计算数学丛书

Padé 逼近概论

徐献瑜　　李家楷　　徐国良　　编著

上海科学技术出版社

计算数学丛书

Padé 逼近概论

徐献瑜 李家楷 徐国良 编著

33649 7

责任编辑　唐仲华

计算数学丛书
Padé 逼近概论
徐献瑜　李家楷　徐国良　编著
上海科学技术出版社出版
(上海瑞金二路 450 号)
新华书店上海发行所发行　常熟市印刷二厂印刷
开本 787×1092　1/32　印张 12.75　字数 282,000
1990 年 10 月第 1 版　　1990 年 10 月第 1 次印刷
印数 1—1,900
ISBN 7-5323-1887-7/O·140
定价：6.25元

出版说明

《计算数学丛书》是为了适应计算数学和计算机科学的发展，配合高等院校的计算数学教学的需要而组织的一套参考读物．读者对象主要是高等院校数学系和计算机科学系的学生、研究生，亦可供高等院校数学系和计算机科学系的教师以及工矿企业、科研单位从事计算工作的技术人员参考．

本丛书向读者介绍近代计算方法的一些主要进展及其适用范围和实用效果．每种书集中介绍一个专题，针对本专题的近代发展作综合性的介绍，内容简明扼要，重点突出，有分析，有评价，力图使读者对该专题的动向和发展趋势得到一个完整的了解．

本丛书已拟定的选题计有：《线性代数与多项式的快速算法》、《数论变换》、《数值有理逼近》、《矩阵特征值问题》、《索伯列夫空间引论》、《计算组合数学》、《样条与插值》、《不动点算法》、《广义逆矩阵的基本理论和计算方法》、《非线性方程的区间算法》、《奇异摄动中的边界层校正法》、《沃尔什函数理论与应用》、《多项式最佳逼近的实现》、《曲线曲面的数值表示和逼近》、《舍入误差分析引论》、《解边值问题的迦辽金方法》、《非线性方程组迭代解法》、《外推法及其应用》、《蒙特卡罗方法》、《演化方程的有限元理论》、《数值解高维偏微分方程的分裂法》、《Padé逼近概论》等二十余种，于一九八〇年初起陆续出版．

序　　言

在自然科学和工程技术的实际计算中，用函数的Taylor展开的部分和作为该函数的近似是一种最基本的方法．Padé逼近则是一种特定类型的有理逼近，它是Taylor多项式逼近的自然引伸．概括地说，就是寻求一有理函数(限定分子和分母的次数)使其幂级数展开与给定的幂级数顺次有尽可能多的系数相同．早在十九世纪，Frobenius、Jacobi和Padé等数学家就已对这种逼近（后人称之为Padé逼近）进行了开发性研究并建立了一系列重要而基本的结果，为以后的发展奠定了基础．但是，Padé逼近的重要作用，特别是作为从幂级数展开式中提取更多信息的一种系统方法，则延至本世纪六十年代初期结合电子计算机的应用始由理论物理学家Baker和Gammel等强调指出，并逐渐被人们认识．事实表明，Padé逼近的研究和发展与数学中的解析函数论、逼近论、矩量理论、连分式以及差分方程等诸分支有着紧密联系，并且它在数值分析、量子场论、临界现象和控制论等自然科学领域中已有若干功效卓著的应用．约自七十年代以来，Padé逼近的理论、方法及其应用得到迅速发展并已为越来越多的科学工作者所重视．

本书的对象是学习或从事计算数学和科学计算的大学生、研究生以及科技工作者，其目的在于对Padé逼近的理论及方法给予系统的介绍，侧重点放在基础理论部分，同时也注重应用及近期发展．全书共分十章．前三章是Padé逼近的

基本知识，分别讲述 Padé 逼近的定义、基本性质、表的结构以及各种恒等式．第 4、6、7、8 各章是前三章内容的进一步引伸，其中包括 Padé 逼近的计算，Padé 逼近与连分式，Stieltjes 级数的 Padé 逼近以及 Padé 逼近的收敛性，它们与前三章合成 Padé 逼近的基础理论部分．第 5 章着重介绍 Padé 逼近用于序列收敛性加速，它和第 9 章同为 Padé 逼近在数值分析中的应用．末尾一章为 Padé 逼近的进一步推广及发展．书中加“*”的诸节论及多点 Padé 逼近，鉴于多点情形较单点情形繁复，为控制篇幅，论述上相对简略，故将它们作为选读材料．此外，书中附有较丰富的参考文献，为有关题材的进一步了解和研究提供了线索．

