科学计算/计算方法(Scientific Computing)

第五章 数值积分与数值微分

任课老师: Xiao-liang Cheng(程晓良)

Department of Mathematics, Zhejiang University, Hangzhou 310027, P.R. China.

2023. 4 .18

数值微分

1 数值微分

数值微分

1. 数值微分
2. Lagrange Interpolation for Numerical Differential

数值微分

在前面的"插值"章节中, 其目的是构造多项式函数或者某子空间上的函数$p(x)$来近似$f(x)$. 这里考虑的问题是: 如何去近似$f(x)$的导数$f'(x)$ 或者$f''(x)$ (数值微分Numerical Differential)? 如何估计误差以及如何解决计算中的稳定性等问题?

先考虑一阶导数$f'(x)$ 的近似问题. 最自然的想法就是从导数的定义出发:

$$f'(x) = \lim_{h \to 0} \frac{f(x+h) - f(x)}{h}.$$

其中极限lim的右端看做是相近两点的差商:

$$f[x_i, x_j] = \frac{f(x_i) - f(x_j)}{x_i - x_j}. \ x_j = x_i + h.$$

用等距节点上的差商来逼近$f'(x)$, 即$f'(x) \approx \dfrac{f(x+h) - f(x)}{h}$.

数值微分

常见的差商型求导公式，由导数定义

$$f'(x)=\lim_{h\to 0}\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

(1) 向前差商公式

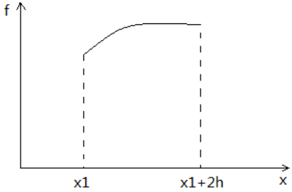
$$f'(x)\approx\frac{f(x+h)-f(x)}{h}$$

(2) 向后差商公式

$$f'(x)\approx\frac{f(x)-f(x-h)}{h}$$

(3) 中心差商公式（中点方法）

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



问题?

这样的近似，误差会是多少? How far away is this approximation from the true value?

假设f 充分光滑, 由Taylor formula 可得

$$
\begin{aligned}
f(x+h) &= f(x) + f'(x)h + \frac{h^2}{2!}f''(x) + \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi_1) \\
&\quad \xi_1 \in (x, x+h), \\
f(x-h) &= f(x) - f'(x)h + \frac{h^2}{2!}f''(x) - \frac{h^3}{3!}f'''(x) + \frac{h^4}{4!}f^{(4)}(\xi_2) \\
&\quad \xi_2 \in (x-h, x), \\
\frac{f(x+h)-f(x)}{h} &= f'(x) + \frac{h}{2}f''(x) + \frac{h^2}{6}f'''(x) + \frac{h^3}{24}f^{(4)}(\xi_3) \\
&\approx f'(x) + O(h), \\
\frac{f(x)-f(x-h)}{h} &= f'(x) - \frac{h}{2}f''(x) + \frac{h^2}{6}f'''(x) - \frac{h^3}{24}f^{(4)}(\xi_4) \\
&\approx f'(x) + O(h),
\end{aligned}
$$

$$
\begin{aligned}
\frac{f(x+h)-f(x-h)}{2h} &\approx f'(x)+\frac{h^2}{6}f'''(x)+O(h^3) \\
&\approx f'(x)+O(h^2), \\
\frac{f(x+h)-2f(x)+f(x-h)}{h^2} &= f''(x)+\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_5)\approx f''(x)+O(h^2)
\end{aligned}
$$

差商型求导公式的余项

由Taylor公式：

$$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = -\frac{f''(x+\theta_1 h)}{2} h = O(h)$$

$$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x)}{h} = \frac{f''(x-\theta_2 h)}{2} h = O(h)$$

$$f'(x) - \frac{f(x+h) - f(x-h)}{2h}$$
$$= -\frac{f^{(3)}(x+\theta_1 h) + f^{(3)}(x-\theta_2 h)}{6} h^2 = O(h^2)$$

$$0 < \theta_1, \theta_2 < 1$$

Remark

① 可以看出，向前或者向后差商的截断误差是$O(h)$的量级。一阶中心差商的截断误差是$O(h^2)$的量级，而二阶中心差商的截断误差也是$O(h^2)$的量级。
② 从截断误差的角度看，步长越小，计算结果越准确；从舍入误差的角度看，步长不宜太小。

问题?

