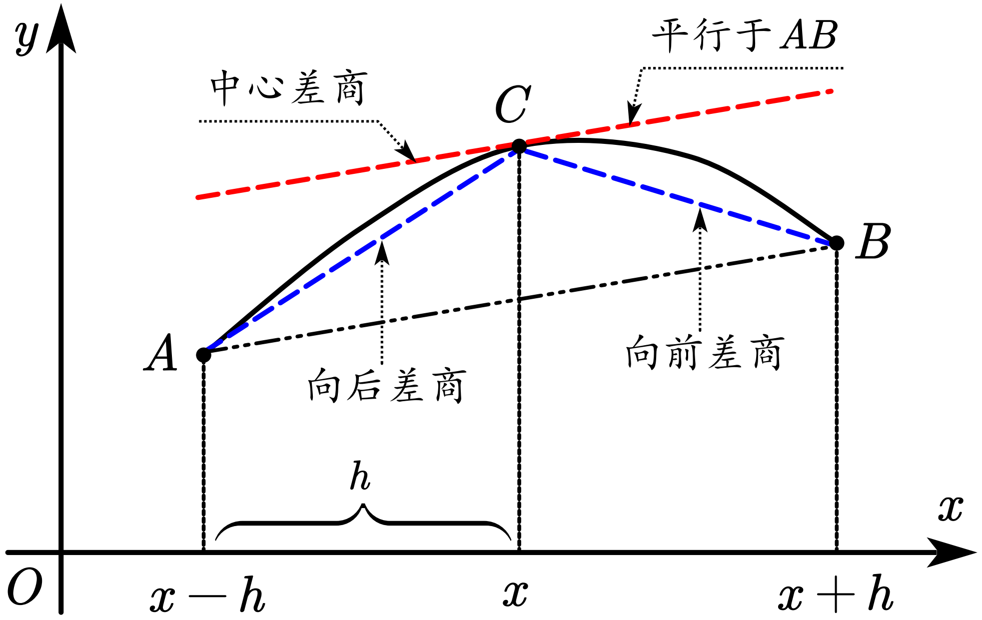
$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h}, \quad f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h}.$$

其中h为步长. 中心差商是向前差商和向后差商的算术平均:

$$f'(x_0) \approx \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h}$$

误差阶$O(h)$可由提高到$O(h^2)$, 又称中点公式法.

几何意义如图所示.



5.1.1 中点公式法

计算导数$f'(x_0)$的近似微分值，必须选取合适的步长. 记$G(h)=\dfrac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$，考虑其截断误差，步长$h$越小，计算结果越准确，且

$$|f'(x_0)-G(h)| \leq \frac{h^2}{6}M,\ M \geqslant \max_{|x-x_0|\leq h}|f'''(x)|.$$

考虑舍入误差，当步长h很小时，因$f(x_0+h)$与$f(x_0-h)$很接近，直接相减造成有效数字的严重损失. 因此，步长不宜太小.一般情况下，如果$f(x)$足够光滑，$h=0.1$即可.

5.1.1 中点公式法

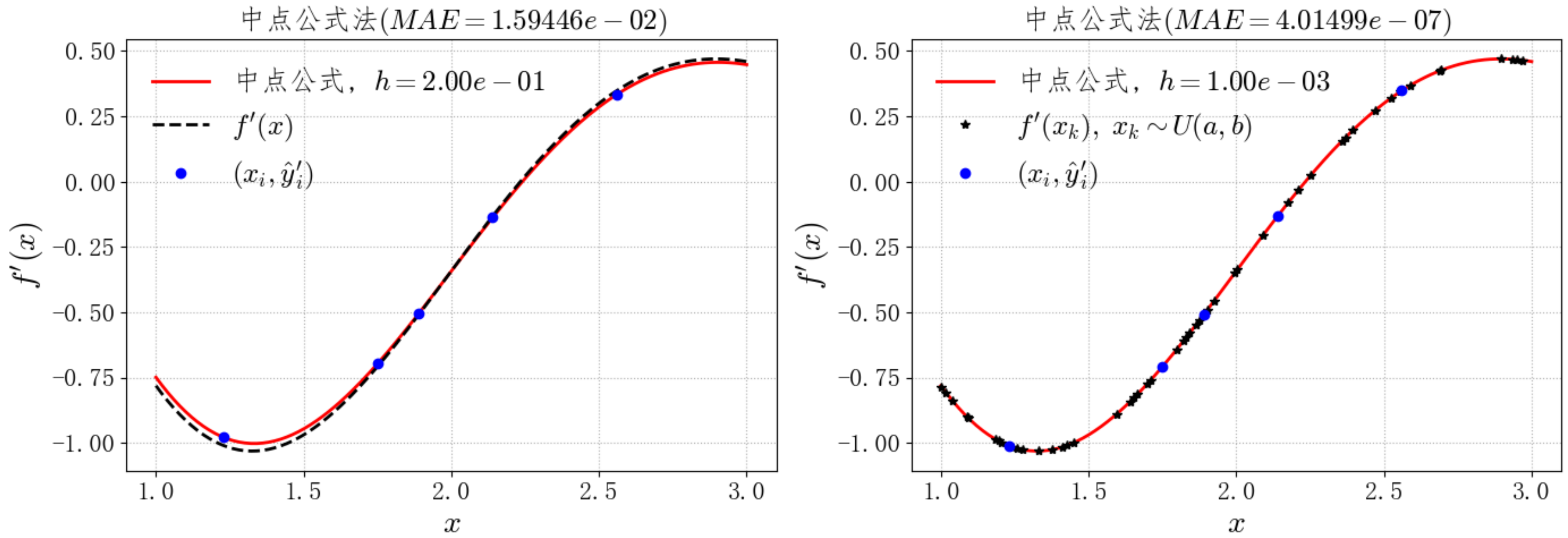
例1:用中点公式法计算$f(x)=e^{-0.5x}\sin 2x$在点[1.23,1.75,1.89,2.14,2.56]处的一阶数值微分，并分析误差.

表 5-1 中点公式求解各微分点的一阶数值微分及误差 $(k=1,2,\cdots,5)$

x_k	精确值 $f'(x_k)$	一阶数值微分 $\widehat{y}'_k$	误差 $\lvert f'(x_k)-\widehat{y}'_k\rvert$	截断误差
1.23	−1.01000147	−1.01000068	7.88356796e−07	7.88833787e−07
1.75	−0.70763235	−0.70763207	2.79722609e−07	2.80943730e−07
1.89	−0.50844462	−0.50844451	1.11342838e−07	1.12511846e−07
2.14	−0.13174909	−0.13174924	1.49239555e−07	1.50120490e−07
2.56	0.34806646	0.34806609	3.69343563e−07	3.69495314e−07

5.1.1 中点公式法

例1:用中点公式法计算$f(x)=e^{-0.5x}\sin 2x$在点$[1.23, 1.75, 1.89, 2.14, 2.56]$处的一阶数值微分，并分析误差.



