数值计算方法

陈鸿峥

2019.04*

目录

*Build 20190404

1 简介

1.1 误差

- 原始误差：模型误差
- 观测误差：测量数据产生的误差
- 方法误差：截断误差
- 计算误差：舍入误差

1.2 需要注意的问题

- 避免相近的数相减，如$\sqrt{1001}-\sqrt{1000}$有效数字会损失，分子有理化可使误差减小。**数学上等价的公式在计算上是不等价的!**
- 避免数量级相差太大的两数相除，容易溢出
- 避免大数和小数相加减，浮点数计算要对阶
- 简化计算步骤

2 插值

定理 1 (唯一性). *n次插值多项式存在且唯一*

分析. 设n次多项式$p(x)=a_0+a_1x+\cdots+a_nx^n$为函数$f(x)$在$[a,b]$上$n+1$个互异节点$x_i(i=0,1,\ldots,n)$上的插值多项式，则求$p(x)$的系数$a_i$相当于解线性方程组

$$\begin{cases} a_0+a_1x_0+\cdots+a_nx_0^n=y_0 \\ a_0+a_1x_1+\cdots+a_nx_1^n=y_1 \\ \vdots \\ a_0+a_1x_n+\cdots+a_nx_n^n=y_n \end{cases}$$

其系数行列式为范德蒙特行列式$V=\prod_{i=1}^{n}\prod_{j=0}^{i-1}(x_i-x_j)$，因为$x_i$互不相同，故$V\neq 0$。进而由克莱姆法则，$a_i$解存在且唯一。

由于$p(x)$为线性空间$P_n(x)$[1]的一个点，因而其基底/插值基函数$\phi(x)$不唯一，有多种表示方法（不同的线性组合）

$$p(x)=a_0\phi_0(x)+a_1\phi_1(x)+\cdots+a_n\phi_n(x)$$

[1]次数小于等于n的代数多项式的集合

2.1 拉格朗日插值

定义 1 (拉格朗日插值基函数). 节点x_k上的插值基函数$l_k(x)$满足

$$l_k(x_k) = \begin{cases} 1 & i = k \\ 0 & i \neq k \end{cases}$$

由定义知$l_k(x)$的零点为$x_i, i \neq k$，待定系数A_k

$$l_k(x) = A_k(x - x_0)(x - x_1) \cdots (x - x_{k-1})(x - x_{k+1}) \cdots (x - x_n)$$

可求得A_k，进而得到插值基函数

$$l_k(x) = \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{x_k - x_i}$$

因此拉格朗日插值函数为

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) \prod_{\substack{i=0 \\ i \neq k}}^{n} \frac{(x - x_i)}{x_k - x_i}$$

其中$L_1(x)$称为线性插值，$L_2(x)$称为抛物线插值

误差估计

$$R_n(x) = \frac{f^{(n+1)}(\xi)}{(n+1)!} \prod_{i=0}^{n} (x - x_i),\ \xi = \xi(x) \in (a, b)$$

2.2 牛顿插值

定义 2 (牛顿插值基函数).

$$\begin{cases} \varphi_0(x) = 1 \\ \varphi_j(x) = \prod_{i=0}^{j-1} (x - x_i),\ j = 1, 2, \ldots, n \end{cases}$$

进而牛顿插值函数为

$$N_n(x) = a_0 + a_1(x - x_0) + a_2(x - x_0)(x - x_1) + \cdots = a_0 + \sum_{i=1}^{n} a_i \prod_{j=0}^{i-1} (x - x_j)$$

实际上就是将x_i之后的项全部为0消掉了。

由$f(x_k) = N_n(x_k)$，对比系数可得

$$\begin{aligned} a_0 &= f(x_0) \\ a_1 &= \frac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0} \\ a_2 &= \frac{\dfrac{f(x_2) - f(x_0)}{x_2 - x_0} - \dfrac{f(x_1) - f(x_0)}{x_1 - x_0}}{x_2 - x_1} \end{aligned}$$

