样条插值函数误差的渐近估计式及其在数値微分中的应用

黄 友 谦

（数 学 力 学 系）

本文将数值微分问题转化为积分问题来研究；又将积分问题同样条函数联系起来。运用数值积分误差估计的渐近形式，将Euler—Maclauring求和技巧运用到样条插值函数误差渐近表达式的研究中。文章提出了精确度高的数值微分公式，并将数值积分的Romberg 思想，微分方程的预报校正法运用到数值微分中来。运用样条函数法及差分法将二阶导数的逼近误差提高到$O(h^4)$。对Spline—on—Spline也进行了研究。

§1．二次样条函数的数值微分公式

数值微分是数值逼近的一个重要课题。将数值微分问题转化为积分问题来研究，导致了与样条函数的密切联系。

为了提高精度，必须研究各类数值微分的误差渐近估计式，而数值积分的外推法、微分方程的预报校正法就能恰当的提高数值微分公式的精度。

1.1 梯形微分公式及其误差

对于给定区间$[a,b]$的一组点x_k按下列次序排列

$$\Delta: \qquad a = x_0 < x_1 \cdots < x_N = b \ ,$$

Δ 称为$[a, b]$的一个分划，函数$f(x)$在节点的值已知，要求研究$f(x)$在节点处的导数值。

注意到关系式

$$f(x) = f(x_{k-1}) + \int_{x_{k-1}}^{x} f'(t)dt \quad , \tag{1.1}$$

对右端的积分施以不同类型的数值积分公式，就可获得相应的数值微分公式，也就是说可以将数值微分问题转化为数值积分问题。

在(1.1)中令$x = x_k$并运用积分的梯形公式有

(1.2) $$f(x_k)=f(x_{k-1})+\frac{h_k}{2}\Big(f'(x_k)+f'(x_{k-1})\Big)-\frac{h_k^3}{12}f'''(\zeta_k)$$

其中

$$h_k=x_k-x_{k-1}, \quad x_{k-1}\leqslant\zeta_k\leqslant x_k .$$

略去右端余项；假设$f'(x_0)$已知并记$f'(x_k)$的近似值为$S'(x_k)$，便可获得梯形的微分公式：

(1.3) $$\begin{cases} S'(x_k)=-S'(x_{k-1})+\dfrac{2(f(x_k)-f(x_{k-1}))}{h_k}, \quad k=1,2\cdots,N. \\ S'(x_0)=f'(x_0) . \end{cases}$$

公式(1.3)与二次样条函数是紧密联系在一起的，有下列定理成立。

定理 1 给定区间$[a,b]$的一个分划Δ，若$S(x)$为定义在Δ的二次样条函数，记为$S(x)\in S_p(\Delta,2)$。如果$S(x)$是关于函数$f(x)$的插值函数，即满足

$$\begin{cases} S(x_k)=f(x_k), \quad k=0,1,\cdots,N. \\ S'(x_0)=f'(x_0), \end{cases}$$

那么$S(x)$必满足关系式(1.3)。

证明 由定理假设$S(x)\in S_p(\Delta,2)$故$S(x)$在区间$[x_{k-1},x_k]$是一个二次多项式即

$$S(x)=a_{k-1}+b_{k-1}(x-x_{k-1})+c_{k-1}(x-x_{k-1})(x-x_k), \quad x_{k-1}\leqslant x\leqslant x_k.$$

运用插值条件$S(x_{k-1})=f(x_{k-1})$，$S(x_k)=f(x_k)$容易导得

$$a_{k-1}=f(x_{k-1}), \qquad b_{k-1}=\frac{f(x_k)-f(x_{k-1})}{h_k},$$

由于$S(x)\in C^1$ 故$S'(x_k)$，$S'(x_{k-1})$均存在且

$$S'(x_k)=b_{k-1}+c_{k-1}(x_k-x_{k-1})$$

$$S'(x_{k-1})=b_{k-1}+c_{k-1}(x_{k-1}-x_k)$$

将上述二式相加有

$$S'(x_k)+S'(x_{k-1})=2b_{k-1}=\frac{2(f(x_k)-f(x_{k-1}))}{h_k},$$

定理证毕。

定理 2 若$f(x)\in C^4[a,b]$，记 $\varepsilon_k'=f'(x_k)-S'(x_k)$

则 ε_k' 有如下估计

(1.4) $$\left|\varepsilon_k'\right|\leqslant\frac{h^2}{6}\left[(b-a)\left\|f^{(4)}\right\|_\infty+\left\|f^{(3)}\right\|_\infty\right],$$

其中 $\|f^{(l)}\|_\infty = \underset{a\leqslant x\leqslant b}{Max}\left|f^{(l)}(x)\right|$.

