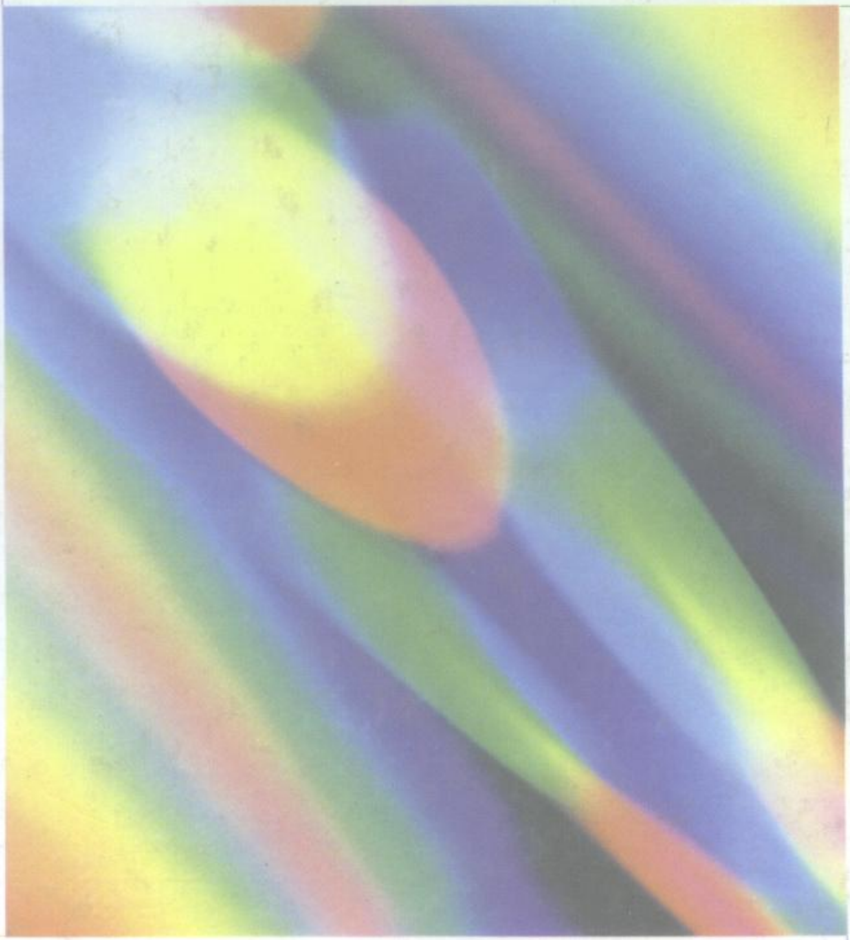
分裂外推与组合技巧

—并行解多维问题的新技术

吕　涛　石济民　林振宝　著



科　学　出　版　社

内 容 简 介

分裂外推与组合技巧是近年才崛起的并行解大型多维问题的新算法.该算法精度高、省计算、省存贮并集区域分解法、多水平法和外推法优点于一体.本书除阐述我国学者的工作外,还介绍了德国学者有关稀疏网和组合技巧方面的研究.全书共八章,分别阐述 Richardson 外推及新进展;分裂外推及其在多维积分、积分方程、微分方程的应用;组合方法与稀疏网的组合技巧.

本书有广泛应用前景,适合从事科学工程计算的科研教学人员,硕士生、博士生及大学高年级学生阅读.

图书在版编目(CIP)数据

分裂外推与组合技巧——并行解多维问题的新技术/吕涛等著.
-北京:科学出版社,1998
ISBN 7-03-006170-5

Ⅰ.分… Ⅱ.吕… Ⅲ.①分裂法;外推法 ②组合-外推法 Ⅳ.O241

中国版本图书馆 CIP 数据核字(97)第 15736 号

科学出版社 出版
北京东黄城根北街 16 号
邮政编码:100717

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1998 年 5 月第 一 版 开本:850×1168 1/32
1998 年 5 月第一次印刷 印张:12 7/8
印数:1—1 500 字数:333 000

