

数值微分插值及其应用

李海龙

(中国科学院青海盐湖研究所, 西宁, 810008)

摘要 以平面区域内偏微分方程定解问题的离散代数方程组为基础, 给出了由平面区域内任意分布点上的值求整个区域中值的一种新插值方法——数值微分插值, 该方法可直接推广到一维和高维空间的区域中, 有较广的应用背景。

关键词 数值微分插值 数值调和插值 微分方程定解问题 M-阵

1 概念、结果及应用

实际中经常遇到这样的问题: 已知某参数 f 在 N 维空间的某个区域 Ω 中 K 个点上的值, 需据此求 f 在整个区域 Ω 中的值, 有时还知道 f 是 Ω 内某个微分方程定解问题 P 的解。对于这类问题, 当 $N=1$ 时, 已有各种插值方法。对于给定的具体问题从中选择一种较合适的并不难。当 $N=2$ 时, 大多数插值方法要求已知点的分布要呈矩形网格, 也有对已知点的分布不作任何要求的, 如曲面样条函数^[1,2]或^[3]中基于距离权的最小平方法所决定的插值方法, 但都只有有限的应用背景。当 $N \geq 3$ 且已知点分布又不规则时, 就作者所知, 尚无有关插值方法的报道。本文给出的插值方法对空间维数 N 和已知点的分布都无任何限制。只是为了叙述方便简洁起见, 以下我们只讨论 $N=2$ 的情形, 由之所得的结论在 $N=1$ 或 $N \geq 3$ 时仍成立。

定义 1 设 $f(x, y)$ 为平面区域 Ω 上的未知函数, 它在点 $(x_q, y_q) \in \bar{\Omega}$ 上的值 $f_q = f(x_q, y_q)$ 为已知, $q=1, \dots, K$. 又设

$$\sum_{j=1}^n a_{ij} u_j = r_i, \quad i=1, 2, \dots, n. \tag{1}$$

是将某个在区域 Ω 上关于未知函数 u 的偏微分方程的定解问题 P 离散后得到的共有 n 个离散剖分节点的代数方程组, 其第 i 个方程刚好表示第 i 个剖分节点及其周围各节点上未知函数值所满足的关系, u_i 是未知函数 u 在第 i 个剖分节点上的值 ($i=1, 2, \dots, n$), $\vec{u} = (u_1, \dots, u_n)^T$. a_{ij}, r_i 可能与 $\vec{u}$ 有关, 这要看定解问题 P 是否是线性的。假设 (x_q, y_q) 刚好是第 i_q 个离散剖分节点 ($q=1, \dots, K$), 分别用等式

$$u_{i_q} = f_q, \quad q=1, \dots, K. \tag{2}$$

来代替方程组(1)中的第 $j_1, j_2, \dots, j_K$ 个方程后, 得到新方程组

$$\begin{cases} \sum_{j=1}^n a_{ij} u_j = r_i, & i \in \{1, \dots, n\} \setminus \{j_1, \dots, j_K\}, \\ u_{i_q} = f_q, & q \in \{1, 2, \dots, K\}. \end{cases} \tag{3}$$

设方程组(3)存在唯一解 $\vec{u}^* = (u_1^*, u_2^*, \dots, u_n^*)'$, 则我们称 $\vec{u}^*$ 是未知函数 f 就已知值 $f_q = f(x_q, y_q)$ ($q=1, \dots, K$) 关于偏微分方程的定解问题 P 的一个数值微分插值。

定义 1 中的定解问题 P 只要有解存在, 对之无其它限制, 它可以是任何线性或非线性微分方程的定解问题。这将使数值微分插值的概念具有较广泛的意义。自然会问

1. 方程组(1)存在唯一解时方程组(3)是否存在唯一解
2. 假设 P 适定, f 又是 P 的解, 则 P 的数值解(即方程组(1)的解)与相应的数值微分插值结果(即方程组(3)的解)有何关系。

由于定解问题 P 的广泛性, 要对上述问题作出统一的回答是很难的。在一些有实际应用背景的假设条件下, 下面的定理 1 和定理 2 回答了上述问题。

定理 1 当方程组(1)的系数阵是对角占优的 M -阵^[4]时, 方程组(3)必存在唯一解。
由^[4, 5, 6, 7]易知, 二阶椭圆和抛物问题的离散方程组的系数矩阵一般都是对角占优的 M -阵, 因此定理 1 具有一定的应用背景。

定理 2 设定解问题 P 适定, f 是定解问题 P 的解, 其数值解在最大剖分步长 $S_{\max} \rightarrow 0$ 时按 L^∞ 模收敛到 f 。又假设当 $S_{\max} \rightarrow 0$ 时, (3)的系数阵 B 的逆阵存在且有界。则当 $S_{\max} \rightarrow 0$ 时, (1)的解和(3)的解趋于相等。

