lab1

宋腾宇 2018110338

2021 年 6 月 18 日

1 实验一：数值积分与数值微分

1.1 第一题：数值积分

1.1.1 0. 数值积分方法

对于积分 $\int_a^b f(x)dx$，可以使用以下三种方法来计算其积分值。

(1). 复合梯形公式

对于给定的区间等分数 n，其在 $[a,b]$ 的节点为 $x_i = a + \frac{b-a}{n}i, i = 0, 1, ..., n$。则此时的复合梯形公式为：

$$\int_a^b f(x)dx \approx T_n = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$$

其中，$h = \frac{b-a}{n}$。

可以用以下函数实现复合梯形公式：

[27]:
```python
# Import
import numpy as np
import matplotlib.pyplot as plt
```

[28]:
```python
# 1.使用复合梯形公式求两个积分值
def trape(a, b, n, f):
    h = (b-a)/n
    array0 = np.array([f(a+k*h) for k in range(0,n+1)])
    sum0 = array0[1:n].sum()
    Tn = 1/2*h*(2*sum0+array0[0]+array0[n])
    return Tn
```

(2). 复合辛普森公式

对于给定的区间等分数 n，其在 $[a,b]$ 的节点为 $x_i = a + \frac{b-a}{n}i, i = 0,1,...,n$。则此时的复合辛普森公式为：

$$\int_a^b f(x)dx \approx S_n = \frac{h}{6}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 4\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(b)]$$

其中，$h = \frac{b-a}{n}$，$x_{i+\frac{1}{2}} = \frac{1}{2}(x_i + x_{i+1})$。

可以用以下函数实现复合辛普森公式：

[29]:
```
def simp(a, b, n, f):
    h = (b-a)/n
    array0 = np.array([f(a+k*h) for k in range(0,n+1)])
    array1 = np.array([f(a+k*h+h/2) for k in range(0,n)])
    sum0 = array0[1:n].sum()
    sum1 = array1.sum()
    Sn = 1/6*h*(2*sum0+4*sum1+array0[0]+array0[n])
    return Sn
```

(3). 龙贝格求积公式

对于将区间 $[a,b]n$ 等分的复合梯形公式，记 $T_n = T(h) = \frac{h}{2}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)]$。若对 n 个区间再二等分，即对区间 $2n$ 等分，则有：

$$\begin{aligned} T_{2n} = T(\frac{h}{2}) &= \frac{h}{4}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + 2\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) + f(b)] \\ &= \frac{h}{4}[f(a) + 2\sum_{i=1}^{n-1} f(x_i) + f(b)] + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) \\ &= \frac{1}{2}T(h) + \frac{h}{2}\sum_{i=0}^{n-1} f(x_{i+\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

由于 $I - T(h) = -\frac{b-a}{12}h^2 f''(\eta)$，所以 $T(h) = I + O(h^2)$，且 $\lim_{h\to 0} T(h) = I$。因此对 $T(h)$ 按 h 展开有：

$$T_n = T(h) = I + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + ... + \alpha_l h^{2l} + ...$$
$$T_{2n} = T(\frac{h}{2}) = I + \alpha_1 (\frac{h}{2})^2 + \alpha_2 (\frac{h}{2})^4 + ... + \alpha_l (\frac{h}{2})^{2l} + ...$$
$$\Longrightarrow \frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3} = I - \frac{\alpha_2}{4} h^4 + ... = I + O(h^4)$$

因此，可以通过加权平均将误差的结束从 $O(h^2)$ 降至 $O(h^4)$。记 $T_0(h) = T(h)$，则可以通过 $T_1(h) = \frac{4T_0(\frac{h}{2}) - T_0(h)}{3} = \frac{4T(\frac{h}{2}) - T(h)}{3}$ 降低误差的精度。同理，可以通过 $T_2(h) = \frac{4T_1(\frac{h}{2}) - T_1(h)}{3}$ 将误差降至 $O(h^6)$。