上图为不同微分步长情况下的整体微分精度，可见，此例中步长$h=0.001$的效果较好. 在指定区间等分200个点的平均绝对值误差$MAE=4.01499\times10^{-7}$，最大绝对值误差8.25213×10^{-7}. 注意第2个子图，由于微分精度较高，可视化效果不佳，故采用随机50个点的微分值标记，标记符号为“*”.

5.1.2 函数形式的三点公式与五点公式法

三点公式法是由等距节点插值公式得到，其思想是先将函数用等距节点公式进行插值，再对插值多项式求导，取有限项数. 如利用三点拉格朗日插值公式并求一阶导数，可得带有余项的三点公式：

$$\begin{cases} f'(x_{k-1}) = \dfrac{-3f(x_{k-1}) + 4f(x_k) - f(x_{k+1})}{2h} + \dfrac{h^2}{3} f'''(\xi), \\ f'(x_k) = \dfrac{f(x_{k+1}) - f(x_{k-1})}{2h} + \dfrac{h^2}{6} f'''(\xi), \\ f'(x_{k+1}) = \dfrac{f(x_{k-1}) - 4f(x_k) + 3f(x_{k+1})}{2h} + \dfrac{h^2}{3} f'''(\xi), \end{cases}$$

其中$\xi \in (x_{k-1}, x_{k+1})$，上式分别称为三点前插公式、斯特林公式和三点后插公式. 忽略高阶项，即可得三点一阶微分公式.

5.1.2 函数形式的三点公式与五点公式法

已知五个节点$x_i=x_0+ih$，$i=0,1,2,3,4$，分析方法同三点公式，可导出下列五点公式:

$$\begin{cases}
f'(x_0)\approx \dfrac{1}{12h}[-25f(x_0)+48f(x_1)-36f(x_2)+16f(x_3)-3f(x_4)],\\
f'(x_1)\approx \dfrac{1}{12h}[-3f(x_0)-10f(x_1)+18f(x_2)-6f(x_3)+f(x_4)],\\
f'(x_2)\approx \dfrac{1}{12h}[f(x_0)-8f(x_1)+8f(x_3)-f(x_4)],\\
f'(x_3)\approx \dfrac{1}{12h}[-f(x_0)+6f(x_1)-18f(x_2)+10f(x_3)+3f(x_4)],\\
f'(x_4)\approx \dfrac{1}{12h}[3f(x_0)-16f(x_1)+36f(x_2)-48f(x_3)+25f(x_4)].
\end{cases}$$

五个相邻节点的选择原则:

(1)一般是在所考察的节点的两侧各取两个邻近的节点;

(2)如果一侧的节点数不足两个(即一侧只有一个节点或没有节点),则用另一侧的节点补足.

5.1.2 函数形式的三点公式与五点公式法

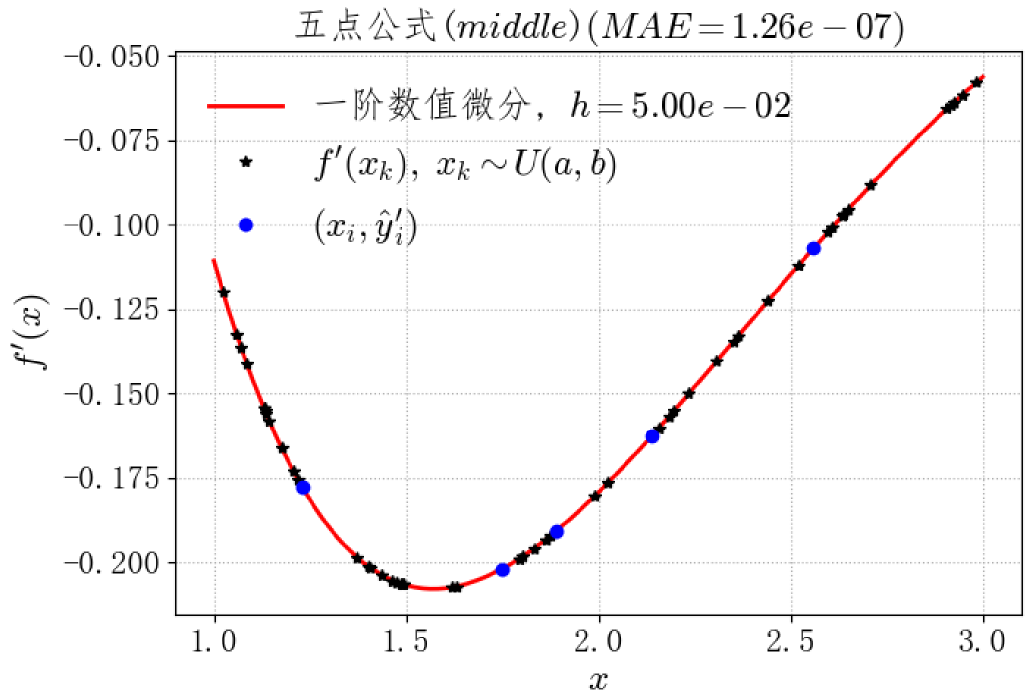
例2:试用五点公式计算$f(x)=e^{-x}\sin x$在点[1.23,1.75,1.89,2.14,2.56]处的一阶数值微分.

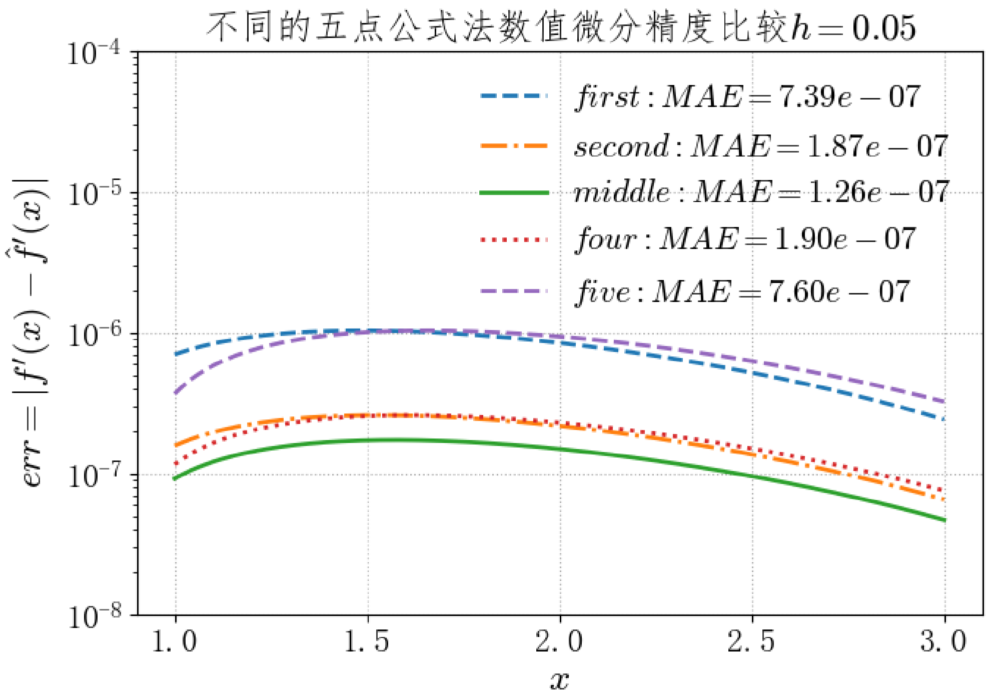
微分步长设定为$h=0.05$，采用五点公式(middle)计算微分值及误差如表所示，相对于中点公式，在相同微分步长的情况下，五点公式精度更高. 其中误差为绝对值误差$|f'(x_k)-\hat{y}_k'|$.

