Numerical Analysis

Zhiping Li

LMAM and School of Mathematical Sciences
Peking University

有理逼近的必要性

在有些情况下，多项式（或分段多项式）插值不是一个好的选择。例如，若函数 $f(x)$ 有以下性质：

- $\lim_{x\to a-0} f(x) = +\infty$;
- $\lim_{x\to +\infty} f(x) = A$ 为有限正常数,

任何多项式（或分段多项式）都不可能具有以上两条性质。

而有理函数, 例如 $\dfrac{Ax+B}{x-a}$, 却可以轻松具有这两条性质。

有理逼近的必要性

有些情况下，函数有收敛的幂级数，但其有理逼近却收敛得更快. 例如,

$$\ln(1+x)=\sum_{k=1}^{\infty}(-1)^{k+1}\frac{x^k}{k},\quad \forall x\in(-1,1],$$

收敛很慢, 要保证误差一致 $\leq 10^{-4}$, 必须取至少一万项求和，而用连分式展开(一种有理展开方法)

$$\ln(1+x)=\cfrac{x}{1+\cfrac{1\cdot x}{2+\cfrac{1\cdot x}{3+\cfrac{2^2\cdot x}{4+\cfrac{2^2\cdot x}{5+\cdots}}}}},$$

则只需展开至第四层。

有理分式函数空间

定义有理分式 $R_{m,n}(x) = \dfrac{P_m(x)}{Q_n(x)}$, 其中 $P_m(x) \in \mathbb{P}_m$, $Q_n(x) \in \mathbb{P}_n$, 且 $P(x)$ 和 $Q(x)$ 互质, 将所有这样的有理分式函数的集合记为 $\mathbb{R}(m,n)$. 不难证明 $R_{m,n}(x)$ 有 $m+n+1$ 个自由度。

注 1： $\mathbb{P}_m$ 和 $\mathbb{P}_n$ 各有 $m+1$ 和$n+1$ 个自由度. 由 $\forall a \neq 0$, 有 $a \cdot P_m(x)/a \cdot Q_n(x) = P_m(x)/Q_n(x)$. 因此, $R_{m,n}(x)$ 自由度个数不超过 $m+n+1$.

注 2： 对任意取定的 $P_m \in \mathbb{P}_m$, 取$Q_n(x) \in \mathbb{P}_n$, $P_m(x)$ 和 $Q_n(x)$ 互质的条件要求 $Q_n(z)$ 在复平面中的零点不能落在 $P_m(z)$ 的零点上. 而这并没有减少 $Q_n(x)$ 的自由度, 只是限定了参数取值的范围. 因此, $R_{m,n}(x)$ 的自由度个数是 $m+n+1$.

有理插值的定义和有理插值问题的提法

定义： 给定 $m+n+1$ 组数据 $(x_i, f(x_i))$, $i=0,1,\cdots,m+n$, 若存在 $R_{m,n}(x)\in\mathbb{R}(m,n)$ 使得

$$R_{m,n}(x_i)=f(x_i),\quad i=0,1,\cdots,m+n,$$

则称 $R_{m,n}(x)$ 为所给数据组 $(x_i, f(x_i))$, $i=0,1,\cdots,m+n$ 的有理插值。

有理插值问题： 给定数据组 $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0}^{m+n}$, 在 $\mathbb{R}(m,n)$ 中找有理分式 $R_{m,n}(x)=\dfrac{P_m(x)}{Q_n(x)}$, 使得 $R_{m,n}(x_i)=f(x_i)$, $0\le i\le m+n$.

注： $R_{m,n}(x)$ 不是一个线性空间, 因此也不可能有基底函数.

