可积系统与数值算法

孙建青 何 益
胡星标 常向科 著

科学出版社

国家科学技术学术著作出版基金资助出版

可积系统与数值算法

孙建青　何　益
胡星标　常向科　著

科学出版社
北京

内 容 简 介

本书旨在介绍可积系统与数值算法交叉研究的背景及发展，系统深入地讲解可积系统在数值算法设计中的应用，探讨如何利用可积系统自身的“可积性”设计稳定高效的数值算法，特别是设计收敛加速算法及矩阵特征值算法，并结合数值例子分析所得算法的各种性质.

本书内容新颖、创新性强、论述严谨、范例丰富，可供可积系统理论与应用专业的研究生阅读，也可供从事可积系统与计算数学交叉研究的科研人员参考.

图书在版编目(CIP)数据

可积系统与数值算法/孙建青等著. —北京：科学出版社，2014.12

ISBN 978-7-03-042615-4

Ⅰ. ①可… Ⅱ. ①孙… Ⅲ. ①数值逼近 ②离散动力系统

Ⅳ. ①O241.5 ②O193

中国版本图书馆 CIP 数据核字(2014) 第 274663 号

责任编辑：李静科 / 责任校对：钟 洋

责任印制：赵德静 / 封面设计：陈 敬

科学出版社 出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码：100717

http://www.sciencep.com

北京源海印刷有限责任公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2014 年 12 月第 一 版 开本：720×1000 1/16

2014 年 12 月第一次印刷 印张：9 3/4

字数：187 000

定价：58.00 元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　言

孤立子理论与可积系统是应用数学和数学物理的一个重要分支, 在流体力学、等离子体物理、光纤通讯、分子生物等科学领域有着广泛应用. 最近的研究更是发现, 可积系统与数值算法中的连分式、Padé 逼近、正交多项式、收敛加速算法、矩阵计算等有很密切的联系. 可积数值算法的研究不仅促进了可积系统理论的发展, 还为计算数学提供了新的思路和方法, 引起了国际上越来越多的数学家和物理学家的极大兴趣和充分关注.

研究可积数值算法有两个基本问题, 一是建立某些经典算法和可积系统的联系; 二是从已有的可积系统出发构造新的数值算法. 利用可积系统设计数值算法, 已成为计算数学领域的一个研究热点. 本书系统地阐述了如何从可积系统出发设计新的数值算法, 特别是设计收敛加速算法和特征值算法, 比较全面地介绍了该领域的最新研究结果. 阅读本书需具备一定的数学基础, 也要对孤立子理论中的直接方法 —Hirota 双线性方法有一定的了解. 关于 Hirota 双线性方法, 感兴趣的读者可参阅 Hirota(2004).

本书分为 6 章, 主要内容安排如下：

第 1 章绪论, 主要介绍可积数值算法的研究背景, 以及书中经常用到的一些数学基础知识, 包括序列变换和收敛加速算法的相关知识、两种重要的求和公式, 并给出了 Pfaff 式的定义和常用性质. 由 Pfaff 式恒等式出发可得到三个重要的行列式恒等式, 这是本书中很重要的研究工具.

第 2 章从离散的 Gel′fand-Dikii 方程族的第二个方程 —Boussinesq 格方程出发, 设计了一个新的收敛加速算法. 进一步, 给出了 Boussinesq 格方程的 q-差分格式和 confluent 形式, 并由此构造了计算函数极限的连续预估 (continuous prediction) 算法.

第 3 章讨论推广的 Lotka-Volterra 系统在收敛加速算法中的应用. 基于 $N=-1$ 和 $N=q+1$ 对应的两种推广方程, 构造了两种新的序列变换及其对应的收敛加速算法, 并对算法的收敛性和稳定性进行了分析.

第 4 章提出了一个新的收敛加速算法, 该算法的递推式包含 ε-算法、ρ-算法以及它的一种推广的递推方程, 但这个算法需要更多的初始值. 我们利用 Θ-算法第一步的计算结果作为部分初始值, 通过数值实例说明当初始值采用这样的取法时, 算法对线性和对数收敛的序列都是有效的.