此方法称为理查森外推，若连续使用此方法，则可得到龙贝格求积公式，其思路如下：

1. 计算第 k 次迭代时的复合梯形求积公式 $T_0^{(k)} = T_{2^k} = T(\frac{h}{2^k})$。
2. 不断对当前所得出的积分值进行理查森加速得到 $T_m^{(k)}, m = 1, 2, ..., k$，其中 $T_m^{(k)} = \frac{4^m T_{m-1}^{(k+1)} - T_{m-1}^{(k)}}{4^m - 1}$。
3. 若 $|T_k^{(k)} - T_{k-1}^{(k-1)}| < \epsilon$，则输出 $T_k^{(k)}$。
4. 回到第 1 步进行迭代。

可以用以下函数实现龙贝格求积公式：

[30]:
```python
# 3.Romberg algorithm
def my_romberg(f, a, b, n):
    mat = np.zeros((n+1,n+1),float)
    h = b-a
    c2 = 1
    mat[0,0] = 1/2*h*(f(a)+f(b))
    for i in range(1, n+1):
        h = h/2
        c2 = 2 * c2
        sum = np.array([f(a+k*h) for k in range(1,c2,2)]).sum()
        mat[i,0] = mat[i-1,0]/2+sum*h
        c4 = 1
        for j in range(1, i+1):
            c4 = 4 * c4
            mat[i,j] = mat[i,j-1] + (mat[i,j-1]-mat[i-1,j-1])/(c4-1)
    return mat
```

1.1.2 1.$\int_{-1.96}^{1.96} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx$

[31]:
```
def f0(x):
    y = 1/np.sqrt(2*np.pi)*np.exp(-x*x/2)
    return y
```

(1). 复合梯形公式

复合梯形公式的求积结果如下：

[32]:
```
a0 = -1.96
b0 = 1.96
for n in [2,10,50,100,300,500]:
    print("n = ", n, " Tn_0 = ", "%.5f" %trape(a0,b0,n,f0))
```

```
n =  2  Tn_0 =  0.89647
n =  10  Tn_0 =  0.94708
n =  50  Tn_0 =  0.94989
n =  100  Tn_0 =  0.94997
n =  300  Tn_0 =  0.95000
n =  500  Tn_0 =  0.95000
```

保留五位小数，最终计算结果为 0.95000

(2). 复合辛普森公式

复合辛普森公式的求积结果如下：

[33]:
```
for n in [2,10,50,100,500]:
    print("n = ", n, " Tn_0 = ", "%.5f" %simp(a0,b0,n,f0))
print()
```

```
n =  2  Tn_0 =  0.94382
n =  10  Tn_0 =  0.95000
n =  50  Tn_0 =  0.95000
n =  100  Tn_0 =  0.95000
n =  500  Tn_0 =  0.95000
```

保留五位小数，最终计算结果为 0.95000

(3). 龙贝格求积公式

龙贝格公式的求积结果如下：

```
[34]: print("f1(x) 的龙贝格算法矩阵, n=6")
      print(my_romberg(f0,a0,b0,6))
```

```
f1(x) 的龙贝格算法矩阵, n=6
[[0.2290885  0.         0.         0.         0.         0.
  0.        ]
 [0.89647112 1.11893199 0.         0.         0.         0.
  0.        ]
 [0.93198216 0.94381918 0.93214499 0.         0.         0.
  0.        ]
 [0.9454369  0.94992182 0.95032866 0.95061729 0.         0.
  0.        ]
 [0.94885927 0.95000006 0.95000527 0.95000014 0.94999772 0.
  0.        ]
 [0.94971779 0.95000396 0.95000422 0.95000421 0.95000422 0.95000423
  0.        ]
 [0.94993259 0.95000419 0.95000421 0.95000421 0.95000421 0.95000421
  0.95000421]]
```