定价: 30.00 元

导　论

尽管当今计算机发展已有惊人进步，巨型计算机每秒能作几十亿次运算，但是用于解决大型科学和工程中的计算问题，计算机的速度仍嫌太慢. 这似乎有些自相矛盾，问题的根源在于：随着计算机规模愈来愈大，性能愈来愈先进，科学研究和工程技术愈来愈离不开数值计算与数值模拟，而实践中提出问题，尤其是那些与国家整体利益相关的问题，如石油勘探与开发，航天器的设计与控制，反应堆计算，大型水利设计与建筑，天气预报与风暴潮预报等，其问题之复杂，规模之大是任何巨型计算机也难于胜任的. 举例来说，按照一般计算规律：如果问题数据扩大一倍，则解决问题计算量常常会增大四倍、八倍，即使今后每隔几年计算机速度提高一倍，也不过意味着求解问题规模增大 10%到 20%而已. 由此可见，计算能力提高除依赖于计算机硬件发展外，更要依赖于创造出全新的计算方法，尤其是与工程应用紧密相关的解大型多维问题的新算法. 事实上，当今计算数学研究的热点就是如何以尽可能少的计算量和存贮量获得多维问题的高精度近似解.

多维问题的计算困难主要来自维数效应：计算复杂度与存贮复杂度随维数指数增长. 克服维数效应的有效方法应当具有以下特点：

(1)算法应当在计算模型上是并行的，并以最少的机间通讯在多处理并行机上解算大型多维问题；

(2)算法的计算复杂度和存贮复杂度尽可能的与问题维数，甚至问题的规模几乎无关；

(3)算法具有高精度和后验误差估计以便对计算结果适时评估，作出停机或再加密计算的自适应处理.

回忆过去 20 年来计算数学的活跃领域，如多层网格法，区域

分解算法，多水平预处理法，有限元外推法无不以上述特点作为研究契机. 本书内容：分裂外推法，作为数值解多维问题的钥匙，正具有上述三大特点.

众所周知，外推法实际上是一种古老的加速收敛方法. 我国魏晋时期的大数学家刘徽(263)及南北朝时期大数学家祖冲之(429—500)已用外推思想计算圆周率 π①，法国数学家 Huygens (1654)使用公式 $4T^h/3-T^{2h}/3$ 计算圆周率. 到本世纪外推法已成为数值分析各个领域中具有普遍意义的加速收敛技术：1910 年 Richardson 对差分法提出著名的 Richardson-h^2 外推，并建立了多项式外推法的基础；1955 年 Romberg 提出数值积分的 Romberg 算法；1965 年 Stetter 提出解常微分方程的外推算法；对于难度更大，应用更为广泛的偏微分方程，1979 年 Marchuk 和 Shaidurov 出版了专著《差分法和它的外推》；有限元方面自 1983 年林群、吕涛等首先提出有限元外推技术后，国内外学者继起研究，主要成果已总结在林群、朱起定的专著《有限元的预处理和后处理理论》中.

但是上述外推法本质依赖于近似误差对单个离散参数的渐近展开. 由于维数效应缘故，Richardson 外推在解多维问题时遇到严重挑战. 举例说，计算一个 s 重积分用 Richardson 外推欲得到$(2m+1)$阶代数精度近似值，必须计算 2^{ms}个点的函数值，这意味计算复杂度随维数指数增长. 对于解偏微分方程而言，维数效应更为严酷：对于一个 s 维问题，即使一步 Richardson 外推加速，除解一个有 N^s 个未知数的代数方程外，还必须解一个有$(2N)^s$ 个未知数的辅问题，后者工作量较之前者工作量随维数指数增长.

为了克服维数效应，林群、吕涛于 1983 年提出分裂外推法. 分裂外推的本质是基于近似解误差对独立网参数的多变量渐近展开. 这看来似乎简单的变化却大为改善了外推的效果. 首先，分裂外推的计算复杂度和存贮复杂度几乎达到最优；例如一个 s 重积分用分裂外推取得$(2m+1)$阶代数精度，仅需计算$\binom{2s+m}{m}$个点

① 关于刘徽和祖冲之用外推法计算 π 的考证依据请参见本书的评注.