表 5-2　中点公式与五点公式 (middle) 求解一阶微分近似值以及绝对值误差 $(k=1,2,\cdots,5)$

x_k	精确值 $f'(x_k)$	中点公式 $\hat{y}_k'$	绝对值误差	五点公式 $\hat{y}_k'$	绝对值误差
1.23	−0.17778727	−0.17747626	3.11018437e−04	−0.17778742	1.47970928e−07
1.75	−0.20196564	−0.20184892	1.16722571e−04	−0.20196581	1.68235217e−07
1.89	−0.19084844	−0.19076837	8.00669081e−05	−0.1908486	1.58992702e−07
2.14	−0.16251568	−0.1624859	2.97778815e−05	−0.16251581	1.35412004e−07
2.56	−0.10706275	−0.10708117	1.84170231e−05	−0.10706284	8.92299208e−08

5.1.2 函数形式的三点公式与五点公式法





右图为五点公式的五种类型的一阶数值微分 $\hat{f}'(x)$ 与为微分真值 $f'(x)$ 的绝对误差(对数刻度坐标)对比示意图，middle类型的五点公式精度最高，而first和five最差，这与五个相邻点的取值有关 $x_k \pm ih,\ i=0,1,2$. 故通常采用五点公式middle类型进行数值微分.

5.1.3 离散数据形式的三点公式与五点公式法

假设已知离散数据点(x_k, y_k)，$k=0,1,\cdots,n$为等距节点，h为步长，则三点公式：

$$y'(x_{k-1}) \approx \frac{-3y_{k-1}+4y_k-y_{k+1}}{2h},\ y'(x_k) \approx \frac{y_{k+1}-y_{k-1}}{2h},\ y'(x_{k+1}) \approx \frac{y_{k-1}-4y_k+3y_{k+1}}{2h}.$$

五点公式也与与函数形式的五点公式一致，如下：

$$\begin{cases} y'_{1th}(x_k) \approx \dfrac{1}{12h}[-25y_k+48y_{k+1}-36y_{k+2}+16y_{k+3}-3y_{k+4}], & k=0,1,\cdots,n-4, \\ y'_{2th}(x_k) \approx \dfrac{1}{12h}[-3y_{k-1}-10y_k+18y_{k+1}-6y_{k+2}+y_{k+3}], & k=1,2,\cdots,n-3, \\ y'_{3th}(x_k) \approx \dfrac{1}{12h}[y_{k-2}-8y_{k-1}+8y_{k+1}-y_{k+2}], & k=2,3,\cdots,n-2, \\ y'_{4th}(x_k) \approx \dfrac{1}{12h}[-y_{k-3}+6y_{k-2}-18y_{k-1}+10y_k+3y_{k+1}], & k=3,4,\cdots,n-1, \\ y'_{5th}(x_k) \approx \dfrac{1}{12h}[3y_{k-4}-16y_{k-3}+36y_{k-2}-48y_{k-1}+25y_k], & k=4,5,\cdots,n. \end{cases}$$

5.1.3 离散数据形式的三点公式与五点公式法

针对**例2**示例：对函数 $f(x)=e^{-x}\sin x$，在区间 $[1,5]$ 等距生成10个离散数据点，结果如表所示.

表 5-3 各微分节点的三点公式与五点公式微分值以及绝对值误差 $(k=1,2,\cdots,10)$

x_k	精确值 $f'(x_k)$	三点公式 $\hat{y}'_k$	绝对值误差	五点公式 $\hat{y}'_k$	绝对值误差
1.00000000	−0.11079377	−0.15338853	0.04259477	−0.11683476	6.04099325e−03
1.44444444	−0.20427245	−0.18664566	0.01762679	−0.20277919	1.49325833e−03
1.88888889	−0.19095367	−0.18436237	0.00659130	−0.19192246	9.68784891e−04
2.33333333	−0.13710324	−0.13671855	0.00038468	−0.13781497	7.11734222e−04
2.77777778	−0.08023185	−0.08249624	0.00226439	−0.0806576	4.25751563e−04
3.22222222	−0.03652592	−0.03930573	0.00277981	−0.03672625	2.00323534e−04
3.66666667	−0.00930465	−0.01159213	0.00228749	−0.00936155	5.68986810e−05
4.11111111	0.00424353	0.00273794	0.00150559	0.00426001	1.64793685e−05
4.55555556	0.00873832	0.0079356	0.00080273	0.00870392	3.44081418e−05
5.00000000	0.00837248	0.00969767	0.00132519	0.00853791	1.65430469e−04

5.1.4数值微分的隐式格式

由Taylor展开式可知

$$f(x_k+h)=f(x_k)+hf'(x_k)+\frac{h^2}{2}f''(x_k)+\frac{h^3}{6}f'''(x_k)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_1),\quad \xi_1\in(x_k,x_k+h),$$

$$f(x_k-h)=f(x_k)-hf'(x_k)+\frac{h^2}{2}f''(x_k)-\frac{h^3}{6}f'''(x_k)+\frac{h^4}{24}f^{(4)}(\xi_2),\quad \xi_2\in(x_k-h,x_k).$$

如果$f^{(4)}(x)\in\mathbb{C}[x_k-h,x_k+h]$，两式相加可得

$$f''(x_k)=\frac{f(x_k+h)-2f(x_k)+f(x_k-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi),\ \xi\in(x_k-h,x_k+h).$$

其三阶导数为

$$f'''(x_k)=\frac{f'(x_k+h)-2'f(x_k)+f'(x_k-h)}{h^2}-\frac{h^2}{12}f^{(5)}(\xi),\ \xi\in(x_k-h,x_k+h).$$

5.1.4数值微分的隐式格式

将$f'''(x_k)$代入中点公式$f'(x_k)=\dfrac{f(x_k+h)-f(x_k-h)}{2h}-\dfrac{h^2}{6}f'''(x_k)+O(h^4)$可得

$$f'(x_k)=\frac{f(x_k+h)-f(x_k-h)}{2h}-\frac{f'(x_k+h)-2'f(x_k)+f'(x_k-h)}{6}+O(h^4)$$

