《数值分析》之

数值微分和数值积分

徐岩

中国科学技术大学数学系

yxu@ustc.edu.cn

http://staff.ustc.edu.cn/~yxu/

- 线性空间上的一个线性泛函是指由线性空间到数域(一般为$\mathbb{R}$)的一个线性映射
- 若线性空间为$C[a,b]$, 常用的两种线性泛函为
  1. 定积分泛函:
  $$\varphi(f)=\int_a^b f(x)dx$$
  2. 在数值计算中最基本的泛函是如下的点赋值泛函：取定$x\in[a,b]$,
  $$\hat{x}(f)=f(x)$$
  定义了线性泛函$\hat{x}$. 利用点泛函的线性组合，得到
  $$\psi=\sum_{i=0}^n c_i\hat{x}_i,\qquad \text{即}\psi(f)=\sum_{i=0}^n c_i f(x_i)$$
- 点泛函的线性组合是数值计算中可直接计算泛函中最一般的类型，其它泛函要用这样的ψ进行逼近

逼近泛函

- 1940年到1970年间，Arthur Sard发展了逼近泛函的相关理论，而且最终与自然样条有着有趣的联系
- 被逼近泛函的定义如下：

$$\varphi(f) = \sum_{i=0}^{N} \left\{ \int_a^b \alpha_i(x) f^{(i)}(x) dx + \sum_{j=1}^{n} \beta_{ij} f^{(i)}(z_{ij}) \right\}$$

其中$z_{ij} \in [a, b]$, $\alpha_i(x)$在$[a, b]$上分段连续, $f \in C^N[a, b]$

Peano核

- 上页定义的线性泛函的m阶Peano核是如下函数：

$$K_m(t) = \frac{1}{m!}\varphi_x[(x-t)_+^m]$$

其中$m \geqslant N$, φ_x表示泛函作用到关于x的函数上，x_+^m就是截断幂函数

$$x_+^m = \begin{cases} x^m & x \geqslant 0 \\ 0 & x < 0 \end{cases}$$

- 如果对任意$f \in W$, $\varphi(f) = 0$, 则称泛函φ零化空间W

例

考虑如下定义的泛函：

$$\varphi(f) = \int_0^{\pi} f'(x)\cos x\, dx$$

这是前面一般形式泛函在$N=1$, $\alpha_1(x)=\cos x$, $n=0$时的情形。确定φ的Peano核K_1

- $$\frac{d}{dx}(x-t)_+^m = m(x-t)_+^{m-1}, \qquad m \geqslant 1$$
- 对于本题，

$$\begin{aligned} K_1(t) = \varphi_x[(x-t)_+^1] &= \int_0^{\pi} (\cos x)\frac{d}{dx}(x-t)_+ dx \\ &= \int_0^{\pi} (\cos x)(x-t)_+^0 dx \\ &= \int_t^{\pi} \cos x \ dx = \sin t \end{aligned}$$

Theorem

若前面定义的一般泛函φ零化Π_m, 则对所有的$f \in C^{m+1}[a,b]$,

$$\varphi(f) = \int_a^b K_m(t) f^{(m+1)}(t)dt$$

其中$m \geqslant N$

证明：带积分余项的Taylor展开定理为

$$f(x) = \sum_{k=0}^{m} \frac{1}{k!} f^{(k)}(a)(x-a)^k + r(x),$$

$$r(x) = \frac{1}{m!} \int_a^x f^{(m+1)}(t)(x-t)^m dt$$

由于φ零化Π_m, 所以$\varphi(f)=\varphi(r)$. 而r可以重写为

$$r(x)=\frac{1}{m!}\int_a^b f^{(m+1)}(t)(x-t)_+^m dt$$

因此

$$\varphi(r)=\frac{1}{m!}\int_a^b f^{(m+1)}(t)\varphi_x[(x-t)_+^m]dt$$

$\square$

注意把φ_x移到积分号内，需要用到积分交换顺序以及积分与求导交换顺序等微积分定理, 所定义的φ是满足这些条件的

例

Sard在1963年给出的例：求出如下定义泛函φ

$$\varphi(f) = \int_0^1 f(x)x^{-1/2}dx$$

的形式为$\psi(f) = c_1 f(0) + c_2 f(1)$的逼近，它对于$\Pi_1$精确成立。给出逼近误差。

- 我们要求$\varphi - \psi$零化Π_1，因此可以用待定系数法确定系数：

$$\varphi(1) - \psi(1) = \int_0^1 x^{-1/2}dx - (c_1 + c_2) = 2 - c_1 - c_2 = 0$$

$$\varphi(x) - \psi(x) = \int_0^1 \sqrt{x}dx - c_2 = \frac{2}{3} - c_2 = 0$$

因此$c_1 = \frac{4}{3}$，$c_2 = \frac{2}{3}$

- 泛函$\varphi - \psi$的Peano核K_1为

$$
\begin{aligned}
(\varphi_x - \psi_x)(x-t)_+^1 &= \int_0^1 (x-t)_+ x^{-1/2}dx - \frac{4}{3}(0-t)_+ - \frac{2}{3}(1-t)_+ \\
&= \int_t^1 (x-t)x^{-1/2}dx - \frac{2}{3}(1-t) \\
&= \frac{4}{3}t(\sqrt{t}-1)
\end{aligned}
$$

- 因此根据Peano核定理：

$$
\int_0^1 f(x)x^{-1/2}dx - \left[\frac{4}{3}f(0) + \frac{2}{3}f(1)\right] = \int_0^1 \frac{4}{3}t(\sqrt{t}-1)f''(t)dt
$$