的函数值;其次,分裂外推与区域分解、有限元外推结合,通个独立网参数的设置可以把大型多维问题转化为若干规模较小,相互独立的子问题,便于在多处理机上并行计算,其并行度还可据问题规模和并行机类型而定,机间通讯很小;第三,分裂外推能提供近似解的后验估计,并由此设计自适应算法.

外推法的最新进展与多水平算法密切相关.多水平方法(如多层网格法)的算法本身就要求解不同网规格的离散方程,而外推法与多水平算法结合能最经济地得到高精度.早期 Brandt 和 Hackbusch 把多网格法和 Richardson 外推结合得到 τ 外推算法,其后 Schüllev 与林群把多网格法与分裂外推结合得到更经济的算法. C. Zenger(1990)基于有限元多水平子空间分裂提出解多维问题稀疏网格法,使 s 维问题仅需 $O(h^{-1}|\ln h|^{s-1})$ 个点就可达到 $O(h^2|\ln h|^{s-1})$ 阶精度,而按标准有限元方法要 $O(h^{-s})$ 个点才能达到 $O(h^2)$ 阶精度,从而大大降低多维问题计算复杂度.但稀疏网法本身也有明显缺点:矩阵稀疏性受到破坏,条件数较大,给应用带来不便. 1990 年 Griebel, Schueider 和 Zenger 又提出基于稀疏网的组合技巧.在原理上组合技巧与分裂外推有相似处:即它们皆依赖于近似解误差关于离散参数的多变量渐近展开.但组合技巧目的是通过粗网格解以得到细网格近似解,收敛阶没有提高,且并行度依赖于问题维数;分裂外推却得到全局细网格点的高精度近似.当然,组合技巧也有分裂外推不及的优点:对解的光滑性要求降低,尤其是渐近展开的幂指数不能确定时,分裂外推失效而组合技巧仍可用以加速收敛.因此两种方法各有优劣,但就多数算例而言,分裂外推的效果皆优于组合技巧(参见 Rüde, 1993).除分裂外推与组合技巧外,隐式外推法是近年来外推法发展的一个新分支,在这里外推法被用于导出高精度的近似方程,本书最后一章将对组合技巧与隐式外推作简略介绍.

本书的前身是作者 1995 年出版的英文专著"The Splitting Extrapolation Method"(World Scientific, Singapore),但本书内容较前书大为改观.最重要的变化是本书突出了重点,新增加了第六

章:基于区域分解的有限元分裂外推法.这些工作皆是作者在英文专著出版后的新研究成果.

作者衷心感谢林群院士、石钟慈院士对本书出版的指导和关注.作者也要感谢德国数学家 Zenger、Rüde 及杨一都教授、周爱辉博士,他们的成果丰富了本书的内容.本书能出版有赖于国家自然科学基金、香港理工大学研究基金和中国科学院出版基金的资助,对此谨表谢忱.

作　者

1996 年 12 月

符号便览

$\mathbb{Z}$	整数集合
$m\mid n$	n 被 m 整除
$m\nmid n$	n 不能被 m 整除
$\mathbb{R}$	实数集合
$\mathbb{R}^s$	s 维 Euclidean 空间
x	$=(x_1,\cdots,x_s)$，$\mathbb{R}^s$ 的一个点
e_j	x_j 方向的单位向量
Ω	$\mathbb{R}^s$ 的开域
$\partial\Omega$	Ω 的边界
$\overline{\Omega}$	Ω 的闭包
$\varnothing$	空集
$\Gamma_{h,l}$	网线集合，见五章 § 2
Γ_h	网点集合，见五章 § 2
Ω_h	正则点集合，见五章 § 2
$\Omega_{h,i}$	非正则点集合，见五章 § 2
$\partial\Omega_h$	$\partial\Omega\cap\Gamma_{h,l}$，见五章 § 2
$\mathcal{N}(x)$	x 的离散邻域，见五章 § 2
h	$=(h_1,\cdots,h_s)$ 多参数网步长
h_0	$=\max\limits_{1\leqslant i\leqslant s}h_i$
α	$=(\alpha_1,\cdots,\alpha_s)$，多指标
$\lvert\alpha\rvert$	$=\alpha_1+\cdots+\alpha_s$
$\alpha!$	$\alpha_1!\ \alpha_2!\ \cdots\alpha_s!$ 的缩写
h^α	$h_1^{\alpha_1}\cdots h_s^{\alpha_s}$ 的缩写，见二章 § 1
$\dfrac{h}{2^\alpha}$	$\left(\dfrac{h_1}{2^{\alpha_1}},\cdots,\dfrac{h_s}{2^{\alpha_s}}\right)$ 的缩写，见二章 § 1