如何求高阶近似? In order to derive another approximation formula for the second derivative with the given points.

比如: 用$f_2, f_1, f_0, f_{-1}, f_{-2}$ 来构造f二阶导数的近似. Generate the approximation formula of second derivative based on $f_2, f_1, f_0, f_{-1}, f_{-2}$. 这里$f_i = f(x_0 + ih)$,$(i = -2, -1, 0, 1, 2)$.

用待定系数法, 设

$$f''(x_0) \approx \frac{c_2 f_2 + c_1 f_1 + c_0 f_0 + c_{-1} f_{-1} + c_{-2} f_{-2}}{h^2}$$

其中$f_i = f(x_0 + ih)$,$(i = -2, -1, 0, 1, 2)$.

注意:

构造的分式中分母是h^2. 为什么?

将f_i 都在x_0 Taylor 展开, 可得$f''(x_0) =$

$$\frac{1}{h^2}\left\{\begin{aligned} & c_2\left(f_0 + 2hf_0' + \frac{(2h)^2}{2}f_0^{(2)} + \frac{(2h)^3}{3!}f_0^{(3)} + \frac{(2h)^4}{4!}f_0^{(4)} + \cdots\right) \\ & +c_1\left(f_0 + hf_0' + \frac{h^2}{2}f_0^{(2)} + \frac{h^3}{3!}f_0^{(3)} + \frac{h^4}{4!}f_0^{(4)} + \cdots\right) + c_0 f_0 \\ & +c_{-1}\left(f_0 - hf_0' + \frac{h^2}{2}f_0^{(2)} - \frac{h^3}{3!}f_0^{(3)} + \frac{h^4}{4!}f_0^{(4)} - \cdots\right) \\ & +c_{-2}\left(f_0 - 2hf_0' + \frac{(2h)^2}{2}f_0^{(2)} - \frac{(2h)^3}{3!}f_0^{(3)} + \frac{(2h)^4}{4!}f_0^{(4)} - \cdots\right) \end{aligned}\right.$$

$$f''(x_0) = \frac{1}{h^2}\left\{\begin{array}{l} (c_2+c_1+c_0+c_{-1}+c_{-2})\,f_0 \\ +\,h\,(2c_2+c_1-c_{-1}-2c_{-2})\,f_0' \\ +\,h^2\left(\dfrac{2^2}{2}c_2+\dfrac{1}{2}c_1+\dfrac{1}{2}c_{-1}+\dfrac{2^2}{2}c_{-2}\right)f_0'' \\ +\,h^3\left(\dfrac{2^3}{3!}c_2+\dfrac{1}{3!}c_1+\dfrac{1}{3!}c_{-1}+\dfrac{2^3}{3!}c_{-2}\right)f_0^{(3)} \\ +\,h^4\left(\dfrac{2^4}{4!}c_2+\dfrac{1}{4!}c_1+\dfrac{1}{4!}c_{-1}+\dfrac{2^4}{4!}c_{-2}\right)f_0^{(4)} \end{array}\right.$$

比较各阶的系数可得

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 0 & -1 & -2 \\ \frac{2^2}{2!} & \frac{1}{2!} & 0 & \frac{1}{2!} & \frac{2^2}{2!} \\ \frac{2^3}{3!} & \frac{1}{3!} & 0 & \frac{1}{3!} & \frac{2^3}{3!} \\ \frac{2^4}{4!} & \frac{1}{4!} & 0 & \frac{1}{4!} & \frac{2^4}{4!} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} c_2 \\ c_1 \\ c_0 \\ c_{-1} \\ c_{-2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