在定理 2 中, B^{-1} 有界这一条件难于直接验证。但当(1)的系数阵 A 是对角占优的 M -阵时, 由后面的引理 1 易知(3)系数阵 B 也是对角占优的 M -阵, 且有

$$\|B^{-1}\|_\infty \leq \max\{1, \|A^{-1}\|_\infty\} \tag{4}$$

而对于椭圆和抛物型偏微分方程的定解问题的离散化方程组来说, A^{-1} 的有界性蕴含于剖分的正则性、定解问题 P 本身的适定性及其数值解的收敛性之中, 因此定理 2 至少有与定理 1 一样广泛的应用背景。这里剖分的正则性是指当 $S_{\max} \rightarrow 0$ 时, 每次剖分的最大和最小步长之比有上界。

定义 2 当定义 1 中的定解问题 P 是调和方程第二边值问题^[5]时, 我们把未知函数 f 就已知值 $f_q = f(x_q, y_q)$ ($q=1, \dots, K$) 关于 P 的数值微分插值称为 f 就已知值 $f_q = f(x_q, y_q)$ ($q=1, \dots, K$) 的一个数值调和插值。

关于数值调和插值, 我们有如下的
定理 3 设定解问题 P 是调和方程第二边值问题, Ω 为连通区域, 则方程组(1)的全体解为 $C(1, \dots, 1)'$ (C 为任意实数), 而(3)存在唯一解 $\vec{u}^* = (u_1^*, \dots, u_n^*)'$ 满足

$$m \leq u_i^* \leq M, \quad i=1, 2, \dots, n. \tag{5}$$

这里 $M \triangleq \max\{f_1, \dots, f_K\}$, $m \triangleq \min\{f_1, \dots, f_K\}$ 。
又设对 P 的离散方法用的是三角形线性插值有限元法^[5], 定义函数类 $W \triangleq \{u : U \text{ 是 } \bar{\Omega} \text{ 上的连续函数, 在每个三角形剖分单元上是 } (x, y) \text{ 的线性函数, } U(x_q, y_q) = f_q, q=1, \dots, K\}$, $U^* \in W$ 在第 i 个剖分节点上取值为 u_i^* ($i=1, \dots, n$), 则有

$$J(U^*) = \min_{U \in W} J(U), \tag{6}$$

这里
$$J(U) = \sum_T \int_T m \text{grad} U m^2 dx dy, \tag{7}$$

其中 T 为三角形剖分单元, $\sum_T$ 表示对全体三角形剖分单元求和, $\text{grad} U$ 是 U 关于 (x, y) 的梯度, (6)、(7)式说明由 $\vec{u}^*$ 导出的 $\bar{\Omega}$ 上分块线性的连续函数 U^* , 在满足 $U^*(x_q, y_q) = f(x_q, y_q)$ ($q=1, \dots, K$) 的条件下, 表示其函数值变化大小的梯度的 L^2 模在函数类 W 中的最小的。

注 1 上述数值微分插值的结果,当剖分节点总数 n 和已知点总数 K 相差不多时(假设总有 $n \geq K$),就较强烈地依赖于对区域 $\bar{\Omega}$ 的离散剖分方式,而受定解问题 P 的影响较小。特别当 $n=K$ 时,数值微分插值的结果就只取决于 (x_q, y_q) , $f_q (q=1, \dots, K)$ 和对 $\bar{\Omega}$ 的剖分方式,而与定解问题 P 毫无关系。因此,若要使数值微分插值的结果受到定解问题 P 的足够影响,须使剖分节点总数 n 比已知点总数 K 大的多,让 K 个已知点“淹没”在众多的剖分节点中才行。

注 2 当剖分步长的最大值 $S_{\max} \rightarrow 0$ 时,上述数值微分插值方程组(3)所对应的形式上的极限定解问题 P^* 是有别于原定解问题 P 的,且 P^* 在一般情况下都不适定。例如设 P 是区域 Ω 上的调和方程第一边值问题

$$\begin{cases} \Delta f=0, (x, y) \in \Omega, \\ \partial \Omega: f=\varphi \end{cases} \tag{8}$$

并假设 $\partial \Omega$ 和 φ 满足一定条件下使(8)存在唯一解,则 P^* 为

$$\begin{cases} \Delta f=0, (x, y) \in \Omega, \setminus \{(x_q, y_q): q=1, \dots, K\}; \\ \partial \Omega: f=\varphi; f(x_q, y_q)=f_q, q=1, \dots, K. \end{cases} \tag{9}$$