第 5 章给出第一类和第二类离散 Bogoyavlensky 格方程的 Lax 表示, 并通过

研究相应离散变量的渐近行为得到两种计算矩阵特征值的新算法. 需要指出的是, 新得到的算法只适用于具有某种特殊结构的带状矩阵.

第 6 章介绍了可积系统在 Laplace 变换、Padé 逼近、奇异值分解中的应用.

本书的主要特点是内容新颖、创新性强. 书中大部分内容都是作者近几年来在可积数值算法领域取得的结果, 另外还介绍了国际上关于可积系统与计算数学交叉研究的许多新的结果. 本书可供可积系统理论与应用专业的研究生阅读, 也可供从事可积系统与计算数学交叉研究的科研人员参考.

本书的出版得到国家科学技术学术著作出版基金的大力支持, 在此表示诚挚的谢意. 感谢科学出版社李静科编辑对本书的出版所给予的帮助. 另外, 作者的研究工作长期得到国家自然科学基金委员会的资助 (基金号 No.11331008, No.11201469, No.11401546 等), 在此一并表示感谢.

由于作者水平有限, 书中难免有不妥和错误之处, 恳请读者批评指正.

作　者

2014 年 9 月

目　　录

第1章 绪 论

1.1 可积数值算法

2006 年, 日本京都大学的 Nakamura 教授在对矩阵奇异值问题的算法进行研究时首次提出了“可積分アルゴリズム”的概念[92, 93], 中文译为“可积数值算法”. 顾名思义, 可积数值算法是一类具有“可积性”的数值算法. 可积性是一类重要的动力学性质[5–7,14], 它有不同的表现形式.

有限维系统的可积性可以在 Liouville 意义下严格定义: 一个 n 维的 Hamilton 系统

$$\frac{\mathrm{d}q_i}{\mathrm{d}t} = \{q_i,\ H\}, \quad \frac{\mathrm{d}p_i}{\mathrm{d}t} = \{p_i,\ H\}, \quad i = 1, \cdots, n \tag{1.1}$$

是 Liouville 可积的当且仅当它有 n 个相互独立、两两对合的守恒量, 其中 Poisson 括号定义为

$$\{F,\ G\} = \sum_{j=1}^{n} \left(\frac{\partial F}{\partial q_j} \frac{\partial G}{\partial p_j} - \frac{\partial F}{\partial p_j} \frac{\partial G}{\partial q_j} \right).$$

例如, 如果我们取 Hamilton 函数为

$$H = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2} \left(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2 \right),$$

那么式 (1.1) 就是 n 维谐振子模型, 并且是 Liouville 可积的. 事实上, 若令

$$F_i = \frac{1}{2} \left(p_i^2 + \omega_i^2 q_i^2 \right), \quad i = 1, \cdots, n,$$

则这样定义的 F_i 就满足

$$\frac{\mathrm{d}F_i}{\mathrm{d}t} = 0, \quad \{F_i,\ F_j\} = 0, \quad i, j = 1, \cdots, n,$$

即 $F_1, \cdots, F_n$ 是 n 维谐振子模型的 n 个相互独立、两两对合的守恒量.

相比之下, 无限维系统的可积性就复杂得多, 研究起来也比较困难. 直到 1967 年, Gardner、Greene、Kruskal 和 Miura 创造性地提出反散射方法[53], 并用它成功地构造了 Korteweg-de Vries(KdV) 方程的多孤子解. 这项工作使人们意识到很多具有物理意义的非线性系统是可以精确求解的, 推动了无限维系统可积性理论的发展. 随着研究的深入, 可积性理论中还涌现出许多其他构造解析解的方法,

比如：Riemann-Hilbert 方法、Bäcklund 变换方法[85, 113, 114]、Darboux 变换方法[3, 4, 82] 等. 这些方法有一个共同点, 即它们都依赖于非线性系统的线性谱问题 (Lax 表示或零曲率方程).