保留五位小数，最终计算结果为 0.95000

(4). 复合梯形公式和复合辛普森公式的比较

已知积分 $\int_{-1.96}^{1.96} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{x^2}{2}} dx = 0.95000$，则使用复合梯形公式和复合辛普森公式的误差如下表所示：

n	复合梯形公式的误差	复合辛普森公式的误差
1	-7.20911498e-01	1.68931993e-01
5	-1.16123432e-02	-2.62577851e-05
10	-2.92277915e-03	2.55300735e-06
20	-7.28780031e-04	4.10973903e-06
50	-1.13122350e-04	4.20716961e-06
100	-2.51252102e-05	4.20954541e-06
200	-3.12414349e-06	4.20969368e-06

[35]:
```python
# 4.比较节点数相同时复合梯形公式和复合辛普森公式的误差。
n_test = [1,5,10,50,100,200]
f0_strape_all = [trape(a0,b0,int(i),f0) for i in n_test]
f0_simp_all = [simp(a0,b0,int(i),f0) for i in n_test]

print(-(np.array(f0_strape_all)-0.95))
print(-(np.array(f0_simp_all)-0.95))
```

```
[7.20911498e-01 1.16123432e-02 2.92277915e-03 1.13122350e-04
 2.51252102e-05 3.12414349e-06]
[-1.68931993e-01  2.62577851e-05 -2.55300735e-06 -4.20716961e-06
 -4.20954541e-06 -4.20969368e-06]
```

1.1.3 2.$\int_0^1 \sqrt{x}\ln x dx$

[36]:
```python
def f1(x):
    if x == 0:
        y = 0
    else:
        y = np.sqrt(x)*np.log(x)
    return y
```

(1). 复合梯形公式

复合梯形公式的求积结果如下:

[37]:
```python
a1 = 0
b1 = 1
for n in [2,10,50,100,500,700,1000]:
    print("n = ", n, " Tn_1 = ", "%.4f"%trape(a1,b1,n,f1))
```

```
n =  2  Tn_1 =  -0.2451
n =  10  Tn_1 =  -0.4171
n =  50  Tn_1 =  -0.4411
n =  100  Tn_1 =  -0.4431
n =  500  Tn_1 =  -0.4443
n =  700  Tn_1 =  -0.4444
n =  1000  Tn_1 =  -0.4444
```

保留四位小数，最终计算结果为-0.4444

(2). 复合辛普森公式

复合辛普森公式的求积结果如下：

[38]:
```
for n in [2,10,50,100,500,700]:
    print("n = ", n, " Tn_1 = ", "%.4f"%simp(a1,b1,n,f1))
```

```
n =  2  Tn_1 =  -0.3958
n =  10  Tn_1 =  -0.4386
n =  50  Tn_1 =  -0.4438
n =  100  Tn_1 =  -0.4442
n =  500  Tn_1 =  -0.4444
n =  700  Tn_1 =  -0.4444
```

