

近似已知函数的高精确度样条磨光微商方法^{*}

罗兴钧^{1,2}, 杨素华²

(1 中山大学数学与计算科学学院, 广东 广州 510275)

(2 赣南师范学院数学与计算机系, 江西 赣州 341000)

摘要: 利用高精度样条函数磨光方法, 构造了一种新的求近似已知函数微商的稳定方法。与 Groetsch 提出的求近似导数方法相比较, 极大地提高了稳定近似导数的收敛率, 在一定条件下可达到 $O(\frac{\delta^l}{\delta^l})$ (l 是奇数)。数值实验显示新方法是有效的算法。

关键词: 不适定问题; 近似微商; 收敛率

中图分类号: O241.2 O241.4 文献标识码: A 文章编号: 0529-6579(2006)01-0013-04

在实际问题中会遇到求近似已知函数的微商, 这是一个典型的不适定问题^[1,2], 即函数的一个微小的扰动会使得导数值有巨大的变化, 因此求导数是相当不稳定的, 对这类问题要用特殊的方法。常用的方法有磨光法^[3,4], 差分法^[5-7], 正则化方法^[8]及正则-样条方法^[9]等。Groetsch 在文[6-7, 10]中对这一问题做过详细的研究, 尤其在文[10]中, 采用了一种新的方法, 即通过求积分的方法来求近似导数, 得到了求导运算中稳定近似导数的最优收敛率为 $O(\delta^\beta)$, 这里 δ 是近似数据的误差界。Groetsch 在文[10]中引进一算子 D_h :

$$D_h f(x) = \frac{3}{2h^3} \int_{-h}^h t f(x+t) dt \quad (1)$$

这里 h 是小参数, 把 $D_h f(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似值。假设 $f(x)$ 是某区间 I 上的有三阶有界的连续函数, $f^\delta(x)$ 是 $f(x)$ 的有界可积近似函数, 则只要选择 $h = c\delta^\beta$, 就有 $\|D_h f^\delta - f'\| = O(\delta^\beta)$ 。本文在文[10]的基础上提出了一种新的求近似导数的稳定方法, 在一定条件下近似导数的收敛率达到 $O(\frac{\delta^l}{\delta^l})$ (l 是奇数)。

1 高精度稳定求导数方法

作一个简单的变换, (1) 就变成如下形式

$$D_h f(x) = \frac{3}{2h^2} \int_{x-h}^{x+h} \frac{\zeta-x}{h} f(\zeta) d\zeta \quad (2)$$

简单验算可知, 用 $D_h f(x)$ 来近似代替 $f'(x)$, 其

代数精度为 2。为了提高代数精度, 能否找到一般的核函数 $\psi(\frac{\zeta-x}{h})$ 来代替 (2) 式中的核函数

$\frac{3(\zeta-x)}{2h}$, 即找到如下形式的近似微商公式

$$D_h f(x) = \frac{1}{h^2} \int_{x-\rho h}^{x+\rho h} \psi(\frac{x-t}{h}) f(t) dt \quad (3)$$

这里, $\rho > 0$ 待定。为了找到具体的形式, 采用高精度磨光公式^[4]

$$M_h f(x) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_{m,n}(\frac{x-t}{h}) f(t) dt \quad (4)$$

其中, $\Omega_{m,n}(x) = P_{m,n}(\frac{\delta}{\delta}) \Omega_m(x)$, 而 $P_{m,n}(\lambda) =$

$$\sum_{k=0}^q \gamma_k^{(m)} \lambda^k, q = [n/2], m, n \text{ 是正整数, 其中 } \gamma_k^{(a)} = \sum_{j=0}^k \gamma_{k-j} \gamma_j^{(a-1)}, \alpha = 1, 2, \dots, m. \text{ 这里}$$

$$\gamma_0^{(0)} = \gamma_0 = 1, \gamma_k^{(0)} = \gamma_k =$$

$$(-1)^k \left[\frac{1 \cdot 3 \cdots (2k-1)}{2^k (2k+1)!} \right]^2, k = 1, 2, 3, \dots$$