解得$c_2 = -1, c_1 = 16, c_0 = -30, c_{-1} = 16, c_{-2} = -1$. 所以

$$f''(x_0) \approx \frac{-f_2 + 16f_1 - 30f_0 + 16f_{-1} - f_{-2}}{12h^2}.$$

Remark:

- 上述例子同$\dfrac{f(x_{i+1})-2f(x_i)+f(x_{i-1})}{h^2}$的区别, 哪些点相同, 哪些点不同, 用到的点数, 对称性, 阶数, 等?
- 有几个待定系数c_i, 就需要几个方程, 所以Taylor公式应该展开到哪阶?
- 为什么都要在$f(x_0)$展开?
- 如何用尽量少的点得到高阶的收敛?
- h越小，数值微分公式的截断误差越小;
- 由于舍入误差，数值微分公式中h又不能取太小；设$f(x_{i-1})$和$f(x_{i+1})$的舍入误差为ε_1和ε_2, 记$\varepsilon=\max\{|\varepsilon_1|,|\varepsilon_2|\}$. 考虑一阶微分的中心格式$f'(x_i)\approx\dfrac{f(x_{i+1})-f(x_{i-1})}{2h}$, $\tilde{f}'(x_i)\approx\dfrac{\tilde{f}(x_{i+1})-\tilde{f}(x_{i-1})}{2h}$, 则$f'(x_i)-\tilde{f}'(x_i)=O(h^2)+\dfrac{2\varepsilon}{2h}$.

插值计算微分

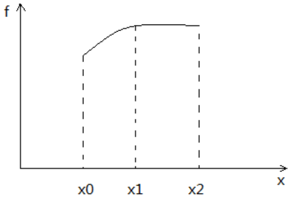
另外一个自然的想法是: 用插值函数$P(x)$来近似$f(x)$, 是否可以用插值函数$P(x)$ 的导数$P'(x)$去近似$f(x)$ 的导数$f'(x)$.

如果采用二点1次的Lagrange插值

$$
\begin{aligned}
P_1(x) &= f(x_1)\frac{x-x_2}{x_1-x_2} + f(x_2)\frac{x-x_2}{x_2-x_2} \\
\Rightarrow \quad P_1'(x) &= \frac{f(x_2)-f(x_1)}{x_2-x_1} = \frac{f(x_1+h)-f(x_1)}{h}, \ x \in [x_1, x_2].
\end{aligned}
$$

如果采用三点2次的Lagrange插值, $x_1 = x_0 + h$, $x_2 = x_0 + 2h$,

$$
\begin{aligned}
P_2(x) &= f(x_0)\frac{(x-x_1)(x-x_2)}{(x_0-x_1)(x_0-x_2)} + f(x_1)\frac{(x-x_0)(x-x_2)}{(x_1-x_0)(x_1-x_2)} \\
&\quad + f(x_2)\frac{(x-x_0)(x-x_1)}{(x_2-x_0)(x_2-x_1)} \\
P_2'(x) &= \frac{2x-x_1-x_2}{2h^2}f(x_0) + \frac{2x-x_0-x_2}{h^2}f(x_1) + \frac{2x-x_0-x_1}{2h^2}f \\
P_2'(x_0) &= \frac{-3f(x_0)+4f(x_1)-f(x_2)}{2h} \approx f'(x_0) \\
P_2'(x_1) &= \frac{f(x_2)-f(x_0)}{2h} \approx f'(x_1) \\
P_2'(x_2) &= \frac{f(x_0)-4f(x_1)+3f(x_2)}{2h} \approx f'(x_2)
\end{aligned}
$$