证明 由(1.2)式有

$$f'(x_k)=-f'(x_{k-1})+2\frac{(f(x_k)-f(x_{k-1}))}{h_k}+\frac{h_k^2}{6}f'''(\zeta_k),$$

将上式减去(1.3)有

$$\varepsilon'_k=-\varepsilon'_{k-1}+\frac{h_k^2}{6}f'''(\zeta_k),$$

注意到 $\varepsilon'_0=0$ 就有

$$\varepsilon'_k=\frac{h^2}{6}\sum_{j=0}^{k-1}(-1)^jf'''(\zeta_{k-j}),$$

运用微分中值定理有

$$|f'''(\zeta_i)-f'''(\zeta_{i-1})|\leqslant 2h\|f^{(4)}\|_\infty$$

从而导得

$$\left|\varepsilon'_k\right|\leqslant\frac{h^2}{6}\left[(b-a)\left\|f^{(4)}\right\|_\infty+\left\|f^{(3)}\right\|_\infty\right].$$

定理 2 证毕。

下面，我们转入渐近误差的估计，为此，假设 $f(x)$ 是充分光滑函数，且节点 x_k 的分布是等距的，记

$$h_k=h=\frac{b-a}{N},\quad f_k=f(x_k).$$

由Euler－Maclauring 求和公式〔5〕，(1.2)可写成

$$(1.5)\qquad f_k=f_{k-1}+\frac{h}{2}\left(f'_k+f'_{k-1}\right)+\sum_{l=1}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l}}{(2l)!}\left(f_k^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+3}),$$

其中 B_{2l} 为贝努里(Bernoulli)数

$$B_2=\frac{1}{6},\ B_4=\frac{-1}{30},\ B_6=\frac{1}{42},\ B_8=\frac{-1}{30},\ B_{10}=\frac{5}{66},\ B_{12}=\frac{-691}{2730},$$

$$B_{14}=\frac{7}{6},\ \cdots.$$

注意到(1.3)并记 $\varepsilon'_k=f'_k-S'_k$ 就有

$$(1.6)\qquad \varepsilon'_k+\varepsilon'_{k-1}=\sum_{l=1}^{q}\frac{2B_{2l}h^{2l-1}}{(2l)!}\left(f_k^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+2}).$$

现在，我们令

$$(1.7)\qquad \varepsilon_k' = \sum_{l=1}^{q} C_l f_k^{(2l+1)} + O(h^{2l+2}),$$

其中C_l为待定常数。为了确定C_l将(1.7)代入(1.6)有

$$(1.8)\qquad \sum_{l=1}^{q} C_l\left(f_k^{(2l+1)} + f_{k-1}^{(2l+1)}\right) = \sum_{l=1}^{q} \frac{2B_{2l}h^{2l-1}}{(2l)!}\left(f_k^{(2l)} - f_{k-1}^{(2l)}\right) + O(h^{2q+2})$$

将 $f_k^{(2l+1)}$、$f_{k-1}^{(2l+1)}$、$f_k^{(2l)}$、$f_k^{(2l+1)}$ 在$x_{k-\frac{1}{2}}$展开为台罗级数，合并同类项并比较 $f_{k-\frac{1}{2}}^{(2l+1)}$ 的系数就可将C_l确定下来。

(1.8)经过上述办法处理后，两端比较$f_{k-\frac{1}{2}}^{(2l+1)}$系数有

$$\sum_{i=1}^{l} \frac{2C_i h^{2(l-i)}}{[2(l-i)]!\,2^{2(l-i)}} = \sum_{i=1}^{l} \frac{2B_{2i}h^{2l}}{(2i)!\,[2(l-i)+1]!\,2^{2(l-i)}},$$

或即

$$(1.9)\qquad C_l = \left(\frac{h}{2}\right)^{2l}\left\{\frac{2^{2l}B_{2l}}{(2l)!} + \sum_{i=1}^{l-1}\frac{2^{2}{}_{i}}{[2(l-i)]!}\left[\frac{B_{2i}}{(2i)!\,(2l-2i+1)} - C_i h^{-2i}\right]\right\},$$

$$l = 1, 2, \cdots, q.$$

由(1.9)容易导得

$$C_1 = \frac{h^2}{12},\quad C_2 = \frac{-h^4}{120},\quad C_3 = \frac{51h^6}{145052},\quad \cdots。$$

(1.8) (1.9) 称为梯形微分公式 (1.3) 的误差渐近估计式，它有助于研究新的精密度高的微分公式。运用微分方程的预报校正法(简称$P-C$法)可构造数值微分的预报校正法，运用数值积分的 Romberg 方法又可构造数值微分的外推算法。

1.2 梯形公式的预报校正法

中心差分的微分公式的误差是$O(h^2)$，而梯形微分公式的误差同样也是$O(h^2)$，将这二个公式适当组合起来，是否可获得精度更高的微分公式呢？

将积分

$$f_{k+1} = f_{k-1} + \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f'(t)\,dt$$

运用中矩形公式代入并整理得

$$f'_k=\frac{f_{k+1}-f_{k-1}}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''_k-\sum_{l=2}^{q}\frac{h^{2l}}{(2l+1)!}f_k^{(2l+1)}+O(h^{2q+2})$$

注意一下二次样条函数的微分公式有

$$f'_k=S'_k+\frac{h^2}{12}f'''_k+\sum_{l=2}^{q}C_l f_k^{(2l+1)}+O(h^{2q+2})$$

将后一式乘以 2 并加以前一式有

$$f'_k=\frac{1}{3}\left[2S'_k+\frac{f_{k+1}-f_{k-1}}{2h}\right]+\frac{1}{3}\sum_{l=2}^{q}\left[2C_l-\frac{h^{2l}}{(2l+1)!}\right]f_k^{(2l+1)}$$

$$+O\left(h^{2q+2}\right)=\frac{1}{3}\left[2S'_k+\frac{f_{k+1}-f_{k-1}}{2h}\right]+O(h^4).$$

由此我们得到预报校正法($P-C$法)如下：

第一步，运用中矩形微分公式作预报

(1.10)　　$I'_k=\dfrac{f_{k-1}-f_{k-1}}{2h}$　　　$f'_k-I'_k$ 的主要项 $-\dfrac{h^2}{6}f'''_k$