不同于反散射变换等解析方法, Hirota 在 1971 年利用所谓的“直接法”构造出 KdV 方程的 N 孤子解[68]. 这是一种纯代数的方法, 并且不依赖非线性系统的线性谱问题, 被称为 Hirota 双线性方法. 它的主要思想是通过“适当的”变量变换把非线性方程转化为双线性方程, 然后再利用摄动法求解. Pfaff 式是 Hirota 双线性方法的重要工具, 它是一种比行列式更为广泛的代数结构. 从统一的观点看, 由可积系统生成的双线性方程就是 Pfaff 式的恒等式 (Plücker 关系式和 Jacobi 恒等式)[1, 70].

基于这些研究, 我们认识到无限维系统的可积性可由系统自身的一些代数、几何性质来体现, 例如：Painlevé 性质[152–155], Lax 表示, 无穷多对合的守恒量, 无穷多对称和双 Hamilton 结构[80, 102] 等. 事实上, 我们也可以将可积性理解为某种不变性、相容性和恒等性. 譬如, 著名的 Kadomtsev-Petviashvili (KP) 方程

$$(u_t + u_{xxx} + 6uu_x)_x + u_{yy} = 0$$

是线性问题

$$\begin{cases} \psi_y = (\partial_x^2 + u)\psi \\ \psi_t = \left(\partial_x^3 + \dfrac{3}{2}u\partial_x + \dfrac{3}{4}\left(u_x + \displaystyle\int u_y \mathrm{d}x\right)\right)\psi \end{cases}$$

的相容性条件. 在相关变量变换 $u = 2(\log f)_{xx}$ 下, KP 方程化为双线性方程 (取积分常数为零)

$$(D_x^4 - 4D_xD_t + 3D_y^2)f \cdot f = 0, \tag{1.2}$$

其中 D-算子是 Hirota 双线性算子, 具体定义如下:

$$D_t^m D_x^n f(t,x) \cdot g(t,x) = \frac{\partial^m}{\partial s^m}\frac{\partial^n}{\partial y^n} f(t+s, x+y)g(t-s, x-y)\Big|_{s=0,y=0}, \quad m, n = 0, 1, \cdots.$$

Freeman 和 Nimmo 发现[51, 99], 如果把 KP 方程的孤子解表示为 Wronski 行列式, 那么双线性 KP 方程 (1.2) 就是行列式恒等式的一种实现. 事实上, Sato 曾经指出, 双线性 KP 方程可看作是等价于 Grassmann 流形上的 Plücker 关系式[100, 119].

早在可积数值算法这个概念提出之前, 很多学者就已经注意到数值算法与可积系统之间的联系, 揭示了隐藏在很多经典数值算法背后的可积性. 例如: 对称 QR 方法等价于有限非周期 Toda 方程时间为 1 的演化[142]; 在 Padé 逼近和正交多项式

理论[16, 31, 107] 中有重要作用的 qd 算法恰好是离散 Toda 方程谱问题的相容性条件[64, 115]; 计算第一类椭圆积分的 Gauss 算术几何平均算法是以相应椭圆积分为守恒量的离散可积系统[13, 22, 90]; 经典的收敛加速算法 —— ε-算法等价于全离散的势 KdV 方程[87, 94, 106], 而 η-算法[160] 和 ρ-算法[161] 分别等价于全离散的格 KdV 方程和全离散的柱 KdV 方程[86]. 更多例子可参见 [2], [8], [71], [95], [116], [137], [150], [151]. 这些研究成果不仅极大地丰富了可积系统的理论, 还促使人们去思考: 能否从已知的经典可积系统出发构造新的数值算法?

1999 年, Nakamura 发现时间连续的 Toda 方程可以用来计算解析函数的 Laplace 变换[89]. 随后, Tsujimoto、Nakamura 和 Iwasaki 通过研究离散 Lotka-Volterra 方程的 Lax 表示, 得到了一种计算矩阵奇异值的算法[73, 74, 147]. 这为计算数学的研究提供了新的思路和方法[43, 91]. 可积数值算法就是在这样的背景下提出的, 而设计可积数值算法也逐渐成为计算数学领域的一个研究热点. 本书系统地阐述了如何从可积系统出发设计新的数值算法, 特别是设计收敛加速算法和特征值算法, 比较全面地介绍了该领域的最新研究结果[37, 42, 62, 139, 140].