保留四位小数，最终计算结果为-0.4444

(3). 龙贝格求积公式

龙贝格公式的求积结果如下：

[39]:
```
print("f2(x) 的龙贝格算法矩阵，n=11")
print(my_romberg(f1,a1,b1,11))
```

```
f2(x) 的龙贝格算法矩阵，n=11
[[ 0.          0.          0.          0.          0.          0.
   0.          0.          0.          0.          0.          0.        ]
 [-0.24506454 -0.32675271  0.          0.          0.          0.
   0.          0.          0.          0.          0.          0.        ]
 [-0.35810406 -0.3957839  -0.40038598  0.          0.          0.
   0.          0.          0.          0.          0.          0.        ]
 [-0.40809004 -0.42475203 -0.42668324 -0.42710066  0.          0.
   0.          0.          0.          0.          0.          0.        ]
 [-0.42947458 -0.43660277 -0.43739282 -0.43756281 -0.43760384  0.
   0.          0.          0.          0.          0.          0.        ]
 [-0.43838949 -0.44136112 -0.44167834 -0.44174637 -0.44176277 -0.44176684
   0.          0.          0.          0.          0.          0.        ]
 [-0.44203068 -0.44324442 -0.44336997 -0.44339682 -0.44340329 -0.4434049
  -0.4434053   0.          0.          0.          0.          0.        ]
```

```
[-0.44349365 -0.44398131 -0.44403044 -0.44404092 -0.44404345 -0.44404407
 -0.44404423 -0.44404427  0.          0.          0.          0.        ]
[-0.44407364 -0.44426696 -0.44428601 -0.44429006 -0.44429104 -0.44429128
 -0.44429134 -0.44429136 -0.44429136  0.          0.          0.        ]
[-0.44430104 -0.44437684 -0.44438416 -0.44438572 -0.4443861  -0.44438619
 -0.44438621 -0.44438622 -0.44438622 -0.44438622  0.          0.        ]
[-0.44438938 -0.44441882 -0.44442162 -0.44442222 -0.44442236 -0.4444224
 -0.44442241 -0.44442241 -0.44442241 -0.44442241 -0.44442241  0.        ]
[-0.44442343 -0.44443478 -0.44443584 -0.44443607 -0.44443612 -0.44443614
 -0.44443614 -0.44443614 -0.44443614 -0.44443614 -0.44443614 -0.44443614]]
```

(4). 复合梯形公式和复合辛普森公式的比较

已知积分 $\int_0^1 \sqrt{x} \ln x dx = -0.44444$，则使用复合梯形公式和复合辛普森公式的误差如下表所示：

n	复合梯形公式的误差	复合辛普森公式的误差
1	-4.44440000e-01	-1.17687286e-01
5	-6.55309711e-02	-1.46592697e-02
10	-2.73771951e-02	-5.80915093e-03
50	-3.34977361e-03	-6.46201699e-04
100	-1.32209468e-03	-2.45489181e-04
200	-5.14640555e-04	-9.09545479e-05
500	-1.43718541e-04	-2.20421815e-05
1000	-5.24612714e-05	-5.54914201e-06

[40]:
```python
# 4.比较节点数相同时复合梯形公式和复合辛普森公式的误差。
n_test = [1,5,10,50,100,200,500,1000]
f1_strape_all = [trape(a1,b1,int(i),f1) for i in n_test]
f1_simp_all = [simp(a1,b1,int(i),f1) for i in n_test]

print(-(np.array(f1_strape_all)+0.44444))
print(-(np.array(f1_simp_all)+0.44444))
```

```
[-4.44440000e-01 -6.55309711e-02 -2.73771951e-02 -3.34977361e-03
 -1.32209468e-03 -5.14640555e-04 -1.43718541e-04 -5.24612714e-05]
[-1.17687286e-01 -1.46592697e-02 -5.80915093e-03 -6.46201699e-04
 -2.45489181e-04 -9.09545479e-05 -2.20421815e-05 -5.54914201e-06]
```

1.2 第二题：数值微分

1.2.1 0. 数值微分方法

(1). 两点公式

对于 $f(x)$ 在 a, b 上建立两点插值函数 $P_1(x) = \frac{x-b}{a-b}f(a) + \frac{x-a}{b-a}f(b)$。使用 $P_1(x)$ 在 a, b 处的导数来近似 $f(x)$ 在 a, b 处的导数。

$f'(a) = f'(b) \approx P'(a) = P'(b) = \frac{f(b)-f(a)}{b-a}$

可以使用如下函数实现数值微分的两点公式：

[41]:
```python
# 1.两点发求 x=1, x=2 导数值
def twopoints(f,x1,x2):
    y = (f(x2)-f(x1))/(x2-x1)
    return y
```