本书的编撰得到中国科学院青年科学基金的支持，由基金申获者徐国良博士做了较广泛深入的调研并拟就初稿．在此基础上，经过对所收题材的通力研讨和论证，力求在内容上具科学性、系统性和相对完整性，复经审校、修订而成书．但是由于我们的水平所限，在题材的取舍上可能会有偏颇和不妥之处，在内容上也难免不足甚至出现谬误．对此，恳请广大读者批评指正．

上海科学技术出版社理科编辑室对本书的编写自始至终给予殷切关注，我们在此谨致衷心谢忱．

作　者

1988 年 9 月于北京

目　　录

第 1 章

Padé 逼近式的定义及其基本性质

本章介绍函数的 Padé 逼近理论中最基本的部分. 首先引入 Padé 逼近式的三种定义, 并讨论这三者之间的关系以及它们的存在性与唯一性. 继而给出 Padé 逼近式的显式表示并阐述 Padé 逼近式的一些基本性质. 然后用一节的篇幅专门介绍指数函数的 Padé 逼近式. 这不仅是因为指数函数的优良性质使其 Padé 逼近式具有独特的形式, 还因为它在微分方程数值解中有特殊的作用. 最后, 作为选读材料, 简要介绍多点 Padé 逼近(即有理插值问题)的有关结果.

§1 引　言

借助函数的 Taylor 级数来研究函数的性质, 或直接用它的部分和逼近该函数, 不仅是纯数学领域中经常使用的手段, 也是应用中赖以发展的方法之一. 在数值计算领域中, 用 Taylor 多项式来逼近一个函数并进而导致各种有效的数值方法已司空见惯, 并在很多情况下获得了成功. 但有时这种方法的应用显露出某些缺陷. 这些缺陷一般来说是由于函数的 Taylor 级数的收敛速度较慢或其收敛范围较狭. 如果采用有理函数作为逼近工具, 则能常常获得出人意外的好结果.

例 **1.1.1**([147])　设 $f(x)=\ln(1+x)$, 它的 Taylor 级

$$\ln(1+x)=x-\frac{x^2}{2}+\frac{x^3}{3}-\frac{x^4}{4}+\cdots+(-1)^{n+1}\frac{x^n}{n}+\cdots \tag{1.1.1}$$

$$\equiv T_n(x)+\varepsilon_T(x),$$

其中 $T_n(x)$是级数(1.1.1)的 n 次部分和. 当 $x=1$ 时, 上述级数的收敛速度是非常慢的. 可是函数 $\ln(1+x)$ 有如下的连分式展开

$$\ln(1+x)=\frac{x}{1}{+}\,\frac{1^2x}{2}{+}\,\frac{1^2x}{3}{+}\,\frac{2^2x}{4}{+}\,\frac{2^2x}{5}{+}\cdots. \tag{1.1.2}$$

取连分式的渐近分式 $R_{nn}(x)$, 则得 $\ln(1+x)$的逐次有理逼近式

$$R_{1,1}(x)=\frac{2x}{2+x},$$

$$R_{2,2}(x)=\frac{6x+3x^2}{6+6x+x^2},$$

$$R_{3,3}(x)=\frac{60x+60x^2+11x^3}{60+90x+36x^2+3x^3},$$

$$R_{4,4}(x)=\frac{420x+630x^2+260x^3+25x^4}{420+840x+540x^2+120x^3+6x^4},$$

$$\cdots\cdots$$

容易验证，$R_{nn}(x)$的 Taylor 展开的前 $2n$ 项与 $T_{2n}(x)$完

表 1.1　$R_{nn}(1)$与 $T_{2n}(1)$之数值比较

n	$R_{nn}(1)$	$\varepsilon_R(1)$	$T_{2n}(1)$	$\varepsilon_T(1)$
1	0.667	0.26×10^{-1}	0.50	0.19
2	0.6928	0.84×10^{-3}	0.58	0.11
3	0.693122	0.25×10^{-4}	0.617	0.76×10^{-1}
4	0.6931464	0.76×10^{-6}	0.635	0.58×10^{-1}

全相同．然而两者的逼近效率则大不相同．表 1.1 列出两者在 $x=1$ 时的数值比较($\ln 2=0.69314718\cdots$)．由表 1.1 我们看到，$R_{4,4}(1)$ 与 $T_8(1)$ 的精度相差竟达 7 万多倍．更令人惊奇的是，当 $x=2$ 时幂级数(1.1.1)发散，然而由表 1.2 我们看到，有理函数仍有较好的逼近性质．$R_{nn}(2)$ 趋向于 $\ln 3=1.098612289$.