$\dfrac{h}{1+\alpha}$	$\left(\dfrac{h_1}{1+\alpha_1},\cdots,\dfrac{h_s}{1+\alpha_s}\right)$的缩写，见二章§1
$f(x)$	$f(x_1,\cdots,x_s)$的缩写
$f_\gamma(x)$	表γ阶齐次函数，见二章§2
D_i	$\dfrac{\partial}{\partial x_i}$的缩写
D^α	$D_1^{\alpha_1}\cdots D_s^{\alpha_s}$ 的缩写
dx	$dx_1\cdots dx_s$的缩写
$C^m(\Omega)$	Ω上m阶连续可微函数集合
$C^{m+\sigma}(\Omega)$	Hölder 空间，$0<\sigma\leqslant 1$
$L^p(\Omega)$	Ω上$p(1\leqslant p<\infty)$次乘方可积函数空间
$L^\infty(\Omega)$	Ω上真性有界函数空间
$W_p^m(\Omega)$	Sobolev 空间
$C_0^\infty(\Omega)$	支集属于Ω的无穷可微函数空间
$\mathring{W}_p^m(\Omega)$	C_0^∞ 函数在$W_p^m(\Omega)$意义下的闭子空间
$H^m(\Omega)$	$W_2^m(\Omega)$的缩写
$H_0^m(\Omega)$	$\mathring{W}_2^m(\Omega)$的缩写
$\lVert\cdot\rVert_{m,p,\Omega}$	$W_p^m(\Omega)$的范，有时简记$\lVert\cdot\rVert_{m,p}$，见第六章§1
$\lVert\cdot\rVert_{m,\Omega}$	$\lVert\cdot\rVert_{m,2,\Omega}$的缩写
$\lvert\cdot\rvert_{m,p,\Omega}$	$W_p^m(\Omega)$的半范
$\lVert\cdot\rVert'_{k,p,\Omega}$	乘积空间$\prod\limits_{i=1}^{m}W_p^k(\Omega_i)$的范，见第六章§1
Q_T	$=(0,T]\times\Omega$
$H^m(0,T;B)$	Q_T上函数空间，见第六章§3
$\triangle$	Laplace 算子
L	椭圆型偏微分算子
L^h	L的离散近似，见第五章§2
δ_j^2	二阶中心差分算子，见第五章§2
K	积分算子，见第四章§1

