最佳平方逼近

黄 猛*

北京航空航天大学 数学科学学院

假定 Y 是赋范线性空间 X 的一个线性子空间，对任给的 $x \in X$，我们试图寻找 $y^* \in Y$ 使得 y^* 是 Y 中对 x 的最佳逼近。数学上，我们可以将问题描述为：**对于给定的 $x \in X$ 以及空间 X 上的范数 p, 寻找 $y^* \in Y$ 使得**

$$\|y^* - x\|_p = \inf_{y \in Y} \|y - x\|_p.$$

我们称 y^* 为最佳逼近元，Y 为逼近子空间，且

$$\Delta(x, Y) = \inf_{y \in Y} \|y - x\|_p$$

为空间 Y 对 x 的最佳逼近.

对空间 X 选取不同的范数将导致不同的逼近结果，我们通常考虑如下三种范数：L_∞, L_1 以及 L_2. 当选取 $p = L_\infty$ 范数时，该问题为最佳一致逼近问题；当选取 $p = L_2$ 范数时，该问题为最佳平方逼近问题.

1 最佳平方逼近

定义 1. 设 X 是数域 $\mathbb{F}$ *(*$\mathbb{R}$ 或 $\mathbb{C}$*)* 上的线性空间，若二元函数 $\langle\, ,\, \rangle : X \times X \to \mathbb{F}$ 满足条件：

(1) $\langle x, y\rangle = \overline{\langle y, x\rangle}, \quad \forall x, y \in X$

(2) $\langle \alpha x, y\rangle = \alpha\langle x, y\rangle, \quad \forall \alpha \in \mathbb{F},\ x, y \in X$

(3) $\langle x + y, z\rangle = \langle x, z\rangle + \langle y, z\rangle, \quad \forall x, y, z \in X$

(4) $\langle x, x\rangle \geq 0, \quad \forall x \in X$, 当且仅当 $x = 0$ 时，$\langle x, x\rangle = 0$，

*电子邮件: menghuang@buaa.edu.cn

则称 X 为内积空间，且 $\langle\,,\,\rangle$ 为 X 上的内积。

给定内积空间 X，称函数 $\|x\|_2=\sqrt{\langle x,x\rangle}$ 为内积空间诱导的范数。由此引出内积空间中的最佳逼近问题：假设 Y 是内积空间 X 的一个线性子空间，给定 $f\in X$, 寻找 $y^*\in Y$ 使得

$$\|y^*-f\|_2=\inf_{y\in Y}\|y-f\|_2.$$

一个自然的问题是，最佳逼近元 y^* 是否存在？如果存在，是否唯一？下面的定理给出了 y^* 的一个刻画.

定理 1.1. 假设 Y 是内积空间 X 的一个线性子空间，$f\in X$，那么 $y^*\in Y$ 是 f 的一个最佳逼近元当且仅当

$$\langle f-y^*,y\rangle=0,\quad \forall y\in Y.$$

Proof. 先证充分性：如果 $\langle f-y^*,y\rangle=0$, $\forall y\in Y$, 那么对任意的 $y\in Y$, 均有

$$\begin{aligned}\|y-f\|_2^2=\|y^*-f+y-y^*\|_2^2 &= \|y^*-f\|_2^2+2\langle y^*-f,y-y^*\rangle+\|y-y^*\|_2^2\\ &= \|y^*-f\|_2^2+\|y-y^*\|_2^2\\ &\geq \|y^*-f\|_2^2.\end{aligned}$$

因而，y^* 是 f 的一个最佳逼近元.

必要性：假设存在 $y\in Y$ 使得 $\langle f-y^*,y\rangle\neq 0$. 不妨设 $\langle f-y^*,y\rangle>0$. 那么

$$\|f-y^*-ty\|_2^2=\|f-y^*\|_2^2-2t\langle f-y^*,y\rangle+t^2\|y\|_2^2.$$

我们可以选择充分小的 $t>0$, 使得

$$-2t\langle f-y^*,y\rangle+t^2\|y\|_2^2<0,$$

则有

$$\|f-(y^*+ty)\|_2<\|f-y^*\|_2.$$

这与 y^* 是 f 的最佳逼近元矛盾，因而 $\langle f-y^*,y\rangle=0$, $\forall y\in Y$. □

定理 1.1 告诉我们，f 在线性子空间 Y 上的最佳逼近元就是 f 在 Y 上的正交投影. 关于闭凸集上的投影，我们有如下刻画：

定理 1.2 (闭凸集上的投影). 设 X 是 *Hilbert* 空间，$K\subset X$ 是非空闭凸集，则对任意 $f\in X$，存在唯一的 $y^*\in K$ 使得

$$\|f-y^*\|_2=\inf_{y\in K}\|f-y\|_2.$$

Proof. 练习. □

上述定理说明，只要线性子空间 Y 是闭的，那么相应的最佳逼近问题存在且唯一.

1.1 有限维空间的最佳平方逼近

引理 1. 假设 Y 是内积空间 X 的一个有限维线性子空间，则 Y 是闭的.

上述引理告诉我们，有限维空间中的最佳平方逼近问题始终是存在且唯一的。接下来，我们介绍如何计算最佳逼近。假设内积空间 Y 的一组基为 $\phi_1, \ldots, \phi_n$，即

$$Y = \text{span}\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}.$$

对于给定的 $f \in X$，我们试图寻找 $y^* \in Y$ 使得

$$\|y^* - f\|_2 = \inf_{y \in Y} \|y - f\|_2.$$

定理 1.1 告诉我们，这样的 y^* 必然满足条件 $\langle f - y^*, y \rangle = 0,\ \forall y \in Y$. 也就是说，$f - y^* \perp Y$. 由于 $y^* \in Y$，不妨设

$$y^* = \alpha_1\phi_1 + \alpha_2\phi_2 + \cdots + \alpha_n\phi_n.$$

由正交条件 $\langle f - y^*, \phi_k \rangle = 0, k = 1, \ldots, n$ 可得

$$\langle f, \phi_k \rangle = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j \langle \phi_j, \phi_k \rangle, \quad k = 1, \ldots, n.$$

改写成矩阵形式为

$$G\alpha = f_Y,$$

其中

$$G = \begin{bmatrix} \langle \phi_1, \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_1, \phi_n \rangle \\ \langle \phi_2, \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_2, \phi_n \rangle \\ \cdots & \cdots & \cdots \\ \langle \phi_n, \phi_1 \rangle & \cdots & \langle \phi_n, \phi_n \rangle \end{bmatrix}, \quad \alpha = \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \cdots \\ \alpha_n \end{bmatrix}, \quad f_Y = \begin{bmatrix} \langle f, \phi_1 \rangle \\ \langle f, \phi_2 \rangle \\ \cdots \\ \langle f, \phi_n \rangle \end{bmatrix}.$$

我们称 G 为 Gram 矩阵，相应的行列式为 Gram 行列式。如果矩阵 G 可逆，则最佳逼近元 y^* 的系数向量 $\alpha = G^{-1} f_Y$. 事实上，由于 $\phi_1, \ldots, \phi_n$ 为空间 Y 的一组基，如下定理告诉我们，其对应的 Gram 矩阵始终可逆.

定理 1.3. 假设 X 是内积空间，则 $\phi_1, \ldots, \phi_n \in X$ 线性相关当且仅当相应的 *Gram* 行列式为零.

假设我们得到了 $f \in X$ 在线性子空间 Y 上的最佳逼近元 $y^* = \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \phi_i$，则最佳平方逼近误差为:

$$\Delta^2(f, Y) := \|f - y^*\|_2^2 = \langle f - y^*, f - y^* \rangle = \langle f - y^*, f \rangle = \|f\|_2^2 - \sum_{i=1}^n \alpha_i^* \langle \phi_i, f \rangle.$$

几何上，令 $\Delta = f - y^*$, 则

$$\langle f, f \rangle = \langle \Delta + y^*, \Delta + y^* \rangle = \langle \Delta, \Delta \rangle + \langle y^*, y^* \rangle.$$

作业：求 x^3 在区间 $[0, 1]$ 上的二次最佳平方逼近多项式.

1.2 $L_\rho^2[a, b]$ 中的最佳平方逼近

我们首先引入权函数的概念。

定义 2. 假设 $\rho(x)$ 是一个在区间 $[a, b]$ 上 *Lebesgue* 可积的非负函数，它至多在一个零测集上可能为零，则我们称 ρ 为一个权函数.

对于任意一个定义在区间 $[a, b]$ 上的可测函数 f, 如果 $\rho \cdot f$ 是 Lebesgue 可积的，则说 f 属于 $L_\rho[a, b]$ 类；如果 $\rho \cdot f^2$ 是 Lebesgue 可积的，则说 f 属于 $L_\rho^2[a, b]$ 类. $L_\rho^2[a, b]$ 按如下定义的内积构成一内积空间:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) \, dx, \quad f, g \in L_\rho^2[a, b].$$

该内积空间的范数为:

$$\|f\|_2 = \sqrt{\int_a^b \rho(x) f^2(x) \, dx}.$$

那么，在空间 $L_\rho^2[a, b]$ 上，我们可以考虑相应的最佳逼近问题：假设

$$Y = \text{span}\{\phi_1, \ldots, \phi_n\},$$

其中 $\phi_1, \ldots, \phi_n \in L_\rho^2[a, b]$ 线性无关. 所谓$L_\rho^2[a, b]$ 最佳逼近就是对任意的函数 $f \in L_\rho^2[a, b]$ 寻找一函数 $y^* \in Y$ 使得 $\|f - y^*\|_2$ 达到最小. 利用上一小节关于内积空间上最佳平方逼近的一般理论，可以得到 $L_\rho^2[a, b]$ 上最佳逼近的存在唯一性、误差估计以及解的构造方法.