有理插值问题解的存在唯一性

- 不难证明, 在 P_m 和 Q_n 互质的条件下, 如果有理插值问题的解存在，则必唯一 (因为 $P_m(x_i)\hat{Q}_n(x_i) = \hat{P}_m(x_i)Q_n(x_i)$, $0 \le i \le m+n$, $\Rightarrow P_m(x)\hat{Q}_n(x) \equiv \hat{P}_m(x)Q_n(x)$).
- 由于 $m+n$ 也可分解为 $(m \pm j) + (n \mp j)$, 所以由以上结论并不能证明不存在其它的有理插值.
- 考虑数据组 $(0,0)$, $(1,0)$, $(2,1)$ 在 $\mathbb{R}(1,1)$ 中的有理插值。设 $R_{1,1}(x) = \dfrac{a_1x + a_0}{b_1x + b_0}$. 则由 $R_{1,1}(0) = 0$ 得 $a_0 = 0$. 又由 $R_{1,1}(1) = 0$ 得 $a_1 = 0$. 于是，$R_{1,1}(x) \equiv 0$, 原问题无解。

有理插值问题解的存在唯一性

- 尽管如此, 在数据组满足一定条件时, 解是存在的. 例如，上例中将 $(1,0)$ 换为 $(1,t)$, $t \notin \{0,1\}$ 后, 由 $R_{1,1}(0)=0$ 得 $a_0=0$; 又由 $R_{1,1}(1)=t$ 和 $R_{1,1}(2)=1$ 分别得系数满足方程 $a_1=tb_1+tb_0$ 和 $a_1=b_1+\frac{1}{2}b_0$, 由此得 $b_1=\frac{\frac{1}{2}-t}{t-1}b_0$. 取 $b_0=1$, 得 $b_1=\frac{2t-1}{2(1-t)}$, $a_1=\frac{t}{2(1-t)}$. 于是得问题的唯一解 $R_{1,1}(x)=\frac{tx}{(2t-1)x+2(1-t)}$.

- 另外，若将 $\mathbb{R}(1,1)$ 换为 $\mathbb{R}(2,0)$ 后也存在唯一解(此时, 问题转化为多项式插值问题)。

注： 以上例子表明, 有理插值函数的存在性要求数据组满足一定的相容性条件, 一般地说, 不同的 $\mathbb{R}(m,n)$, 相容性条件也不同.

k 阶反差商

定义： 对任意(无重点)点集 $S=\{x_0,x_1,\cdots,\}$ 及函数 $f(x)$, 令

$$\begin{cases} v_0(x)=f(x), \\ v_k(x)=\dfrac{x-x_{k-1}}{v_{k-1}(x)-v_{k-1}(x_{k-1})}, \quad k=1,2,\cdots, \end{cases}$$

当 $v_k(x)$ **有定义时，** 称 $v_k(x)$ 为 $f(x)$ 在 S 上的 k 阶反差商.

- 当 $f(x)$ 在 S 上的 $0\le k\le n+1$ 阶反差商 $v_k(x)$ 都有定义时（此时必有 $v_k(x_k)\neq 0$），由定义我们有

$$v_0(x)=v_0(x_0)+\frac{x-x_0}{v_1(x)}=v_0(x_0)+\cfrac{x-x_0}{v_1(x_1)+\cfrac{x-x_1}{v_2(x)}}$$

....

函数的一种连分式表示和连分式逼近方法

归纳地有

$$v_0(x) = v_0(x_0) + \cfrac{x - x_0}{v_1(x_1) + \cfrac{x - x_1}{v_2(x_2) + \cfrac{\cdots}{\cdots + \cfrac{x - x_{n-1}}{v_n(x_n) + \cfrac{x - x_n}{v_{n+1}(x)}}}}}$$

令

$$R_n(x) = v_0(x_0) + \cfrac{x - x_0}{v_1(x_1) + \cfrac{x - x_1}{v_2(x_2) + \cfrac{\cdots}{\cdots + \cfrac{x - x_{n-1}}{v_n(x_n)}}}}$$

注： 当 $v_k(x_k)$, $0 \le k \le n$ 都有定义时, $R_n(x)$ 对 $\forall x$ 有定义.

由反差商连分式方法构造的有理插值问题的解

则由连分式表达式直接得

$$R_n(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, 2, \cdots, n.$$

由连分式表达式和 $R_n(x)$ 的定义有

$$R_1(x) = v_0(x_0) + \frac{x - x_0}{v_1(x_1)} = \frac{x + (v_1(x_1)v_0(x_0) - x_0)}{v_1(x_1)} \in \mathbb{R}(1, 0);$$

$$R_2(x) = v_0(x_0) + \cfrac{x - x_0}{v_1(x_1) + \cfrac{x - x_1}{v_2(x_2)}} \in \mathbb{R}(1, 1);$$

一般地，归纳地可得，当 $n = 2m$ 时，$R_n(x) \in \mathbb{R}(m, m)$，而当 $n = 2m + 1$ 时，$R_n(x) \in \mathbb{R}(m + 1, m)$.