三点2次的Lagrange插值

讨论$f'(x_1)$ 与$P_2'(x_1)$的误差:

$$
\begin{aligned}
f(x_2) &= f(x_1) + f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 + \frac{1}{6}f'''(x_1)h^3 + O \\
f(x_0) &= f(x_1) - f'(x_1)h + \frac{1}{2}f''(x_1)h^2 - \frac{1}{6}f'''(x_1)h^3 + O \\
\Rightarrow \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} &= f'(x_1) + \frac{h^2}{6}f'''(x_1) + O(h^3)
\end{aligned}
$$

插值型求导公式

更一般的误差，可以由Lagrange插值公式的余项.
若已知函数$f(x)$ 在$[a,b]$ 内$n+1$ 个节点$(x_i, f(x_i)), i=0,1,...,n$，可用其插值多项式$P_n(x)$ 的导数近似函数$f(x)$ 的导数。

$$R_n(x) = f(x) - P_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}(x)$$

$$\Rightarrow f'(x) - P_n'(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x) + \frac{\omega_{n+1}(x)}{(n+1)!}\frac{d}{dx}f^{(n+1)}(\xi)$$

对任意$x \in [a,b]$，因ξ 未知，故上式很难估计误差，但若只求某个节点上的导数值，误差可估计。

$$f'(x_i) - P_n'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\omega_{n+1}'(x_i) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!}\prod_{j=0,k\neq i}^{n}(x_i - x_j)$$

因此，插值型求导公式通常用于求节点处导数的近似值。

对于$P_1(x)$, 有

$$\begin{aligned} f'(x_1) - P_1'(x_1) &= f'(x_1) - \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h} = -\frac{h}{2} f''(\xi_1) \\ f'(x_2) - P_1'(x_2) &= f'(x_2) - \frac{f(x_2) - f(x_1)}{h} = \frac{h}{2} f''(\xi_2) \end{aligned}$$

对于$P_2(x)$, 有

$$
\begin{aligned}
f'(x_0) - P_2'(x_0) &= f'(x_0) - \frac{-3f(x_0) + 4f(x_1) - f(x_2)}{2h} = \frac{h^2}{3} f'''(\xi_0) \\
f'(x_1) - P_2'(x_1) &= f'(x_1) - \frac{f(x_2) - f(x_0)}{2h} = -\frac{h^2}{6} f'''(\xi_1) \\
f'(x_2) - P_2'(x_2) &= f'(x_2) - \frac{f(x_0) - 4f(x_1) + 3f(x_2)}{2h} = \frac{h^2}{3} f'''(\xi_2)
\end{aligned}
$$

问题?

$f''(x)$的逼近呢?

由于$P_1'(x)$ 为常数, 所以$P_1''(x) = 0$, 显然这样的近似不太好. 而

$$P_2''(x) = \frac{f(x_0) - 2f(x_1) + f(x_2)}{h^2}, \ x \in [x_0, x_2].$$

所以

$$\begin{aligned}
f''(x_0) - P_2''(x_0) &= -hf'''(\xi_1) + \frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_3) \\
f''(x_1) - P_2''(x_1) &= -\frac{h^2}{12}f^{(4)}(\xi_4) \\
f''(x_2) - P_2''(x_2) &= hf'''(\xi_4) - \frac{h^2}{6}f^{(4)}(\xi_5)
\end{aligned}$$

其中$\xi_i \in [x_0, x_1] \quad i = 1, \cdots, 5.$

样条插值函数

问题: 设在区间

$$a = x_0 < x_1 < x_2 < \cdots < x_{n-1} < x_n = b$$

给定这些点上的函数值$f(x_i) = y_i\,(i = 0, 1, \cdots, n)$. 现在要求构造一个三次样条插值函数$s(x)$满足下列条件:

(1)$s(x_i) = y_i,\ i = 0, 1, 2, \cdots, n$;

(2)在每个小区间$[x_i, x_{i+1}]$上是一个不高于三次的多项式;

(3)$s(x) \in C^2_{[a,b]}$.