$\mathscr{R}(K)$	K 的值域
$k(x,y)$	K 的核,见第四章 § 1
$k_{(n)}(x,y)$	K 的 n 次迭核,见第四章 § 1
$K_n \xrightarrow{p} K$	$\{K_n\}$点收敛于 K,见第四章 § 1
$K_n \xrightarrow{c.c} K$	$\{K_n\}$聚紧收敛于 K,见第四章 § 1
$K_n \xrightarrow{ac} K$	$\{K_n\}$渐近紧收敛于 K,见第四章 § 9
$\rho(K)$	K 的预解集
$\mathscr{T}^h$	以网参数 h 的剖分
$S^h(\Omega)$	试探函数空间,见第六章 § 2
$S_0^h(\Omega)$	$=S^h(\Omega)\cap H_0^1(\Omega)$
Π^h	插值算子,见第四章 § 7
P_n	投影算子,见第四章 § 7
E^h	正投影算子,见第四章 § 7
I_h	映 $C(\Omega)$到 S_0^h 的插值算子,见第六章 § 2
$\bar{h}_i$	独立网参数,见第六章 § 2,见第六章 § 2
e	$\mathscr{T}^h$的元素,$e\subset\mathbb{R}^d$,见第六章 § 2
$\mathbb{P}_1(e)$	e 上的线性函数集合
$\mathbf{Q}_1(\mathrm{e})$	e 上的 d-线性函数集合
$\mathrm{a}(\cdot,\cdot)$	能量内积
$\mathrm{R_h}$	Ritz 投影
u^h	u 的有限元近似
u^I	u 的插值函数
τ	时间步长,有时记为 $\bar{h}_{l+1}$,见第六章 § 2
∂_t	时间差分,见第六章 § 3
$\bar{\partial}_t$	时间差分,见第六章 § 4
$\mathscr{T}_k$	初始剖分$\mathscr{T}_0$的 k 次加密,见第 11 章 § 1
$\mathscr{N}_k$	$\mathscr{T}_k$的全体结点集合,见第八章 § 1
$\tilde{S}_k$	关于剖分$\mathscr{T}_k$的 s-分片线性函数集合

$I_k u$	u 在 $\tilde{S}_k$ 上的内插函数，见第八章 §1
T_k	等级基空间，见第八章 §1
$S_{n,m}$	矩形网上的分片双线性函数空间
$S_{n,m}^0$	$=S_{n,m}\cap H_0^1(\Omega)$
$\hat{S}_{n,m}^0$	稀疏网空间，见第八章 §1
$\hat{u}^I$	U 在 $\hat{S}_{n,m}$ 上内插函数
$\hat{u}_{n,n}^c$	u 的组合近似，见第八章 §2