为了求解过程的数值稳定性，我们考虑由一组正交基生成的子空间. 设 $\rho(x)$ 为定义在区间 $[a, b]$ 上的权函数，如果函数 $f, g \in L_\rho^2[a, b]$ 满足条件:

$$\langle f, g \rangle = \int_a^b \rho(x) f(x) g(x) \, dx = 0,$$

则称 f 和 g 在 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交. 如果函数系统

$$\phi_1, \phi_2, \ldots$$

中的每一对函数在区间 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 正交，则称该系统为 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 的正交函数系. 进一步，若每一个函数 $\|\phi_k\|_2 = 1, k = 1, 2, \ldots$, 则称该系统为规范正交系.

对于最佳平方逼近问题，如果 $\phi_1, \ldots, \phi_n$ 满足正交条件，则最佳逼近元的系数为:

$$\alpha_k = \frac{\langle f, \phi_k \rangle}{\langle \phi_k, \phi_k \rangle}, \quad k = 1, \ldots, n,$$

最佳平方逼近为:

$$y^*(x) = \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \phi_k(x) = \sum_{k=1}^{n} \frac{\langle f, \phi_k \rangle}{\langle \phi_k, \phi_k \rangle} \phi_k(x).$$

误差估计为:

$$\Delta^2(f, Y) = \|f\|_2^2 - \sum_{k=1}^{n} \frac{|\langle f, \phi_k \rangle|^2}{\|\phi_k\|_2^2}.$$

下面我们介绍广义 Fourier 级数展开的问题：假设 $\phi_1, \phi_2, \ldots$ 是一组正交系统，取

$$\alpha_k = \frac{\langle f, \phi_k \rangle}{\langle \phi_k, \phi_k \rangle} = \frac{\int_a^b \rho(x) f(x) \phi_k(x) dx}{\int_a^b \rho(x) \phi_k^2(x) dx}, \quad k = 1, 2, \ldots$$

则称级数

$$f(x) \sim \sum_{k=1}^{\infty} \alpha_k \phi_k$$

为 f 的广义 Fourier 级数展开.

定理 1.4. *假设 $\{\phi_1, \phi_2, \ldots\}$ 是一组正交系统，子空间 $Y = span\{\phi_1, \ldots, \phi_n\}$，则对任意给定的函数 $f \in L_\rho^2[a,b]$, 其在子空间 Y 上的最佳平方逼近就是 f 广义 Fourier 级数展开的部分和 $S_n(x) := \sum_{k=1}^{n} \alpha_k \phi_k$.*

由于逼近误差 $\Delta^2(f, Y) \geq 0$, 因此，我们有

$$\sum_{k=1}^{n} \frac{|\langle f, \phi_k \rangle|^2}{\|\phi_k\|_2^2} \leq \|f\|_2^2.$$

令 $n \to \infty$ 有

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\langle f, \phi_k \rangle|^2}{\|\phi_k\|_2^2} \leq \|f\|_2^2,$$

这就是 Bessel 不等式. 根据逼近误差的估计可知，上述 Bessel 不等式能改成 Parseval 等式

$$\sum_{k=1}^{\infty} \frac{|\langle f, \phi_k \rangle|^2}{\|\phi_k\|_2^2} = \|f\|_2^2$$

的充要条件是

$$\lim_{n\to\infty}\|S_n - f\|_2 = 0.$$

为了给出广义 Fourier 级数收敛的等价条件，我们引入如下定义：若一个正交函数系 $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ 对于 $L_\rho^2[a,b]$ 中的每一个函数 Parseval 等式成立，则称它是**封闭**的正交函数系. 给定一个正交函数系 $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$，如果 $L_\rho^2[a,b]$ 中再没有一个函数与一切 ϕ_k 正交，那么称它为**完备**的正交函数系.

正交系的完备性与封闭性等价. 一般地，我们有如下结论：

定理 1.5. 假设 $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ 是 $L_\rho^2[a,b]$ 中一正交函数系，则下列论断彼此等价：

(1) $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ 是完备正交系

(2) $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ 是封闭正交系

(3) *Parseval* 等式对每个 $f \in L_\rho^2[a,b]$ 成立

(4) $L_\rho^2[a,b]$ 中每个函数 f 的 *Fourier* 级数都平均收敛

(5) 不存在与正交系 $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ 中所有元素均正交的非零元

(6) *span* $\{\phi_k\}_{k=1}^{\infty}$ 在 $L_\rho^2[a,b]$ 中处处稠密

(7) 当两个函数有相同的 *Fourier* 级数时，它们必定几乎处处相等

例如，三角函数系 $\{1, \cos x, \sin x, \cos 2x, \sin 2x, \ldots\}$ 是 $L^2_{[0,2\pi]}$ 上的一个完备正交系. 另外，任何一组线性无关系都可以通过 Schmidt 标准正交化过程得到一个规范正交系.

作业：确定函数 $e^x \in L^2_{[0,1]}$ 在子空间 Y =span$\{1, x\}$ 上的最佳平方逼近。

2 $L_\rho^2[a,b]$ 上的正交多项式

将幂函数系 $\{1, x, x^2, \ldots\}$ 通过 Schmidt 正交化过程就可以得到空间 $L_\rho^2[a,b]$ 的一组正交多项式 $\{\omega_0, \omega_1, \ldots\}$. 自然，根据权函数 $\rho(x)$ 以及区间的不同选择，我们可以得到不同的正交多项式. 在介绍一些常用的正交多项式之前，我们先看看正交多项式具有哪些很好的性质。

2.1 正交多项式的性质

在 $L_\rho^2[a,b]$ 空间中，由幂函数系经正交化得到的正交多项式系有下列性质：

（1）$\omega_n(x)$ 是 n 次代数多项式；

（2）任何不高于 n 次的多项式 $p_n(x) \in \text{span}\{\omega_0, \ldots, \omega_n\}$；

（3）$\omega_n(x)$ 在 $L^2_\rho[a,b]$ 中与所有次数不超过 $n-1$ 次的多项式正交.

（4）具有三项递推关系。具体来说，假设 $\{\omega_k(x)\}_{k=0}^{\infty}$ 为区间 $[a,b]$ 上首项系数均为 1 的正交多项式，则

$$\omega_{k+1(x)} = (x-\beta_k)\omega_k(x) - r_k\omega_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \ldots$$

其中，

$$\beta_k = \frac{\langle x\omega_k, \omega_k\rangle}{\langle \omega_k, \omega_k\rangle}, \quad r_k = \frac{\langle \omega_k, \omega_k\rangle}{\langle \omega_{k-1}, \omega_{k-1}\rangle}.$$

（5）$\omega_n(x)$ 在区间 (a,b) 上有 n 个互异实根.

2.2 常用的正交多项式

2.2.1 Legender 多项式

当区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 时，由幂函数系 $\{1, x, x^2, \ldots\}$ 正交化得到的多项式称为 Legender 多项式，其简单表达形式为：

$$P_n(x) = \frac{1}{2^n n!}\left(\frac{d}{dx}\right)^n (x^2-1)^n, \quad n = 1, 2, \ldots$$

$P_n(x)$ 首项系数为：

$$\frac{2n(2n-1)\cdots(n+1)}{2^n n!} = \frac{2n!}{2^n(n!)^2}.$$

三项递推关系为：

$$P_0(x) = 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_{k+1}(x) = \frac{2k+1}{k+1}xP_k(x) - \frac{k}{k+1}P_{k-1}(x), \quad k = 1, 2, \ldots$$

正交性：

$$\int_{-1}^{1} P_n(x)P_m(x)dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{2}{2n+1}, & m = n \end{cases}$$

2.2.2 第一类 Chebyshev 多项式

区间为 $[-1,1]$，权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$，表达形式为：

$$T_n(x) = \cos(n \arccos x).$$

递推关系：

$$T_0(x) = 1, \quad T_1(x) = x, \quad T_{n+1}(x) = 2xT_n(x) - T_{n-1}(x)$$

$T_n(x)$ 首项系数为 2^{n-1}，且在点列 $x_k = \cos(\frac{k\pi}{n}), k = 0, \dots, n$ 上正负交错达到最大值 1.

正交性：

$$\int_{-1}^{1} \frac{T_n(x)T_m(x)}{\sqrt{1-x^2}} dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{\pi}{2}, & m = n \neq 0 \\ \pi, & m = n = 0 \end{cases}$$

2.2.3 第二类 Chebyshev 多项式

区间为 $[-1, 1]$，权函数 $\rho(x) = \sqrt{1-x^2}$, 表达形式为：

$$U_n(x) = \frac{\sin((n+1)\arccos x)}{\sqrt{1-x^2}}$$

递推关系：

$$U_0(x) = 1, \quad U_1(x) = 2x, \quad U_{n+1}(x) = 2xU_n(x) - U_{n-1}(x).$$

正交性：

$$\int_{-1}^{1} \sqrt{1-x^2} U_n(x) U_m(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ \frac{\pi}{2}, & m = n \end{cases}$$

作业：证明上述正交性.