定义 3 (差商). 一阶差商$f[x_i,x_k]=\dfrac{f(x_k)-f(x_i)}{x_k-x_i}$，二阶差商$f[x_i,x_j,x_k]=\dfrac{f[x_i,x_k]-f[x_j,x_k]}{x_k-x_j}$，高阶差商为

$$f[x_0,x_1,\dots,x_{k-1},x_k]=\frac{f[x_0,x_1,\dots,x_{k-2},x_k]-f[x_0,x_1,\dots,x_{k-1}]}{x_k-x_{k-1}}$$

由差商定义可得以下差商表（注：下面$f_i:=f(x_i)$）

x_k	y_k	一阶	二阶	三阶
x_0	f_0			
x_1	f_1	$f[x_0,x_1]$		
x_2	f_2	$f[x_1,x_2]$	$f[x_0,x_1,x_2]$	
x_3	f_3	$f[x_2,x_3]$	$f[x_1,x_2,x_3]$	$f[x_0,x_1,x_2,x_3]$

并且有

$$\begin{aligned}
a_0&=f(x_0)\\
a_1&=f[x_0,x_1]\\
a_2&=f[x_0,x_1,x_2]\\
&\vdots\\
a_n&=f[x_0,x_1,\dots,x_n]
\end{aligned}$$

由误差估计的计算可得差商与导数之间的关系

$$f[x_0,x_1,\dots,x_k]=\frac{f^{(k)}(\xi)}{k!}$$

可以看出，当增加一个节点时，牛顿插值只需增加一项，而拉格朗日插值需要全部重新算。

定义 4 (差分). 设已知函数$f(x)$在等距节点$x_i=x_0+ih(i=0,1,2,\dots,n)$上的函数值为$f(x_i)=f_i$，其中$h>0$为步长，则称$\Delta f_i=f(x_i+h)-f(x_i)=f_{i+1}-f_i$为$f(x)$在$x_i$处步长为$h$的一阶向前差分。称$\Delta^2 f_i=\Delta(\Delta f_i)=\Delta f_{i+1}-\Delta f_i$为函数$f(x)$在$x_i$处的二阶向前差分。一般地$\Delta^n f_i=\Delta(\Delta^{n-1}f_i)$为函数$f(x)$在$x_i$处的$n$阶向前差分。并规定，$\Delta^0 f_i=f_i$为零阶差分。

差分与差商的关系为

$$f[x_0,x_1,\dots,x_k]=\frac{\Delta^k f_0}{k!h^k},\ k=1,2,\dots,n$$

则牛顿插值公式的向前差分形式为

$$N_n(x)=N_n(x_0+th)=f_0+\frac{t}{1!}\Delta f_0+\frac{t(t-1)}{2!}\Delta^2 f_0+\cdots+\frac{t(t-1)\cdots(t-n+1)}{n!}\Delta^n f_0,\ t\in[0,1]$$

类似于泰勒展开。

2.3 埃尔米特插值

不仅要求插值点的函数值$H(x_i)$与原函数的值$f(x_i)$相同，还要求它们有公切线，即$H'(x_i)=f'(x_i)$。若所有插值点都要满足上述条件，则埃尔米特(Hermite)插值多项式为$2n+1$次的。

2.4 三次样条插值

分多段，每段用三次函数逼近

三次样条条件

- 插值条件：$s_k(x_j) = y_j, \quad j = k-1, k, \quad k = 1, 2, \ldots, n$，共$2n$个条件
- 端点导数条件：$\lim_{x \to x_k^-} s^{(p)}(x) = \lim_{x \to x_k^+} s^{(p)}(x), \quad p = 1, 2, \quad k = 1, \ldots, n-1$，共$2n-2$个条件
- 边界条件：
  - 第一类边界条件：$s'(x_0) = f_0', s'(x_n) = f_n'$，其中$f_0', f_n'$为给定值
  - 第二类边界条件：$s''(x_0) = f_0'', s''(x_n) = f_n''$，其中$f_0'', f_n''$为给定值，若为0，则为**自然**边界条件
  - 周期性条件：$\lim_{x \to x_0^+} s^{(p)}(x) = \lim_{x \to x_n^-} s^{(p)}(x), p = 1, 2$