反差商表

应用反差商连分式方法构造有理插值的关键在于计算各阶反差商。这可通过建立反差商表来完成。

x_i	$f(x)$	$v_0(x)$	$v_1(x)$	$v_2(x)$	$v_3(x)$	$\cdots$	$v_n(x)$
x_0	f_0	$v_0(x_0)$					
x_1	f_1	$v_0(x_1)$	$v_1(x_1)$				
x_2	f_2	$v_0(x_2)$	$v_1(x_2)$	$v_2(x_2)$			
x_3	f_3	$v_0(x_3)$	$v_1(x_3)$	$v_2(x_3)$	$v_3(x_3)$		
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	
x_n	f_n	$v_0(x_n)$	$v_1(x_n)$	$v_2(x_n)$	$v_3(x_n)$	$\cdots$	$v_n(x_n)$

其中 $v_0(x_j) = f_j = f(x_j), j = 0, 1, \cdots, n,$

$v_k(x_j) = \frac{x_j - x_{k-1}}{v_{k-1}(x_j) - v_{k-1}(x_{k-1})}, \ 1 \le k \le j \le n,$

条件: $v_m(x_j) \ne v_m(x_m), \ 0 \le m < j \le n.$

函数的一种混合连分式逼近方法

设(对 $0 \le k \le n-1$)由函数 $f(x)$ 可成功地定义

$$\hat{R}_k(x) = v_0(x_0) + \cfrac{x - x_0}{v_1(x_1) + \cfrac{x - x_1}{v_2(x_2) + \cfrac{\cdots}{\cdots + \cfrac{x - x_{k-1}}{v_k(x_k) + \cfrac{x - x_k}{v_{k+1}(x)}}}}}$$

即当 $0 \le l \le k \le n-1$ 时，有$v_l(x_i) \neq v_l(x_l), \forall l+1 \le i \le n.$ 则有

$$\hat{R}_k(x_i) = f(x_i), \quad i = 0, 1, \cdots, n.$$

函数的一种混合连分式逼近方法

注意，若将 $v_{k+1}(x)$ 换成一个过 $\{(x_i, v_{k+1}(x_i))\}_{i=k+1}^{n}$ 的多项式 $g_{n-k-1}(x) \in \mathbb{P}_{n-k-1}$，定义有理函数

$$R_{k,n}(x) = v_0(x_0) + \cfrac{x - x_0}{v_1(x_1) + \cfrac{x - x_1}{v_2(x_2) + \cfrac{\cdots}{\cdots + \cfrac{x - x_{k-1}}{v_k(x_k) + \cfrac{x - x_k}{g_{n-k-1}(x)}}}}}$$

则也必然有 $R_{k,n}(x_i) = f(x_i)$, $i = 0, 1, 2, \cdots, n$.

函数的一种混合连分式逼近方法

因此，当 $v_{k+1}(x)$ 不满足条件 $v_{k+1}(x_j) \neq v_{k+1}(x_{k+1})$, $\forall k+1 < j \leq n$, 时，可用 $R_{k,n}(x)$ 作为 $f(x)$ 的有理插值函数。

给定 $n \geq 2$, 由定义, 当 $k = 0$ 时, 有 $R_{0,n}(x) \in \mathbb{R}(n-1, n-1)$;

当 $k = 1$ 时, 有 $R_{1,n}(x) \in \mathbb{R}(n-1, n-2)$;

归纳可得: 对 $k \leq n-2$,

当 $k = 2m$ 时, 有 $R_{2m,n}(x) \in \mathbb{R}(n-m-1, n-m-1)$;

当 $k = 2m+1$ 时, 有 $R_{2m+1,n}(x) \in \mathbb{R}(n-m-1, n-m-2)$.

由此可见，不能完全满足连分式插值条件的数据组，仍可以用阶数更高的有理函数实现插值.