2.2.4 Laguerre 多项式

在区间为 $[0, +\infty)$ 关于权函数 $\rho(x) = e^{-x}$ 正交，表达形式为：

$$L_n(x) = e^x \left(\frac{d}{dx}\right)^n (x^n e^{-x}), \quad n = 1, 2, \dots$$

递推关系：

$$L_0(x) = 1, \quad L_1(x) = 1 - x, \quad L_{n+1}(x) = (1 + 2n - x)L_n(x) - n^2 L_{n-1}(x).$$

正交性：

$$\int_{0}^{\infty} e^{-x} L_n(x) L_m(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ (n!)^2, & m = n \end{cases}$$

2.2.5 Hermite 多项式

在区间为 $(-\infty, +\infty)$ 关于权函数 $\rho(x) = e^{-x^2}$ 正交，表达形式为：

$$H_n(x) = (-1)^n e^{x^2} \left(\frac{d}{dx}\right)^n (e^{-x^2}), \quad n = 1, 2, \dots$$

递推关系：

$$H_0(x) = 1, \quad H_1(x) = 2x, \quad H_{n+1}(x) = 2xH_n(x) - 2nH_{n-1}(x).$$

正交性:
$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-x^2} H_n(x) H_m(x) dx = \begin{cases} 0, & m \neq n \\ 2^n n! \sqrt{\pi}, & m = n \end{cases}$$

3 最小二乘

给定一组数据 $\{(x_i, y_i)\}_{i=1}^n$, 欲在函数空间 $\Phi_m = \text{span}\{\phi_1, \ldots, \phi_m\}$ $(m < n)$ 中寻找一函数 $\phi(x) = \sum_{k=1}^m c_k \phi_k(x)$，使得
$$\sum_{i=1}^n (y_i - \phi(x_i))^2$$
达到最小. 上述问题可以写成矩阵的形式:
$$\min_{c \in \mathbb{R}^m} \|Ac - y\|_2^2,$$
其中
$$A = \begin{bmatrix} \phi_1(x_1) & \phi_2(x_1) & \cdots & \phi_m(x_1) \\ \phi_1(x_2) & \phi_2(x_2) & \cdots & \phi_m(x_2) \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \phi_1(x_n) & \phi_2(x_n) & \cdots & \phi_m(x_n) \end{bmatrix} \quad c = \begin{bmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \cdots \\ c_m \end{bmatrix}, \quad y = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \cdots \\ y_n \end{bmatrix}.$$
由无约束优化问题的最优性条件可知，上述问题的解满足条件:
$$A^T A c = A^T y. \tag{1}$$

上述方程组 (1) 称为最小二乘问题的法方程组.

从几何的角度，最小二乘问题可以看成是向量 $y \in \mathbb{R}^n$ 在矩阵 A 的列空间的正交投影. 换句话说，就是寻找向量 $y \in \mathbb{R}^n$ 在矩阵 A 的列空间的最佳平方逼近. 因此，也可以从最佳平方逼近的角度去计算最小二乘.

作业：给定一组数据

x	1	2	3	4	5	6	7	8	9
y	201	159	61	77	40	17	25	103	156

选择基函数 $1, x, x^2$，基于最小二乘建立 y 与 x 的关系.

数值积分

黄　猛*

北京航空航天大学　数学科学学院

May 22, 2023

1　简介

数值积分是一种通过近似方法求解定积分的技术。在许多实际问题中，解析方法可能难以应用或无法解析地求出积分。考虑积分

$$\int_a^b f(x)\,dx,$$

若找到 $f(x)$ 的原函数 $F(x)$, 则 Newton-Leibniz 公式：

$$\int_a^b f(x)\,dx = F(b) - F(a).$$

（1）实际中有些被积函数的原函数不能用初等函数表示, 如

$$f(x) = \frac{\sin x}{x}, e^{x^2}, \ldots$$

（2）即使能求原函数，有时计算困难，如 $f(x) = \frac{1}{1+x^6}$.

（3）$f(x)$ 表达式未知，只有观测或数值计算给出的数据表.

在这些情况下，数值积分成为了一种重要的替代方法。

我们先从直观上感受一下数值积分。由于定积分表示被积函数下方的面积，因此一个简单的近似方法为：将区间 $[a, b]$ 划分为 n 个等距子区间，每个子区间的宽度为 $h = \frac{b-a}{n}$。

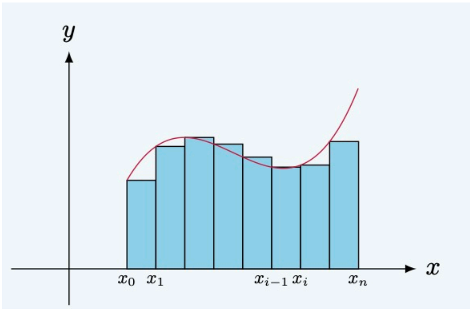
*电子邮件: menghuang@buaa.edu.cn

然后在每个子区间上用一个矩形或梯形近似曲线下的面积。由此，我们可以得到如下积分公式：

（1）左矩形法：取每个子区间的左端点的函数值作为高度

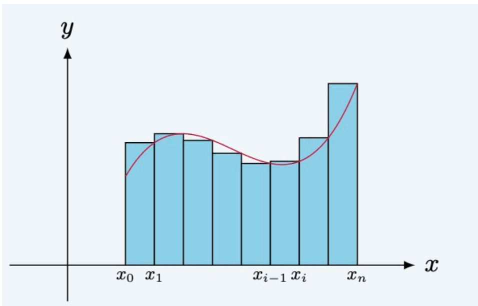
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{n}\left(f(x_0)+f(x_1)+\cdots+f(x_{n-1})\right),$$

其中 $x_k = a + kh, k = 0, 1, \ldots, n.$



（2）右矩形法：取每个子区间的右端点的函数值作为高度

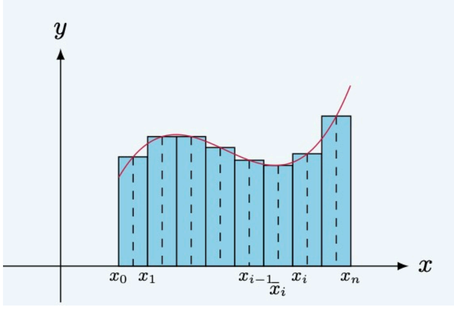
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{n}\left(f(x_1)+f(x_2)+\cdots+f(x_n)\right).$$



（3）中点矩形法：取每个子区间的中点的函数值作为高度

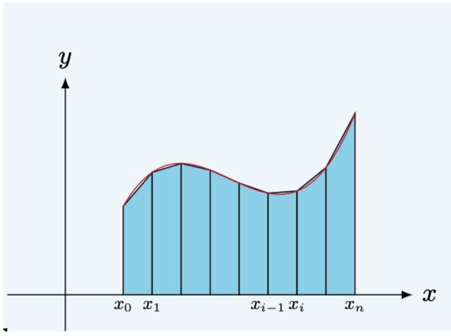
$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{n}\left(f(x_1^*)+f(x_2^*)+\cdots+f(x_n^*)\right),$$

其中 x_i^* 为每个区间的中点.



（4）梯形法：在每个子区间上用一个梯形近似曲线下的面积

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx \frac{b-a}{2n}\left(f(x_0)+2f(x_1)+2f(x_2)+\cdots+2f(x_{n-1})+f(x_n)\right).$$



直观上，我们得到了一些数值积分公式。到目前为止，我们还并不知道这些积分公式对定积分近似程度的好坏。接下来，我们将从代数的角度提出更多的数值积分公式，并给出误差分析。

2 基本概念

数值积分是通过对给定函数 $f(x)$ 在区间 $[a,b]$ 上进行离散化来近似计算定积分的方法。考虑带权积分，典型的求积公式具有如下形式：

$$I(f) := \int_a^b \rho(x)f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) := I_{n+1}(f), \tag{1}$$

其中 x_k 是求积公式的节点，A_k 是求积系数，其值与被积函数无关.

为了刻画求积公式的好坏，我们引入代数精度的概念.

定义 1. 如果某个求积公式对于次数不超过 m 的多项式均能精确地成立, 但对于 $m+1$ 次多项式就不精确成立，则称该求积公式具有 m 次代数精度。

为了验证求积公式的代数精度，我们只需对多项式的一组基进行验证就可以了。具体来说，

（1）把 $f(x)=1,x,\ldots,x^m$ 都代入求积公式，均精确成立；

（2）把 $f(x)=x^{m+1}$ 代入，求积公式不精确成立；

例如：左矩形公式和右矩形公式的代数精度为 0 次；中点矩形公式和梯形公式的代数精度为 1 次。

定义 2. 如果求积公式 $\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k)$ 满足

$$\lim_{h\to 0}\sum_{k=0}^n A_k f(x_k) = \int_a^b \rho(x)f(x)\,dx,$$

则称该求积公式是收敛的，其中 $h = \max_{1\le i\le n}\Delta x_i$.

