数值计算方法

陈鸿峥

2019.03*

目录

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

*Build 20190314

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）

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

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

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

[1]次数小于等于n的代数多项式的集合

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

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

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

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

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

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

由误差估计的计算可得差商与导数之间的关系

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

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$x_i = x_0 + ih (i = 0, 1, 2, \ldots, n)$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

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

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