表 1.2

n	$R_{nn}(2)$	$\varepsilon_R(2)$
1	1.000	0.99×10^{-1}
2	1.092	0.66×10^{-2}
3	1.0980	0.61×10^{-3}
4	1.09857	0.42×10^{-4}

下面再看一个例子．

例 1.1.2([2], p. 100)　设 $f(x)=[(1+2x)/(1+x)]^{1/2}$，它的 Taylor 级数是

$$f(x)=1+\frac{1}{2}x-\frac{5}{8}x^2+\frac{13}{16}x^3-\frac{141}{128}x^4+\cdots,\quad |x|<\frac{1}{2}. \tag{1.1.3}$$

显然，函数 $f(x)$ 本身在 $(0,\infty)$ 上是十分光滑的，但是级数(1.1.3)当 $x>1/2$ 时并不收敛．为了获得有理逼近式，可使用分式线性变换的技巧，即作变量替换：

$$x=\frac{w}{1-2w}\quad 或\quad w=\frac{x}{1+2x}, \tag{1.1.4}$$

则

$$f(x(w))=(1-w)^{-1/2}$$

$$=1+\frac{1}{2}w+\frac{1\cdot3}{2\cdot4}w^2+\frac{1\cdot3\cdot5}{2\cdot4\cdot6}w^3+\cdots,\ -1<w<1. \tag{1.1.5}$$

在变换(1.1.4)之下，x 的区间$[0, \infty]$变成 w 的$\left[0, \frac{1}{2}\right]$. 我们知道，当 $w\in[0, 1/2]$ 时，级数(1.1.5)收敛. 因此如果将(1.1.5)的逐次部分和作为逼近多项式，那么将这些多项式恢复成原始变量则得到一系列有理逼近式：

$$1,\ \frac{1+\frac{5}{2}x}{1+2x},\ \frac{1+\frac{9}{2}x+\frac{43}{8}x^2}{(1+2x)^2},\ \cdots. \tag{1.1.6}$$

它们在 $[0, \infty]$ 上均很好地逼近 $f(x)$. 譬如，当 $x=\infty$ 时，(1.1.6)中各式之值分别为

$$1,\ 1.25,\ 1.34375,\ 1.38281,\ 1.39990,\ \cdots. \tag{1.1.7}$$

它们收敛于 $f(\infty)=\sqrt{2}=1.414\cdots$.

由上述两例我们清楚地看出：对于某些函数，有理逼近不仅能改善 Taylor 展开的逼近效率，而且还能扩大其逼近范围.

Padé 逼近法(亦称 Padé 逼近)就是从幂级数出发获得有理函数逼近式的一种十分简捷而且非常有效的方法. 其基本思想就是对于一个给定的形式幂级数，构造一个有理函数，称其为 Padé 逼近式，使其 Taylor 展开有尽可能多的项与原来的幂级数相吻合. 为了用数学语言精确表达，我们引入记号

$$H_m=\left\{P:P(z)=\sum_{i=0}^{m}a_iz^i,\ z,\ a_i\in\mathbf{C}\right\},$$

$$\mathbf{R}(m, n)=\{R=P/Q:P\in H_m,\ Q\in H_n\backslash\{0\}\},$$

其中 $\mathbf{C}$ 表复数全体，$H_n\backslash\{0\}$指从 H_n 中除去恒为零的元素.

定义 1.1.1 Padé 逼近式(基本定义)

设 $\sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$ 为一给定的形式幂级数，使

$$f(z) \equiv \sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i, \tag{1.1.8}$$

那么 $f(z)$ 在 $\mathbf{R}(m, n)$ 中的 Padé 逼近式就是一个有理分式 $P/Q \in \mathbf{R}(m, n)$，记之为 $(m/n)_f$，它的 Taylor 展开与级数 (1.1.8) 从首项起连续地有尽可能多的项相同．即

$$\sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i - P(z)/Q(z) = O(z^\alpha), \tag{1.1.9}$$

α 尽可能地大，其中 $O(z^\alpha)$ 表示一个形如 $\sum_{i=\alpha}^{\infty} e_i z^i$ 的形式幂级数．

由于有理函数包含多项式为其特例，所以定义中所述的有理函数 $P(z)/Q(z)$ 显然存在．记 $P(z) = \sum_{i=0}^{m} a_i z^i$，$Q(z) = \sum_{i=0}^{n} b_i z^i$，那么有理分式 P/Q 中含有 $m+1$ 个分子系数，$n+1$ 个分母系数．而对整个分式而言有一个与其本身无关的常数公因子，因此为确定起见，取 $b_0 = 1$．这样分式中包含有 $m+n+1$ 个独立的未知参数．这个数目启示我们，在 (1.1.9) 中应取 $\alpha = m+n+1$．于是把方程 (1.1.9) 乘以 $Q(z)$ 得

$$\begin{aligned}&(b_0 + b_1 z + \cdots + b_n z^n)(c_0 + c_1 z + \cdots)\\&= a_0 + a_1 z + \cdots + a_m z^m + O(z^{m+n+1}),\end{aligned}$$