定义 3. 对任意的 $\epsilon > 0$，若 $\exists\delta > 0$，只要 $\left|f(x_k) - \tilde{f}(x_k)\right| \le \delta, k = 0, 1, \ldots, n$ 就有

$$\left|I_n(f) - I_n(\tilde{f})\right| = \left|\sum_{k=0}^n A_k f(x_k) - \sum_{k=1}^n A_k \tilde{f}(x_k)\right| \le \epsilon,$$

则称该求积公式是稳定的.

3 插值型公式的构造

接下来，我们介绍求积公式的构造。其基本思想是在区间 $[a,b]$ 上找一个充分靠近 $f(x)$ 的简单函数 $p(x)$，且关于 $p(x)$ 的定积分容易计算。事实上，如果

$$\|f-p\|_\infty = \max_{x\in[a,b]}|f(x)-p(x)| \le \epsilon,$$

那么逼近误差满足

$$\left|\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx - \int_a^b \rho(x)p(x)\,dx\right| \le \epsilon\int_a^b \rho(x)\,dx.$$

由于多项式是最简单的函数类，构造求积公式的一个最基本的思想就是利用 Lagrange 插值多项式代替 $f(x)$，得到的求积公式就是插值型求积公式. 给定 $n+1$ 个求积节点 $x_0 < x_1 < \cdots < x_n$，构造 $f(x)$ 的 n 次插值多项式

$$p_n(x) = \sum_{k=0}^n l_k(x)f(x_k),$$

其中 $l_k(x)$ 是 x_k 处的插值基函数. 用

$$\int_a^b \rho(x)p_n(x)\,dx$$

作为

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx$$

的近似值，就得到了插值型求积公式：

$$I(f) := \int_a^b \rho(x)f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) := I_{n+1}(f), \tag{2}$$

其中，求积系数

$$A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x) \, dx, \quad k = 0, \ldots, n.$$

求积公式的误差为:

$$E_{n+1}(f) := I(f) - I_{n+1}(f) = \int_a^b \rho(x) \left(f(x) - p_n(x)\right) \, dx = \int_a^b \rho(x) R_n(x) \, dx, \tag{3}$$

其中 $R_n(x)$ 为 Lagrange 插值余项:

$$R_n(x) = \frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!} \omega_{n+1}(x), \qquad \omega_{n+1}(x) = (x - x_0) \cdots (x - x_n).$$

由 Lagrange 插值余项可知，上述插值型求积公式具有至少 n 次代数精度.

3.1 Newton-Cotes 公式

在插值型求积公式 (2) 中取权函数 $\rho(x) \equiv 1$ 且求积节点为等距形式，就导出了所谓的 Newton-Cotes 公式. 具体来说，将区间 $[a, b]$ 进行 n 等分，得到求积节点为:

$$x_k = a + kh, \quad h = \frac{b-a}{n}, \quad k = 0, 1, \ldots, n.$$

这时候的求积系数

$$\begin{aligned}
A_k = \int_a^b l_k(x) \, dx \quad &= \quad \int_a^b \prod_{i=0, i \neq k}^{n} \frac{x - x_i}{x_k - x_i} \, dx \\
&\overset{x=a+th}{=} \quad h \int_0^n \prod_{i=0, i \neq k}^{n} \frac{t - i}{k - i} \, dt \\
&= \quad (b-a) \cdot \frac{(-1)^{n-k}}{n(n-k)!k!} \int_0^n \prod_{i=0, i \neq k}^{n} (t - i) \, dt \\
&:= \quad (b-a) c_k^n.
\end{aligned}$$

我们称 c_k^n 为 Cotes 系数。对应的 Newton-Cotes 公式为:

$$I_{n+1}(f) = (b-a) \sum_{k=0}^{n} c_k^n f(x_k).$$

下面我们考察几个常用的 Newton-Cotes 公式:

（1）$n = 1$ 时: 通过计算，对应的 Cotes 系数 $c_0^1 = c_1^1 = \frac{1}{2}$. 因此，可以得到如下求积公式:

$$I_2(f) = \frac{b-a}{2} \left[f(a) + f(b) \right],$$

称为梯形公式.

（2）$n=2$ 时：可以得到如下求积公式：

$$I_3(f)=\frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right],$$

称为 Simpson 公式或抛物线公式.

（3）$n=4$ 时：可以得到如下求积公式：

$$I_5(f)=\frac{b-a}{90}\left[7f(x_0)+32f(x_1)+12f(x_2)+32f(x_3)+7f(x_4)\right],$$

称为 Cotes 公式.

Cotes 系数可由查系数表获得：

n	$C_i^{(n)}$								
1	$\frac{1}{2}$	$\frac{1}{2}$							
2	$\frac{1}{6}$	$\frac{2}{3}$	$\frac{1}{6}$						
3	$\frac{1}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{3}{8}$	$\frac{1}{8}$					
4	$\frac{7}{90}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{2}{15}$	$\frac{16}{45}$	$\frac{7}{90}$				
5	$\frac{19}{288}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{144}$	$\frac{25}{96}$	$\frac{19}{288}$			
6	$\frac{41}{840}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{34}{105}$	$\frac{9}{280}$	$\frac{9}{35}$	$\frac{41}{840}$		
7	$\frac{751}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{2989}{17280}$	$\frac{1323}{17280}$	$\frac{3577}{17280}$	$\frac{751}{17280}$	
8	$\frac{989}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-4540}{28350}$	$\frac{10496}{28350}$	$\frac{-928}{28350}$	$\frac{5888}{28350}$	$\frac{989}{28350}$

注解 1. *1. Cotes* 系数与被积函数 $f(x)$ 及积分区间 $[a,b]$ 无关*; 2.* 当 n 较大时，*Runge* 现象存在，求积公式不收敛*; 3.* 当 $n\geq 8$ 时*, Cotes* 系数出现负值，公式不稳定.

注解 2. *Newton-Cotes* 公式对 $f(x)=1$ 精确成立，故 *Cotes* 系数必满足条件

$$\sum_{k=0}^{n} c_k^n=1 \quad \text{对任意} \quad n\geq 1.$$

3.2 Newton-Cotes 公式的误差估计

我们先研究 Newton-Cotes 公式的代数精度。由 Lagrange 插值余项可知，当剖分区间的数目为 n 时，相应的 Newton-Cotes 公式

$$I_n(f)=(b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^n f(x_k).$$

具有至少 n 次代数精度. 特别地，当 n 为偶数时，该公式至少有 $n+1$ 次代数精度.

定理 3.1. 当 n 为偶数时，*Newton-Cotes* 公式至少有 $n+1$ 次代数精度.

Proof. 只需证当 n 为偶数时，Newton-Cotes 公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 精确成立。由插值型求积公式的截断误差表达式 (3) 可知:

$$E_{n+1}(f)=\frac{f^{n+1}(\xi)}{(n+1)!}\int_a^b\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,dx.$$

由于 $f^{n+1}(x)\equiv(n+1)!$，因此

$$\begin{aligned}
E_{n+1}(f) &= \int_a^b\prod_{i=0}^{n}(x-x_i)\,dx\\
&\overset{x=a+th}{=} h^{n+2}\int_0^n\prod_{i=0}^{n}(t-i)\,dt\\
&\overset{t=u+\frac{n}{2}}{=} h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{i=0}^{n}(u+\frac{n}{2}-i)\,du\\
&= h^{n+2}\int_{-\frac{n}{2}}^{\frac{n}{2}}\prod_{j=-n/2}^{n/2}(u-j)\,du.
\end{aligned}$$

可以看出，被积函数是奇函数，因此阶段误差 $E_{n+1}(f)=0$. 也就是当 n 为偶数时，Newton-Cotes 公式对 $f(x)=x^{n+1}$ 精确成立. □

接下来，我们针对梯形公式和 simpson 公式给出更加精细的误差估计。

定理 3.2. 若 $f(x)\in C^2[a,b]$，则梯形公式的截断误差为:

$$\begin{aligned}
E_2(f) &= \int_a^b f(x)\,dx-\frac{b-a}{2}[f(a)+f(b)]\\
&= -\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta),\quad \eta\in(a,b).
\end{aligned}$$

Proof. 线性插值误差为

$$f(x)-p_1(x)=\frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b),\quad a<\xi<b,$$

其中 ξ 是依赖于 x 的函数，两边积分得

$$E_2(f)=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\,dx.$$

由于 $f''(\xi)$ 在区间 $[a,b]$ 上连续，而 $(x-a)(x-b)$ 在 $[a,b]$ 上非正，由积分中值定理

$$E_2(f)=\int_a^b\frac{f''(\xi)}{2}(x-a)(x-b)\,dx=\frac{f''(\eta)}{2}\int_a^b(x-a)(x-b)\,dx=-\frac{(b-a)^3}{12}f''(\eta).$$