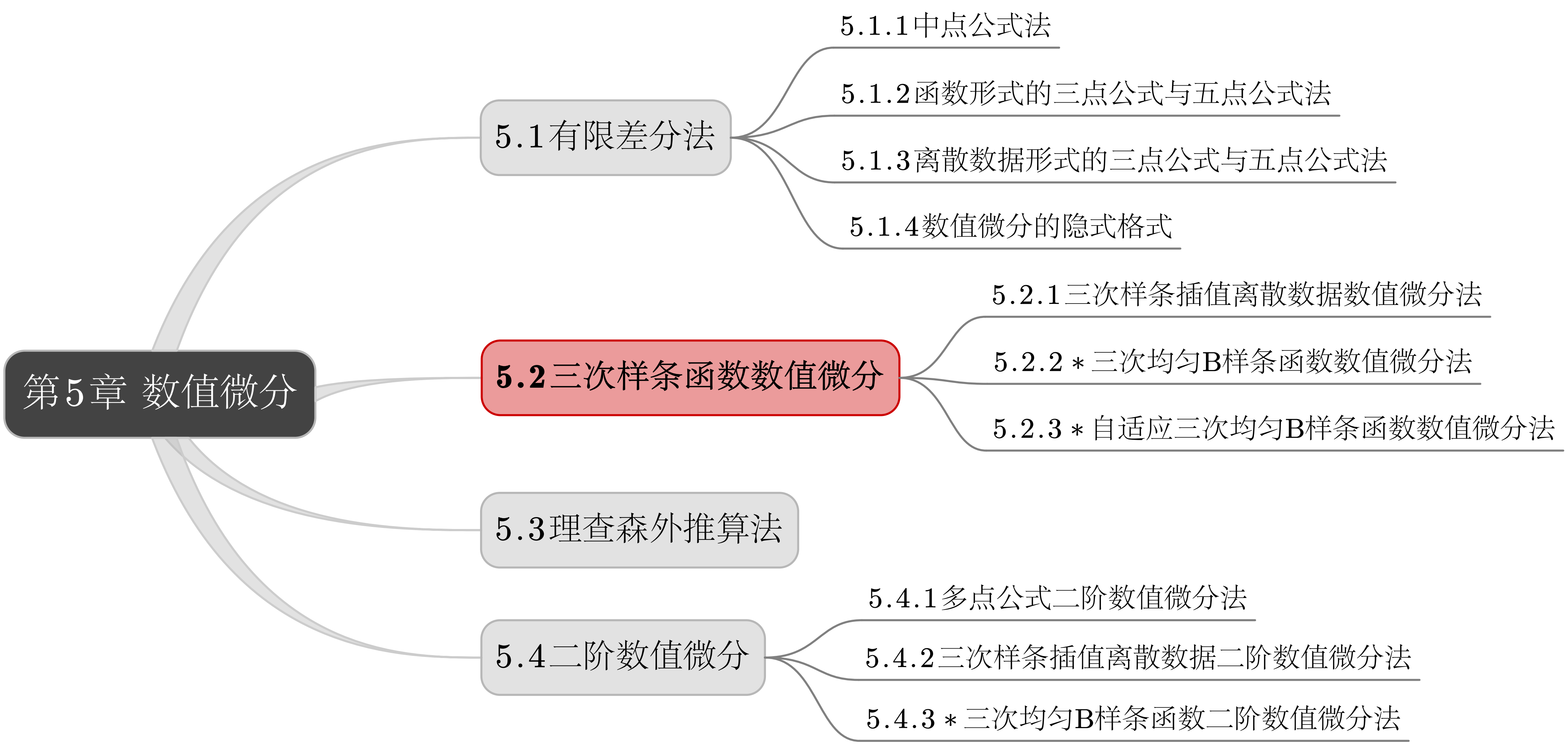
上式为数值微分的隐式格式. 略去误差项$O(h^4)$, 并记$m_k=f'(x_k)$, 则上式可表示为

$$m_{k-1}+4m_k+m_{k+1}=\frac{3}{h}[f(x_{k+1})-f(x_{k-1})],\ k=1,2,\cdots,n-1.$$

记$d_k=\dfrac{3}{h}[f(x_{k+1})-f(x_{k-1})]$, 写成矩阵形式为:

$$\begin{pmatrix} 4 & 1 & & & \\ 1 & 4 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & 4 & 1 \\ & & & 1 & 4 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} m_1 \\ m_2 \\ \vdots \\ m_{n-2} \\ m_{n-1} \end{pmatrix}=\begin{pmatrix} d_1-m_0 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-2} \\ d_{n-1}-m_n \end{pmatrix}$$

其中m_0和m_n采用五点公式法求解. 用追赶法求解三对角矩阵即可得到指定点的数值微分近似值.



第5章 数值微分
5.1有限差分法
5.1.1中点公式法
5.1.2函数形式的三点公式与五点公式法
5.1.3离散数据形式的三点公式与五点公式法
5.1.4数值微分的隐式格式
5.2三次样条函数数值微分
5.2.1三次样条插值离散数据数值微分法
5.2.2 * 三次均匀B样条函数数值微分法
5.2.3 * 自适应三次均匀B样条函数数值微分法
5.3理查森外推算法
5.4二阶数值微分
5.4.1多点公式二阶数值微分法
5.4.2三次样条插值离散数据二阶数值微分法
5.4.3 * 三次均匀B样条函数二阶数值微分法

5.2.1 三次样条插值离散数据数值微分法

已知离散数据(x_i, y_i)，$i=0,1,\cdots,n$，求解指定点x_0的数值微分，离散数据可能存在非等距，若非等距采用自然边界条件，等距可采用第一种边界条件．已知三次样条插值的第j $(j=0,1,\cdots,n-1)$段函数表示为

$$S_j(x)=\frac{(x_{j+1}-x)^3}{6h_j}M_j+\frac{(x-x_j)^3}{6h_j}M_{j+1}+\left(y_j-\frac{M_j h_j^2}{6}\right)\frac{x_{j+1}-x}{h_j}+\left(y_{j+1}-\frac{M_{j+1}h_j^2}{6}\right)\frac{x-x_j}{h_j}$$