目　录

导论

第一章　Richardson 外推及若干新进展 ……………………（1）

§1 多项式外推法 ……………………（1）

1.1 插值多项式与外推 ……………………（2）

1.2 多项式外推算法及其推广 ……………………（5）

1.3 外推系数与外推算法的稳定性和收敛性……………………（8）

1.4 后验误差估计……………………（13）

§2 外推法在数值积分中的应用 ……………………（18）

2.1 Euler-Maclaurin 求和公式 ……………………（18）

2.2 被积函数在端点有奇点的 Euler-Maclaurin 展开式 ……………………（26）

2.3 多维 Euler-Maclaurin 展开式 ……………………（28）

2.4 奇异函数的多维数值求积的渐近展开式 ……………………（30）

2.5 数值结果 ……………………（35）

2.6 带参数的奇异函数的数值积分与渐近展开式 ……………………（38）

第二章　分裂外推法 ……………………（46）

§1 多变量渐近展开 ……………………（48）

§2 分裂外推的递推算法 ……………………（49）

§3 分裂外推的系数计算与分裂外推的稳定性 ……………………（53）

§4 分裂外推的后验误差估计 ……………………（61）

§5 分数幂展开式与逐步齐次分裂外推消去法 ……………………（62）

第三章　分裂外推在多维数值积分中的应用 ……………………（70）

§1 光滑函数的分裂外推算法 ……………………（71）

§2 多维反常积分的数值算法——变量替换法 ……………………（79）

§3 多维反常积分的 Duffy 转换法 ……………………（83）

§4 多维反常积分的多变量渐近展开式 ……………………（85）

§5 多维单纯形区域上的积分 ……………………（89）

§6 多维曲边区域上的积分 …………………………………… (95)
§7 反常积分的数值试验 ……………………………………… (98)
第四章 积分方程的分裂外推算法……………………………… (100)
§1 积分算子的一般理论 ……………………………………… (100)
§2 近似求积法 ………………………………………………… (106)
§3 具有光滑核的多维积分方程的分裂外推法 ……………… (109)
§4 多角形区域上积分方程的分裂外推算法 ………………… (114)
§5 本征值与本征函数的分裂外推算法 ……………………… (124)
§6 具有非光滑核的积分方程的分裂外推算法 ……………… (130)
§7 一维弱奇异积分方程配置解的分裂外推算法 …………… (140)
§8 多维弱奇异积分方程配置解的分裂外推方法 …………… (149)
§9 第二类弱奇异积分方程的高精度 Nyström 方法与外推 ……………………………………………………………… (154)
9.1 Sidi-Israeli 的求积公式法 ………………………………… (155)
9.2 本征值问题 ………………………………………………… (159)
9.3 周期化方法 ………………………………………………… (160)
9.4 算例 ………………………………………………………… (162)
第五章 微分方程配置法和差分法的分裂外推……………… (165)
§1 两点边值问题配置解的分裂外推算法 …………………… (165)
1.1 拟线性两点边值问题配置解的分裂外推算法 …………… (165)
1.2 Sturm-Liouville 型本征值问题配置解的分裂外推算法 …… (168)
1.3 奇异两点边值问题的分裂外推算法 ……………………… (173)
1.4 具有不连续系数的两点边值问题的分裂外推算法 ……… (174)
§2 差分方程近似解的分裂外推算法 ………………………… (176)
2.1 差分方程与离散极大值原理 ……………………………… (176)
2.2 光滑边界区域上差分近似解的误差的多参数渐近展开 … (182)
2.3 长方体上差分近似解的误差的多参数渐近展开 ………… (191)
2.4 算例 ………………………………………………………… (197)
第六章 基于区域分解的有限元分裂外推方法……………… (203)
§1 二阶椭圆型方程的有限元近似 …………………………… (205)
§2 椭圆型偏微分方程的有限元分裂外推算法 ……………… (207)

2.1 问题的提出 …………………………………………… (207)
2.2 线性问题有限元误差的多参数渐近展开 ……………… (211)
2.3 本征值问题的有限元误差的多参数渐近展开 ………… (220)
2.4 拟线性问题的有限元误差的多参数渐近展开 ………… (223)
2.5 全局细网格点的高精度算法 ……………………… (227)
2.6 算例 …………………………………………………… (231)
2.7 凹角域问题的有限元分裂外推法 ………………… (238)
§3 抛物型偏微分方程的有限元分裂外推方法 ……………… (244)
3.1 问题的提出 …………………………………………… (245)
3.2 半离散有限元误差的多参数渐近展开 ……………… (249)
3.3 全离散有限元误差的多参数渐近展开 ……………… (259)
3.4 全局细网格的分裂外推方法 ……………………… (272)
3.5 算例 …………………………………………………… (275)
§4 双曲型偏微分方程的有限元分裂外推方法 ……………… (278)
4.1 二阶双曲型偏微分方程 ……………………………… (279)
4.2 半离散有限元误差的多参数渐近展开 ……………… (281)
4.3 全离散有限元误差的多参数渐近展开 ……………… (284)
4.4 转换为一阶组的有限元误差的多参数渐近展开 ……… (289)
4.5 算例 …………………………………………………… (295)
§5 梯度超收敛与梯度分裂外推 ……………………………… (298)
5.1 梯度超收敛 …………………………………………… (298)
5.2 梯度分裂外推法 ……………………………………… (299)
5.3 后验估计 ……………………………………………… (300)
5.4 曲边区域与高次元 …………………………………… (301)
第七章 加速近似解收敛的组合方法 …………………… (304)
§1 组合方法 …………………………………………………… (304)
1.1 组合原理 ……………………………………………… (304)
1.2 积分方程的组合方法 ………………………………… (306)
1.3 差分方程的组合方法 ………………………………… (308)
1.4 算例 …………………………………………………… (310)
§2 两点边值问题配置解的组合方法 ……………………… (313)
2.1 二次与三次样条配置解的组合方法 ………………… (313)