比较上式两边 $1, z, \cdots, z^{m+n}$ 的系数，得到诸系数 a_i 及 b_i 满足以下方程

$$\begin{bmatrix} a_0 \\ a_1 \\ \vdots \\ a_m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} c_0 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ c_1 & c_0 & 0 & \cdots & 0 \\ & & \cdots\cdots & & \\ c_m & c_{m-1} & c_{m-2} & \cdots & c_{m-n} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix}, \tag{1.1.10}$$

以及

$$\begin{bmatrix} c_{m+1} & c_m & \cdots & c_{m-n+1} \\ c_{m+2} & c_{m+1} & \cdots & c_{m-n+2} \\ & \cdots\cdots & & \\ c_{m+n} & c_{m+n-1} & \cdots & c_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_0 \\ b_1 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{1.1.11}$$

其中规定当 $j<0$ 时，$c_j=0$（以后同）. 由于规定 $b_0=1$，所以方程(1.1.11)可写成

$$\begin{bmatrix} c_m & c_{m-1} & \cdots & c_{m-n+1} \\ c_{m+1} & c_m & \cdots & c_{m-n+2} \\ & \cdots\cdots & & \\ c_{m+n-1} & c_{m+n-2} & \cdots & c_m \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_n \end{bmatrix} = -\begin{bmatrix} c_{m+1} \\ c_{m+2} \\ \vdots \\ c_{m+n} \end{bmatrix}. \tag{1.1.11a}$$

如果从方程(1.1.11a)可以解出诸 b_i，那么从方程(1.1.10)可得出诸 a_i. 于是我们得以构造出 Padé 逼近式 $(m/n)_f$. 因此方程(1.1.10)和(1.1.11a)称为 Padé 方程.

值得注意的是，Padé 逼近定义的出发点是一个形式幂级数 $\sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$，所以我们可不必知道是否存在 $f(z)$，它以 $\sum_{i=0}^{\infty} c_i z^i$ 为其 Taylor 展开. 但是如果需要考虑函数 $f(z)$ 的 Padé 逼近或 Padé 逼近的收敛性，则必须将 $f(z)$ 同其 Taylor 展开联系起来.

现在我们再回顾一下前面的两个例子. 对于例 1.1.1 中的函数，容易验证 $R_{mn}(x)$ 就是 $f(x)$ 在 $\mathbf{R}(m, n)$ 中的 Padé 逼近式. 但对于例 1.1.2 中的函数，所求得的有理函数系列(1.1.6)并非 Padé 逼近式. 实际上，若从幂级数(1.1.3)出发，根据 Padé 方程(1.1.10)及(1.1.11a)，我们可算得 $f(x)$

在 $\mathbf{R}(m, n)$中的 Padé 逼近式分别为

$$1,\ \frac{1+\frac{7}{4}x}{1+\frac{5}{4}x},\ \frac{1+\frac{13}{4}x+\frac{41}{16}x^2}{1+\frac{11}{4}x+\frac{29}{16}x^2},\ \cdots.$$

当 $x\to\infty$ 时，它们的极限值分别为

$$1,\ 1.4,\ 1.413793103,\ 1.414201183,\ \cdots.$$

容易发现，这个序列比(1.1.7)更快地收敛于

$$\sqrt{2}=1.4142135\cdots.$$

在结束本节之前，还应当指出，以 Padé 命名的 Padé 逼近，实际上在法国数学家 H. Padé 以前就已得到研究．早在 1821 年，Padé 逼近的理论基础就已为 Cauchy 所奠定．在 Cauchy 著名的“Cours d' Analyse”([52]) 一书中，他研究了“循环级数”，还将 Lagrange 插值公式推广到 N 点有理插值．正是这一推广致使 Jacobi ([132], 1846) 发现了 Padé 逼近式．在 Jacobi 的工作中，对于有理插值问题提出了若干行列式表示，并进一步考虑了当所有插值点重合于原点时的极端情形．所以 Jacobi 第一个在现代观点之下给出 Padé 逼近的定义．后来，Frobenius([97], 1881)研究了 Padé 逼近的代数性质并给出了不同次数 Padé 逼近元素分子分母间的恒等式关系．到 1892 年，H. Padé 重新独自构造了 Padé 逼近式 $(m/n)_f$，并开始将它们按 m 和 n 排成一个二维表，且深入系统地研究了这个表的结构．他还特别注意有关 e^x 的 Padé 逼近式的特殊性质，进而引出 Padé 逼近的一个理想情况，由于他的贡献，后人把这种逼近方法归功于 Padé．顺便指出，在 Padé 的论文中，并未提到早期出现的文献．