三转角方法，用一阶导数求解；三弯矩方法，用二阶导数求解。

$$\begin{bmatrix} 2 & 1 & & & & \\ \mu_1 & 2 & \lambda_1 & & & \\ & \mu_2 & 2 & \lambda_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & & \mu_{n-1} & 2 & \lambda_{n-1} \\ & & & & 1 & 2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} M_0 \\ M_1 \\ M_2 \\ \vdots \\ M_{n-1} \\ M_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d_0 \\ d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

3 线性方程组直接解法

3.1 高斯消元法

即逐行做**消元**，变为上三角矩阵后**回代**

但由于浮点误差，高斯消元容易产生“大数吃小数”的现象，而达到错误的解（不稳定），如下式

$$\begin{cases} \varepsilon x_1 + x_2 = 1 \\ x_1 + x_2 = 2 \end{cases}$$

- 列主元高斯消去法：每次选择一列中最大的元素所在行，然后与当前行交换
- 全主元消去法：每次选择矩阵中最大元素所在行，与当前行交换

3.2 三角分解

3.3 LU分解

- 杜利脱尔(Doolittle)分解：由高斯消元法，$A = L_1^{-1} \cdots L_{n-1}^{-1} U = LU$，其中$L$为**单位**下三角矩阵，$U$为上三角

- 克洛脱(Crout)分解：$A = LU$，其中L为下三角，U为**单位**上三角
- LDU分解：$A = LD\tilde{U}$，其中L为**单位**下三角，$D = \mathrm{diag}(u_{11}, u_{22}, \dots, u_{nn})$，$\tilde{U} = D^{-1}U$为单位上三角

杜利脱尔分解要求对A高斯消去时，所有主元元素$a_{ii}^{(i)}$不为零

定理 2. 主元元素$a_{ii}^{(i)}$不为零的充要条件为n阶矩阵A的所有顺序主子式均不为0

定理 3. 若A的所有顺序主子式均不为0，则矩阵A的LU分解都具有唯一性

3.4 乔列斯基(Choleskey)分解

当A为**对称正定**矩阵时，所有顺序主子式都大于0，因而存在唯一LU分解。用LDU分解，D为非奇异的对角矩阵，由A的对称性有

$$A = LDU = U^{\mathrm{T}} D U^{\mathrm{T}}$$

又由分解的唯一性，有$L = D^{\mathrm{T}}$，得$A = LDL^{\mathrm{T}}$

设$D = \mathrm{diag}(d_1, \dots, d_n), d_i \neq 0$，则$D$的对角元素均为正数

记$D^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \dots, \sqrt{d_n})$，则

$$A = LDL^{\mathrm{T}} = LD^{1/2}D^{1/2}L^{\mathrm{T}} = (LD^{1/2})(LD^{1/2})^{\mathrm{T}} = GG^{\mathrm{T}}$$

求解方法为平方根法。

3.5 追赶法

设n阶方程组$A\mathbf{x} = \mathbf{d}$，其中A为三对角方程

$$A = \begin{bmatrix} b_1 & c_1 & & & \\ a_2 & b_2 & c_2 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & a_{n-1} & b_{n-1} & c_{n-1} \\ & & & a_n & b_n \end{bmatrix}, \ \mathbf{d} = \begin{bmatrix} d_1 \\ d_2 \\ \vdots \\ d_{n-1} \\ d_n \end{bmatrix}$$

对矩阵A做克洛脱分解，有

$$L = \begin{bmatrix} l_1 & & & & \\ v_2 & l_2 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & v_{n-1} & l_{n-1} & \\ & & & v_n & l_n \end{bmatrix}, \ U = \begin{bmatrix} 1 & u_1 & & & \\ & 1 & u_2 & & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & 1 & u_{n=1} \\ & & & & 1 \end{bmatrix}$$

