计算物理基础第三次作业

柴声都 19307110142

2021 年 10 月 26 日

一　第一题

1　问题描述

分别使用 Newton interpolation 和 cubic spline interpolation 对 cos(x) 和 $1/(1+25x^2)$ 进行插值，并比较结果。

2　求解思路

对于 Newton interpolation，我们利用递归函数求出多项式的系数

$$f[x_n, x_{n-1}, ..., x_1, x_0] = \frac{f[x_n, x_{n-1}, ..., x_1] - f[x_{n-1}, ..., x_2, x_1]}{x_n - x_0} \tag{1}$$

并将系数代入多项式可以得到：

$$\begin{aligned} f_n(x) &= f(x_0) + (x - x_0)f[x_1, x_0] + (x - x_0)(x - x_1)f[x_2, x_1, x_0] \\ &+ \cdots + (x - x_0)(x - x_1)\cdots(x - x_{n-1})f[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_0] \end{aligned} \tag{2}$$

对于 cubic spline interpolation 我们利用一阶导连续求出 $f''(x_i)$ 的值，

$$\begin{aligned} &(x_i - x_{i-1})f''(x_{i-1}) + 2(x_{i+1} - x_{i-1})f''(x_i) + (x_{i+1} - x_i)f''(x_{i+1}) \\ &= \frac{6}{(x_{i+1} - x_i)}[f(x_{i+1}) - f(x_i)] + \frac{6}{x_i - x_{i-1}}[f(x_{i-1}) - f(x_i)] \end{aligned} \tag{3}$$

以及 $f''(x_1) = f''(x_n) = 0$，再将这些值代入：

$$\begin{aligned} f_{i-1}(x) &= \frac{f_i''(x_{i-1})}{6(x_i - x_{i-1})}(x_i - x)^3 + \frac{f_i''(x_i)}{6(x_i - x_{i-1}}(x - x_{i-1})^3 \\ &+ \left[\frac{f_i(x_{i-1})}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f_i''(x_{i-1}(x_i - x_{i-1})}{6}\right](x_i - x) \\ &+ \left[\frac{f_i(x_i)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f_i''(x_i)(x_i - x_{i-1})}{6}\right](x - x_{i-1}) \end{aligned} \tag{4}$$

3 伪代码

Algorithm 1 NEWTON INTERPOLATION

Input: x coordinates and y coordinates of the points xs, ys

Output: Newton interpolation.

$def func(xs, ys)$

$n = len(xs)$

if $n > 1$ **then**

  $f = (\text{func}(xs[0 : n-1], ys[0 : n-1]) - \text{func}(xs[1 : n], ys[1 : n]))/(xs[0] - xs[n-1])$

else

  $f = ys[0]$

end if

return f

$y = \text{func}\left(x_0\right) + \cdots + \left(x - x_0\right)\left(x - x_1\right) \cdots \left(x - x_{n-1}\right) \text{func}\left[x_n, x_{n-1}, \cdots, x_0\right]$

return x, y

Algorithm 2 SPLINES INTERPOLATION

Input: x coordinates and y coordinates of the points xs, ys

Output: splines interpolation.

$n = len(xs)$

for i in range (n) **do**

  $f''\left(x_1\right) = f''\left(x_N\right) = 0$

$$\begin{aligned} &\left(x_i - x_{i-1}\right) f''\left(x_{i-1}\right) + 2\left(x_{i+1} - x_{i-1}\right) f''\left(x_i\right) + \left(x_{i+1} - x_i\right) f''\left(x_{i+1}\right) \\ &= \tfrac{6}{x_{i+1} - x_i}\left[f\left(x_{i+1}\right) - f\left(x_i\right)\right] + \tfrac{6}{x_i - x_{i-1}}\left[f\left(x_{i-1}\right) - f\left(x_i\right)\right] \end{aligned}$$

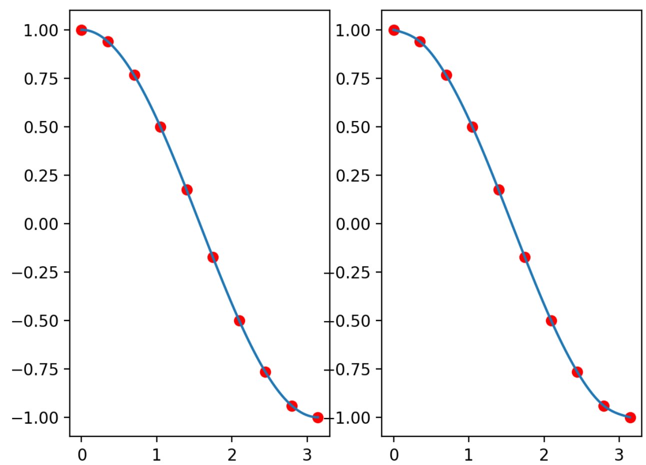
end for

$sol = solve(f_i'')$ for i in range(n)

$$\begin{aligned} y =& \frac{f_i''\left(x_{i-1}\right)}{6\left(x_i - x_{i-1}\right)}\left(x_i - x\right)^3 + \frac{f_i''\left(x_i\right)}{6\left(x_i - x_{i-1}\right)}\left(x - x_{i-1}\right)^3 \\ &+ \left[\frac{f_i\left(x_{i-1}\right)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f_i''\left(x_{i-1}\right)\left(x_i - x_{i-1}\right)}{6}\right]\left(x_i - x\right) \\ &+ \left[\frac{f_i\left(x_i\right)}{x_i - x_{i-1}} - \frac{f_i''\left(x_i\right)\left(x_i - x_{i-1}\right)}{6}\right]\left(x - x_{i-1}\right) \end{aligned}$$