第二步，运用梯形公式作预报

(1.11)　　$S'_k=-S'_{k-1}+\dfrac{2(f_k-f_{k-1})}{h}$　　　$f'_k-S'_k$ 的主要项 $\dfrac{h^2}{12}f'''_k$

第三步，运用二次预报值作校正

(1.12)　　$V'_k=\dfrac{1}{3}\left(2S'_k+I'_k\right)$　　　$f'_k-V'_k$ 的主要项 $-\dfrac{h^4}{120}f_k^{(5)}$

在国外文献中有用下列方法作误差订正：

由于

$$f'_k=-f'_{k-1}+\frac{2(f_k-f_{k-1})}{h}+\frac{h^2}{6}f'''(\xi_k),$$

$$f'_k=\frac{f_{k+1}-f_{k-1}}{2h}-\frac{h^2}{6}f'''(\eta_k),$$

将上式加起来除以 2 有

(1.13)　　$$f'_k=-\frac{f'_{k-1}}{2}+\frac{f_k-f_{k-1}}{h}+\frac{f_{k+1}-f_{k-1}}{4h}+O(h^3)$$

而本文导得的结果(1.12)却达到了$O(h^4)$,(1.12)称为梯形微分的订正公式。

1.3 运用二次样条求数值微分的外推算法

外推算法思想是利用误差估计的渐近形式，将逐次分半的近似解恰当地组合起来获得高精度的解，由于算法简便，在近代数值逼近问题中被广泛采用。

现在根据本文导得结果，我们可运用逐次分半的样条函数方法求数值微分。首先，我们引用一个定理。

定理3 若$F(h)$逼近a_0的误差有下列渐近估计式

$$F(h)=a_0+a_1h^{p_1}+a_2h^{p_2}+a_3h^{p_3}+\cdots,$$

这里

$$p_i<p_{i+1},$$

定义序列$\{F_m(h)\}$如下：

$$\begin{cases} F_1(h)=F(h), \\ F_{m+1}(h)=F_m(h)+\dfrac{F_m(h)-F_m(qh)}{q^{p_m}-1} \end{cases}$$

那么$F_{m+1}(h)$逼近于a_0的误差有如下估计

$$F_{m+1}(h)=a_0+a_{m+1}^{(m+1)}h^{p_{m+1}}+a_{m+2}^{(m+1)}h^{p_{m+2}}+\cdots$$

其中$a_m^{(k)}$都是与h无关的适当常数，q为具体的常数，由使用者任意取定。

关于定理3，可运用归纳法得到证明。

现在我们研究数值微分的外推算法，注意(1.8)(1.9)式和定理3，取$q=\frac{1}{2}$，构造序列

$$(1.14)\qquad \begin{cases} F_{1,k}(h)=S'_k(h), \\ F_{m+1,k}(h)=\dfrac{2^{2m}F_{m,k}\left(\dfrac{h}{2}\right)-F_{m,k}(h)}{2^{2m}-1}, \\ m=1,2,\cdots. \end{cases}$$

那么$F_{m+1,k}(h)$逼近$f'(x_k)$的精确度达到了$h^{2(m+1)}$。算法由表1指明。

表1中，$F_{4,k}(h)$逼近$f'(x_k)$的精度达到了$O(h^8)$。

1.4 数值例子

例1 给定$f(x)=e^x$， $x=0.00(0.01)0.05$ 的一个表求数值微分．

解

方法1． 向后差分法．

$$(e^x)'_{x=x_k} \approx \frac{e^{x_k} - e^{x_{k-1}}}{0.01} \qquad \text{截断误差} \quad O(h)$$

表 1　①示计算步骤

1	2	3	4
$S'_k(h)$ ①	$F_{2,k}(h)$③	$F_{3,k}(h)$⑥	$F_{4,k}(h)$⑩
$S'_k\left(\frac{h}{2}\right)$②	$F_{2,k}\left(\frac{h}{2}\right)$⑤	$F_{3,k}\left(\frac{h}{2}\right)$⑨	
$S'_k\left(\frac{h}{2^2}\right)$④	$F_{2,k}\left(\frac{h}{2^2}\right)$⑧		
$S'_k\left(\frac{h}{2^3}\right)$⑦			
…			

方法 2． 中心差分法

$$(e^x)_{x=x_k} \approx \frac{e^{x_{k+1}} - e^{x_{k-1}}}{0.02} \qquad O(h^2)$$

法方 3． 二次样条插值法

$$\begin{cases} S'(x_k) = -S'(x_{k-1}) + \dfrac{2(e^{x_k} - e^{x_{k-1}})}{0.01} \\ S'(x_0) = e^0 = 1 \end{cases} \qquad O(h^2)$$

算得结果如表 2

表 2　（誤差表示眞值减去近似值）

x	e^x	方法 1	誤差	方法 2	誤差	方法 3	誤差
0.00	1.0000000						
0.01	1.0100502	1.00502	0.00503	1.01006	−0.00001	1.01004	0.00001
0.02	1.0202013	1.01511	0.00509	1.02022	−0.00002	1.02018	0.00002
0.03	1.0304545	1.02532	0.00513	1.03048	−0.00003	1.03046	−0.00001
0.04	1.0408108	1.03563	0.00518	1.04083	−0.00002	1.04080	0.00001
0.05	1.0512711	1.04603	0.00524			1.05126	0.00001