1.2 数学基础

本节我们介绍在可积数值算法的研究中经常用到的一些数学基础知识, 包括序列变换和收敛加速算法、欧拉–麦克劳林求和公式、布尔求和公式以及一种比行列式更为广泛的代数工具 ——Pfaff 式, 并给出几个常用的行列式恒等式, 它们都是 Pfaff 式恒等式的特殊情况. 相关参考文献为 [12], [38], [39], [70], [75], [133], [143], [156].

1.2.1 序列变换和收敛加速算法

在数值分析中, 很多数值方法都会生成序列, 进而将原问题归结为一个序列求极限的问题, 例如: 迭代法、摄动法、级数展开法、微分方程的有限差分法, 等等. 这些序列的收敛速度直接影响了相应算法的执行效率. 面对一个收敛速度很慢的序列, 怎样才能较快地得到相对精确的近似值就是迫切需要解决的问题. 一个很自然的想法是在保持原序列极限值不变的前提下, 通过一定的法则将原序列变为一个新的序列, 使得新序列的收敛速度更快. 这就是序列变换的基本思想.

那么, 如何定量地描述一个序列的收敛快慢呢? 迄今为止还没有一个可以涵盖所有收敛类型的分类标准. 然而, 在大多数实际应用问题中, 我们碰到的序列收敛类型只有少数几种. 接下来我们就给出这几种常见收敛类型的定义.

定义 1.1 设 $\{S_n\}$ 是一个以 S 为极限的序列, 并且满足

$$\lim_{n\to\infty}\frac{S_{n+1}-S}{S_n-S}=\lambda, \tag{1.3}$$

(i) 若 $-1\leqslant\lambda<1$ ($\lambda\neq 0$), 则称序列 $\{S_n\}$ 是线性收敛的;

(ii) 若 $\lambda=1$, 则称序列 $\{S_n\}$ 是对数收敛的;

(iii) 若 $\lambda=0$, 则称序列 $\{S_n\}$ 是超线性收敛的.

注 1.1　如果式 (1.3) 中的 λ 满足 $|\lambda|>1$, 那么序列 $\{S_n\}$ 是发散的, 这时 S 称为序列 $\{S_n\}$ 的反极限.

由于在很多时候判别式 (1.3) 中的极限并不容易求得, 因此 Wimp 给出了如下命题[159] .

命题 1.1　若序列 $\{S_n\}$ 满足式 (1.3), 并且 $0<|\lambda|<1$, 则有下式成立

$$\lim_{n\to\infty}\frac{\Delta S_{n+1}}{\Delta S_n}=\lambda. \tag{1.4}$$

此外, Clark、Cray 和 Adams 还考虑了 $|\lambda|=1$ 的情况[44].

命题 1.2　如果序列 $\{S_n\}$ 满足式 (1.3), $0<|\lambda|\leqslant 1$, 并且 ΔS_n 不变号, 那么式 (1.4) 成立.

在上述两个命题的帮助下, 我们可以通过计算式 (1.4) 中的极限来判断序列的收敛类型. 但对于超线性收敛序列, 我们就只能根据式 (1.3) 来判断. 例如, 几何级数的部分和序列

$$S_n(z)=\sum_{k=0}^{n-1}z^k,\quad 0<|z|<1,\ n\in\mathbb{N}_+$$

是线性收敛的; 黎曼 ζ 函数 $\zeta(\alpha)$ 的部分和序列

$$S_n=\sum_{k=1}^{n}\frac{1}{k^\alpha},\quad \alpha>1,\ n\in\mathbb{N}$$

是对数收敛的; 而指数函数的幂级数展开所对应的部分和序列

$$S_n(z)=\sum_{k=0}^{n-1}\frac{z^k}{k!},\quad z\in\mathbb{R}$$

是超线性收敛的.