□

定理 3.3. 若 $f(x)\in C^4[a,b]$，则 *Simpson* 公式的截断误差为:

$$\begin{aligned} E_3(f) &= \int_a^b f(x)\,dx - \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right] \\ &= -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta), \quad \eta\in(a,b). \end{aligned}$$

Proof. 由于 Simpson 公式具有 3 次代数精度，构造三次插值多项式 $p_3(x)$ 满足

$$p_3(a)=f(a), p_3(b)=f(b), p_3\left(\frac{a+b}{2}\right)=f\left(\frac{a+b}{2}\right), p_3'\left(\frac{a+b}{2}\right)=f'\left(\frac{a+b}{2}\right).$$

则 Hermite 插值误差为

$$f(x)-p_3(x)=\frac{f^{(4)}(\xi)}{4!}(x-a)(x-b)\left(x-\frac{b-a}{2}\right)^2,$$

两边积分

$$\begin{aligned} \int_a^b f(x)\,dx - \int_a^b p_3(x)\,dx &= \frac{1}{4!}\int_a^b f^{(4)}(\xi)(x-a)(x-b)\left(x-\frac{b-a}{2}\right)^2\,dx \\ &= \frac{f^{(4)}(\eta)}{4!}\int_a^b (x-a)(x-b)\left(x-\frac{b-a}{2}\right)^2\,dx \\ &= -\frac{(b-a)^5}{2880}f^{(4)}(\eta), \end{aligned} \tag{4}$$

其中第二个等式利用了积分中值定理。

注意到，$p_3(x)$ 是三次多项式，故 Simpson 公式是精确成立的，即

$$\begin{aligned} \int_a^b p_3(x)\,dx &= \frac{b-a}{6}\left[p_3(a)+4p_3(\frac{a+b}{2})+p_3(b)\right] \\ &= \frac{b-a}{6}\left[f(a)+4f(\frac{a+b}{2})+f(b)\right]. \end{aligned} \tag{5}$$

将 (5) 代入 (4)，定理得证. □

3.3 Newton-Cotes 公式的稳定性

对数值积分公式

$$I_{n+1}(f)=\sum_{k=0}^n A_k f(x_k),$$

假如我们只能得到 $f(x_k)$ 的误差估计 $\tilde{f}(x_k)$，且有

$$\left|f(x_k-\tilde{f}(x_k))\right|\le\epsilon_k, \quad k=0,\ldots,n.$$

那么累计误差

$$\left|I_{n+1}(f)-I_{n+1}(\tilde{f})\right|=\left|\sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)-\sum_{k=0}^{n} A_k \tilde{f}(x_k)\right| \leq \epsilon \sum_{k=0}^{n} |A_k|,$$

其中 $\epsilon=\max_{0\leq k\leq n}\epsilon_k$. 因此，如果 $\sum_{k=0}^{n}|A_k|$ 有界，则积分公式是稳定的。

特别地，对于 Newton-Cotes 公式，当 Cotes 系数全为正时，有

$$\sum_{k=0}^{n}|A_k|=(b-a)\sum_{k=0}^{n} c_k^n=b-a,$$

这时候的积分公式是稳定的。由 Cotes 系数表可知，当 $n\leq 7$ 时，Cotes 系数都大于零。当 $n=8$ 时，Cotes 系数开始出现负值.

4 提高求积公式精度的方法

回忆梯形公式和 Simpson 公式的截断误差的表达式，我们可以看出：如果积分区间越小，则求积公式的截断误差亦越小. 这就启发我们先将区间等分，然后在每一小区间上应用求积公式，再将所有区间进行求和. 这样得到的公式称为复化求积公式.

4.1 复合梯形公式

将区间 $[a,b]$ 作 n 等分，其节点为 $x_k=a+kh, k=0,1,\ldots,n$，其中 $h=\frac{b-a}{n}$. 如果在每一小区间 $[x_k,x_{k+1}]$ 上采用梯形公式然后累加可得

$$\int_a^b f(x)\,dx=\sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx\approx\sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{h}{2}\left[f(x_k)+f(x_{k+1})\right]\right).$$

我们称

$$T_n:=\frac{h}{2}\left[f(a)+2\sum_{k=1}^{n-1} f(x_k)+f(b)\right]$$

为复合梯形公式.

定理 4.1. 设 $f(x)\in C^2[a,b]$，则复合梯形公式的截断误差为

$$I(f)-T_n=-\frac{(b-a)h^2}{12}f''(\eta),\quad \eta\in(a,b)$$

Proof. 由梯形公式余项得

$$I(f)-T_n=\sum_{k=0}^{n-1}\left[-\frac{h^3}{12}f''(\eta_k)\right],\quad \eta_k\in(x_k,x_{k+1}).$$

由于 $f(x) \in C^2[a,b]$，且

$$\min_{0\le k\le n-1} f''(\eta_k) \le \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k) \le \max_{0\le k\le n-1} f''(\eta_k)$$

由介值定理，$\exists \eta \in (a,b)$ 使得

$$f''(\eta) = \frac{1}{n}\sum_{k=0}^{n-1} f''(\eta_k).$$

故，复合梯形公式的截断误差为

$$I(f) - T_n = -\frac{nh^3}{12} f''(\eta) = -\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\eta).$$

□

4.2 复合 Simpson 公式

将区间 $[a,b]$ 作 n 等分，其节点为 $x_k = a + kh, k = 0,1,\ldots,n$，其中 $h = \frac{b-a}{n}$. 在每一小区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 上采用 Simpson 公式可得

$$\int_a^b f(x)\,dx = \sum_{k=0}^{n-1}\int_{x_k}^{x_{k+1}} f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n-1}\left(\frac{h}{6}\left[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right]\right).$$

我们称

$$S_n := \frac{h}{6}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k) + 4f(x_{k+\frac{1}{2}}) + f(x_{k+1})\right]$$

为复合 Simpson 公式. 这里，$x_{k+\frac{1}{2}}$ 表示区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 的中点.

定理 4.2. 设 $f(x) \in C^4[a,b]$，则复合 *Simpson* 公式的截断误差为

$$I(f) - S_n = -\frac{(b-a)h^4}{2880} f^{(4)}(\eta), \quad \eta \in (a,b)$$

例 1. 如果采用复合梯形公式和复合 *Simpson* 公式计算定积分

$$\int_0^1 e^x\,dx,$$

要使得误差不超过 5×10^{-6}，应将区间 $[0,1]$ 分成多少等分?

解. $f(x) = e^x, f^{(n)}(x) = e^x, b - a = 1$. 对于复合梯形公式，由阶段误差

$$|I(f) - T_n| = \left|-\frac{(b-a)h^2}{12} f''(\eta)\right| = \frac{1}{12}\left(\frac{1}{n}\right)^2 e \le 5\times 10^{-6}$$

可得 $n \ge 212.85$. 故可取 $n = 213$，也就是将区间分为 213 等分，可使误差不超过 5×10^{-6}。

如果采用复合 Simpson 公式，有

$$\left|-\frac{(b-a)h^4}{2880}f^{(4)}(\eta)\right| = \frac{1}{2880}\left(\frac{1}{n}\right)^2 e \le 5\times 10^{-6},$$

由此得 $n \ge 3.707$. 可取 $n=4$，此时实际上区间应分为 8 等份. □

作业：P179 习题 7.

4.3 复合公式之间的递推关系

首先将区间 $[a,b]$ 作 n 等分，如果再将每个子区间 $[x_k, x_{k+1}]$ 二分一次，从而新增分点 $x_{k+\frac{1}{2}}, k=0,\ldots,n-1$. 则复合梯形公式

$$\begin{aligned} T_{2n} &= \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}\left[f(x_k)+2f(x_{k+\frac{1}{2}})+f(x_{k+1})\right] \\ &= \frac{h}{4}\sum_{k=0}^{n-1}[f(x_k)+f(x_{k+1})]+\frac{h}{2}\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}}) \end{aligned}$$

其中 $h=\frac{b-a}{n}$ 为二分前的子区间长度. 记

$$H_n := h\sum_{k=0}^{n-1}f(x_{k+\frac{1}{2}}),$$

那么我们有

$$T_{2n} = \frac{1}{2}T_n + \frac{1}{2}H_n.$$

类似地，我们可以推得

$$S_n = \frac{1}{3}T_n + \frac{2}{3}H_n = \frac{4T_{2n}-T_n}{3}.$$

注解 3. 复合梯形递推公式算法简单，编程方便，但收敛速度较慢.

4.4 Romberg 算法

Romberg 算法思想是将两个粗糙的近似值通过组合获得更精确的值. 为此，我们需要如下关于复合梯形公式误差表达式的渐近形式：

定理 4.3. 设 $f(x)\in C^\infty[a,b]$，记 $I(f)=\int_a^b f(x)\,dx$, $h=\frac{b-a}{n}$，则有

$$T_n = I(f)+\alpha_1 h^2+\alpha_2 h^4+\cdots\alpha_k h^{2k}+\cdots,$$

其中系数 α_k 与 h 无关.