$$\gamma_0^{(m)} = 1, \gamma_1^{(m)} = -\frac{m+1}{24}, \gamma_2^{(m)} =$$

$$-\frac{(m+1)(27+5m)}{5760}$$

而 $\Omega_m(x) = \delta^{m+1} \{x^m / m!\} > 0$ 表示步长 1 为的差分算子。当 $m = 1, 2$ 时, 可求得

$$\Omega_1(x) = \begin{cases} 0 & |x| \geq 1 \\ 1 - |x| & |x| < 1 \end{cases}$$

* 收稿日期: 2005-02-01

基金项目: 高等学校博士学科点专项科研基金资助项目 (20030558008)

作者简介: 罗兴钧 (1965 年生), 男, 副教授, 博士; E-mail: luoxingjun98@yahoo.com.cn

$$\Omega_2(x) = \begin{cases} 0 & |x| \geq \frac{3}{2} \\ -x^2 + \frac{3}{4} & |x| < \frac{1}{2} \\ \frac{1}{2}x^2 - \frac{3}{2}|x| + \frac{9}{8}, & \frac{1}{2} \leq |x| \leq \frac{3}{2} \end{cases}$$

于是,

$$\Omega_{m,n}(x) = \sum_{k=0}^q \gamma_k^{(m)} \delta^k \Omega_m(x)$$

而

$$\delta^k \Omega_m(x) = \sum_{j=0}^{2k} (-1)^j \begin{bmatrix} 2k \\ j \end{bmatrix} \Omega_m(x+k-j) = \sum_{j=-k}^k (-1)^{k+j} \begin{bmatrix} 2k \\ k+j \end{bmatrix} \Omega_m(x-j)$$

因此^[4]

$$\begin{aligned} \Omega_{m,n}(x) &= \sum_{j=-q}^q d_j^{(m)} \Omega_m(x-j) \\ d_j^{(m)} &= \sum_{k=0}^q (-1)^{k+j} \begin{bmatrix} 2k \\ k+j \end{bmatrix} \gamma_k^{(m)}, \\ j \leq k, d_{-j}^{(m)} &= d_j^{(m)} \end{aligned} \quad (5)$$

当 $q=1$ 时可算出 ($m \geq 2$):

$$d_0^{(m)} = \frac{m+13}{12}, d_1^{(m)} = -\frac{1-m}{24}$$

当 $n=4$, 即 $q=2$ 时可算出

$$\begin{aligned} d_{-2}^{(m)} &= d_2^{(m)} = \gamma_2^{(m)}, \\ d_{-1}^{(m)} &= d_1^{(m)} = \gamma_1^{(m)} - 4\gamma_2^{(m)}, \\ d_0^{(m)} &= 1 - 2\gamma_1^{(m)} + 6\gamma_2^{(m)} \end{aligned}$$

特别地, 当 $m=2$ 时, 算得 $d_0^{(2)} = \frac{3267}{2880} d_1^{(2)} =$

$$-\frac{69}{1440} d_2^{(2)} = -\frac{111}{5760}$$

注: 由文[11]可知, 公式(4)的代数精度为 $2q$ 。

我们定义

$$N_h^{m,n} f(x) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f(t) dt \quad (6)$$

其中, $h>0$ 为参数, 并把 $N_h^{m,n} f(x)$ 作为 $f'(x)$ 的近似值。

简单计算知(6)式可化为

$$\begin{aligned} N_h^{m,n} f(x) &= \frac{1}{h^2} \int_{-\infty}^{+\infty} K_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f(t) dt = \\ &= \frac{1}{h^2} \int_{x-\rho h}^{x+\rho h} K_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f(t) dt = \\ &= \frac{1}{h} \int_{-\rho}^{\rho} K_{m,n}(t) f(x-th) dt \end{aligned}$$

即

$$N_h^{m,n} f(x) = \frac{1}{h} \int_{-\rho}^{\rho} K_{m,n}(t) f(x-th) dt \quad (7)$$