另一种有理插值问题的提法

有理插值问题： 给定数据组 $\{(x_i, f(x_i))\}_{i=0}^{N}$, 找满足 $m+n=N$ 的非负整数 m, n, 和 $\mathbb{R}(m,n)$ 中的有理分式 $R_{m,n}(x)=\dfrac{P_m(x)}{Q_n(x)}$, 使得 $R_{m,n}(x_i)=f(x_i)$, $0\le i\le N$.

注 1： 以上分析表明，上述问题的解总是存在的，但问题的解一般不具唯一性.

注 2： 当可以算出 $v_n(x_n)$ 的反差商表时, 上述问题的解总可以通过连分式方法求解.

注 3： 当可以算出 $\{v_k(x_l)\}_{l=k}^{n}$, $0\le k\le n-2$ 的反差商表时, 则总可通过混合连分式方法求解在更高阶的有理函数空间中求解.

分段有理插值与有理样条插值

注 1： 如例表明，并非任给的数据组都可产生有意义的反差商表。有些情况下，可通过调整节点顺序和放松有理函数类型的方法提高有理插值的可行性。

注 2： 与多项式插值类似地，在实际应用中，可采用分段有理插值与有理样条插值，以增强有理插值的可行性、稳定性、逼近性，以及保持某些整体或局部的几何性质。

注 3： 与多项式逼近类似地，在实际应用中，也可采用非插值型的有理逼近。

函数的 Padé 逼近式

对具有幂级数形式的函数，常常可以通过构造适当的有理逼近得到收敛更快的近似计算公式。函数的 Padé 逼近式是一种构造此类函数有理逼近的方法。

定义： 设 $f(x)$ 为由以下形式的幂级数定义的函数：

$$f(x) = \sum_{j=0}^{\infty} a_j x^j.$$

如果存在有理分式函数 $P_L(x)/Q_M(x) \in \mathbb{R}(L, M)$, 其中 $P_L(x)$ 与 $Q_M(x)$ 互质，且 $Q_M(0) = 1$, 满足

$$f(x) - \frac{P_L(x)}{Q_M(x)} = O(x^{L+M+1}),$$

则称 $P_L(x)/Q_M(x)$ 为 $f(x)$ 在 $\mathbb{R}(L, M)$ 中的 *Padé* 逼近式，记为 $[L/M]_f(x)$.

求函数的 Padé 逼近式的方法

由定义，我们可以通过比较 $x^j, j = 0, 1, \cdots, L+M$ 项的系数来求函数的 Padé 逼近式。记

$$P_L(x) = p_0 + p_1 x + p_2 x^2 + \cdots + p_L x^L,$$

$$Q_M(x) = q_0 + q_1 x + q_2 x^2 + \cdots + q_M L x^M,$$

则有(记 $a_k = 0, \forall k \le 0$):

$$\begin{pmatrix} p_0 \\ p_1 \\ p_2 \\ \vdots \\ p_L \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_1 & a_0 & 0 & \cdots & 0 \\ a_2 & a_1 & a_0 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_L & a_{L-1} & a_{L-2} & \cdots & a_{L-M} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_M \end{pmatrix},$$

求函数的 Padé 逼近式的方法

以及

$$\begin{pmatrix} a_{L+1} & a_L & a_{L-1} & \cdots & a_{L-M+1} \\ a_{L+2} & a_{L+1} & a_L & \cdots & a_{L-M+2} \\ a_{L+3} & a_{L+2} & a_{L+1} & \cdots & a_{L-M+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{L+M} & a_{L+M-1} & a_{L+M-2} & \cdots & a_L \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_0 \\ q_1 \\ q_2 \\ \vdots \\ q_M \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}$$

注意 $q_0 = 1$ 已知。上式可改写成线性方程组

$$\begin{pmatrix} a_{L-M+1} & a_{L-M+2} & a_{L-M+3} & \cdots & a_L \\ a_{L-M+2} & a_{L-M+3} & a_{L-M+4} & \cdots & a_{L+1} \\ a_{L-M+3} & a_{L-M+4} & a_{L-M+5} & \cdots & a_{L+2} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_L & a_{L+1} & a_{L+2} & \cdots & a_{L+M-1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} q_M \\ q_{M-1} \\ q_{M-2} \\ \vdots \\ q_1 \end{pmatrix} = - \begin{pmatrix} a_{L+1} \\ a_{L+2} \\ a_{L+3} \\ \vdots \\ a_{L+M} \end{pmatrix}.$$