(2). 外推法

外推法的思想与龙贝格求积公式类似，使用外推降低误差的阶数。定义 $G(h) = \frac{f(a+h)-f(a-h)}{2h}$。由于 $\lim\limits_{h\to 0} G(h) = f'(a)$ 且 $G(h) = f'(a) + O(h^2)$。所以有：

$$\begin{aligned} G(h) &= f'(a) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \ldots \\ G(\frac{h}{2}) &= f'(a) + \alpha_1 (\frac{h}{2})^2 + \alpha_2 (\frac{h}{2})^4 + \ldots \\ \Longrightarrow \frac{4G(\frac{h}{2}) - G(h)}{3} &= f'(a) + O(h^4) \end{aligned}$$

因此，可不断使用外推法提高数值微分的精度。记 $G_0(h) = G(h), G_m(h) = \frac{4^m G_{m-1}(\frac{h}{2}) - G_{m-1}(h)}{4^m - 1}$，则有 $G_m(h) = f'(a) + O(h^{2m+2})$。类似地，可以通过判断 $|G_m(h) - G_{m-1}(h)| < \epsilon$ 来输出数值微分的结果。不过由于数值微分会受到舍入误差的影响，此处 m 不宜过大。

[42]:
```python
# 2.外推法
def richardd(f, x, n, h):
    mat = np.zeros((n+1,n+1),float)
    mat[0,0] = (f(x+h)-f(x-h))/(2*h)
    for i in range(1, n+1):
        h = h/2
        mat[i,0] = (f(x+h)-f(x-h))/(2*h)
        c4 = 1
        for j in range(1, i+1):
```

```
            c4 = 4 * c4
            mat[i,j] = mat[i,j-1] + (mat[i,j-1]-mat[i-1,j-1])/(c4-1)
    return mat
```

下面使用数值微分方法对函数 $f(x) = e^{-\frac{1}{x}}$ 求区间 $[1, 2]$ 上的导数。

[43]:
```
def f2(x):
    y = np.exp(-1/x)
    return y

def f2derireal(x):
    y = np.exp(-1/x)/(x*x)
    return y
```