方法 4．　采用(1.13)的订正公式

$$\begin{cases} f'_k \approx -\dfrac{f'_{k-1}}{2} + \dfrac{f_k - f_{k-1}}{h} + \dfrac{f_{k+1} - f_{k+1}}{4h} \\ f'_0 = 1 \end{cases}$$

方法5． 预报校正法，取梯形公式2倍加上矩形公式再除以3．参见公式(1.10)——(1.12)。

计算结果如表3

表 3

x	e^x	方法4	誤差	方法5	誤差
0.00	1.0000000				
0.01	1.0100502	1.01005	0.00000	1.01005	0.00000
0.02	1.0202013	1.02020	0.00000	1.01019	0.00001
0.03	1.0304545	1.03046	−0.00001	1.01046	−0.00001
0.04	1.0408108	1.04081	0.00000	1.04081	0.00000
0.05	1.0512711				

表2与表3比较，校正公式的精确度较高。

§2. 三次样条函数求数值微分的误差漸近式

2.1 数值微分的辛浦生（Simpson）公式

取区间$[a,b]$的一个分划

Δ: $a = x_0 < x_0 < \cdots < x_N = b$,

其中节点分布是等距的，即$x_i = a + ih$，$h = \dfrac{b-a}{N}$且N为偶数。

$$f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}) = \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f'(t)dt, \tag{2.1}$$

对上式右端积分运用辛浦生公式有

$$f(x_{k+1}) - f(x_{k-1}) = \frac{h}{3}\left[f'(x_{k-1}) + 4f'(x_k) + f'(x_{k+1})\right] - \frac{h^5}{90} f^{(5)}(\xi_k), \tag{2.2}$$

其中 $\xi_k \in (x_{k-1}, x_{k+1})$。略去(2.2)右端余项，并记$f'(x_k)$的近似值为$S'_k$，就有

(2.3)
$$S'_{k-1}+4S'_k+S'_{k+1}=\frac{3(f_{k+1}-f_{k-1})}{h},$$
$$k=1,2,\cdots,N-1.$$

(2.3)是关于 S'_0, S'_1, …, S'_N共$N+1$个未知数的方程组，方程数目有$N-1$个。

若在端点补加适当条件（例如给出导数值）就可解得S'_k，从而定出 f'_k的近似值。

由于（2.3）由积分的辛浦生公式产生而得，故称为微分的辛浦生公式，又由于（2.3）是一方程组，故（2.3）又称为闭型微分公式，（2.3）与三次样条是密切相联系的。

（2.3）就是三次样条函数的三转角表示法〔2〕，这里借助B样条表示法〔3〕，直接验证这一事实。

定理4　若$S(x)\in S(\Delta,3)$并且是关于$f(x)$的插值函数，那么$S(x)$必满足(2.3)式，其中$S(\Delta,3)$是关于分划Δ的三次样条函数集合。

证明　由于$S(x)\in S(\Delta,3)$，并且节点是等距的，故$S(x)$可写成〔3〕

(2.4)
$$S(x)=\sum_{i=-1}^{N+1}C_i\Omega_3\left(\frac{x-x_i}{h}\right)$$

容易导得

$$S'(x_{k-1})=\frac{1}{h}\sum_{i=-1}^{N+1}C_i\Omega'_3\left(k-1-i\right)=\frac{C_k-C_{k-2}}{2h},$$

$$S'(x_k)=\frac{1}{h}\sum_{i=-1}^{N+1}C_i\Omega'_3\left(k-i\right)=\frac{C_{k+1}-C_{k-1}}{2h},$$

$$S'(x_{k+1})=\frac{1}{h}\sum_{i=-1}^{N+1}C_i\Omega'_3\left(k+1-i\right)=\frac{C_{k+2}-C_k}{2h}.$$

将$\frac{h}{3}$、$\frac{4h}{3}$、$\frac{h}{3}$分别乘上面三个式子并加起来有

(2.5)
$$\frac{h}{3}\Big[S'(x_{k-1})+4S'(x_k)+S'(x_{k+1})\Big]$$
$$=\frac{(C_k+4C_{k+1}+C_{k+2})-(C_{k-2}+4C_{k-1}+C_k)}{6}$$

现在，由于$f(x)$是$S(x)$的插值函数即$f(x_j)=S(x_j)$从而有

$$f(x_j)=S(x_j)=\sum_{i=-1}^{N+1}C_i\Omega_3(j-i)=\frac{C_{j-1}+4C_j+C_{j+1}}{6}$$
$$j=1,2,\cdots N-1.$$

从而(2.5)的右端等于

$$f(x_{k+1})-f(x_{k-1}),$$

定理4得证。

2.2 误差估计的渐近形式

由于辛浦生公式由二个梯形公式组合而得到，我们有

$$(2.6)\quad f(x_{k+1})-f(x_{k-1})=\int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}}f'(t)dt=h\left(f'_{k-1}+f'_{k+1}\right)-\sum_{l=1}^{q}\frac{B_{2l}(2h)^{2l}}{(2l)!}\left(f_{k+1}^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+3}),$$

$$(2.7)\quad f(x_{k+1})-f(x_{k-1})=\int_{x_{k-1}}^{x_k}f'(t)dt+\int_{x_k}^{x_{k+1}}f'(t)dt=\frac{h}{2}\left(f'_{k-1}+2f'_k+f'_{k+1}\right)-\sum_{l=1}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l}}{(2l)!}\left(f_{k+1}^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+3}).$$

将(2.6)乘以4并减去(2.7)就有

$$(2.8)\quad 3(f_{k+1}-f_{k-1})=h\left(f'_{k-1}+4f'_k+f'_{k+1}\right)-\sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l}(4-2^{2l})}{(2l)!}\left(f_{k+1}^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+3}).$$