序列变换 $\mathcal{T}$ 本质上是一个映射, 它从原序列出发构造新的序列 $\mathcal{T}:\{S_n\}\to\{T_n\}$, 使得 $\{T_n\}$ 与 $\{S_n\}$ 收敛到相同的极限值 S, 并且在一定条件下满足

$$\lim_{n\to\infty}\frac{T_n-S}{S_n-S}=\rho,$$

其中 ρ 被称为缩减因子. 若 $\rho=0$, 则称序列变换 $\mathcal{T}$ 使原序列 $\{S_n\}$ 的收敛得到加速; 若 $0<|\rho|<1$, 则称序列变换 $\mathcal{T}$ 使原序列 $\{S_n\}$ 的收敛得到改善. 显然, 缩减因子 ρ 的绝对值越小, 对应的序列变换效果越好.

目前已有的序列变换大部分都是基于外推的思想得到的[38]. 外推法一般需要引入一个包含序列元素 S_n 和极限值 S 的关系式, 反解 S 所得到的表达式即可作为序列变换的对应法则, 而满足这个关系式的全体序列构成的集合称为序列变换的核. 显然, 核中的每一个序列在此变换下都变成一个常数. 通常我们认为, 如果一个序列的渐近展开式近似满足某个序列变换的核所对应的关系式, 那么这个序列变换对该序列有效. 目前所研究的序列变换大都表示为行列式之比的形式, 然而实际计算中行列式的计算量很大, 即使可以计算也会导致较大的机器误差. 这就需要利用行列式恒等式技巧去构造递推算法来实现序列变换, 即通常所说的收敛加速算法. 迄今为止, 已经有很多种收敛加速算法被提出并被研究. 例如, Wynn 提出的 ε-算法[160], 以及该算法的一些推广形式[27, 41].

Richardson 外推法和 Aitken 的 Δ^2 方法是序列变换中最经典的例子. Richardson 外推法可以用来计算插值多项式在零点的值, 该方法的一种特殊情形首先由 Huygens 得到, 后来 Milne 和 Kommerell 用这个方法计算 π 的近似值. Richardson 还将这个方法用于方程的离散化和特征值问题[111, 112]. 基于 Richadson 外推法, Romberg 构造了用梯形公式计算定积分的收敛加速算法, 即 Romberg 方法[40].

Aitken 的 Δ^2 方法由 Aitken 首次提出[11], 具体形式如下:

$$T_n = \frac{S_nS_{n+2} - S_{n+1}^2}{S_{n+2} - 2S_{n+1} + S_n} = S_{n+1} + \frac{(S_{n+1} - S_n)(S_{n+2} - S_{n+1})}{(S_{n+1} - S_n) - (S_{n+2} - S_{n+1})}. \tag{1.5}$$

Aitken 用它来加速计算多项式模最大零点的 Bernoulli 算法. Naegelsbach 和 Maxwell 也曾分别在自己的研究工作中用过该方法, 但都没有将其作为收敛加速算法提出. Naegelsbach 是将 Δ^2 方法用于非线性方程的求解问题, 而 Maxwell 则是用此方法去研究一个物理问题. 值得一提的是, 日本数学家关孝和早在 1674 年出版的《括要算法》第四册中, 就已经用 Aitken 的 Δ^2 方法去计算圆周率 π 的值[9]. 具体地, 他用圆内接正 2^n 边形 $(n = 2, 3, \cdots)$ 去逼近直径为 1 的圆, 用多边形的周长 c_i 来近似计算 π,

$$\begin{aligned}
c_2 &= 2.82842\,71247\,46190\,0976\\
c_3 &= 3.06146\,74589\,20718\,1738\\
&\vdots\\
c_{15} &= 3.14159\,26487\,76985\,6708\\
c_{16} &= 3.14159\,26523\,86591\,3571\\
c_{17} &= 3.14159\,26532\,88992\,7759
\end{aligned}$$

并利用下述公式获得更高精度的近似值:

$$T_{15}=c_{16}+\frac{(c_{16}-c_{15})(c_{17}-c_{16})}{(c_{16}-c_{15})-(c_{17}-c_{16})}$$
$$=3.14159\,26535\,89793\,2476.$$

可以看到, c_{17} 只精确到小数点后 9 位数字, 而 T_{15} 精确到 16 位.