说明(1)(2)(3)并不能唯一确定$s(x)$，缺二个条件.

两种方法确定三次样条

1. 三斜率方程组:

假设$s'(x_i) = m_i$, $(i = 0, 1, \cdots, n)$待定，在每个单元写出三次多项式(Hermite插值), 然后根据C^2在节点确定出关于m_i的线性方程组.

2. 三弯矩方程组:

用$s''(x)$在结点处的值作为待定系数，
即$s''(x_i) = M_i$, $i = 0, 1, 2, \cdots, n$, 然后在每个单元写出三次多项式，根据节点一阶导数值连续，确定出M_i的值.

利用三次样条插值函数构造数值微分公式

三次样条插值函数为分段三次多项式, 在区间$[x_{i-1}, x_i]$ 上, 有

$$\begin{aligned} s_i(x) &= M_{i-1}\frac{(x_i-x)^3}{6h_i} + M_i\frac{(x-x_{i-1})^3}{6h_i} \\ &+ \left(y_{i-1} - \frac{M_{i-1}}{6}h_i^2\right)\frac{x_i-x}{h_i} + \left(y_i - \frac{M_i}{6}h_i^2\right)\frac{x-x_{i-1}}{h_i}, \end{aligned}$$

其中$x \in [x_{i-1}, x_i], \quad (i = 1, \cdots, n)$, $M_i = s''(x_i)$, 所以

$$\begin{aligned} f'(x) &\approx s_i'(x) = \frac{1}{2h_i}[M_i(x-x_{i-1})^2 - M_{i-1}(x_i-x)^2] \\ &+ \frac{y_i - y_{i-1}}{h_i} + \frac{h_i}{6}(M_{i-1} - M_i) \\ f''(x) &\approx s_i''(x) = \frac{1}{h_i}[M_i(x-x_{i-1}) + M_{i-1}(x_i - x)], \end{aligned}$$

Remark:

以上, 通过了一次, 二次, 三次插值多项式来构造导数的近似, 显然近似的结果会随着次数的提高而改进, 但所用到的点也会随着增加, 相应的计算量也会增加. 另一方面, 由插值理论可知, 插值多项式有龙格现象, 所以不太宜用过高次数的插值多项式来近似. 可以用分段插值多项式替代.

Remark:

当函数数值有扰动误差，如何计算数值微分，这是一个难题. 大家可以上机实习体会.

例子

题目: 假设f充分光滑，已知x_0-h和x_0+h上f和f'的值，讨论计算$f'(x_0)$的近似值:

(1) 证明$f'(x_0)\approx\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}$的近似精度为$O(h^2)$;

(2) 证明$f'(x_0)=\frac{1}{2}(f'(x_0-h)+f'(x_0+h))$的近似精度为$O(h^2)$;

(3) 确定常数α,β使得

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

具有最高可能高阶的近似精度.

解答.
(1) 用Taylor展开，

$$\frac{f(x_0+h)-f(x_0-h)}{2h}=f'(x_0)+\frac{1}{3!}h^2f'''(x_0)+O(h^4)$$

因此近似$f'(x_0)$的精度为$O(h^2)$.

(2) 用Taylor展开，

$$\frac{1}{2}(f'(x_0-h)+f'(x_0+h))=f'(x_0)+\frac{1}{2}h^2f'''(x_0)+O(h^4)$$

因此近似$f'(x_0)$的精度为$O(h^2)$.

(3) 利用(1)(2), 原公式右端为

$$(\alpha+\beta)f'(x_0)+(\frac{1}{2}\alpha+\frac{1}{6}\beta)h^2f'''(x_0)+O(h^4)$$

因此要使得公式更高阶的近似$f'(x_0)$，只要

$$\alpha+\beta=1, \quad \frac{1}{2}\alpha+\frac{1}{6}\beta=0.$$

解之，$\alpha=-\frac{1}{2}, \beta=\frac{3}{2}$.