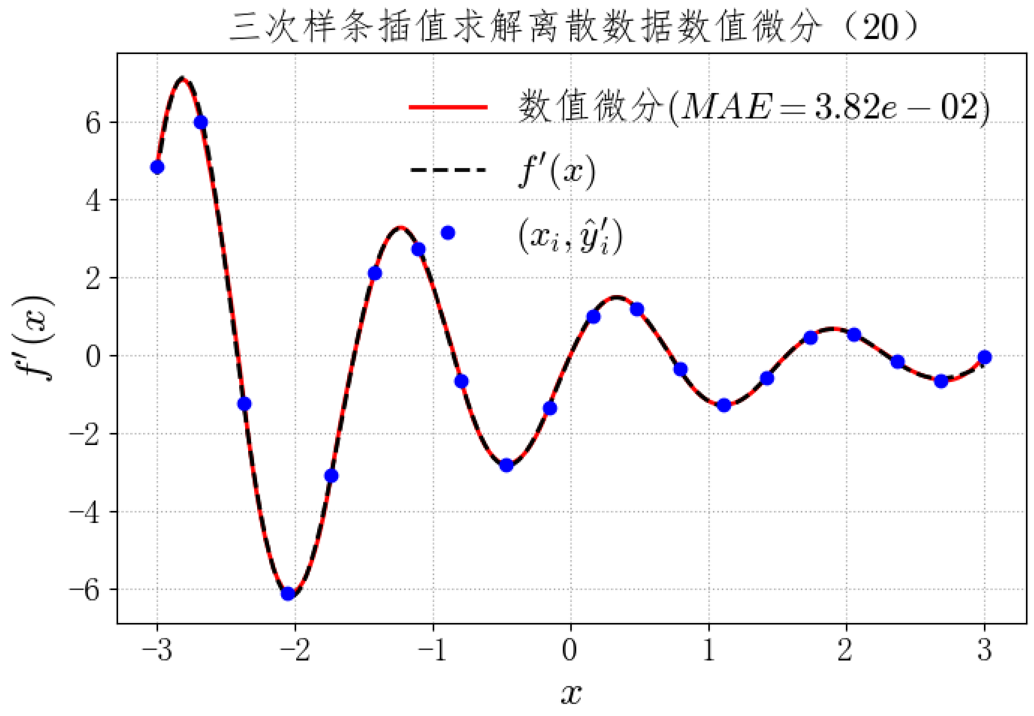
求解一阶导数(按三弯矩方法求解M)得

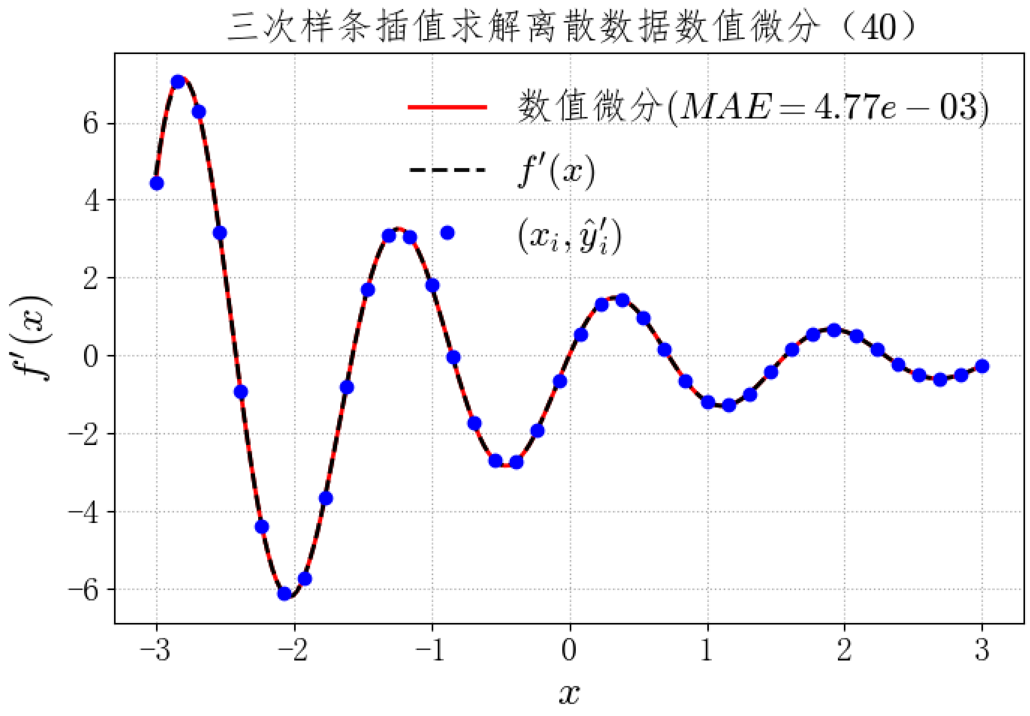
$$f'(x)\approx S_j'(x)=\frac{(x-x_j)^2}{2h_j}M_{j+1}-\frac{(x_{j+1}-x)^2}{2h_j}M_j+\frac{1}{h_j}\left(y_{j+1}-\frac{M_{j+1}h_j^2}{6}\right)-\frac{1}{h_j}\left(y_j-\frac{M_j h_j^2}{6}\right)$$

5.2.1 三次样条插值离散数据数值微分法

例4：由函数 $f(x)=(\sin 2x)^2 e^{-0.5x}$ 在区间 $[-3,3]$ 等距产生20和40个等距离散数据，以及服从 $U(-3,3)$ 均匀分布随机产生20和40个非等距的离散数据，采用三次样条插值数值微分法求解近似微分.

(1) 等距数据:

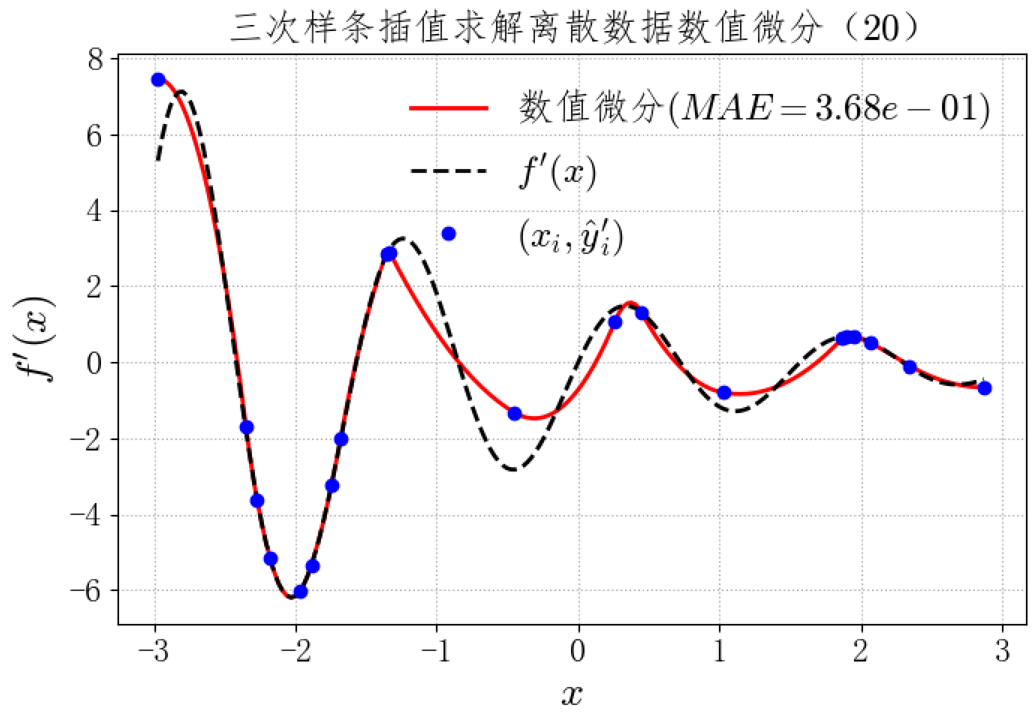


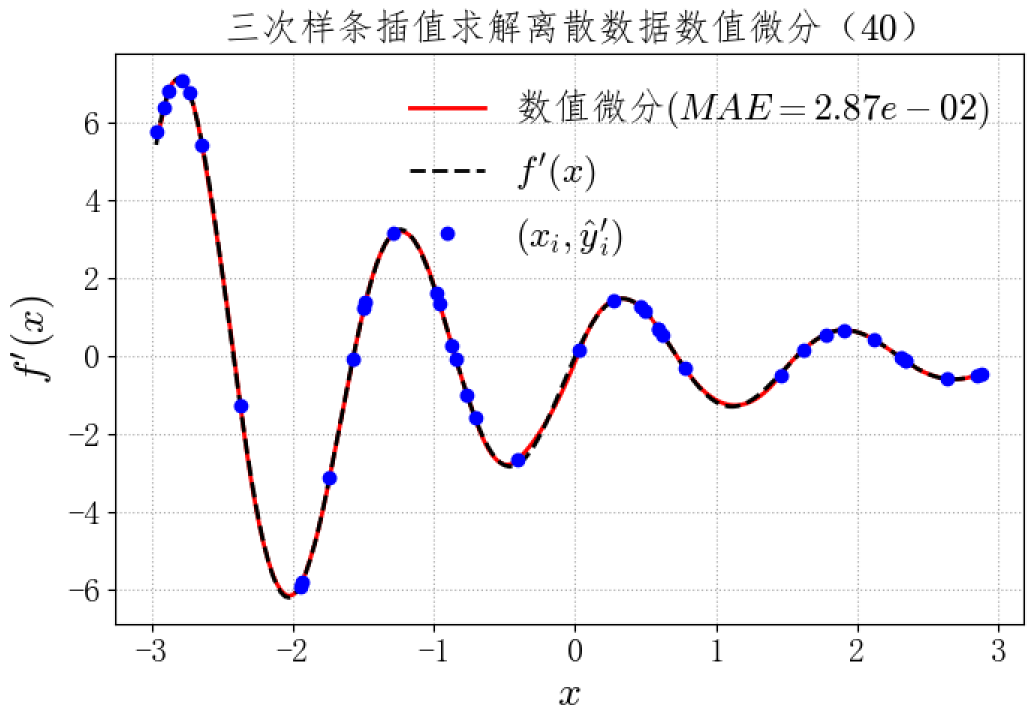


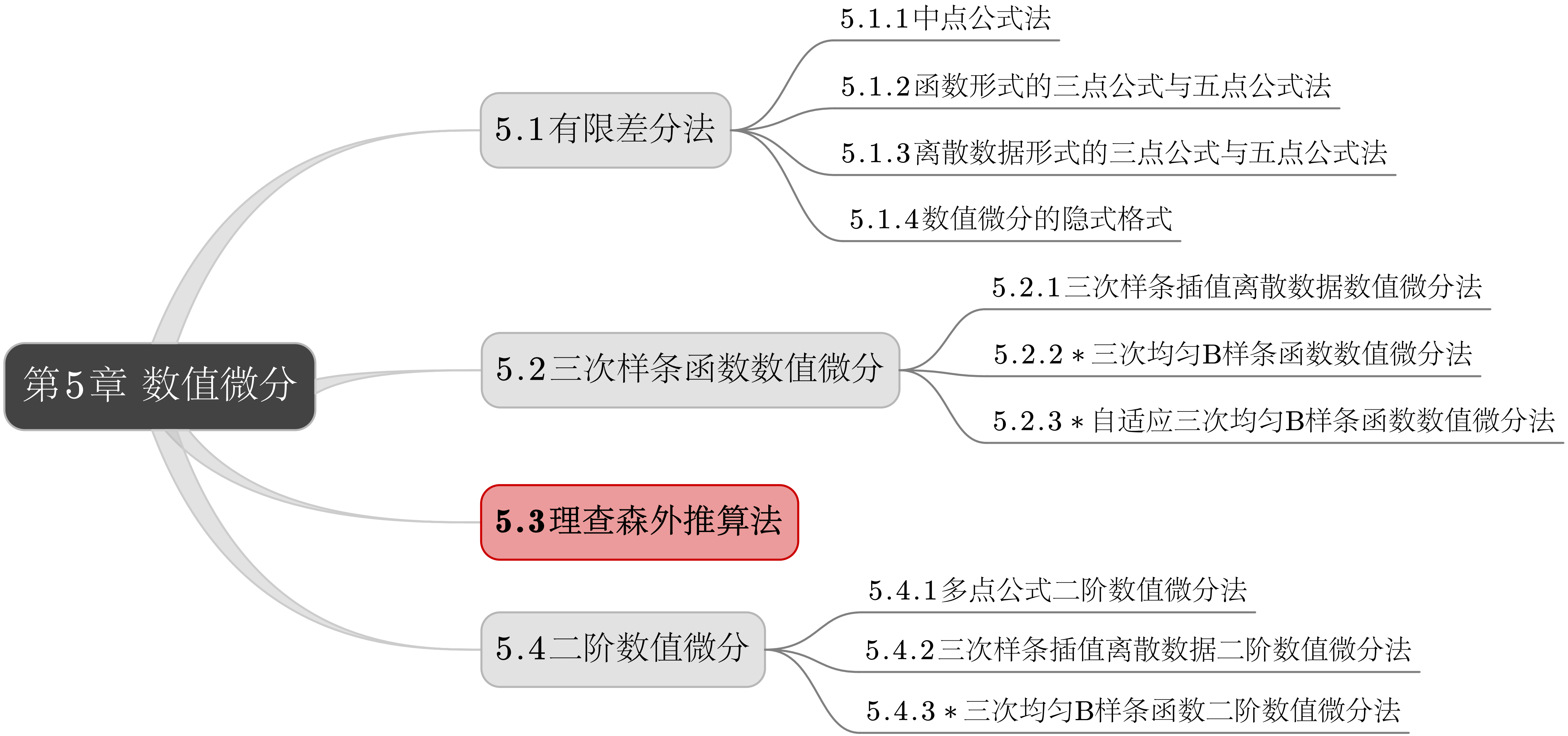
5.2.1 三次样条插值离散数据数值微分法

例 4：由函数 $f(x)=(\sin 2x)^2 e^{-0.5x}$ 在区间 $[-3,3]$ 等距产生 20 和 40 个等距离散数据，以及服从 $U(-3,3)$ 均匀分布随机产生 20 和 40 个非等距的离散数据，采用三次样条插值数值微分法求解近似微分.

(2) 非等距数据:






第5章 数值微分
5.1有限差分法
5.1.1中点公式法
5.1.2函数形式的三点公式与五点公式法
5.1.3离散数据形式的三点公式与五点公式法
5.1.4数值微分的隐式格式
5.2三次样条函数数值微分
5.2.1三次样条插值离散数据数值微分法
5.2.2 * 三次均匀B样条函数数值微分法
5.2.3 * 自适应三次均匀B样条函数数值微分法
5.3理查森外推算法
5.4二阶数值微分
5.4.1多点公式二阶数值微分法
5.4.2三次样条插值离散数据二阶数值微分法
5.4.3 * 三次均匀B样条函数二阶数值微分法

5.3 理查森外推算法

利用中点公式$f'(x)\approx G(h)$时，对函数$f(x)$在x处做Taylor级数展开，利用理查森外推方法对步长逐次分半，可得理查森外推算法的迭代公式

$$\begin{cases} G_1(h)=\dfrac{f\left(x+\frac{h}{2}\right)-f\left(x-\frac{h}{2}\right)}{h}, \\ G_{n+1}(h)=\dfrac{G_n\left(\frac{h}{2}\right)-\left(\frac{1}{2}\right)^{2n}G_n(h)}{1-\left(\frac{1}{2}\right)^{2n}}=\dfrac{4^n G_n\left(\frac{h}{2}\right)-G_n(h)}{4^n-1}, \quad n=1,2,\cdots. \end{cases}$$

迭代公式的误差$f'(x)-G_n(h)=O(h^{2(n+1)})$，可见当迭代步数$n$充分大时，$G_n(h)$收敛到$f'(x)$.

