常见数值计算方法原理与手算指南

常见数值计算方法原理与手算指南

引言

本指南涵盖了插值、拟合、数值积分、方程求解、线性方程组求解及常微分方程求解等多个领域的经典数值方法。每个方法的讲解都包含“核心思想”、“适用场景”和最重要的“手算步骤”，并配有关键公式，旨在为您提供一份清晰、可靠的案头参考资料。

第一部分：插值与拟合

1. 拉格朗日插值 (Lagrange Interpolation)

- **核心思想**：为每个数据点 (x_i, y_i) 构造一个特殊的多项式 $L_i(x)$，它在 x_i 处的值为1，在所有其他 x_j ($j \neq i$) 处的值为0。最终的插值多项式就是这些 $L_i(x)$ 的加权（权重为 y_i）之和。
- **适用场景**：理论分析、公式推导，或当数据点较少时。不适合数据点很多的情况，因为增加一个点需要重新计算所有项。
- **手算步骤**：
  1. 给定 $n+1$ 个数据点 $(x_0, y_0), (x_1, y_1), \dots, (x_n, y_n)$。
  2. 对每一个点 i (从0到n)，构造拉格朗日基多项式 $L_i(x)$：

     $$L_i(x) = \prod_{j=0, j\neq i}^{n} \frac{x - x_j}{x_i - x_j} = \frac{x - x_0}{x_i - x_0} \times \frac{x - x_1}{x_i - x_1} \times \dots (\text{跳过} \frac{x - x_i}{x_i - x_i}) \dots \times \frac{x - x_n}{x_i - x_n}$$

  3. 将所有基多项式与对应的 y_i 相乘并求和，得到最终的插值多项式 $P(x)$：

     $$P(x) = \sum_{i=0}^{n} y_i L_i(x) = y_0 L_0(x) + y_1 L_1(x) + \dots + y_n L_n(x)$$

  4. 将需要计算的 x 值代入 $P(x)$ 求解。

2. 牛顿插值 (Newton's Interpolation)

- **核心思想**：构造一个具有“继承性”的多项式。每增加一个数据点，只需在原有基础上增加一项，而无需改变之前的项。其系数由“差商”或“差分”决定。
- **适用场景**：需要动态增加数据点的情况，手算时比拉格朗日更方便。
- **手算步骤 (以差商为例，不要求等距)**：
  1. 给定 $n+1$ 个数据点。
  2. **构造差商表**：
     - **零阶差商**：$f[x_i] = y_i$
     - **一阶差商**：$f[x_i, x_{i+1}] = \frac{f[x_{i+1}] - f[x_i]}{x_{i+1} - x_i}$
     - **二阶差商**：$f[x_i, x_{i+1}, x_{i+2}] = \frac{f[x_{i+1}, x_{i+2}] - f[x_i, x_{i+1}]}{x_{i+2} - x_i}$
     - **k阶差商**：$f[x_i, \ldots, x_{i+k}] = \frac{f[x_{i+1}, \ldots, x_{i+k}] - f[x_i, \ldots, x_{i+k-1}]}{x_{i+k} - x_i}$
     - 通常将这些值列成一个表，方便查看。
  3. **写出牛顿插值多项式**：系数就是差商表的“上对角线”：$f[x_0]$, $f[x_0, x_1]$, $f[x_0, x_1, x_2]$, ...

     $$P(x) = f[x_0] + f[x_0, x_1](x - x_0) + f[x_0, x_1, x_2](x - x_0)(x - x_1) + \ldots$$

  4. 将需要计算的 x 值代入 $P(x)$ 求解。
- **注意**：对于等距节点，差商可以简化为差分，即**牛顿前插/后插公式。**

3. 最小二乘法拟合 (Least Squares Fitting)

- **核心思想**：寻找一个函数（如直线、多项式），使得所有数据点到该函数的“距离”（误差）的平方和最小。
- **适用场景**：数据点含有测量误差，不要求曲线精确通过所有点，而是反映整体趋势。
- **手算步骤 (以线性拟合 $y = a + bx$ 为例)**：
  1. 给定 m 个数据点 $(x_1, y_1), \ldots, (x_m, y_m)$。
  2. **建立正规方程组**：这是一个关于待定系数 a 和 b 的线性方程组。

     $$\begin{cases} ma + (\sum x_i)b = \sum y_i \\ (\sum x_i)a + (\sum x_i^2)b = \sum x_i y_i \end{cases}$$

  3. **计算所需的和**：手动计算 $\sum x_i$, $\sum y_i$, $\sum x_i^2$, $\sum x_i y_i$。
  4. **解线性方程组**：将计算出的和代入正规方程组，解出 a 和 b 的值。
- **注意**：对于更高次的多项式拟合，正规方程组的维度会增加，但原理相同。对于指数、对数等模型，通常先通过变换（如取对数）将其线性化，再使用线性最小二乘法。

第二部分：数值积分

1. 梯形公式 (Trapezoidal Rule)