由(2.8)减去(2.3)并记 $\varepsilon'_k=f'_k-S'_k$ 有

$$(2.9)\quad \varepsilon'_{k-1}+4\varepsilon'_k+\varepsilon'_{k+1}=\sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l-1}(4-2^{2l})}{(2l)!}\left(f_{k+1}^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+3}).$$

我们从(2.9)寻求 ε'_k 的表达式，为此令

$$(2.10)\quad \varepsilon'_i=\sum_{l=2}^{q}C_l f_i^{(2l+1)}+O(h^{2q+2}),$$

代入(2.9)式有

$$(2.11)\quad \sum_{l=2}^{q}C_l\left(f_{k-1}^{(2l+1)}+4f_k^{(2l+1)}+f_{k+1}^{(2l+1)}\right)=\sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l-1}(4-2^{2l})}{(2l)!}$$

$$\times\left(f_{k+1}^{(2l)}+f_{k-1}^{(2l)}\right)+O(h^{2q+3}).$$

类似于§1，我们将 $f_{k-1}^{(2l)}$、$f_{k+1}^{(2l)}$ 在x_k处展开为台罗级数有

$$\sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l-1}(4-2^{2l})}{(2l)!}\left(f_{k+1}^{(2l)}-f_{k-1}^{(2l)}\right)\tag{2.12}$$

$$=\sum_{l=2}^{q}\sum_{i=2}^{l}\frac{2B_{2i}h^{2l}(4-2^{2i})}{(2i)!\,[2(l-i)+1]!}f_k^{(2l+1)}+O(h^{2q+2}).$$

对于(2.11)右端同样在x_k展开为台罗级数有

$$\sum_{l=2}^{q}C_l\left(f_{k+1}^{(2l+1)}+4f_k^{(2l+1)}+f_{k-1}^{(2l+1)}\right)\tag{2.13}$$

$$=\sum_{l=2}^{q}\left(4C_l+\sum_{i=2}^{l}\frac{2C_ih^{2(l-i)}}{[2(l-i)]!}\right)f_k^{(2l+1)}+\sum_{l=2}^{q}C_lO(h^{2(q-l+1)}).$$

将(2.12)、(2.13)代入(2.11)并比较 $f_k^{(2l+1)}$ 的系数解得

$$C_l=\frac{h^{2l}}{3}\left\{\frac{(4-2^{l})B_{2l}}{(2l)!}+\sum_{i=2}^{l-1}\frac{1}{[2(l-i)]!}\left[\frac{(4-2^{2i})B_{2i}}{(2i)!\,[2(l-i)+1]}-C_ih^{-2i}\right]\right\}.\tag{2.14}$$

$$l=2,3,\cdots,q.$$

C_l代入(2.10)就有

$$\varepsilon_k'=f'(x_k)-S'(x_k)=\frac{h^4}{180}f_k^{(5)}-\frac{h^6}{1512}f_k^{(7)}-\frac{h^8}{25920}f_k^{(9)}+\cdots.\tag{2.15}$$

即对于充分光滑函数，$S'(x)$在节点处逼近 $f'(x)$的误差达到 h^4，也就是说三次样条函数的数值微分公式其精度是高的。

在 James W. Daniel 1974年的文章[1] 里给出的C_l 表达式如下

$$C_l=\left[\frac{1}{6(2l-1)!}-\frac{1}{(2l+1)!}+\frac{1}{6}\sum_{i=0}^{l-2}\frac{C_l}{(2l-3-2i)!}\right]h^{2l}\tag{2.16}$$

$$l=2,3,\cdots,q.$$

与(2.14)比较 C_2,C_3,C_4都是相同的，跟Dainel方法截然不同的是，我们运用了尤拉——麦克洛林求和公式，推导过程显得简洁。

2.3　三次样条插值函数求二阶导数的误差的渐近形式

为了研究三次样条函数求二阶导数的误差，我们先写出三弯距方程

$$(2.17)\qquad \frac{2}{h}(f_{k-1}-2f_k+f_{k+1}) = \frac{h}{3}\left(S''_{k-1} + 4S''_k + S''_{k+1}\right),$$

注意到下列的辛浦生公式

$$(2.18)\qquad f'(x_{k+1})-f'(x_{k-1}) = \int_{x_{k-1}}^{x_{k+1}} f''(t)dt = \frac{h}{3}\left(f''_{k-1} + 4f''_k + f''_{k+1}\right)$$

$$-\sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l}(4-2^{2l})}{3\cdot(2l)!}\left(f^{(2l+1)}_{k+1} - f^{(2l+1)}_{k-1}\right) + O(h^{2q+3}).$$

将(2.18)减去(2.17)并记 $\varepsilon''_k = f''_k - S''_k$ 有

$$(2.19)\qquad f'_{k+1} + f'_{k-1} - \frac{2}{h}\left(f_{k-1} - 2f_k + f_{k+1}\right) = \frac{h}{3}\left(\varepsilon''_{k-1} + 4\varepsilon''_k + \varepsilon''_{k-1}\right)$$

$$-\sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l}(4-2^{2l})}{3\cdot(2l)!}\left(f^{(2l)}_{k+1} - f^{(2l)}_{k-1}\right) + O(h^{2q+3}).$$