其中,

$$K_{m,n}(t) = P_{m,n}(\delta) \delta \Omega_{m-1}(t), \rho = (m+2q+1)/2$$

经简单计算可知

$$\begin{aligned} K_{m,n}(t) &= P_{m,n}(\delta) \left[\Omega_{m-1} \left(t + \frac{1}{2} \right) - \Omega_{m-1} \left(t - \frac{1}{2} \right) \right] = \\ &= \sum_{j=-q}^q d_j^{(m)} \left[\Omega_{m-1} \left(t + \frac{1}{2} - j \right) - \Omega_{m-1} \left(t - \frac{1}{2} - j \right) \right] \end{aligned}$$

假定 $f(x)$ 是某区间 I 上的有界连续可微函数, 已知 $f(x)$ 的有界可积近似函数 $f^\delta(x)$, 满足

$$\|f^\delta - f\| = \sup |f^\delta(x) - f(x)| \leq \delta \quad (8)$$

令 $K(\delta M_m) = \{f \in C^m(\mathbf{R}), \|f^{(m)}\| \leq M_m < \infty (m \text{ 是自然数}), \|f^\delta - f\| \leq \delta\}$ 。

定理 1 令 $l=2q+1$, 假设 $f(x) \in C^l(\mathbf{R})$, 且 $\|f^{(l)}\| \leq M_l$, 则

$$\begin{aligned} N_h^{m,n} f(x) - f'(x) &= \\ \frac{1}{h} \int_{x-\rho h}^{x+\rho h} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) (f'(t) - f'(x)) dt &= \\ \frac{1}{h} \int_{x-\rho h}^{x+\rho h} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) \frac{(t-x)^{l-1}}{(l-1)!} f^{(l)}(\xi) dt \end{aligned}$$

进而有误差估计

$$\sup_{x \in \mathbf{R}} |N_h^{m,n} f(x) - f'(x)| \leq \frac{M_l}{(l-1)!} \sigma_{m,n} h^{l-1}$$

其中, $\rho = q + (m+1)/2$, $\xi = \xi(x)$, $x - \rho h < \xi < x + \rho h$, 且

$$\sigma_{m,n} = \int_{-\rho}^{\rho} |\Omega_{m,n}(t) t^{l-1}| dt \quad (9)$$

证明 可仿照文[11]定理 3.2 的证明方法,

证明如下: 由于 $\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) dt = 1$, 故

$$f'(x) = \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f'(x) dt \quad (10)$$

又根据分部积分法得

$$\begin{aligned} N_h^{m,n} f(x) &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dx} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f(t) dt = \\ &= -\frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d}{dt} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f(t) dt = \\ &= \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) f'(t) dt \end{aligned}$$

由上式及(10)式得

$$\begin{aligned} N_h^{m,n} f(x) - f'(x) &= \\ \frac{1}{h} \int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) (f'(t) - f'(x)) dt \end{aligned} \quad (11)$$

由 Taylor 公式得

$$\begin{aligned} f'(t) - f'(x) &= \\ \sum_{j=1}^{l-2} \frac{f^{(l+j)}(x)}{j!} (t-x)^j + \frac{f^{(l)}(\xi)}{l!} (t-x)^{l-1} \end{aligned} \quad (12)$$

由于

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \Omega_{m,n} \left(\frac{x-t}{h} \right) (t-x)^j dt = 0$$

$$j=1,2,\cdots,l-2 \tag{13}$$

且

$$\Omega_{m,n}(\frac{x-t}{h})=0 \quad \frac{|x-t|}{h} \geq \rho \tag{14}$$

由 (11), (12), (13), (14) 式便可知结论成立。

注: 由以下定理 2 可知, 求导公式 (6) 的代数精度为 $2q$, 即代数精度为 $n-1$ (当 n 为奇数) 或 n (当 n 为偶数)。例如, 当 $n=4$ 时, 求导公式 (6) 的代数精度为 4, 当 $n=3$ 时, 求导公式 (6) 的代数精度为 2。