基于上述定理，我们有

$$T_n = I(f) + \alpha_1 h^2 + \alpha_2 h^4 + \cdots \alpha_k h^{2k} + \cdots$$

和

$$T_{2n} = I(f) + \alpha_1 \left(\frac{h}{2}\right)^2 + \alpha_2 \left(\frac{h}{2}\right)^4 + \cdots \alpha_k \left(\frac{h}{2}\right)^{2k} + \cdots$$

两式相减并消去 $O(h^2)$ 项可得

$$4T_{2n} - T_n = 3I(f) + (-3/4)\alpha_2 h^4 + (-15/16)\alpha_2 h^4 + \cdots$$

因此，我们有

$$S_n := \frac{4T_{2n} - T_n}{3} = I(f) + \beta_1 h^4 + \beta_2 h^6 + \cdots$$

通过以上操作，我们将两个 $O(h^2)$ 阶的积分公式进行组合，得到了一个 $O(h^4)$ 阶的积分公式. 这一过程被称为 Richardson 外推法.

注解 4. 回忆上一节关于复合公式之间的递推关系，我们发现，将复合梯形公式进行上述这样组合得到的公式正是我们熟知的 *Simpson* 公式。这也是我们为什么选择符号 S_n 来标记这个公式的原因.

类似地，我们对得到的 S_n 进行同样的操作，也就是通过两式相减消除 $O(h^4)$ 项，可得

$$C_n := \frac{16S_{2n} - S_n}{15} = I(f) + \gamma_1 h^6 + \gamma_2 h^8 + \cdots$$

我们可以继续这样的操作：

$$R_n := \frac{64C_{2n} - C_n}{63} = I(f) + O(h^8)$$

我们可以将上述过程写成统一的形式：记 T_n^m 为 T_n 经过 m 次加速后的积分公式，则有

$$T_n^m := \frac{4^m T_{2n}^{m-1} - T_n^{m-1}}{4^m - 1}, \quad m = 1, 2, \ldots$$

上述过程称为 Romberg 算法.

Romberg 算法可以按如下递推表进行：

作业：用 Romberg 算法计算定积分（写出迭代 5 步的递推表）

$$\int_0^1 x^{3/2}\, dx.$$

迭代 k	T_n^0	T_n^1	T_n^2	T_n^3	T_n^4	T_n^5	$\cdots$
0	T_1^0						
1	T_2^0	T_1^1					
2	T_4^0	T_2^1	T_1^2				
3	T_8^0	T_4^1	T_2^2	T_1^3			
4	T_{16}^0	T_8^1	T_4^2	T_2^3	T_1^4		
5	T_{32}^0	T_{16}^1	T_8^2	T_4^3	T_2^4	T_1^5	
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\cdots$

5 非等距节点的求积公式

考虑一般求积公式

$$\int_a^b \rho(x) f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k). \tag{6}$$

对于 Newton-Cotes 求积公式，我们选择的求积节点为等距节点，得到的公式具有至少 n 次代数精度。

我们自然关心如下问题：如果对求积节点不作任何限制，是否可以提高求积公式的代数精度？事实上，注意到这时候的求积公式 (6) 具有 $2n+2$ 个待定系数 $x_k, A_k, k=0,\ldots,n$. 因此，通过适当选取 x_k, 我们有可能使求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度。这需要我们求解一个非线性方程组。

例 2. 对求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx A_0 f(x_0) + A_1 f(x_1),$$

试确定节点与系数，使其具有尽可能高的代数精度。

解. 令求积公式对于 $f(x) = 1, x, x^2, x^3$ 精确成立，则得

$$\begin{cases} A_0 + A_1 & = 2 \\ A_0 x_0 + A_1 x_1 & = 0 \\ A_0 x_0^2 + A_1 x_1^2 & = \frac{2}{3} \\ A_0 x_0^3 + A_1 x_1^3 & = 0 \end{cases}$$

解得

$$x_0 = -\frac{\sqrt{3}}{3}, x_1 = \frac{\sqrt{3}}{3}; \quad A_0 = A_1 = 1.$$

因此，积分公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)\, dx \approx f\left(-\frac{\sqrt{3}}{3}\right) + f\left(\frac{\sqrt{3}}{3}\right).$$

容易验证，当 $f(x)=(x-x_0)^2(x-x_1)^2$ 时，公式不精确成立，故上述积分公式的代数精度为 3. □

5.1 Gauss 型求积公式

一般地，n 个节点的求积公式的代数精度最高为 $2n+1$ 次。由此，我们有如下定义:

定义 4. 考虑带权积分 $\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx$, 如果求积公式

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k)$$

有 $2n+1$ 次代数精度，则称其节点 $x_k, k=0,\dots,n$ 为**高斯节点**，公式称为**高斯型求积公式**.

取 $f(x)=x^m, m=0,1,\dots,2n+1$，求积公式精确成立，则得到关于 A_k 和 x_k 的非线性方程组:

$$\sum_{k=0}^{n} A_k x_k^m = \int_a^b \rho(x)x^m\,dx, \quad m=0,\dots,2n+1.$$

上述非线性方程组的求解非常困难! 注意到，如果先确定了节点 x_k，那么再确定 A_k 就容易得多了. 事实上，假设 $n+1$ 个节点为

$$a \le x_0 < x_1 < \cdots < x_n \le b,$$

那么 $f(x)$ 在这 $n+1$ 个点的插值多项式为

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} f(x_k) l_k(x),$$

其中 $l_k(x)$ 为插值基函数. 从而，我们可以得到具有至少 n 次代数精度的求积公式

$$\int_a^b \rho(x)f(x)\,dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k),$$

其中

$$A_k = \int_a^b \rho(x) l_k(x)\,dx.$$

进一步，借助于多项式插值的误差表达式，我们还知道上述求积公式的截断误差为

$$\begin{aligned} E_{n+1}(f) &:= \int_a^b \rho(x)f(x)\,dx - \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k) \\ &= \int_a^b \rho(x)\left(f[x_0,x_1,\dots,x_n,x]\omega_{n+1}(x)\right)\,dx, \end{aligned}$$

这里 $\omega_{n+1}(x)=(x-x_0)\cdots(x-x_n)$.

通过以上分析，我们知道：要想使得求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度，我们需要小心的选取节点 x_k，使得当取 $f(x)=x^m,\ m=n+1,\ldots,2n+1$，均有截断误差 $E_{n+1}(f)=0$. 为此，我们需要如下结论：

作业：假设 $f(x)=x^m\ (m>n)$，那么差商 $f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]$ 是一个 $m-n-1$ 次的多项式.

基于上述事实，我们知道：当取 $f(x)=x^m,\ m=n+1,\ldots,2n+1$，$f[x_0,x_1,\ldots,x_n,x]$ 是一个次数不超过 n 的多项式；而 $\omega_{n+1}(x)$ 是一个 $n+1$ 次多项式。因此，使得 $E_{n+1}(f)=0$ 的一个充分条件是：$\omega_{n+1}(x)$ 是区间 $[a,b]$ 上关于权函数 $\rho(x)$ 的 $n+1$ 次正交多项式。

最后，我们将高斯型求积公式作个总结：首先，高斯型求积公式的节点 x_k 就是区间 $[a,b]$ 上带权 $\rho(x)$ 的正交多项式的零点。有了求积公式，求积系数可以按如下两种方式进行计算：

（1）利用 $x_0,\ldots,x_n$ 的插值多项式计算求积系数 A_k.

（2）利用求积公式对 $f(x)=x^m,\ m=0,1,\ldots,n$ 精确成立，解一组关于系数的线性方程组.

例 3. 确定求积公式

$$\int_0^1 \sqrt{x}f(x)\,dx \approx A_0f(x_0)+A_1f(x_1)$$

的系数 A_0,A_1 及节点 x_0,x_1，使得它具有最高的代数精度.

解. 具有最高代数精度的求积公式是高斯型求积公式, 节点为关于权函数 $\rho(x)=\sqrt{x}$ 的正交多项式零点. 设

$$\omega(x)=x^2+bx+c.$$

由正交性可知，$\omega(x)$ 与 1 及 x 带权正交：

$$\int_0^1 \sqrt{x}\omega(x)\,dx=0,\quad \int_0^1 \sqrt{x}x\omega(x)\,dx=0.$$

即

$$\frac{2}{7}+\frac{2}{5}b+\frac{2}{3}c=0,\quad \frac{2}{9}+\frac{2}{7}b+\frac{2}{5}c=0.$$

求解方程组可得：

$$b=-\frac{10}{9},\quad c=\frac{5}{21}.$$

也就是

$$\omega(x)=x^2--\frac{10}{9}x+\frac{5}{21},$$

其零点为

$$x_0 = 0.289919, \quad x_1 = 0.821162.$$

接下来，我们确定系数：由于高斯型求积公式有 3 次代数精度，故公式对 $f(x) = 1, x$ 精确成立. 也就是

$$A_0 + A_1 = \int_0^1 \sqrt{x}\, dx = \frac{2}{3}$$

$$A_0 x_0 + A_1 x_1 = \int_0^1 \sqrt{x} \cdot x\, dx = \frac{2}{5},$$

由此解出 $A_0 = 0.277556, A_1 = 0.389111.$

□

5.1.1 Gauss 型求积公式的截断误差

由于 $n+1$ 个节点的高斯型求积公式具有 $2n+1$ 次代数精度，因此考虑 $f(x)$ 在节点 x_k 的 Hermite 插值 $H_{2n+1}(x)$，即

$$H_{2n+1}(x_k) = f(x_k), \quad H'_{2n+1}(x_k) = f'(x_k), \quad k = 0, \ldots, n.$$