假设(9)存在解 f ,则由奇点可去定理^[5]易知 f 在 (x_q, y_q) 的邻域中调和($q=1, \dots, K$),从而知 f 满足(8),但(8)的解存在唯一,设为 $\tilde{f}$,则由(9)式知有

$$\tilde{f}(x_q, y_q)=f_q, q=1, \dots, K. \tag{10}$$

这说明若(10)至少对某一个 $q (1 \leq q \leq K)$ 不成立,则定解问题(9)就没有解。

因此,由方程组(3)给出的插值结果,是基于微分方程数值解的插值,故称之为数值微分插值。虽然它所对应的形式上的极限问题不一定适定,但是数值微分插值本身却在数值近似计算中有着广泛的实际应用背景。

用途之一:用于微分方程反问题的数值求解。设 f 是定解问题 P 的解, f 在区域 $\bar{\Omega}$ 内某些点 (x_q, y_q) 上的值 $f_q (q=1, \dots, K)$ 已知。定解问题 P 中有未知的分布参数 $\lambda(x, y)$ 需要确定。对试取的分布参数,可求出相应的定解问题 P 的数值解 S 和 f 就已知值 $f_q (q=1, \dots, K)$ 关于定解问题 P 的数值微分插值 S^* 。然后通过比较 S 和 S^* ,可以判断 λ 的试取值是否合理。若 S 和 S^* 相差很小,则说明 λ 取值已合理。否则,对 λ 还须作进一步调整,直至 S 和 S^* 相差很小为止。定理 1 和定理 2 说明对一般二阶椭圆和抛物问题的逆问题可用这种方法。

用途之二:当某参数 f 在区域 $\bar{\Omega}$ 内某些点上的值已知,但对 f 的变化规律知之甚少时,可利用数值调和插值来估计 f 在整个 $\bar{\Omega}$ 中的值。这种估计虽较粗略,但定理 3 说明它在某种意义下还是合理的。这是因为当对参数 f 的变化规律知之甚少时,对利用若干离散点上的已知值求整个区域 $\bar{\Omega}$ 中值的插值方法,一般都要求

- i) 值域不变。即插值结果应在 m 和 M 之间, m 和 M 如定理 3 所述。
- ii) 插值结果在满足已知点处的插值值就是已知值的条件下,其变化尽量平缓。而定理 3 说明数值调和插值正好具有上述两条性质。

在对盐湖地下卤水动态规律的数值模拟(主要是根据地下卤水水位的长观资料反求或修正含有卤水的盐层的水文地质参数)过程中,我们综合运用上述两种数值微分插值方法,较方便准确地反求和修正了近 100km² 内的盐滩区域中 312 个剖分节点上盐层的渗透系数,为该地区地下卤水水量的中远期预测评估获取了重要数据。^①

① 中科院青海盐湖研究所,对察尔汗盐湖首采区地下晶间卤水动态变化规律的数学模拟研究报告,第一部分,数学模型及水文地质参数的确定,内部资料,1994。

2 定理的证明

引理 1 设实阵 $E=(e_{ij})_{n \times n}$ 是 n 阶对角占优的 M -阵。 $E(i_1, \cdots, i_k)$ 是由 E 的第 $i_1, \cdots, i_k$ 行和第 $i_1, \cdots, i_k$ 列的交叉点上的元素构成的 K 阶主子阵, $1 \leq i_1 < i_2 < \cdots < i_k \leq n$. 则 $E(i_1, \cdots, i_k)$ 也是对角占优的 M -阵, 且有

$$\| [E(i_1, \cdots, i_k)]^{-1} \|_{\infty} \leq \| E^{-1} \|_{\infty}.$$
 (11)

证 显然, $E(i_1, \cdots, i_k)$ 是对角占优阵。 下证它是 M -阵, 作 n 阶矩阵 G , 其 (i, j) 元素 g_{ij} 为

$$g_{ij} = \begin{cases} e_{ij}, & \text{当 } i=j \text{ 或 } i, j \in \{i_1, i_2, \cdots, i_k\}, \\ 0, & \text{其余,} \end{cases}$$
 (12)

则易见 G 是 M -阵当且仅当 $E(i_1, \cdots, i_k)$ 是 M -阵。 下证 G 是 M -阵。 记 D 是由 E 的对角元构成的对角阵, $E^* = I - D^{-1}E, G^* = I - D^{-1}G, e_{ij}^*$ 和 g_{ij}^* 分别为 E^* 和 G^* 的 (i, j) 元素 $(i, j=1, 2, \cdots, n)$ 。 因 E 是 M -阵, 由^[4]的 6. 2. 11 知有 $\rho(E^*) < 1$, 这里 $\rho(E^*)$ 表示 E^* 的谱半径。 由 E 是 M -阵以及(12)式易见有

$$\begin{cases} g_{ij}^* \geq 0, e_{ij}^* \geq 0, \\ g_{ij}^* \leq e_{ij}^* \end{cases} \quad i, j=1, \cdots, n.$$
 (13)