进而$A=LU$，做两次回代即可

$$\begin{cases} L\mathbf{y}=\mathbf{d} \\ U\mathbf{x}=\mathbf{y} \end{cases}$$

3.6 分块三角分解

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{E} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathbf{U}=\begin{bmatrix} \mathbf{F} & \mathbf{G} \\ \mathbf{0} & \mathbf{H} \end{bmatrix}$$

且满足$\mathbf{A}=\mathbf{LU}$，经计算有

$$\mathbf{L}=\begin{bmatrix} \mathbf{I} & \mathbf{0} \\ \mathbf{CA}^{-1} & \mathbf{I} \end{bmatrix}, \mathbf{U}=\begin{bmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{B} \\ \mathbf{0} & \mathbf{D}-\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

其中$\mathbf{S}=\mathbf{D}-\mathbf{CA}^{-1}\mathbf{B}$为$\mathbf{A}$的舒尔(schur)补。

4 线性方程组迭代解法

4.1 范数与条件数

定义 5 (向量的范数)**.** *对任意n维向量$\mathbf{x}$，若对应非负实数$\|\mathbf{x}\|$，满足*

1. $\|\mathbf{x}\|\geq 0$，*当且仅当$\mathbf{x}=\mathbf{0}$时等号成立*
2. *对任意$\alpha\in\mathbb{R}$，$\|\alpha\mathbf{x}\|=|\alpha|\cdot\|\mathbf{x}\|$*
3. *对任意的n维向量$\mathbf{x}$和$\mathbf{y}$，满足三角不等式$\|\mathbf{x}+\mathbf{y}\|\leq\|\mathbf{x}\|+\|\mathbf{y}\|$*

则称$\|\mathbf{x}\|$为$\mathbf{x}$的范数，其中1-范数、2-范数、无穷范数定义如下

$$\|\mathbf{x}\|_1=\sum_{i=1}^{n}|x_i|$$
$$\|\mathbf{x}\|_2=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}|x_i|^2}$$
$$\|\mathbf{x}\|_\infty=\max_{1\leq i\leq n}|x_i|$$

定义 6 (矩阵的范数)**.** *对于n阶方阵$\mathbf{A}$，若对应非负实数$\|\mathbf{A}\|$，满足*

1. $\|\mathbf{A}\|\geq 0$，*当且仅当$\mathbf{A}=\mathbf{0}$时等号成立*
2. *对任意$\alpha\in\mathbb{R}$，$\|\alpha\mathbf{A}\|=|\alpha|\cdot\|\mathbf{A}\|$*
3. *对任意两个n阶方阵$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$，满足三角不等式$\|\mathbf{A}+\mathbf{B}\|\leq\|\mathbf{A}\|+\|\mathbf{B}\|$*
4. *对任意两个n阶方阵$\mathbf{A}$和$\mathbf{B}$，满足矩阵乘法要求$\|\mathbf{AB}\|\leq\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{B}\|$*

则称$\|\mathbf{A}\|$为方阵$\mathbf{A}$的矩阵范数。记$\rho(\mathbf{A})=\max_{1\le i\le n}|\lambda_i|$为$\mathbf{A}$的谱半径，这里$\lambda_i$为$\mathbf{A}$的特征值，矩阵的*1*-范数、*2*-范数、无穷范数和F范数分别定义如下

$$\|\mathbf{A}\|_1=\max_{1\le j\le n}\sum_{i=1}^{n}|a_{ij}|$$
$$\|\mathbf{A}\|_2=\sqrt{\rho(A^{\mathrm{T}}A)}$$
$$\|\mathbf{A}\|_\infty=\max_{1\le i\le n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|$$
$$\|\mathbf{A}\|_F=\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\sum_{j=1}^{n}|a_{ij}|^2}$$