1.2.2 1. 两点法求导数

[44]:
```
print(twopoints(f2,1,2))
```

```
0.2386512185411911
```

f(x) 在 1，2 两点的导数为 0.2386512185411911

1.2.3 2. 外推法求导数

[45]:
```
n = 5
h = 0.5
print(richardd(f2,1,n,h))
```

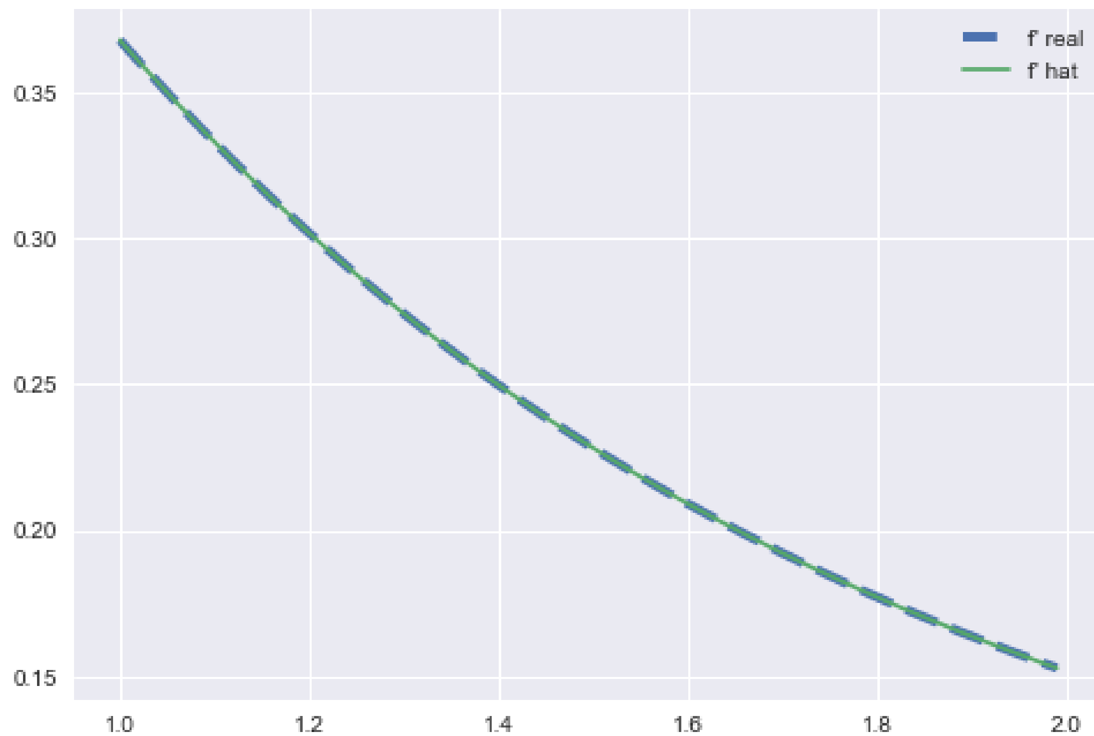
```
[[0.37808184 0.         0.         0.         0.         0.        ]
 [0.37146365 0.36925759 0.         0.         0.         0.        ]
 [0.36882293 0.36794269 0.36785503 0.         0.         0.        ]
 [0.36811805 0.36788309 0.36787912 0.3678795  0.         0.        ]
 [0.36793926 0.36787966 0.36787944 0.36787944 0.36787944 0.        ]