但考虑到舍入误差,一般n不能取太大.

5.3 理查森外推算法

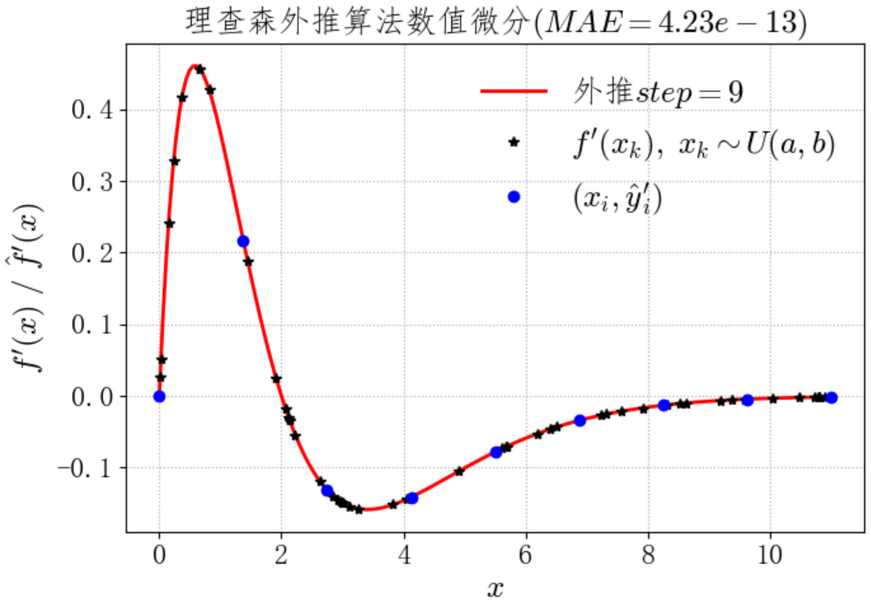
理查森外推算法是一种金字塔式的算法，底层是$G_1(h), G_1\left(\frac{h}{2}\right), \cdots, G_1\left(\frac{h}{2^n}\right)$，第二层是$G_2(h)$，$G_2\left(\frac{h}{2}\right), \cdots, G_2\left(\frac{h}{2^{n-1}}\right)$，顶层是$G_{n-1}(h)$. 如表所示为理查森外推算法计算过程，对于给定的外推步数，从底层到顶层逐层计算即可.

表 5-9　理查森外推算法计算过程

$G_1(h)$	$G_1\left(\frac{h}{2}\right)$	$\cdots$	$G_1\left(\frac{h}{2^{n-1}}\right)$	$G_1\left(\frac{h}{2^n}\right)$
$G_2(h)$	$G_2\left(\frac{h}{2}\right)$	$\cdots$	$G_2\left(\frac{h}{2^{n-1}}\right)$	
$\vdots$	$\vdots$	$\iddots$		
$G_{n-2}(h)$	$G_{n-2}\left(\frac{h}{2}\right)$			
$G_{n-1}(h)$				

5.3 理查森外推算法

例6：用理查森外推算法计算$f(x)=x^2e^{-x}$，$x\in[0,11]$的一阶数值微分，外推步数分别为$[3,5,7,9]$.



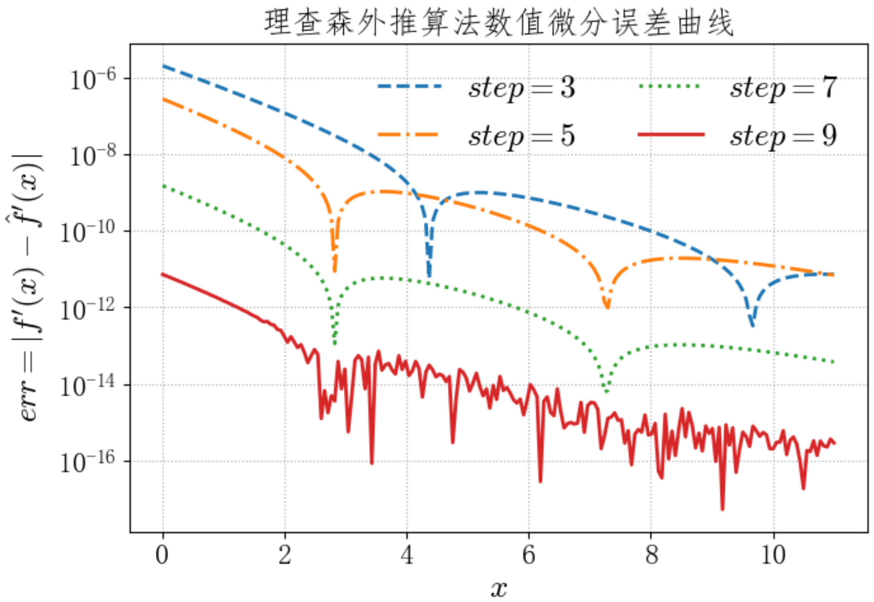
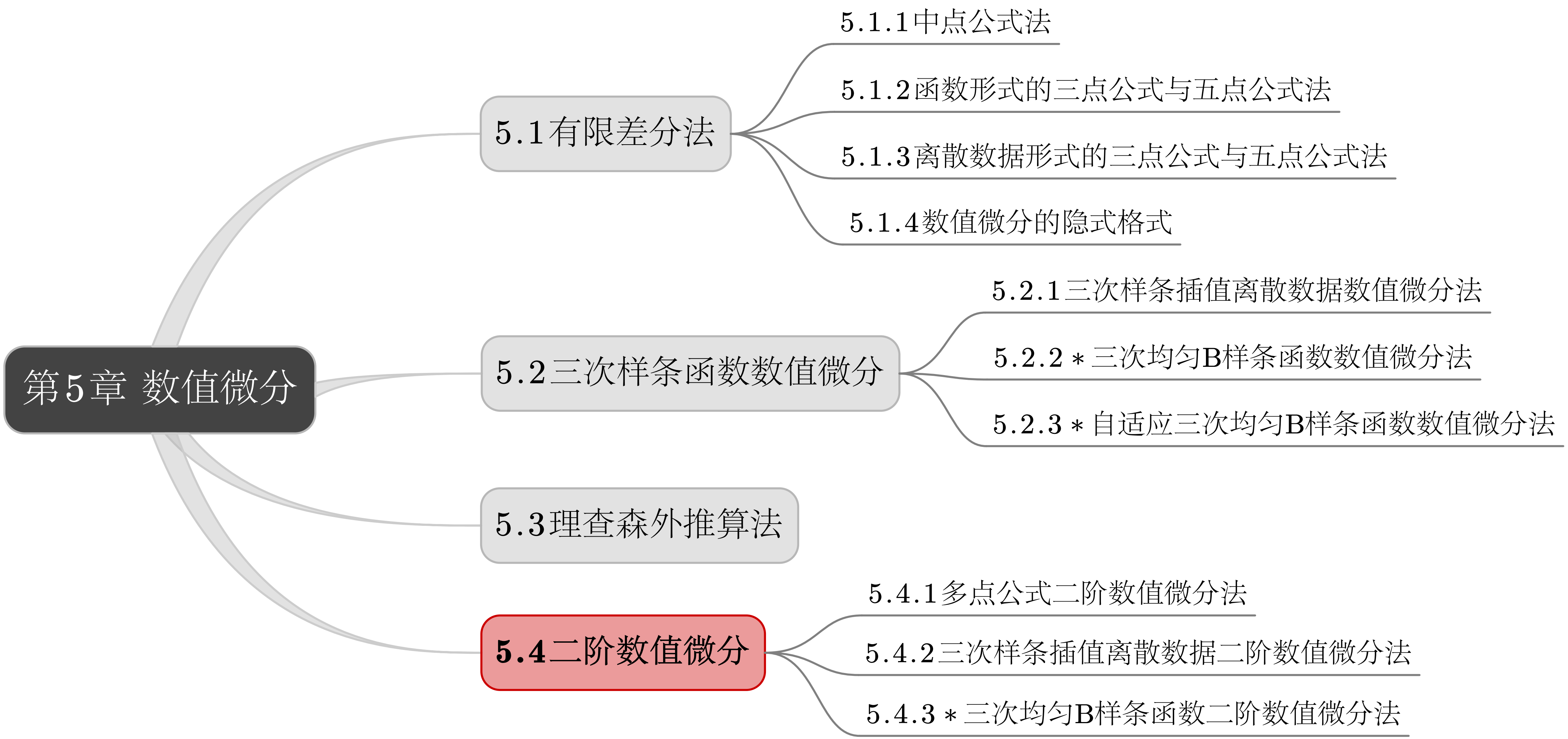