- **核心思想**：用一条直线连接积分区间的两个端点，计算该直线下方形成的梯形面积，作为积分的近似值。
- **适用场景**：简单、基础的积分估算。
- **关键公式**：
  - **基本梯形公式**：$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]$
  - **复合梯形公式** (将 $[a,b]$ 分为 n 段，步长 $h=\frac{b-a}{n}$):

$$T_n = \frac{h}{2}[f(x_0) + 2f(x_1) + 2f(x_2) + \cdots + 2f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

2. 辛普生公式 (Simpson's Rule)

- **核心思想**：用一条抛物线（二次多项式）来逼近被积函数，计算该抛物线下方的面积作为积分近似值。精度通常远高于梯形公式。
- **适用场景**：需要更高精度的积分估算。
- **关键公式**：
  - **基本辛普生公式** (需要3个点：a, $\frac{a+b}{2}$, b):

$$S = \frac{b-a}{6}[f(a) + 4f(\frac{a+b}{2}) + f(b)]$$

  - **复合辛普生公式** (将 $[a,b]$ 分为 n 段，n必须为**偶数**，步长 $h=\frac{b-a}{n}$):

$$S_n = \frac{h}{3}[f(x_0) + 4f(x_1) + 2f(x_2) + 4f(x_3) + \cdots + 2f(x_{n-2}) + 4f(x_{n-1}) + f(x_n)]$$

    (系数规律：1, 4, 2, 4, ..., 2, 4, 1)

3. 龙贝格方法 (Romberg Integration)

- **核心思想**：这是**Richardson外推法**在**复合梯形公式**上的完美应用。它从一个粗略的梯形积分结果开始，通过一个递推公式，不断消除误差，快速得到高精度的结果。
- **适用场景**：追求高精度积分值的首选方法之一。
- **手算步骤**：
  1. **构造龙贝格表** T。
  2. **计算第一列**：$T(k,0)$ 是使用 2^k 个区间的复合梯形公式的结果。

        - $T(0,0)$: 1个区间 (基本梯形公式)
        - $T(1,0)$: 2个区间
        - $T(2,0)$: 4个区间 ...
        - 有一个递推关系可以简化计算：$T(k,0) = \frac{1}{2}T(k-1,0) + h_k \sum f(\text{新增的中点})$
    3. **计算其他列**：使用Richardson外推公式递推计算表的其余部分。

$$T(k,m) = T(k,m-1) + \frac{T(k,m-1) - T(k-1,m-1)}{4^m - 1}$$

    4. 表中的 $T(k,k)$ 就是 k 阶龙贝格积分值，精度非常高。通常计算到 $|T(k,k) - T(k-1,k-1)|$ 小于给定误差为止。

第三部分：非线性方程求解

1. 二分法 (Bisection Method)

- **核心思想**：不断地将有根区间一分为二，每次都保留包含根的那一半，直到区间足够小。
- **适用场景**：只要能保证初始区间 $[a,b]$ 满足 $f(a)f(b) < 0$，则一定能找到根，非常稳健。
- **手算步骤**：
    1. 找到区间 $[a,b]$ 使得 $f(a)$ 和 $f(b)$ 异号。
    2. 计算中点 $m = (a+b)/2$。
    3. 计算 $f(m)$。
    4. 判断：
        - 若 $f(a)f(m) < 0$，则根在 $[a,m]$ 内，令 $b = m$。
        - 若 $f(b)f(m) < 0$，则根在 $[m,b]$ 内，令 $a = m$。
        - 若 $f(m) = 0$，则 m 就是根，计算结束。
    5. 重复步骤2-4，直到 $|b-a|$ 小于要求的误差。

2. 牛顿法 (Newton's Method)

- **核心思想**：在当前点 x_k 处对函数 $f(x)$ 做切线，切线与x轴的交点作为下一个近似点 x_{k+1}。
- **适用场景**：收敛速度极快（二次收敛），但需要计算导数，且对初始值选取敏感。
- **手算步骤**：

1. 选取一个初始猜测值 x_0。
2. 计算 $f(x_k)$ 和 $f'(x_k)$。
3. 使用迭代公式计算下一个点 x_{k+1}：

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)}$$

4. 重复步骤2-3，直到 $|x_{k+1} - x_k|$ 小于要求的误差。

第四部分：线性方程组求解

1. 高斯消去法 (Gaussian Elimination)

- **核心思想**：通过一系列的行变换，将增广矩阵 $[A|b]$ 变换为一个等价的上三角矩阵，然后通过回代求解。
- **适用场景**：求解中小型稠密线性方程组的基础方法。
- **手算步骤**：
  1. 写出增广矩阵 $[A|b]$。
  2. **消元过程 (化为上三角)**：
     - 从第一列开始，用第一行的倍数去减掉下面各行，使得第一列中除了 a_{11} 外都变为0。
     - 转到第二列，用第二行的倍数去减掉它下面的各行，使得第二列中对角线以下的元素都变为0。
     - ... 重复此过程，直到矩阵变为上三角形式。
  3. **回代过程**：
     - 从上三角矩阵的最后一行开始，直接解出最后一个未知数。
     - 将该未知数的值代入倒数第二行，解出倒数第二个未知数。
     - ... 依次向上回代，直到解出所有未知数。
- **注意**：**列主元法**只是在每一步消元前，先将当前列对角线及其下方的元素中绝对值最大的那个元素所在行与当前行进行交换，以提高数值稳定性。