2.2 算例 …………………………………………………… (317)
§3 第二类边界积分方程 Nyström 解的组合方法 ………… (318)
3.1 第二类边界积分方程 ………………………………… (318)
3.2 Nyström 近似解的组合方法 ………………………… (319)
3.3 非光滑域情形 ………………………………………… (324)
3.4 Neumann 边值问题 …………………………………… (326)
3.5 算例 …………………………………………………… (327)
§4 多维中矩形求积公式的组合方法 ……………………… (330)
4.1 多元乘积型中矩形求积公式 ………………………… (330)
4.2 组合方法 ……………………………………………… (332)
4.3 算例 …………………………………………………… (334)
第八章　稀疏网格法与组合技巧 ………………………… (337)
§1 稀疏网格法 …………………………………………… (338)
1.1 有限元空间的多水平分裂 …………………………… (338)
1.2 二维稀疏网 …………………………………………… (341)
1.3 高维稀疏网 …………………………………………… (344)
1.4 稀疏网上的有限元方法 ……………………………… (346)
§2 组合技巧 ……………………………………………… (349)
2.1 二维组合技巧 ………………………………………… (350)
2.2 三维组合技巧 ………………………………………… (351)
2.3 算例 …………………………………………………… (355)
2.4 组合技巧、分裂外推和稀疏网方法的数值结果比较 ……… (362)
§3 隐式外推法提要 ……………………………………… (370)
附录一　分裂外推系数表 ………………………………… (373)
附录二　逐步分裂外推系数表 …………………………… (377)
附录三　评注 ……………………………………………… (380)
参考文献 …………………………………………………… (386)

第一章　Richardson 外推及若干新进展

本章除回顾 Richardson 外推及相关算法外，应用方面重点介绍少为人知的 Lyness 和 Sidi 有关奇异积分和多维奇异积分的结果. 至于 Richardson 外推在偏微分方程的应用，差分法方面读者可在 Marchuk 和 Shaidurov[112]专著中找到详尽叙述；有限元方面可参看林群、朱起定的专著[162]和陈传淼、黄永清的专著[28]及有关文献.

本章取材主要是 Joyce[61]和 Rabinowitz[122]的专论，也参看了邓建中[34]的专著.

§1　多项式外推法

计算数学基本主题：对一个给定的连续问题（积分、积分方程、微分方程、积微方程等）先用网格步长 h 将其离散为代数问题，再借助计算机求出近似解. 近似解 $T(h)$ 的精度依赖于步长 h，并且 h 愈小，网格分割愈细，$T(h)$ 的精度愈高，而计算量则愈大. 在许多情形下，精确解 a_0 不仅连续依赖于 $h>0$：

$$a_0 = \lim_{h\to 0} T(h) = T(0), \tag{1.1.1}$$

而且存在常数 $a_1, a_2, \cdots; p_1, p_2, \cdots$，使成立渐近展开式

$$T(h) = a_0 + a_1 h^{p_1} + a_2 h^{p_2} + \cdots + a_m h^{p_m} + O(h^{p_{m+1}}), \tag{1.1.2}$$

这里 $0<p_1<p_2<\cdots<p_m<p_{m+1}$.

对于光滑问题，展开式(1.1.2)经常是 h 的偶次幂；对于非光滑问题 p_i 可能是分数，甚至出现形如 $h^{p_i}\ln h$ 的对数项. 往后我们证明：含对数项的展开式也可以借助多项式外推法消去.

具有(1.1.2)的展开式的外推法称为多项式外推法（文献中

把具有偶次幂展开式的外推法称为 Romberg 外推法)，它是 Richardson 外推法的推广. 1910 年 Richardson 组合两个差分解：$\frac{4}{3}u(\frac{h}{2})-\frac{1}{3}u(h)$得到 $O(h^4)$阶精度. Richardson 称为 h^2-外推；Romberg 在 1955 年利用梯形求积公式误差的 Euler-Maclaurin 渐近展开式，逐步消去 $h^2,h^4,\cdots$得到阶数愈来愈高精度，建立了数值积分中著名的 Romberg 方法. 实际上外推的哲理早在公元 3 世纪中国大数学家刘徽和 5 世纪大数学家祖冲之的著述中已可见到，在欧洲 1654 年 Huygens 已明确建立用$(4S_{2n}-S_n)/3$ 计算圆周率的外推算法. Richardson 和 Romberg 的贡献在于发现外推法应用的普遍性. 事实上在当今凡涉及计算的问题，几乎都可发现外推在提高精度方面奇迹般的效力.