Aitken 的 Δ^2 方法对线性收敛的序列都是有效的. 事实上, 如果我们将 (1.5) 改写成行列式之比的形式

$$T_n=\frac{\begin{vmatrix} S_n & S_{n+1} \\ \Delta S_n & \Delta S_{n+1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 \\ \Delta S_n & \Delta S_{n+1} \end{vmatrix}},$$

那么很容易看出序列变换 (1.5) 的核是: $\forall n,\ a_0(S_n-S)+a_1(S_{n+1}-S)=0$, 其中 a_0 和 a_1 是常数, 且 $a_0a_1\neq 0,\ a_0+a_1\neq 0$. 它可以推广到一般形式

$$a_0(S_n-S)+\cdots+a_k(S_{n+k}-S)=0,\quad \forall n, \tag{1.6}$$

其中 $a_0,\cdots,a_k$ 是常数, 且 $a_0a_k\neq 0,\ a_0+\cdots+a_k\neq 0$. 由 (1.6) 可得比 Aitken 的 Δ^2 方法更广的序列变换 ——Shanks 变换[120, 122, 123]:

$$e_k(S_n)=\frac{\begin{vmatrix} S_n & S_{n+1} & \cdots & S_{n+k} \\ \Delta S_n & \Delta S_{n+1} & \cdots & \Delta S_{n+k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Delta S_{n+k-1} & \Delta S_{n+k} & \cdots & \Delta S_{n+2k-1} \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} 1 & 1 & \cdots & 1 \\ \Delta S_n & \Delta S_{n+1} & \cdots & \Delta S_{n+k} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \Delta S_{n+k-1} & \Delta S_{n+k} & \cdots & \Delta S_{n+2k-1} \end{vmatrix}}. \tag{1.7}$$

Wynn 在 1956 年给出了一种可以有效计算 Shanks 变换 (1.7) 的非线性递推算法[160], 称为 ε-算法:

$$\varepsilon_{-1}^{(n)}=0,\quad \varepsilon_0^{(n)}=S_n,\quad n=0,1,\cdots \tag{1.8}$$
$$\varepsilon_{k+1}^{(n)}=\varepsilon_{k-1}^{(n+1)}+\frac{1}{\varepsilon_k^{(n+1)}-\varepsilon_k^{(n)}},\quad k,\ n=0,1,\cdots. \tag{1.9}$$

由此算法可得 $\varepsilon_{2k}^{(n)}=e_k(S_n)$, $\varepsilon_{2k+1}^{(n)}=1/e_k(\Delta S_n)$, 其中下标为奇数的 ε 是计算的中间量. Shanks 变换和 ε-算法的提出推动了包括数学各个分支和理论物理在内的

诸多领域的研究工作, 具体可参见 [15], [16], [28], [29], [31], [32], [159] 及其所引用的文献.

类似于前面对序列变换的讨论, 我们同样可以用函数变换来加速或改善函数的收敛速度. 函数变换 $\mathcal{G}: f(t) \to g(t)$ 将原函数 $f(t)$ 变为新的函数 $g(t)$, 使得 $g(t)$ 与 $f(t)$ 收敛到相同的极限值 S, 并在一定条件下满足

$$\lim_{t\to\infty} \frac{g(t)-S}{f(t)-S} = \rho,$$

其中 ρ 称为缩减因子. 若 $\rho = 0$, 则称函数变换 $\mathcal{G}$ 使原函数 $f(t)$ 的收敛得到加速; 若 $0 < |\rho| < 1$, 则称函数变换 $\mathcal{G}$ 使原函数 $f(t)$ 的收敛得到改善.