将 f'_{k+1}, f'_{k-1}, f_{k+1}, f_{k-1}在x_k处展开有

$$(2.20)\qquad f'_{k+1} - f'_{k-1} - \frac{2}{h}(f_{k-1} - 2f_k + f_{k+1})$$

$$= 2\sum_{l=1}^{q}\frac{1}{(2l+1)!}\left(\frac{l}{l+1}\right) h^{2l+1} f^{(2l+2)}_k + O(h^{2q+3}),$$

根据(2.12)有

$$(2.21)\qquad \sum_{l=2}^{q}\frac{B_{2l}h^{2l}(4-2^{2l})}{(2l)!}\left(f^{(2l+1)}_{k+1} - f^{(2l+1)}_{k-1}\right)$$

$$= \sum_{l=2}^{q}\sum_{i=2}^{l}\frac{2B_{2i}h^{2l+1}(4-2^{2i}}{(2i)!\,[2(l-i)+1]!} f^{(2l+2)}_k + O(h^{2q+3}),$$

令

$$(2.22)\qquad \varepsilon''_i = \sum_{l=1}^{q} C_l f^{(2l+2)}_i + O(h^{2q+2}),$$

将 $f^{(2l+2)}_{k-1}$、$f^{(2l+2)}_{k+1}$ 在x_k点展开为台罗级数有

$$(2.23)\qquad \varepsilon''_{k-1} + 4\varepsilon''_k + \varepsilon''_{k+1} = \sum_{l=1}^{q} C_l\left(f^{(2l+2)}_{k-1} + 4f^{(2l+2)}_k + f^{(2l+2)}_{k+1}\right)$$

$$= \sum_{l=1}^{q}\left(4C_l + \sum_{i=1}^{l}\frac{2C_i h^{2(l-i)}}{[2(l-i)]!}\right) f^{(2l+2)}_k + \sum_{l=1}^{q} C_l O(h^{2(q-l)+1}),$$

将(2.20)－(2.23)代入(2.19)并比较$f_k^{(2l+2)}$系数有

$$C_l=\frac{h^{2l}}{3}\left\{\frac{6l}{(2l+2)!}-\frac{C_1h^{-2}}{[2(l-1)]!}+\sum_{i=2}^{l-1}\frac{1}{[2(l-i)]!}\left[\frac{B_{2l}(4-2^{2i})}{[2(l-i)+1](2i)!}-C_ih^{-2i}\right]\right\},\quad l=2,3,\cdots q\ . \tag{2.24}$$

其中

$$C_1=\frac{h^2}{12}.$$

由(2.24)容易求得

$$C_2=\frac{-h^4}{360},\ C_3=-\frac{17}{60480}h^6,\ \cdots.$$

一般的有$C_k=O(h^{2k})$，从而$\sum_{l=1}^{q}C_lO(h^{2(q-l)+1})=O(h^{2q+1})$。

定理5　对于区间$[a,b]$的一个均匀分划

Δ:　$a=x_0<x_1<\cdots<x_N=b$，$x_i=a+ih$，$h=\dfrac{b-a}{N}$，N为偶数。若$S(x)\epsilon S(\Delta,3)$并且是$f(x)$的插值函数，那么有

$$f'(x_k)-S'(x_k)=\sum_{l=2}^{q}C_lf_k^{(2l+1)}+O(h^{2q+2}),$$

其中C_l与h^{2l}同阶且

$$C_l=\frac{h^{2l}}{3}\left\{\frac{(4-2^{2l})B_{2l}}{(2l)!}+\sum_{i=2}^{l-1}\frac{1}{[2(l-i)]!}\left[\frac{(4-2^{2i})B_{2i}}{(2i)![2(l-i)+1]}-C_ih^{-2i}\right]\right\}$$

$$l=2,3,\cdots,q\ .$$

$$f''(x_k)-S''(x_k)=\sum_{l=1}^{q}\overset{*}{C_l}f_k^{(2l+2)}+O(h^{2q+2}),$$

其中$\overset{*}{C_l}$与h^{2l}同阶且

$$\overset{*}{C_l}=\frac{h^{2l}}{3}\left\{\frac{6l}{(2l+2)!}-\frac{\overset{*}{C_1}h^{-2}}{[2(l-1)]!}\right.$$

$$+\sum_{i=2}^{l-1}\frac{1}{[2(l-i)]!}\left[\frac{B_{2i}(4-2^{2i})}{[2(l-i)+1](2i)!}-C_i^*h^{-2i}\right]\Bigg\},$$

$$C_1^*=\frac{h^2}{12},$$

$$l=2,3,\cdots,q.$$

§3. 提高三次样条二阶导数逼近的阶数

3.1 预报校正法(P-C法)

由台罗展开式求得

$$f_k''-\frac{f_{k+1}-2f_k+f_{k-1}}{h^2}\approx-\frac{h^2}{12}f_k^{(4)}-\frac{h^4}{360}f_k^{(6)}, \tag{3.1}$$

根据§2有

$$f_k''-S_k''\approx\frac{h^2}{12}f_k^{(4)}-\frac{h^4}{360}f_k^{(6)},$$

将上两式加起来并除以2便得

$$f_k''-\frac{1}{2}\left(S_k''+\frac{f_{k+1}-2f_k+f_{k-1}}{h^2}\right)\approx-\frac{h^4}{360}f_k^{(6)}. \tag{3.2}$$

也就是说$\frac{1}{2}\left(S_k''+\frac{f_{k+1}-2f_k+f_{k-1}}{h^2}\right)$逼近$f_k''$的精变达到了$h^4$。预报校正法步骤如下:

第一步，用二阶差分去逼近二阶导数

截断误差主要项

$$I_k=\frac{f_{k+1}-2f_k+f_{k-1}}{h^2}\qquad\Big\|-\frac{h^2}{12}f_k^{(4)}$$

第二步，运用三次样条插值函数的二阶导数去逼近$f(x)$的二阶导数

$$S_{k-1}''+4S_k''+S_{k+1}''=\frac{6}{h^2}\left(f_{k-1}-2f_k+f_{k+1}\right)\qquad\Big\|\frac{h^2}{12}f_k^{(4)}$$

第三步，运用第一、二步来校正导数值，即

$$f_k''\approx\frac{1}{2}\left(S_k''+\frac{f_{k+1}-2f_k+f_{k-1}}{h^2}\right)\qquad\Big\|-\frac{h^4}{360}f_k^{(6)}$$

3.2 Spline-on-Spline方法

这一方法是J.H.Ahlberg等在样条函数的理论及应用一书中提出的，现在我们运用误差估计的渐近式来分析这一方法的精度。根据三次样条函数逼近$f(x)$的

导数的估计式(2.15)，有

$$f'_k - S'_k = \frac{h^4}{180} f_k^{(5)} - \frac{h^6}{1512} f_k^{(7)} + \cdots,$$

令

$$K(x) = f'(x) - \frac{h^4}{180} f^{(5)}(x) + \frac{h^6}{1512} f^{(7)}(x),$$

易知

$$K(x_k) \approx S'_k.$$

对$K(x)$作三次样条插值，记之为$\bar{S}'(x)$，运用一阶导数的渐近估计式(1.15)有

$$K'(x_k) - \bar{S}''(x_k) = \frac{h^4}{180} K^{(5)}(x_k) - \frac{h^6}{1512} K^{(7)}(x_k)$$

将$K(x)$表达式代入上式就有

$$f''(x_k) - \bar{S}''(x_k) \approx \frac{h^4}{90} f_k^{(6)}。 \tag{3.3}$$

3.3 一次外推法

运用逐次分半法，将二个近似解适应组合起来也可将二次导数逼近的阶数提高到h^4，为此记$S''_{h,k}$、$S''_{2h,k}$分别为对应步长为h和$2h$的二个三次样条插值函数在同一点x_k处的二阶导数，由误差估计式有

$$f''_k - S''_{h,k} = \frac{h^2}{12} f_k^{(4)} - \frac{h^4}{360} f_k^{(6)} - \frac{h^6}{60480} f_k^{(8)} + \cdots$$

运用外推算法有

$$f''_k - \frac{4S''_{h,k} - S''_{2h,k}}{3} \approx \frac{h^4}{90} f_k^{(6)}. \tag{3.4}$$

3.4 数值例子

不必运用(2.17)（三弯距方程）来确定二阶导数，可运用三转角公式

$$S'_{k-1} + 4S'_k + S'_{k+1} = \frac{3(f_{k+1} - f_{k-1})}{h} \tag{3.5}$$

确定得一阶导数后直接求二阶导数

$$\begin{cases} S''_0 = -\dfrac{2}{h}\left[S'_1 + 2S'_0 - 3\cdot\dfrac{(f_1 - f_0)}{h}\right], \\ S''_k = \dfrac{2}{h}\left[S'_{k-1} + 2S'_k - 3\cdot\dfrac{(f_k - f_{k-1})}{h}\right], \\ k = 1, 2, \cdots, N, \end{cases} \tag{3.6}$$

为了解(3.5)必须补加边界条件有

第一边界条件。这时 f_0', f_N' 已给，相应的边界条件为

(3.7) $S_0' = f_0', \quad S_N' = f_N'.$

第二边界条件。f_0'', f_N''已知，这时有

$$(3.8)\quad \begin{cases} 2S_0' + S_1' = 3\dfrac{f_1 - f_0}{h} - \dfrac{h}{2} f_0'', \\ S_{N-1}' + 2S_N' = 3\dfrac{f_N - f_{N-1}}{h} + \dfrac{h}{2} f_N''. \end{cases}$$

第三边界条件。$f(x)$是周期函数，这时有$S_0' = S_N'$，$S_0'' = S_N''$

即

$$\begin{cases} S_0' = S_N', \\ 3\dfrac{f_1 - f_0}{h} - (S_1' + 2S_0') = -3\dfrac{f_N - f_{N-1}}{h} + S_{N-1}' + 2S_N'. \end{cases}$$

例2 给定函数 $y = \dfrac{1}{x}$ 在$x = 2(1)6$的表及端点导数值，求 $y = \dfrac{1}{x}$在诸点的一阶、二阶导数。

解 由三转角方程有

$$\begin{cases} 4S_1' + S_2' &= \dfrac{3(f_2 - f_0)}{h} - f_0', \\ S_1' + 4S_2' + S_3' &= \dfrac{3(f_3 - f_1)}{h}, \\ \qquad S_2' + 4S_3' &= \dfrac{3(f_4 - f_2)}{h} - f_4'. \end{cases}$$