求函数的 Padé 逼近式的方法

记以上线性方程组系数矩阵的行列式为 $C_{L,M} = C(L/M)$. 则当 $C_{L,M} = C(L/M) \neq 0$ 时, 由 Cramer 法则有

$$C_{L,M} \cdot Q_M(x) = \det \begin{bmatrix} a_{L-M+1} & a_{L-M+2} & a_{L-M+3} & \cdots & a_L & a_{L+1} \\ a_{L-M+2} & a_{L-M+3} & a_{L-M+4} & \cdots & a_{L+1} & a_{L+2} \\ a_{L-M+3} & a_{L-M+4} & a_{L-M+5} & \cdots & a_{L+2} & a_{L+3} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_L & a_{L+1} & a_{L+2} & \cdots & a_{L+M-1} & a_{L+M} \\ x^M & x^{M-1} & x^{M-2} & \cdots & x & 1 \end{bmatrix}.$$

由此得 $Q_M(x)$, 将其系数 $(q_1, q_2, \cdots, q_M)$ 代入 $\vec{p}$ 与 $\vec{q}$ 的关系式, 既得

求函数的 Padé 逼近式的方法

$$P_L(x) = \begin{pmatrix} \sum_{i=0}^{L} a_i x^i & \sum_{i=1}^{L} a_{i-1} x^i & \cdots & \sum_{i=M}^{L} a_{i-M} x^i \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ q_1 \\ \vdots \\ q_M \end{pmatrix},$$

或(注意 $(-1)^j q_j$ 等于下式右端 $(M+1)\times(M+1)$ 矩阵中 $\sum_{i=j}^{L} a_{i-j} x^i$ 所对应的代数余子式)

$$C_{L,M} \cdot P_L(x) =$$

$$\det \begin{bmatrix} a_{L-M+1} & a_{L-M+2} & \cdots & a_L & a_{L+1} \\ a_{L-M+2} & a_{L-M+3} & \cdots & a_{L+1} & a_{L+2} \\ a_{L-M+3} & a_{L-M+4} & \cdots & a_{L+2} & a_{L+3} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_L & a_{L+1} & \cdots & a_{L+M-1} & a_{L+M} \\ \sum\limits_{i=M}^{L} a_{i-M} x^i & \sum_{i=M-1}^{L} a_{i-M+1} x^i & \cdots & \sum_{i=1}^{L} a_{i-1} x^i & \sum_{i=0}^{L} a_i x^i \end{bmatrix}.$$

求函数的 Padé 逼近式的方法

容易验证，当 $C_{L,M} = C(L/M) \neq 0$ 时，由以上公式定义的 $P_L(x)$, $Q_M(x)$ 满足 $Q_M(0) = 1$, 且有

$$Q_M(x)\sum_{i=0}^{\infty} a_i x^i - P_L(x) = O(x^{L+M+1}).$$

定理： 设 $P_L(x)$, $Q_M(x)$ 由以上公式定义. 则当 $C_{L,M} = C(L/M) \neq 0$ 时，$f(x)$ 的形式幂级数的 *Padé* 逼近式可表示为

$$[L/M]_f(x) = P_L(x)/Q_M(x).$$

求函数的 Padé 逼近式的方法

以上给出了当 $C_{L,M} = C(L/M) \neq 0$ 时, $f(x)$ 的形式幂级数的 Padé 逼近式的公式。但由于这些公式要计算矩阵的行列式，这通常意味着巨大的工作量以及数值不稳定性。因此实际求 Padé 逼近式时并不用这些公式。

最简单实用的方法是通过求解线性代数方程组得到 $Q_M(x)$ 的系数。另外，还有一些基于递推关系式的算法。

函数的 Padé 逼近式序列的收敛性问题十分复杂，它不仅依赖于 $f(z)$ 的特性，还与序列 (L, M 序列）的取法有关。

习题二：17，19，20

Thank You!