由 Hermite 插值的截断误差可知

$$f(x) = H_{2n+1}(x) + \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{2n+2} \omega_{n+1}^2(x).$$

两边积分

$$\int_a^b \rho(x) f(x) dx = \int_a^b \rho(x) H_{2n+1}(x) dx + \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{2n+2} \omega_{n+1}^2(x) dx$$

其中右端第一项积分对 $2n+1$ 次多项式精确成立, 故

$$\int_a^b \rho(x) H_{2n+1}(x) dx = \sum_{k=0}^n A_k f(x_k).$$

由此，我们可以得到 Gauss 型求积公式的截断误差

$$\begin{aligned} E_{n+1}(f) &:= \int_a^b \rho(x) f(x) dx - \sum_{k=0}^n A_k f(x_k) \\ &= \int_a^b \rho(x) \frac{f^{(2n+2)}(\xi)}{2n+2} \omega_{n+1}^2(x) dx \\ &= \frac{f^{(2n+2)}(\eta)}{2n+2} \int_a^b \rho(x) \omega_{n+1}^2(x) dx. \end{aligned}$$

接下来，我们说明 Gauss 型求积公式是稳定的。为此，我们只需证明如下定理：

定理 5.1. *Gauss* 型求积公式的求积系数 A_k 均大于零.

Proof. 考虑 Lagrange 插值基函数

$$l_k(x)=\prod_{\substack{j=0\\ j\neq k}}^{n}\frac{x-x_j}{x_k-x_j},$$

则 $l_k^2(x)$ 是 $2n$ 次多项式, 故 Gauss 求积公式对它能准确成立. 即有

$$\int_a^b \rho(x)l_k^2(x)dx=\sum_{j=0}^{n}A_j l_k^2(x_j).$$

注意到，$l_k^2(x_j)=\delta_{kj}$. 因此，上式右端等于 A_k, 从而有

$$A_k=\int_a^b \rho(x)l_k^2(x)dx>0$$

□

作业：假定 $f(x)\in C^2[a,b]$, 求证：

$$\int_a^b f(x)\,dx-(b-a)f\left(\frac{a+b}{2}\right)=\frac{(b-a)^3}{24}f''(\eta),\quad a\leq\eta\leq b.$$

5.1.2 常用的 Gauss 型求积公式

（1）Gauss-Legendre 求积公式

当权函数 $\rho(x)\equiv 1$, 区间 $[a,b]=[-1,1]$ 时，对应的正交多项式是 Legendre 多项式。以 $n+1$ 次 Legendre 多项式 $P_{n+1}(x)$ 的全部零点为求积节点，得到的积分公式称为 Gauss-Legendre 求积公式。

比如：当 $n=0$ 时，$P_1(x)=x$. 其零点为 $x_0=0$，故积分公式为

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx\approx A_0 f(0).$$

求积公式对 $f(x)\equiv 1$ 精确成立，得 $A_0=2$. 从而得到中点公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx\approx 2f(0).$$

作业：给出当 $n=2$ 时 3 个节点的 Gauss-Legendre 求积公式。

对于 Gauss-Legendre 求积公式

$$\int_{-1}^{1} f(x)dx\approx\sum_{k=0}^{n}A_k f(x_k),$$

当 n 较小时的节点和系数可查下表获得：

n	x_k	A_k	n	x_k	A_k
0	0	2	3	± 0.8611363116	0.3478548451
				± 0.3399810436	0.6521451549
1	± 0.5773502692	1	4	± 0.9061798459	0.2369268851
				± 0.5384693101	0.4786286705
				0	0.5688888889
2	± 0.7745966692	0.5555555556	5	± 0.9324695142	0.1713244924
	0	0.8888888889		$\pm .6612093865$	0.3607615730
				± 0.2386191861	0.4679139346

表 1: 节点系数表

注解 5. 当区间 $[a,b] \neq [-1,1]$ 时，只需做变换

$$x = \frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2},$$

我们就能将区间 $[a,b]$ 转化为 $[-1,1]$。此时，有

$$\int_a^b f(x)dx = \int_{-1}^1 f(\frac{b-a}{2}t + \frac{a+b}{2})dt.$$

这时候，我们就能对右端积分用 *Gauss-Legendre* 公式.

例 4. 用 4 点的 *Gauss-Legendre* 公式计算积分

$$\int_0^{\frac{\pi}{2}} x^2 \cos x \, dx.$$

（2）Gauss-Chebyshev 公式

区间 $[a,b] = [-1,1]$，关于权函数 $\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$ 正交的多项式为 Chebyshev 多项式。n 次 Chebyshev 多项式的零点为:

$$x_k = \cos\left(\frac{2k-1}{2n}\pi\right), \quad k = 1, \ldots, n.$$

得到的求积公式为 Gauss-Chebyshev 公式:

$$\int_{-1}^1 \frac{f(x)}{\sqrt{1-x^2}}dx \approx \frac{\pi}{n}\sum_{k=1}^n f(x_k).$$

上述积分公式可用于计算奇异积分。

（3）Gauss-Laguerre 公式

区间 $[0,+\infty)$，关于权函数 $\rho(x)=e^{-x}$ 正交的多项式为 Laguerre 多项式。由其零点，我们可以得到 Gauss-Laguerre 公式。具体计算时，求积节点与系数可查表获得。

（3）Gauss-Hermite 公式

区间 $(-\infty,+\infty)$，关于权函数 $\rho(x)=e^{-x^2}$ 正交的多项式为 Hermite 多项式。类似地，我们可以得到 Gauss-Hermite 公式。求积节点与系数可查表获得。

5.2　一致系数公式

在求积公式中，如果所有的求积系数均相同，那么这个公式被称为一致系数公式。一致系数公式因形式简单而收到人们的关注，下面我们简单介绍一下。为了简单起见，这里我们只考虑 $\rho(x)\equiv 1$ 的情形。一般情形可作类似分析。

n 个节点的一致系数公式可以描述为：

$$\int_a^b f(x)\,dx \approx A_n \sum_{k=1}^n f(x_k).$$

为了使 $f(x)=1$ 时公式精确成立，可得一致系数

$$A_n=\frac{b-a}{n}.$$

为了使求积公式具有尽可能高的精度，我们必须小心地选择节点。为了求积公式具有 n 次代数精度，当取 $f(x)=x^m$, $m=1,\dots,n$ 时，节点 x_k 应满足

$$A_n\sum_{k=1}^n x^m=\frac{1}{m+1}\left(b^{m+1}-a^{m+1}\right),\quad m=1,\dots,n. \tag{7}$$

所以，我们接下来的任务就是如何求解上述非线性方程。Newton 恒等式给我们提供了一个可行的途径：假设 $x_1,\dots,x_n$ 是 n 次多项式

$$p_n(x)=x^n+\sigma_1x^{n-1}+\cdots+\sigma_n$$

的根，则 Newton 恒等式告诉我们

$$\begin{cases} s_1+\sigma_1 & =0\\ s_2+s_1\sigma_1+2\sigma_2 & =0\\ \cdots & \\ s_n+s_{n-1}\sigma_1+\cdots+s_1\sigma_{n-1}+n\sigma_n & =0\end{cases},$$

其中

$$s_m:=x_1^m+x_2^m+\cdots+x_n^m,\quad m=1,\dots,n.$$

注意到，通过等式 (7)，我们能够很容易得到所有的 s_m，从而求得所有的 σ_m. 因此，寻找求积节点转化为求解多项式 $p_n(x)$ 的所有根.

注解 6. 任何区间都可以通过变量代换化成 $[-1,1]$。对于这个特殊的区间，求积节点可以通过查表获得.

6　特殊积分的处理技术

本节我们介绍振荡函数积分以及奇异积分的处理方法，其核心思想就是：将难处理的积分部分看成权函数，从而使得数值积分公式具有较高的精度。

6.1　振荡函数的积分

工程技术中遇到的一类振荡积分为

$$\begin{cases} I_1 = \int_a^b f(x)\sin mx\, dx \\ \\ I_2 = \int_a^b f(x)\cos mx\, dx \end{cases}.$$

当 m 充分大时，$\sin mx$ 和 $\cos mx$ 振荡的频率很大，使得很难通过选择合适的节点对被积函数 $f(x)\sin mx$ 和 $f(x)\cos mx$ 进行有效的逼近。

注意到，函数 $f(x)$ 一般是可以被有效逼近的。因此，处理上述振荡积分的一种途径是：将 $\sin mx$ 和 $\cos mx$ 当作权函数，而对 $f(x)$ 进行 Lagrange 插值逼近.

接下来，我们介绍其推导过程。为了统一处理积分 I_1 和 I_2，我们令 $\rho(x) = e^{imx}$. 因此，有

$$I_1 + iI_2 = \int_a^b e^{imx} f(x)\, dx.$$

假设 $f(x)$ 在 $n+1$ 个节点 x_k 处的 Lagrange 插值为

$$L_n(x) = \sum_{k=0}^{n} l_k(x) f(x_k),$$

那么有积分公式

$$\int_a^b e^{imx} f(x)\, dx \approx \sum_{k=0}^{n} A_k f(x_k),$$

其中积分系数

$$A_k = \int_a^b e^{imx} l_k(x)\, dx.$$

这样我们就给出了振荡积分 I_1 和 I_2 的积分公式.