当$f \in C^2[0,1]$时，这里等号右边项即为误差。进一步应用积分中值定理：

$$
\int_0^1 \frac{4}{3}t(\sqrt{t}-1)f''(t)dt = f''(\xi)\int_0^1 \frac{4}{3}t(\sqrt{t}-1)dt = -\frac{2}{15}f''(\xi)
$$

- 如果φ和ψ是在Π_m上相同的两个泛函，那么根据Cauchy-Scharwz不等式

$$|\varphi(f)-\psi(f)| \leqslant \left\|K_m\right\|_2 \left\|f^{(m+1)}\right\|_2$$

- 在前面示例中，如果ψ的系数不能完全由$\varphi-\psi$零化Π_m得到，那么通过极小化$\left\|K_m\right\|_2^2=\int_a^b [K_m(t)]^2 dt$来选取这些参数，由此得到的泛函称为Sard意义下$\varphi$的一个最佳逼近
- Schoenberg发现可以用自然样条得到这种最佳逼近

Theorem

设φ为如前定义的一般线性泛函。给定结点$a = t_0 < t_1 < \cdots < t_n = b$, $n > N$. 在所有形如$\sum_{i=0}^{n} c_i \hat{t}_i$, 并且在$\Pi_m$上与$\varphi$相同的泛函中，*Sard*意义下$\varphi$的最佳逼近是$\varphi \circ L$, 其中$L(f)$是在给定结点上插值$f$的$2m+1$次自然样条

证明：令

$$\psi = \sum_{i=0}^{n} c_i \hat{t}_i$$

并且假设对任意$p \in \Pi_m$, $\psi(p) = \varphi(p)$, 即$\varphi - \psi$零化Π_m。
记K_m为$\varphi - \psi$的Peano核。
如果f是给定结点上的$2m+1$次自然样条，那么$Lf = f$. 而次数$\leqslant m$的多项式也是自然样条，因此对$p \in \Pi_m$, $Lp = p$. 所以$\varphi - \varphi \circ L$也零化$\Pi_m$. 我们的目标就是证明$\psi = \varphi \circ L$.

设$\overline{K}_m$为$\varphi-\varphi\circ L$的Peano核，那么下面证明

$$\int_a^b \left[\overline{K}_m(t)\right]^2 dx \leqslant \int_a^b [K_m(t)]^2 dt$$

就可以完成证明。
泛函$\theta=\varphi\circ L-\psi=(\varphi-\psi)-(\varphi-\varphi\circ L)$的Peano核
为$\overline{\overline{K}}_m=K_m-\overline{K}_m$，它具有形式

$$\overline{\overline{K}}_m(t)=\frac{1}{m!}\theta_x[(x-t)_+^m]$$

如果我们能证明$\langle\overline{\overline{K}}_m,\overline{K}_m\rangle=0$，那么就可以得到所需要的结论。
实际上，为此首先证明满足$g^{(m+1)}=\overline{\overline{K}}_m$的函数$g$是自然样条，
所以$Lg=g$，从而

$$\int_a^b \overline{\overline{K}}_m\overline{K}_m dt=\int_a^b \overline{K}_m g^{(m+1)} dt=(\varphi-\varphi\circ L)(g)=0$$

证明最后的关键点：g是自然样条

- 设$s_0, s_1, \ldots, s_n$是自然样条空间的一组插值基函数，即满足$s_i(t_j)=\delta_{ij}$，那么L具有形式

$$Lf=\sum_{i=0}^{n} f(t_i)s_i$$

- 因此可得θ的形式为

$$\theta(f)=\varphi(Lf)-\psi(f)=\sum_{i=0}^{n} f(t_i)\varphi(s_i)-\sum_{i=0}^{n} c_i f(t_i)=\sum_{i=0}^{n} \gamma_i f(t_i)$$

- 所以$\overline{\overline{K}}_m$的形式为

$$\overline{\overline{K}}_m(t)=\frac{1}{m!}\sum_{i=0}^{n} \gamma_i (t_i-t)_+^m$$

- 令函数g满足$g^{(m+1)}=\overline{\overline{K}}_m$，则可证$g$为$2m+1$次自然样条
  1. g为$2m+1$次样条：来自于$\overline{\overline{K}}_m$为$m$次样条
  2. $t\geqslant b$时$g^{(m+1)}(t)=0$，这是由于$\overline{\overline{K}}_m(t)=0$，$t\geqslant b$
  3. $t\leqslant a$时$g^{(m+1)}(t)=0$，因为此时

$$\overline{\overline{K}}_m(t)=\frac{1}{m!}\theta_x[(x-t)^m]$$

而θ零化Π_m，所以有此结论

□

中国科学技术大学

$$\varphi(f) = \int_{-1}^{1} f(x)dx$$
$$\psi(f) = c_1 f(-1) + c_2 f(0) + c_3 f(1)$$

两者在Π_1上一致，ψ为φ在Sard意义下的最佳逼近，确定ψ的形式

- 此时L的形式为

$$(Lf)(x) = a_0 + a_1 x + b_0(x+1)_+^3 + b_1(x)_+^3 + b_2(x-1)_+^3$$

其中

$$a_0 = \frac{1}{4}[-f(-1) + 6f(0) - f(1)]$$
$$a_1 = \frac{1}{4}[-5f(-1) + 6f(0) - f(1)]$$
$$b_0 = b_2 = -b_1/2 = \frac{1}{4}[f(-1) - 2f(0) + f(1)]$$

- 因此最佳公式为

$$\begin{aligned}\psi(f)=\varphi(Lf)&=\int_{-1}^{1}(Lf)(x)dx\\&=2a_0+4b_0+\frac{1}{4}b_1\\&=\frac{3}{8}f(-1)+\frac{5}{4}f(0)+\frac{3}{8}f(1)\end{aligned}$$

□

中国科学技术大学