定理 2 令 $l=2q+1$, 假设 $f(x) \in K(\delta M_l)$ 则

$$\|N_h^{m,n} f^{\hat{\delta}} - f'\| \leq \frac{\omega_{m,n}}{h} \delta + \frac{M_l \sigma_{m,n}}{(l-1)!} h^{l-1}$$

这里, $\omega_{m,n} = \int_{-\rho}^{\rho} |K_{m,n}(t)| dt$ $\sigma_{m,n}$ 按 (9) 式定义。

证明 由于

$$\begin{aligned} &|N_h^{m,n} f^{\hat{\delta}}(x) - N_h^{m,n} f(x)| = \\ &|N_h^{m,n} (f^{\hat{\delta}}(x) - f(x))| \leq \\ &\frac{\delta}{h} \int_{-\rho}^{\rho} |K_{m,n}(t)| dt = \frac{\delta}{h} \omega_{m,n} \end{aligned}$$

这里, $\omega_{m,n} = \int_{-\rho}^{\rho} |K_{m,n}(t)| dt$

由定理 1 及上式可知

$$\begin{aligned} &\|N_h^{m,n} f^{\hat{\delta}} - f'\| \leq \\ &\|N_h^{m,n} f^{\hat{\delta}} - N_h^{m,n} f\| + \|N_h^{m,n} f - f'\| \leq \\ &\frac{\delta}{h} \omega_{m,n} + \frac{M_l}{(l-1)!} \sigma_{m,n} h^{l-1}. \end{aligned}$$

由此可见结论成立。

由定理 2 立即可得

推论 1 令 $l=2q+1$, 假设 $f(x) \in K(\delta M_l)$ 。

令 $g(h) = \frac{\delta}{h} \omega_{m,n} + \frac{M_l}{(l-1)!} \sigma_{m,n} h^{l-1}$, 则当 $h^* = (\frac{\omega_{m,n}(l-2)!}{M_l \sigma_{m,n}})^{\frac{1}{l-1}} \delta^{\frac{1}{l-1}}$ 时, $g(h^*)$ 取最小, 而且

$$\|N_{h^*}^{m,n} f^{\hat{\delta}} - f'\| \leq g(h^*)$$

注: 令 $l=2q+1$, 假设 $f(x) \in K(\delta M_l)$, 如果取 $h = d^{\frac{1}{l-1}} (d > 0)$, 则 $\|N_h^{m,n} f^{\hat{\delta}} - f'\| = O(\frac{1}{d^{\frac{1}{l-1}}})$ 。

为了得到近似已知函数的数值微商公式, 只需将式 (7) 中积分换成相应和数, 我们采用复合梯形求积公式

$$\begin{aligned} N_h^{m,n} f(x) &= \frac{1}{h} \int_{-\rho}^{\rho} K_{m,n}(t) f(x-th) dt \approx \\ &\frac{1}{h} \sum_{i=0}^n \tau_i K_{m,n}(t_i) f(x-t_i h) =: N_h f(x) \end{aligned}$$

这里

$$K_{m,n}(t_i) =$$

$$\begin{aligned} &\sum_{j=-q}^q d_j^{(m)} \left[\Omega_{m-1}(t_i + \frac{1}{2} - j) - \Omega_{m-1}(t_i - \frac{1}{2} - j) \right], \\ &i=0,1,2,\cdots,n \\ &\tau_0 = \tau_n = \frac{h}{2}, \tau_i = h, i=1,2,\cdots,n-1 \\ &t_i = -\rho + ih, h' = \frac{2\rho}{n} \end{aligned}$$

2 数值例子

假设 $f(x) = e^{x^2} (-1 \leq x \leq 1)$, $f^{\hat{\delta}}(x) = f(x) + \delta^* \text{rand}(x)$, $f'(x) = 2xe^{x^2}$ 。取 $\delta=0.01$, $n=100$ 以下图形是用 MATLAB 进行计算所得。