2. LU分解 (LU Decomposition)

- **核心思想**：将方阵 A 分解为一个下三角矩阵 L 和一个上三角矩阵 U 的乘积，即 $A = LU$。求解 $Ax = b$ 就转变为求解两个简单的三角方程组：$Ly = b$ 和 $Ux = y$。
- **适用场景**：当需要用同一个矩阵 A 和不同的 b 多次求解时非常高效。

- **手算步骤 (以Doolittle分解，L对角线为1为例)**：
  1. **分解** $A = LU$：
     - U 的第一行就是 A 的第一行。
     - L 的第一列是 A 的第一列除以 $U_{0,0}$。
     - 然后逐行/逐列交替计算 U 和 L 的其他元素。公式较为复杂，但有规律可循，核心是 $A_{i,j} = \sum_k L_{i,k}U_{k,j}$。
  2. **求解** $Ly = b$ **(前向代入)**：从 y_1 开始，依次解出 $y_2, y_3, \ldots$。
  3. **求解** $Ux = y$ **(回代)**：从 x_n 开始，依次解出 $x_{n-1}, \ldots$。

第五部分：常微分方程初值问题

1. 欧拉法 (Euler's Method)

- **核心思想**：最简单的数值积分思想。假设在一个小步长 h 内，导数 y' 是常数（等于该步起点的导数值），然后用 $y_{i+1} = y_i + h \cdot y'_i$ 来估算下一步的值。
- **适用场景**：教学、概念理解，实际应用中因精度太低而很少使用。
- **手算步骤**：
  1. 给定 $y' = f(x, y)$, 初值 (x_0, y_0), 步长 h。
  2. 使用迭代公式计算：

$$y_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$$

$$x_{i+1} = x_i + h$$

  3. 重复步骤2，直到达到目标 x 值。

2. 改进欧拉法 (Heun's Method / Predictor-Corrector)

- **核心思想**：通过“预测-校正”来提高精度。先用欧拉法预测一个初步值，然后用这个初步值和初始值的斜率的平均值来校正，得到最终值。
- **适用场景**：比欧拉法精确得多，是二阶龙格-库塔法的一种。
- **手算步骤**：
  1. 给定 $y' = f(x, y)$, 初值 (x_0, y_0), 步长 h。
  2. **预测 (Predictor)**：计算一个临时的 y 值。

$$y^*_{i+1} = y_i + h \cdot f(x_i, y_i)$$

  3. **校正 (Corrector)**：使用初始点和预测点的斜率平均值来计算最终的 y 值。

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{2}[f(x_i, y_i) + f(x_{i+1}, y_{i+1}^*)]$$

4. 重复步骤2-3。

3. 四阶经典龙格-库塔法 (RK4)

- **核心思想**：通过在区间内巧妙地选取四个点并计算它们的斜率，然后对这些斜率进行加权平均，来得到一个精度非常高的 y 增量。
- **适用场景**：应用最广泛、最受欢迎的常微分方程数值解法之一，在精度和计算量之间取得了很好的平衡。
- **手算步骤**：
  1. 给定 $y' = f(x, y)$, 初值 (x_0, y_0), 步长 h。
  2. 在每一步 i，计算四个斜率 k_1, k_2, k_3, k_4：

$$k_1 = f(x_i, y_i)$$

$$k_2 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_1)$$

$$k_3 = f(x_i + \frac{h}{2}, y_i + \frac{h}{2}k_2)$$

$$k_4 = f(x_i + h, y_i + hk_3)$$

  3. 计算最终的 y_{i+1}：

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{6}(k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$$

  4. 重复步骤2-3。

4. Adams预测-校正法

- **核心思想**：利用已经计算出的前面几个点的“历史信息”（y值和$f(x, y)$值）来预测和校正当前点的值。每一步只调用一次 $f(x, y)$，计算效率高。
- **适用场景**：在RK4等单步法完成“启动”后，进行后续的高效、高精度计算。
- **手算步骤 (以四步法为例)**：
  1. **启动**：使用RK4等高精度单步法，计算出 y_0, y_1, y_2, y_3 四个初始值。同时计算并保存对应的 f_0, f_1, f_2, f_3。
  2. **预测 (Adams-Bashforth 4步显式)**：

$$y_{i+1}^* = y_i + \frac{h}{24}[55f_i - 59f_{i-1} + 37f_{i-2} - 9f_{i-3}]$$

3. **校正 (Adams-Moulton 3步隐式)**：

$$y_{i+1} = y_i + \frac{h}{24}[9f(x_{i+1}, y_{i+1}^*) + 19f_i - 5f_{i-1} + f_{i-2}]$$

4. 更新 f 列表，重复步骤2-3。