1.1 插值多项式与外推

如果近似有(1.1.2)的渐近展开，并且我们已有 $m+1$ 个近似解 $T(h_i),i=0,\cdots,m,h_0>h_1>\cdots>h_m>0$，那么 m 次外推值 $T_m^{(0)}$ 由线性方程组

$$T(h_i)=T_m^{(0)}+a_1h_i^{p_1}+\cdots+a_mh_i^{p_m},\quad i=0,\cdots,m \tag{1.1.3}$$

决定，这里 $T_m^{(0)},a_1,\cdots,a_m$ 是未知数，我们仅对求 $T_m^{(0)}$ 有兴趣，展开式(1.1.2)表明 $T_m^{(0)}$ 的精度为 $O(h_0^{p_{m+1}})$.

为了求出 $T_m^{(0)}$，实际上并不需要解线性方程(1.1.3)，而是寻求多项式 $f(x)=\sum_{i=0}^{m}b_ix^{p_i}$，适合插值条件 $f(h_i)=T(h_i)$，一旦插值多项式被得到，$f(0)=b_0=T_m^{(0)}$ 就是我们需要的外推值. 外推与插值多项式的这种关系，使我们可以应用插值多项式性质来研究外推算法. 为了简单起见，我们先讨论渐近展开为偶次幂情形

$$T(h)=a_o+a_1h^2+\cdots+a_mh^{2m}+O(h^{2(m+1)}). \tag{1.1.4}$$

令 $x=h^2$，相应的插值多项式问题成为求多项式 $p_m(x)=a_0+a_1x$

$+\cdots+a_m x^m$,满足插值条件

$$p_m(x_i)=f(x_i)=T(h_i),\qquad x_i=h_i^2,$$
$$i=0,\cdots,m,\tag{1.1.5}$$

这个问题等价于求系数 $a_0,\cdots,a_m$ 满足线性方程

$$a_0+a_1x_i+\cdots+a_mx_i^m=f(x_i),\ i=0,\cdots,m.\tag{1.1.6}$$

由于方程(1.1.6)的系数行列式是 Vandermonde 行列式,其值为 $\prod\limits_{k>j}(x_k-x_j)\neq 0$,故插值多项式唯一存在.熟知,插值多项式有多种表达形式,每一种形式各有优点和缺点.

A) Lagrange 插值公式

$$\begin{aligned}p_m(x)&=\sum_{i=0}^{m}L_i(x)f(x_i)\\&=\sum_{i=0}^{m}\prod_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{m}\left(\frac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)f(x_i),\end{aligned}\tag{1.1.7}$$

这里 $L_i(x)=\prod\limits_{\substack{j=0\\j\neq i}}^{m}\left(\dfrac{x-x_j}{x_i-x_j}\right)$ 称为插值基函数,有性质

$$L_i(x_j)=\delta_{ij},\qquad i,j=0,\cdots,m\tag{1.1.8}$$

及

$$\sum_{i=0}^{m}L_i(x)\equiv 1.\tag{1.1.9}$$

Lagrange 插值多项式的优点是插值多项式直接由插值条件(1.1.5)表达出来,这给理论分析带来方便,但不利于实算,因为当改变结点和次数时,计算需从头开始.

B)Newton 插值公式

$$\begin{aligned}p_m(x)=&f(x_0)+(x-x_0)f[x_0,x_1]+(x-x_0)(x-x_1)\\&\cdot f[x_0,x_1,x_2]+\cdots+(x-x_0)\cdots(x-x_{m-1})f[x_0,\cdots,x_m],\end{aligned}\tag{1.1.10}$$

这里 $f[x_0,\cdots,x_i]$是 Newton 差商,可以表达为

$$f[x_0,\cdots,x_i]=\sum_{j=0}^{i}\frac{f(x_j)}{\prod\limits_{\substack{k=0\\k\neq j}}^{i}(x_j-x_k)}.\tag{1.1.11}$$