由(13)和^[4]的 6. 2. 12 知有 $\rho(G^*) \leq \rho(E^*)$. 从而 $\rho(G^*) < 1$, 再由^[4]的 6. 2. 11 即知 G 是 M -阵。

利用 Neumann 引理^[4, P. 21] 易知有

$$G^{-1} = D^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} G^*{}^k, \quad E^{-1} = D^{-1} \sum_{k=0}^{\infty} E^*{}^k$$
 (14)

由(13)、(14)式以及 $\| [E(i_1, \cdots, i_k)]^{-1} \|_{\infty} \leq \| G^{-1} \|_{\infty}$ 即可知(11)式。

定理 1 的证明: 因(3)的系数阵的行列式等于(1)的系数阵的某个主子阵的行列式, 故由引理 1 知(3)的系数阵非异, 从而(3)存在唯一解。

定理 2 的证明: 只须简单验证即可。

定理 3 的证明: 设方程组(1)的连通区域 Ω 上调和方程第二边值问题的离散化方程组, 则显然有

$$r_i = 0, \quad (i=1, \cdots, n).$$
 (15)

又无妨设 $a_{ii} \geq 0 (i=1, \cdots, n)$. 则应成立

$$\begin{cases} \sum_{i=1}^n a_{ij} = 0, \quad j=1, \cdots, n. \\ a_{ii} > 0, \quad a_{ij} \leq 0 (i \neq j), i, j=1, \cdots, n. \end{cases}$$
 (16)

否则所用的离散化方法被认为是不合理的^[5, 6, 7]。 由 Ω 的连通性易知(1)的系数阵 A 不可约。 由(15)、(16)知 $\vec{u} = C(1, \cdots, 1)'$ 是(1)的解(这与任一常数 C 是原定解问题的解这一事实相符)。 注意到 A 的任一 $n-1$ 阶主子阵不可约、对角占优、且只少有一行严格对角占优, 故其 $n-1$ 阶主子阵是 M -阵^[4, 6. 2. 17], 因此 A 的秩为 $n-1$, 从而 $C(1, \cdots, 1)' (C \text{ 为任意实数})$ 是(1)的全体解。 由于(3)的系数阵 B 的行列式等于 A 的某个阶数不超过 $n-1$ 的主子阵的行列式, 故由 A 的 $n-1$ 阶主子阵是 M -阵和引理 1 易知 B 也是 M -阵, 故(3)存在唯一解 $\vec{u}^*$, 且 B^{-1} 的元素非负。 另一方面由(3)、(15)、(16)知向量 $\vec{a} \triangleq B(M(1, \cdots, 1)' - \vec{u}^*)$ 的第 i 个分量 $(i=1, \cdots, n)$ 当 i 为某个 $j_q (q=1, \cdots, K)$ 时为 $M - f_{j_q} \geq 0$, 当 i 为其它值时均为 0, 即 $\vec{x}$ 的各分量非负。 因此向量 $M(1, \cdots, 1)' - \vec{u}^* = B^{-1}\vec{a}$ 的各分量也非负, 即有 $u_i^* \leq M, i=1, \cdots, n$. 同理可证 $u_i^* \geq m, i=1, \cdots, n$. 故(5)成立。

当(1)是将调和方程第二边值问题用 Ritz 有限元法离散后得到的方程组时,由熟知的变分原理^[5]以及(3)知(6)、(7)式成立。又因在所设定的有限元素之下,用其它离散方法(如 Galerkin 法或元体平衡法等)所得到的离散方程组都与 Ritz 法的等效^[5],故(6)、(7)式成立。

参 考 文 献

- [1]上海计算技术研究所,电子计算机算法手册,上海教育出版社,1982.
- [2]Harder, R. L. and Desmarais, R. N. , J. Aircraft, 1972, 9(2)
- [3]McLain D. H. , Comp. J. , 1974, 17, 318~324.
- [4]J. M. Ortega 著,张丽君等译,数值分析,高等教育出版社,1983.
- [5]谷超豪、李大潜等,数学物理方程,上海科学技术出版社,1987.
- [6]Patarkar, S. V. 著,张政译,传热与流体流动的数值计算,科学出版社,1984.
- [7]南京大学数学系数学专业编,偏微分方程数值解法,科学出版社,1979.

Numerical Differential Interpolation and Its Application

Li Hai—long

(Qinghai Institute of Salt Lakes, Academia Sinica, Xining, 810008)

Abstract

On the basis of algebraic equations of discretized solution—determination problem of partial differential equations in bounded plane domain, a new interpolation method—numerical differential interpolation (NDI) is described. Using unknown function's values on arbitrarily distributed points in bounded plane domain, NDI can be used to calculate values on any points in the domain. It is also suitable for bounded domains in 1—dimension or higher dimension space, and has wide backgrounds of applications.

Keywords: Numerical differential interpolation, Numerical harmonic interpolation, Solution—determination problem of differential equations, M —Matrix.