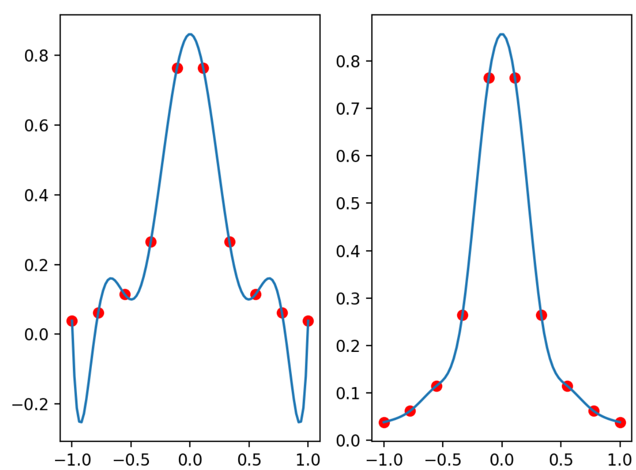
return x, y

4 运行结果



图一 y=cosx

如图一，对 $cosx$，左边为 Newton interpolation 结果，右图为 cubic spline interpolation 结果，可以发现两者都和原函数符合较好, 没有明显区别。



图二 $y = \frac{1}{1+25x^2}$

如图二, 对 $\frac{1}{1+25x^2}$, 左边为 Newton interpolation 结果, 右图为 cubic spline interpolation 结果, 可以发现 Newton interpolation 在点之间有很明显的波动，在两端偏离真值很大，而 cubic spline interpolation 就表现很好。

Newton interpolation 优势在于计算复杂度只有 $O(nlogn)$，而 cubic spline interpolation 的计算复杂度有 $O(n^3)$。因此在应用时可以根据对运算速度和插值还原度的需求选择方法。

二 第二题

1 问题描述

根据 $\frac{PV}{RT} = 1 + \frac{a}{V} + \frac{b}{V^2}$ 拟合系数 a, b。数据由下表给出。

P/atm	0.985	1.108	1.363	1.631
V/mL	25000	22200	18000	15000

2 解决方法

根据线性回归最小二乘法，最小二乘系数 $\mathrm{b} = (\mathrm{X}\mathrm{X}^\mathrm{T})^{-1}\mathrm{X}^\mathrm{T}\mathrm{Y}$，由此得到 a, b。其中

$$\mathrm{X} = \begin{bmatrix} \frac{1}{V_1} & \frac{1}{V_1^2} \\ \frac{1}{V_2} & \frac{1}{V_2^2} \\ \frac{1}{V_3} & \frac{1}{V_3^3} \\ \frac{1}{V_4} & \frac{1}{V_4^2} \end{bmatrix}, \quad \mathrm{Y} = \begin{bmatrix} \frac{P_1V_1}{RT} - 1 \\ \frac{P_2V_2}{RT} - 1 \\ \frac{P_2V_3}{RT} - 1 \\ \frac{P_3V_4}{RT} - 1 \end{bmatrix}$$

得到系数后我们就可以利用系数 a，b 绘制曲线图，并将结果与实际数据点比较。

3 伪代码

Algorithm 3 FIT a AND b

Input: X,Y

Output: b

1:
$$\mathrm{X} = \begin{bmatrix} \frac{1}{V_1} & \frac{1}{V_1^2} \\ \frac{1}{V_2} & \frac{1}{V_2^2} \\ \frac{1}{V_3} & \frac{1}{V_3^3} \\ \frac{1}{V_4} & \frac{1}{V_4^2} \end{bmatrix}, \quad \mathrm{Y} = \begin{bmatrix} \frac{P_1V_1}{RT} - 1 \\ \frac{P_2V_2}{RT} - 1 \\ \frac{P_2V_3}{RT} - 1 \\ \frac{P_3V_4}{RT} - 1 \end{bmatrix}$$

2: $b = (XX^T)^{-1}X^TY$

3: return b

4 运行结果

我们得到 $a = -7.33 * 10^{-4}$ 和 $b = 4.58 * 10^{-6}$，并将这两个系数代回原函数与实际数据点比较发现基本吻合。

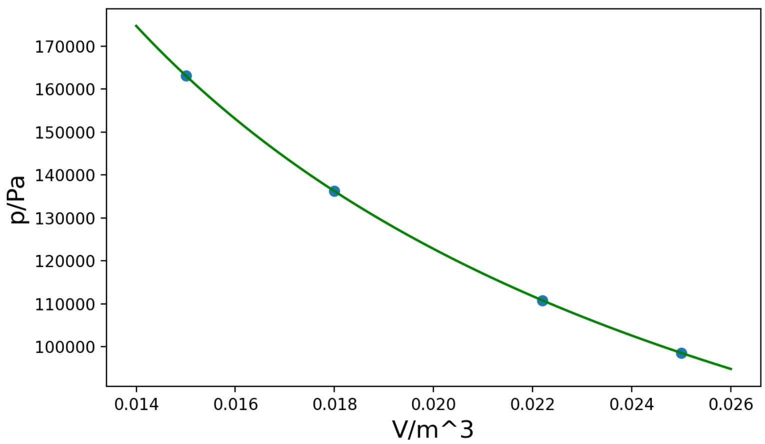


图 三 p-V