表 5-11　理查森外推算法在不同外推步数下的误差度量

外推步数	平均绝对值误差	最大绝对值误差	外推步数	平均绝对值误差	最大绝对值误差
step = 3	1.3813247264e−07	2.0504585546e−06	step = 5	1.6325990340e−08	2.7845293952e−07
step = 7	8.7976381998e−11	1.5018744629e−09	step = 9	4.2334459654e−13	7.2285125735e−12


第5章 数值微分
5.1有限差分法
5.1.1中点公式法
5.1.2函数形式的三点公式与五点公式法
5.1.3离散数据形式的三点公式与五点公式法
5.1.4数值微分的隐式格式
5.2三次样条函数数值微分
5.2.1三次样条插值离散数据数值微分法
5.2.2 * 三次均匀B样条函数数值微分法
5.2.3 * 自适应三次均匀B样条函数数值微分法
5.3理查森外推算法
5.4二阶数值微分
5.4.1多点公式二阶数值微分法
5.4.2三次样条插值离散数据二阶数值微分法
5.4.3 * 三次均匀B样条函数二阶数值微分法

5.4.1 多点公式二阶数值微分法

二阶导数基本公式$f''(x)=\lim\limits_{h\to 0}\dfrac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2}$，利用插值公式可求二阶导数的多点公式法.

二阶导数的三点公式如下:

$$f''(x_0)\approx\frac{y_0-2y_1+y_2}{h^2},\ f''(x_0)\approx\frac{y_{-1}-2y_0+y_1}{h^2},\ f''(x_0)\approx\frac{y_{-2}-2y_{-1}+y_0}{h^2},$$

其中$y_i=f(x_i+jh),\ j=\pm 2,\pm 1,0.$

二阶导数的四点公式如下:

$$f''(x_0)\approx\frac{2y_0-5y_1+4y_2-y_3}{h^2},\ f''(x_0)\approx\frac{y_{-1}-2y_0+y_1}{h^2},\ f''(x_0)\approx\frac{y_{-3}+4y_{-2}-5y_{-1}+2y_0}{h^2},$$

其中$y_i=f(x_i+jh),\ j=\pm 3,\pm 2,\pm 1,0.$

5.4.1 多点公式二阶数值微分法

二阶导数的五点公式如下:

$$
\begin{cases}
f''(x_0)\approx \dfrac{35y_0-104y_1+114y_2-56y_3+11y_4}{12h^2},\\[2ex]
f''(x_0)\approx \dfrac{11y_{-1}-20y_0+6y_1+4y_2-y_3}{12h^2},\\[2ex]
f''(x_0)\approx \dfrac{-y_{-2}+16y_{-1}-30y_0+16y_1-y_2}{12h^2},\\[2ex]
f''(x_0)\approx \dfrac{-y_{-3}+4y_{-2}+6y_{-1}-20y_0+11y_1}{12h^2},\\[2ex]
f''(x_0)\approx \dfrac{11y_{-4}-56y_{-3}+114y_{-2}-104y_{-1}+35y_0}{12h^2}.
\end{cases}
$$

其中$y_i=f(x_i+jh)$, $j=\pm 4, \pm 3, \pm 2, \pm 1, 0$.

5.4.1 多点公式二阶数值微分法

例 7：计算函数 $f(x)=\dfrac{\sin x}{\sqrt{x}}$，$x\in[2,5]$ 在点 $[2:0.3:5]$(步长 0.3 等分 11 个点)处的二阶近似微分值.

表 5-14　五点公式的函数形式和离散数据形式求解二阶数值微分及绝对值误差 $(k=1,2,\cdots,11)$

x_k	$f''(x_k)$	函数形式微分值	绝对值误差	离散数据形式微分值	绝对值误差
2	−0.3752833060	−0.3752833059	5.32602296e−11	−0.3832045933	7.92128737e−03
2.3	−0.2309784638	−0.2309784637	2.36526909e−11	−0.2301781350	8.00328758e−04
2.6	−0.0798384143	−0.0798384143	4.94822239e−12	−0.0798348357	3.57860315e−06
2.9	0.0686460309	0.0686460309	1.12331117e−11	0.0686376048	8.42612868e−06
3.2	0.2046370094	0.2046370093	2.24109342e−11	0.2046190611	1.79483021e−05
3.5	0.3190381670	0.3190381669	3.17509907e−11	0.3190130228	2.51441340e−05
3.8	0.4043524149	0.4043524149	3.73579501e−11	0.4043225606	2.98542783e−05
4.1	0.4553283191	0.4553283190	3.95268818e−11	0.4552964044	3.19147013e−05
4.4	0.4693828172	0.4693828171	3.83333920e−11	0.4693515322	3.12849738e−05
4.7	0.4467863542	0.4467863542	3.53163609e−11	0.4470119533	2.25599053e−04
5	0.3906071363	0.3906071363	2.69351208e−11	0.3882555218	2.35161451e−03