 [0.36789441 0.36787946 0.36787944 0.36787944 0.36787944 0.36787944]]
```

在 10^{-3} 精度条件下，外推法求得的导数值为 0.367

1.2.4 3. 一阶导数图像

[47]:
```python
# 3.画出 [1,2] 上一阶数值微分曲线，比较
def fderihat(f, x, n=5, h=0.5):
    return richardd(f,x,n,h)[n,n]

x_space = np.arange(1,2,0.01)
yd_real_space = f2derireal(x_space)
yd_hat_space = [fderihat(f2,i,n,h) for i in x_space]

plt.style.use("seaborn")
plt.plot(x_space,yd_real_space,'--',label="f' real",lw =4)
plt.plot(x_space,yd_hat_space,label="f' hat")
plt.legend()
```

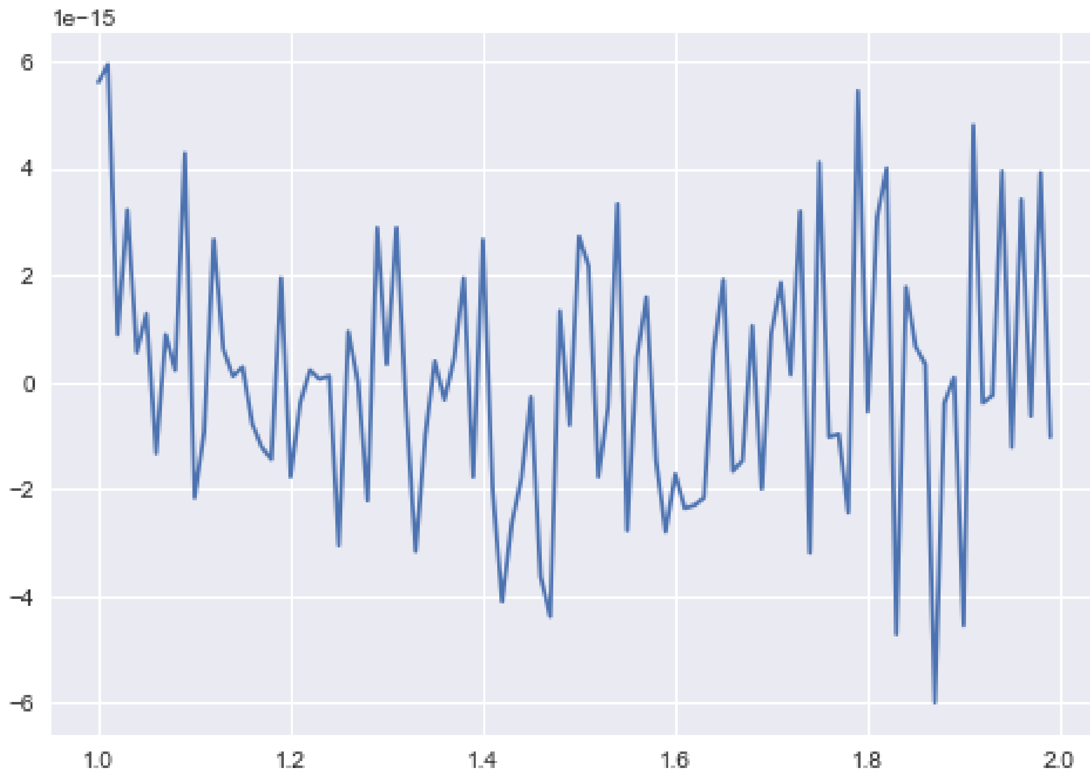
[47]: <matplotlib.legend.Legend at 0x18e9840c808>