函数变换通常可以通过两种不同的途径来得到, 其中较为常见的是基于序列变换的构造方法. 具体作法是在序列变换 $\mathcal{T}: \{S_n\} \to \{T_n\}$ 中作一系列的变量替换, 即用 $t+nh$ 替换 n, 用 $f(t+nh)$ 替换 S_n, 并且令 h 趋向于零. 这样得到的函数变换又称为序列变换的 confluent 形式, 相应的递推算法称为序列收敛加速算法的 confluent 形式或连续预估算法. 连续预估算法的思想最早由 Wynn[162, 163] 提出, 这种算法可以用来计算函数极限, 并且在计算 Cauchy 主值和奇异积分等问题中有重要应用[38]. 作为例子, 我们给出 confluent 的 Shanks 变换[162]:

$$e_k(f(t)) = \frac{\begin{vmatrix} f(t) & f'(t) & \cdots & f^{(k)}(t) \\ f'(t) & f''(t) & \cdots & f^{(k+1)}(t) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f^{(k)}(t) & f^{(k+1)}(t) & \cdots & f^{(2k)}(t) \end{vmatrix}}{\begin{vmatrix} f''(t) & f^{(3)}(t) & \cdots & f^{(k+1)}(t) \\ f^{(3)}(t) & f^{(4)}(t) & \cdots & f^{(k+2)}(t) \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ f^{(k)}(t) & f^{(k+1)}(t) & \cdots & f^{(2k)}(t) \end{vmatrix}}, \tag{1.10}$$

其中函数 $f(t)$ 我们假设它是无穷次连续可微的. 变换 (1.10) 将原函数 $f(t)$ 变为函数列 $e_k(f(t))$, 对应的递推算法是 confluent 的 ε-算法

$$\varepsilon_{-1}(t) = 0, \quad \varepsilon_0(t) = f(t), \tag{1.11}$$

$$\varepsilon_{k+1}(t) = \varepsilon_{k-1}(t) + \frac{1}{\varepsilon_k'(t)}. \tag{1.12}$$

Confluent 的 Shanks 变换的核由以下定理给出.

定理 1.3 给定正常数 T, 对 $\forall t \geqslant T$, $\varepsilon_{2k}(t) = S$ 成立的充分必要条件是

$$f(t) = S + a_1 f'(t) + \cdots + a_k f^{(k)}(t), \quad \forall t \geqslant T,$$

其中 $a_1, \cdots, a_k$ 是与 t 无关的常数且 $a_k \neq 0$, $S = \lim\limits_{t\to\infty} f(t)$.

由于并不存在一个对所有序列都有效的“万能”序列变换[46], 研究针对不同类型序列的序列变换及其对应的收敛加速算法就变得很有必要. 继 Shanks 变换和 ε-算法之后, 很多新的序列变换和算法被提出, 例如: W-算法[78], ρ-算法[161], G-变换[58, 59, 109], Θ-算法[24], Levin 变换[77], 等等. Smith 和 Ford 通过数值例子比较了多种不同的加速算法[135, 136], 关于它们的收敛稳定性分析可参见 [124], [126], [128], [129], [132], [133], [148], [165]. 加速算法还被应用于优化、统计等领域[19, 49, 50, 110]. 值得一提的是, 最近出版的 NIST 数学函数手册[101] 也将序列变换编写在内. 更多的研究背景和进展可参见 [33]–[35], [45], [149], [156], [159].

1.2.2　求和公式

欧拉–麦克劳林求和公式和布尔求和公式是两个重要的求和公式, 它们不仅在数值积分中有重要应用, 也是研究序列和无穷级数渐近性的有力工具. 本节我们将不加证明地给出这两个公式的具体形式及例子, 相关证明细节请参见 [23], [48], [75], [143].

在给出欧拉–麦克劳林求和公式之前, 我们先给出伯努利数的定义.