由矩阵求逆有

$$\begin{pmatrix} S_1' \\ S_2' \\ S_3' \end{pmatrix} = \frac{1}{56}\begin{pmatrix} 15 & -4 & 1 \\ -4 & 16 & -4 \\ 1 & -4 & 15 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} \\ -\frac{2}{5} \\ -\frac{2}{9} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -0.10734 \\ -0.062698 \\ -0.039881 \end{pmatrix},$$

$$S_0'' = -2\left[S_1' + 2S_0' - 3(f_1 - f_0)\right] = 0.21468\,,$$

$$S_1'' = 2\left[S_0' + 2S_1' - 3(f_1 - f_0)\right] = 0.07064\,,$$

$$S_2'' = 2\left[S_1' + 2S_2' - 3(f_2 - f_1)\right] = 0.03453\,,$$

$$S_3'' = 2\left[S_2' + 2S_3' - 3(f_3 - f_2)\right] = 0.01508\,,$$

$$S_4'' = 2\left[S_3' + 2S_4' - 3(f_4 - f_3)\right] = 0.009126\,.$$

若记差分算法

$$f_k'' \approx I_k = \frac{f_{k+1} - 2f_k + f_{k-1}}{h^2}\,,$$

我们容易求得

$$I_0 = 0.3\,,\qquad I_1 = 0.08333\,,\qquad I_2 = 0.033333\,,$$

$$I_3 = 0.01667,\qquad I_4 = 0.009524\,.$$

有了差分法和样条函数法就可求得预报校正法，兹将计算结果列表如下

表　4

x	y	y′准确值	S′	誤差
2	0.500000	−0.250000	−0.250000	0.000000
3	0.333333	−0.111111	−0.107340	−0.003771
4	0.250000	−0.062500	−0.062698	+0.000198
5	0.200000	−0.040000	−0.039881	−0.000119
6	0.166667	−0.027778	−0.027778	0.000000

表　5

x	y″	条样法	誤差	差分法	誤差	P−C法	誤差
2	0.250000	0.21468	0.04532	0.300000	−0.05000	0.25734	−0.00734
3	0.074074	0.07064	0.003334	0.08333	−0.09260	0.076985	−0.002911
4	0.031250	0.03453	−0.00328	0.033333	−0.00208	0.033930	−0.00268
5	0.016000	0.01508	0.00092	0.01667	−0.00067	0.015875	−0.000125
6	0.009259	0.009126	0.000133	0.009524	−0.000265	0.009325	−0.000066

从表5看出，经校正后精度确实提高了。

最后，我们运用Splin—on—Spine 求二次导数近似值。为此，假设

$$\bar{S}''_0 = f''_0 = 0.250000 .$$

$$\bar{S}''_4 = f''_4 = 0.009259 .$$

由 Spline—on—Spline 的定义有

$$\begin{pmatrix} \bar{S}''_1 \\ \bar{S}''_2 \\ \bar{S}''_3 \end{pmatrix} = \frac{1}{56}\begin{pmatrix} 15 & -4 & 1 \\ -4 & 16 & -4 \\ 1 & -4 & 15 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 3(S'_2 - S'_0) - f''_0 \\ 3(S'_3 - S'_1) \\ 3(S'_4 - S'_2) - f''_4 \end{pmatrix}$$

$$= \frac{1}{56}\begin{pmatrix} 15 & -4 & 1 \\ -4 & 16 & -4 \\ 1 & -4 & 15 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 0.311906 \\ 0.202377 \\ 0.095501 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0.070798 \\ 0.028714 \\ 0.016697 \end{pmatrix}$$

表 6

x	y″	Spline-on-Spline	誤差
2	0.250000		
3	0.074074	0.070798	0.003276
4	0.031250	0.028714	0.002536
5	0.016000	0.016697	0.0006966
6	0.009259		

Spline—on—Spline 比S''_k的精度高一些，但要用到f''的端点导数值，而且，尽管这样做了还是比不上预报校正法的精度高。

参 考 文 献

〔1〕 James W. Daniel, *Asymptotic Error Expansions for Spline Interpolation: Some Remarks*, AD-786226, 1974.

〔2〕 Ahlberg, J. H., Nilson, E. N., and Wash, J. L., *The Theory of Splines and Their Applications*, 1967.

〔3〕 李岳生、黄友谦，数値逼近，人民教育出版社，1978.

〔4〕 Philip J Davis, Philip Rabinowitz, *Methods of Numerical Integration*, New York, 1975.

〔5〕 И. С. Березин, Н. П. Жидков, Методы вычислений (I); Москва, 1959.

Asymptotic Error Estimations for Spline Interpolation Function and Their Applications in Numerical Differentiation

Huang Youqian

Abstract

In this paper, asymptotic error estimations for some spline interpolation functions and the structure of numerical differentiation are given. They are used to find the errors for spline-on-spline, satisfy the relations

$$f''(x_k)-\bar{S}''(x_k)\approx\frac{h^4}{90}f_k^{(6)},\qquad k=1,2,\cdots,N-1.$$

学·术·动·态

我校学术代表团訪问美国加州大学

以李嘉人校长为团长、黄焕秋副校长为副团长的中山大学学术代表团，应美国加州大学洛杉矶校的邀请，于今年四至五月，前往美国访问，历时二十四天。

代表团重点访问了加州大学系统（洛杉矶、雷弗沙德、圣地亚哥、欧旺、圣地巴巴拉、戴维斯和伯克莱等七个校园）。此外，还顺道访问了美国科学促进协会、哈佛大学、纳布拉斯加大学和阿拉斯加太平洋大学。代表团所到之处，受到了各方面的热情接待。中山大学、岭南大学在美国的校友以及中国血统的美籍学者，纷纷与代表团会见和座谈，他们对我国四个现代化甚为关心，对学术交流提出了很好的建议。

代表团与加州大学洛杉矶校就两校之间学术交流的具体项目，进行了详细的讨论，并商定了双方合作的科学研究项目。