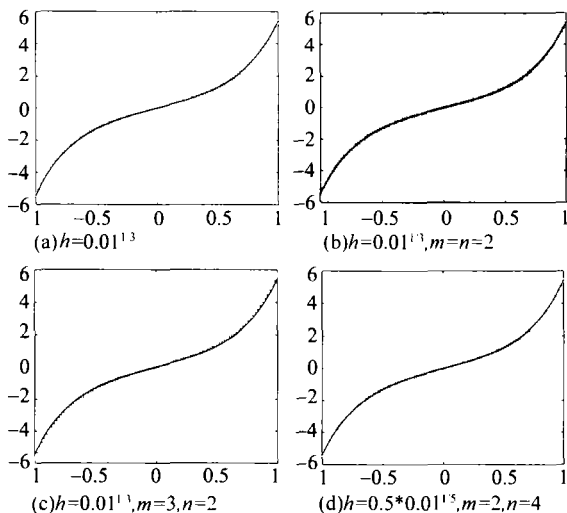


图 1 求某近似已知函数导数数值实验图

Fig. 1 Numerical experiments for differentiation of approximately specified functions

图 1 (a) - (d) 是采用新旧方法求导数实验图, 图形 (a) 是采用 Gmetsch 的方法, 图形 (b) - (d) 是采用高精度样条磨光求导的方法 (新方法), 实线表示导函数 (精确解) 对应的图形, 虚线表示导函数的计算值。实验所得到的结果与我们从理论上所得到的结果一致, 即我们的求导方法是非常有效的, 优于 Gmetsch 的求导方法。

致谢: 作者衷心感谢中山大学李岳生老师的悉心指导和有价值的建议。

参考文献:

- [1] TIKHONOV A H ARSENIN V Y. Solutions of Ill-Posed Problem [M]. New York: Wiley, 1977.
- [2] KIRSCH A. An Introduction to the Mathematical Theory of Inverse Problems [M]. New York: Springer-Verlag, 1996.
- [3] MURD D A. Automatic numerical differentiation by dis

cretemollification[J]. Comput Math Appl 1987 13 381
– 386

[4] 李岳生. 样条与插值[M]. 上海: 上海科学技术出版社, 1983

[5] 杨宏奇, 李岳生. 近似已知函数微商的稳定逼近方法
[J]. 自然科学进展, 2000 10(12): 1088 – 1093

[6] GROETSCH C W. Optimal order of accuracy in Vasin’s
method for differentiation of noisy functions[J]. J Optim
Theory Appl 1992 74 (2): 373 – 377

[7] GROETSCH C W. Differentiation of approximately speci
fied functions[J]. American Mathematical Monthly

1991 98 847 – 851

[8] CULLUM J. Numerical differentiation and regularization
[J]. SIAM J Numer Anal 1971 8 254 – 265

[9] 李岳生. 解第一类积分方程的正则 – 样条方法 [J].
地球物理学报 (专辑 II), 1990 33(6): 6 – 17.

[10] GROETSCH C W. Lanczos’s generalized derivative[J].
American Mathematical Monthly 1998 105(4): 320 –
326

[11] 李岳生. 算子样条函数磨光法 [J]. 计算数学, 1981,
4 3 – 10

A Stable High Accuracy Smoothing Method by Spline Function for Differentiation of Approximately Specified Functions

LUO Xing-jun^{1, 2}, YANG Su-hua²

(1. School of Mathematics and Computational Science, Sun Yat-sen University, Guangzhou 510275, China

2. Department of Mathematics and Computer, Gannan Normal University, Jiangxi Ganzhou 341000, China)

Abstract A new stable smoothing method by spline function for differentiation of specified functions is presented. The convergence rate of the approximate differentiation is improved under some conditions and that the improved estimate is $O(\frac{1}{\delta^1})$, as compared with the Groetsch’s method for approximate differentiation. The experimental simulation shows that the new methods are effective.

Key words ill posed problems; approximate differentiation; convergence rate