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

*Build 20190328

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）

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

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

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

[1]次数小于等于n的代数多项式的集合

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

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

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

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：$\lim_{x\to x_k^-} s^{(p)}(x)=\lim_{x\to x_k^+} s^{(p)}(x),\quad p=1,2,\quad k=1,\dots,n-1$，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

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

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

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

记$D^{1/2} = \mathrm{diag}(\sqrt{d_1}, \sqrt{d_2}, \ldots, \sqrt{d_n})$，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$\mathbf{A} = \mathbf{L}\mathbf{U}$，经计算有

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

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