定义 1.2　伯努利数 B_n 可由下式给出:

$$\frac{z}{e^z-1} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{B_n}{n!} z^n, \quad |z| < 2\pi. \tag{1.13}$$

其中 $\dfrac{z}{e^z-1}$ 称为伯努利数的生成函数.

由于函数

$$f(z) = \frac{z}{e^z-1} - 1 + \frac{1}{2}z$$

是偶函数, 故而下标为奇数且大于等于 3 的伯努利数为零, 即

$$B_{2n+1} = 0, \quad n = 1, 2, \cdots.$$

再注意到当 $z = 0$ 时, 式 (1.13) 左端为 1. 于是, 伯努利数满足如下递推关系:

$$B_0 = 1,$$

$$\sum_{k=0}^{n-1} \binom{n}{k} B_k = 0, \quad n = 2, 3, \cdots.$$

根据上面的递推式, 有

$$B_0 = 1, \quad B_1 = -\frac{1}{2}, \quad B_2 = \frac{1}{6}, \quad B_4 = -\frac{1}{30}, \quad B_6 = \frac{1}{42},$$
$$B_8 = -\frac{1}{30}, \quad B_{10} = \frac{5}{66}, \quad B_{12} = -\frac{691}{2730}, \quad B_{14} = \frac{7}{6}, \quad B_{16} = -\frac{3617}{510}, \quad \cdots.$$

此外, 下标为偶数的伯努利数 B_{2n} 还有一个非常有趣的性质[143]

$$B_{2n} = 2(-1)^{n+1}(2n)! \sum_{m=1}^{\infty} (2\pi m)^{-2n}, \quad n = 1, 2, \cdots.$$

进一步, 可以得到

$$\frac{2}{(2\pi)^{2n}} < (-1)^{n+1} \frac{B_{2n}}{(2n)!} < 2\frac{2}{(2\pi)^{2n}}, \quad n = 1, 2, \cdots.$$

有了上述准备, 接下来我们给出欧拉–麦克劳林求和公式[48] 的两种常见形式.

定理 1.4 若函数 $f(x) \in C^{2p+2}[a, b]$, $p = 0, 1, \cdots$, 则有下式成立:

$$T_n - \int_a^b f(x)\mathrm{d}x = \sum_{j=1}^{p} \frac{B_2 j}{(2j)!} h^{2j} \left(f^{(2j-1)}(b) - f^{(2j-1)}(a) \right) + \mathcal{O}(h^{2p+2}), \text{ 当 } h \to +0\text{时},$$

其中

$$h = (b-a)/n, \quad T_n = h \left(\frac{1}{2} f(a) + \sum_{i=1}^{n-1} f(a+ih) + \frac{1}{2} f(b) \right).$$

定理 1.5 若函数 $f(x) \in C^{2p+1}[n, n+m]$, $p = 0, 1, \cdots$, 则有下式成立:

$$\sum_{i=0}^{m} f(n+i) = \int_n^{n+m} f(x)\mathrm{d}x + \frac{1}{2}(f(n) + f(n+m)) + \sum_{j=1}^{p} \frac{B_{2j}}{(2j)!} \left(f^{(2j-1)}(n+m) - f^{(2j-1)}(n) \right) + R_p(n, m),$$

其中

$$|R_p(n, m)| \leqslant \frac{4e^{2\pi}}{(2\pi)^{2p+1}} \int_n^{n+m} |f^{(2p+1)}(x)|\mathrm{d}x.$$

特别地, 如果 $f^{(2p+1)}(x)$ 在闭区间 $[n, n+m]$ 内不变号, 那么

$$|R_p(n, m)| \leqslant \frac{4e^{2\pi}}{(2\pi)^{2p+1}} |f^{(2p)}(n+m) - f^{(2p)}(n)|.$$

下面我们以黎曼 ζ 函数[144] 为例, 来说明欧拉–麦克劳林求和公式的应用.

例 1.1 考察 $\zeta(\alpha)$ 的部分和序列

$$S_n = \sum_{k=1}^{n} \frac{1}{k^{\alpha}}, \quad \alpha > 1,$$