与真实值误差图，数量级在 1e-15

[48]:
```
plt.plot(x_space,yd_real_space-yd_hat_space)
```

[48]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x18e9849b208>]

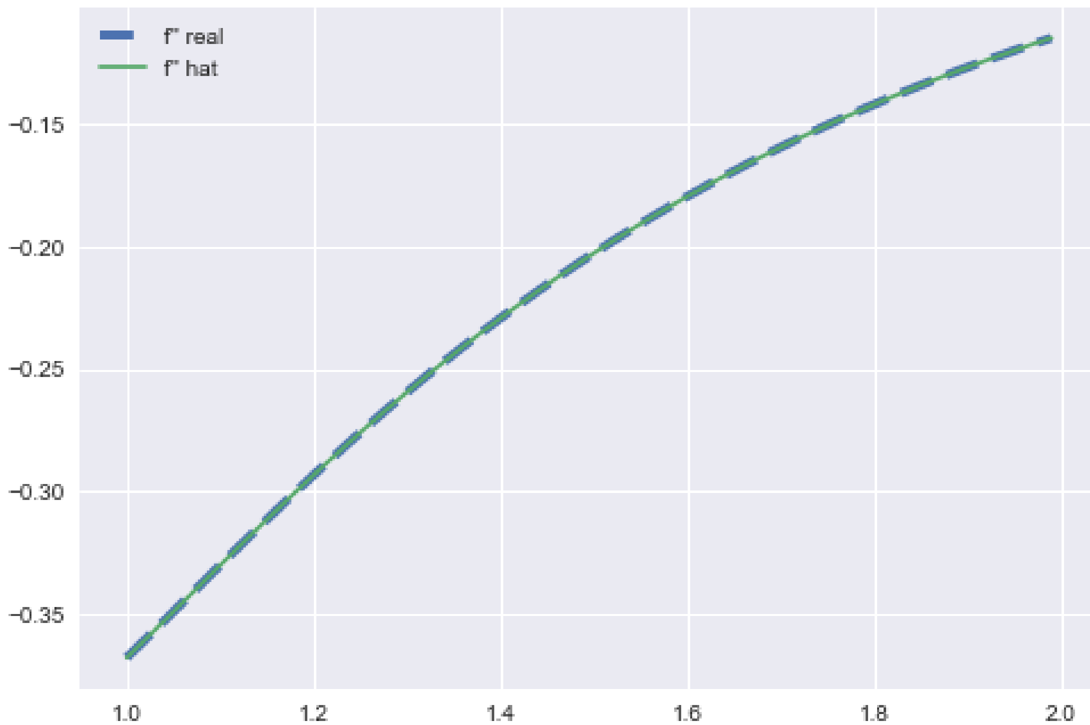


1.2.5 4. 二阶导数

[49]:
```
# 4.画出 [1,2] 上二阶数值微分曲线，比较

def f2derihat(x):
    return fderihat(f2, x, n=5, h=0.1)

def f2ddreal(x):
    y = np.exp(-1/x)*(1/x**4-2/x**3)
    return y

ydd_real_space = f2ddreal(x_space)
ydd_hat_space = [fderihat(f2derihat,i,5,0.1) for i in x_space]
```

```python
plt.plot(x_space,ydd_real_space,'--',label="f'' real",lw =4)
plt.plot(x_space,ydd_hat_space,label="f'' hat")
plt.legend()
```

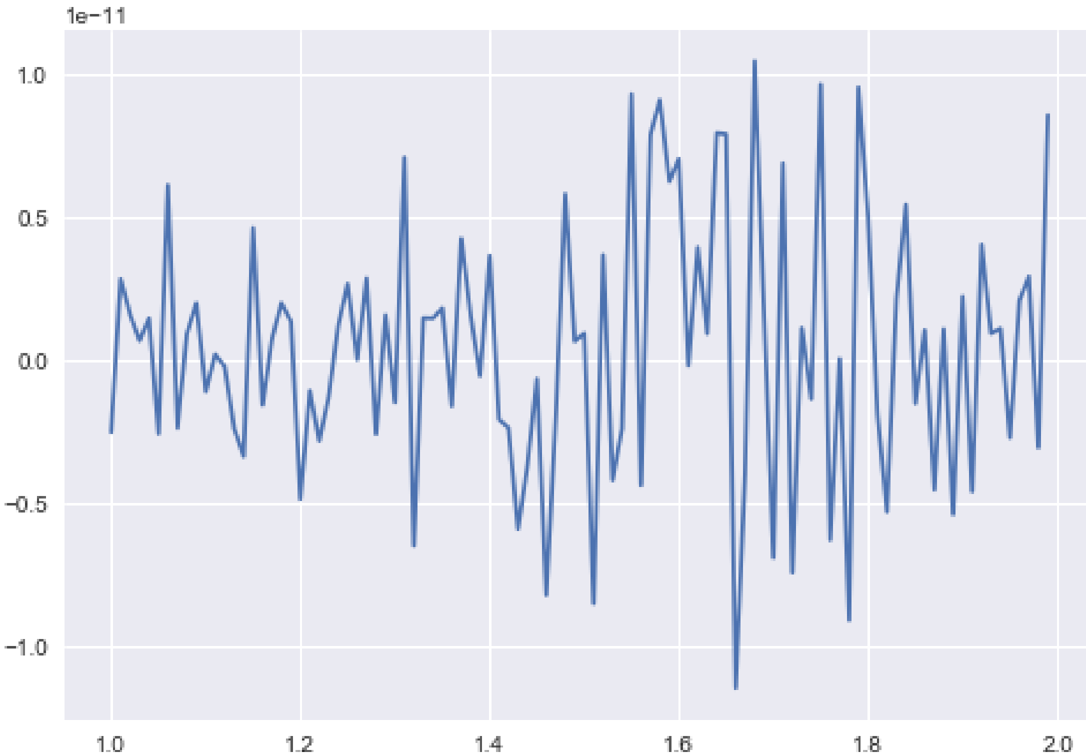
[49]: <matplotlib.legend.Legend at 0x18e98523748>



与真实值误差图，数量级在 1e-11

[50]:
```python
plt.plot(x_space,ydd_real_space-ydd_hat_space)
```

[50]: [<matplotlib.lines.Line2D at 0x18e985ad908>]


1e−11
1.0
0.5
0.0
−0.5
−1.0
1.0
1.2
1.4
1.6
1.8
2.0

```
[ ]:
```