注意矩阵的F-范数才是向量*2*-范数的直接推广，而矩阵的*2*-范数是计算$A^{\mathrm{T}}A$的谱半径，又被称为谱范数

相容的向量范数和矩阵范数，满足

$$\|\mathbf{A}\mathbf{x}\|\le\|\mathbf{A}\|\cdot\|\mathbf{x}\|$$

一些相容的范数如下

- 矩阵1-范数与向量1-范数
- 矩阵2-范数与向量2-范数
- 矩阵无穷范数与向量无穷范数
- 矩阵F范数与向量2-范数

定义 7 (条件数)**.** 设$\mathbf{A}$为n阶非奇异矩阵，称数$cond(\mathbf{A})=\|\mathbf{A}\|\,\|\mathbf{A}^{-1}\|$为线性方程组$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$或矩阵$\mathbf{A}$的条件数。其对方程组的解的相对误差起到关键的控制作用

4.2 基本迭代法

给定线性方程组$\mathbf{A}\mathbf{x}=\mathbf{b}$，设$\mathbf{A}=\mathbf{M}-\mathbf{N}$，其中$\mathbf{M}$为非奇异矩阵，则原式变为

$$\mathbf{M}\mathbf{x}=\mathbf{N}\mathbf{x}+\mathbf{b}$$

左右乘上$\mathbf{M}^{-1}$，有

$$\mathbf{x}=\mathbf{M}^{-1}\mathbf{N}\mathbf{x}+\mathbf{M}^{-1}\mathbf{b}=\mathbf{B}\mathbf{x}+\mathbf{g}$$

给定初始向量$\mathbf{x}^{(0)}$，按照下式迭代

$$\mathbf{x}^{(n+1)}=\mathbf{B}\mathbf{x}^{(n)}+\mathbf{g}$$

最终若收敛至$\mathbf{x}^{\star}$，则原方程得出解。实际迭代还是用

$$\mathbf{M}\mathbf{x}^{(k+1)}=\mathbf{N}\mathbf{x}^{(k)}+\mathbf{b}$$

将$\mathbf{A}$拆分成三个矩阵之和（只是将矩阵$\mathbf{A}$元素分块而已）

$$\mathbf{A} = \mathbf{D} - \mathbf{L} - \mathbf{U}$$

对角线阵$\mathbf{D}$、负的严格下三角阵$\mathbf{L}$和严格上三角阵$\mathbf{U}$

4.2.1 雅可比迭代法

取$\mathbf{M} = \mathbf{D}$和$\mathbf{N} = \mathbf{L} + \mathbf{U}$，即得雅可比迭代法

$$\mathbf{D}\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{L} + \mathbf{U})\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}$$

4.2.2 高斯-赛德尔迭代法

如果在雅可比迭代算法的第三步，将算出来的$\mathbf{x}^{(k+1)}$的分量立即投入到下一个迭代方程，则得到Gauss-Seidel迭代法

$$\mathbf{D}\mathbf{x}^{(k+1)} = \mathbf{L}\mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b}$$

4.2.3 超松弛(SOR)迭代法

将GS迭代改写为

$$\begin{aligned}\mathbf{x}^{(k+1)} &= \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}\mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b} \\ &= \mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{D}^{-1}(\mathbf{L}\mathbf{x}^{(k+1)} + \mathbf{U}\mathbf{x}^{(k)} - \mathbf{D}\mathbf{x}^{(k)} + \mathbf{b})\end{aligned}$$

等号右侧第二项为修正量，为获得更快的收敛速度，在其前面乘系数ω，即得到逐次超松弛(SOR)迭代法，其中ω为松弛因子

$$\mathbf{x}^{(k+1)} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}[(1-\omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}]\mathbf{x}^{(k)} + \omega(\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}\mathbf{b}$$

此时迭代矩阵为

$$\mathbf{B}_{SOR} = (\mathbf{D} - \omega\mathbf{L})^{-1}[(1-\omega)\mathbf{D} + \omega\mathbf{U}]$$