比如，当 $n=1$ 时，函数 $f(x)$ 在 a,b 两点的 Lagrange 插值为

$$L_1(x)=\frac{x-b}{a-b}f(a)+\frac{x-a}{b-a}f(b).$$

因此，积分系数

$$A_0=\int_a^b e^{imx}\frac{x-b}{a-b}\,dx=\frac{ie^{ima}}{m}-\frac{e^{imb}-e^{ima}}{m^2(b-a)},$$

$$A_1=\int_a^b e^{imx}\frac{x-a}{b-a}\,dx=-\frac{ie^{imb}}{m}+\frac{e^{imb}-e^{ima}}{m^2(b-a)},$$

利用实部与虚部的对应关系，可得 I_1 和 I_2 的求积公式：

$$\begin{cases} I_1=\frac{f(a)\cos ma-f(b)\cos mb}{m}+\frac{(\sin mb-\sin ma)(f(b)-f(a))}{m^2(b-a)} \\ \\ I_2=\frac{f(b)\sin mb-f(a)\sin ma}{m}+\frac{(\cos mb-\cos ma)(f(b)-f(a))}{m^2(b-a)} \end{cases}.$$

为了得到较高的精度，可以将区间细分，然后在每个子区间上利用上述公式。

作业：选择合适数值积分方法计算定积分

$$\int_0^{2\pi} x\cos x\,(\sin 40x+\cos 50x)\ dx.$$

6.2 奇异积分

被积函数在求积区间的某一点无界或积分区间无界，这类积分称为奇异积分，前者也称为反常积分，后者也称为无穷积分. 对于奇异积分，有时可以通过变量代换或分部积分转化为正常积分。如

$$\int_0^1 \frac{f(x)}{\sqrt[n]{x}}\,dx \overset{x=t^n}{=} n\int_0^1 f(t^n)t^{n-1}\,dt,\quad n\geq 2.$$

当被积函数相当复杂时, 用变量代换消去函数的奇异性将是十分困难的. 解决的办法是将奇异积分的被积函数写成 $\rho(x)f(x)$ 的形式，其中 $f(x)$ 不具有奇异性. 接下来的处理方式就自然了，也就是选取合适的求积节点，对 $f(x)$ 进行 Lagrange 插值，然后计算求积系数. 特别地，当选取高斯节点时，得到的积分就是高斯积分公式。

比如, 当权函数分别为 $\frac{1}{\sqrt{1-x^2}}$, e^{-x} 和 e^{-x^2} 时, 有相应的 Gauss-Chebyshev 公式、Gauss-Laguerre 公式和 Gauss-Hermite 公式。

作业：选择合适数值积分方法计算定积分

$$\int_0^1 \frac{e^x}{\sqrt{1-x^2}}\,dx,\quad \int_0^\infty e^{-2x}\ln(1+x)\,dx.$$

7 多重积分

多重积分可以写成如下形式:

$$I(f) := \int_D f(x)\, dx,$$

其中 D 是求积区域，且

$$x = (x_1, \ldots, x_n) \in \mathbb{R}^n, \quad dx = dx_1 dx_2 \cdots dx_n.$$

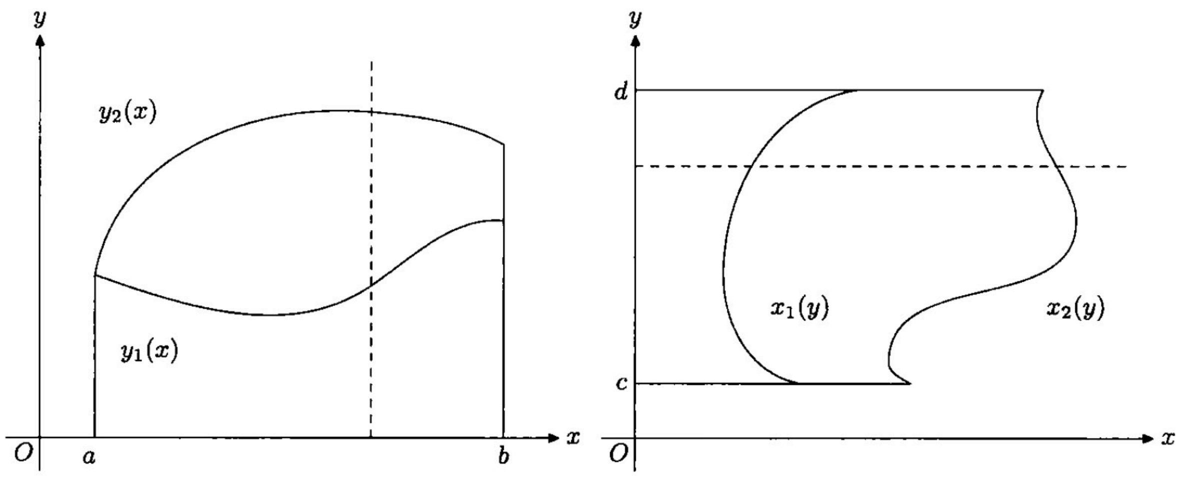
多重积分的数值积分公式具有如下形式:

$$I_N(f) := \sum_{k=1}^{N} A_k f(x_k),$$

这里 $x_k \in \mathbb{R}^n$ 是求积节点，A_k 是求积系数. 如果上述数值积分公式对所有次数不超过 m 的多远多项式均精确成立，那么我们称该积分公式具有至少 m 次代数精度.

7.1 累次积分

计算多重积分的一个基本思想就是先化为累次积分，再利用数值积分公式. 我们主要考虑二维空间中的如下两种区域类型：x-型区域和 y-型区域.



以左图的 x-型区域 $D = \{(x, y) : a \le x \le b, y_1(x) \le y \le y_2(x)\}$ 为例，重积分可以转化为

$$I(f) := \int_D f(x)\, dx = \int_a^b \left(\int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x, y)\, dy \right) dx := \int_a^b F(x)\, dx, \tag{8}$$

其中

$$F(x) = \int_{y_1(x)}^{y_2(x)} f(x, y)\, dy.$$

我们可以先对积分 (8) 利用一维数值积分公式得

$$I(f) :\approx \sum_{k=0}^{n} \alpha_k F(x_k).$$

然后对每一个 $F(x_k)$ 关于 y 再次利用一维数值积分公式

$$F(x_k) \approx \sum_{j=0}^{m_k} \beta_{k,j} f(x_k, y_{k,j}).$$

这里的系数 $\beta_{k,j}$ 和 $y_{k,j}$ 均依赖于 x_k. 结合以上两式，可得求积公式

$$I(f) :\approx \sum_{k=0}^{n} \sum_{j=0}^{m_k} \alpha_k \beta_{k,j} f(x_k, y_{k,j}).$$

例 5. 考虑矩形区域 $D = \{(x, y) : a \le x \le b, c \le y \le d\}$，重积分可写成累次积分

$$\int\int_D f(x, y)\, dxdy = \int_a^b \left(\int_c^d f(x, y)\, dy \right) dx.$$

则梯形公式为

$$\begin{aligned}
\int\int_D f(x, y)\, dxdy &\approx \frac{b-a}{2} \left(\int_c^d f(a, y)\, dy + \int_c^d f(b, y)\, dy \right) \\
&\approx \frac{(b-a)(d-c)}{4} \left[f(a, c) + f(a, d) + f(b, c) + f(b, d) \right].
\end{aligned}$$

为了提高数值精度，在计算累次积分的时候，我们可以采用高斯求积公式。为此，我们只需要通过变量替换的方式将区域 D 变成区域 $\tilde{D} := \{(x, y) : -1 \le x \le 1, -1 \le y \le 1\}$. 比如，对于矩形区域 $D = \{(x, y) : a \le x \le b, c \le y \le d\}$，令

$$x = \frac{a+b}{2} + \frac{b-a}{2} u, \quad y = \frac{c+d}{2} + \frac{d-c}{2} v,$$

则有

$$\int\int_D f(x, y)\, dxdy = \frac{(b-a)(d-c)}{4} \int\int_{\tilde{D}} g(u, v)\, dudv.$$

作业：分别利用一维上三点的 Gauss 型求积公式和复化梯形公式 ($h = 0.1$) 计算重积分

$$\int\int_D e^{-xy}\, dxdy,$$

其中区域 $D = \{(x, y) : 0 \le x \le 1, 0 \le y \le 1\}$.

7.2 重积分的插值型积分公式

考虑二维重积分

$$I(f) = \int\int_D f(x,y)\,dxdy.$$

类似于一维情形，构造重积分的数值积分公式的思想是：用一个插值多项式代替求积函数，然后得到积分公式。遗憾的是，针对一般节点的高维插值仍然是一个尚未解决的问题。

然而，选取规则的节点组 $(x_i, y_j), i = 0, \ldots, m; j = 0, \ldots, n$, 其上的高维插值可以通过一维插值多项式的直积的形式给出。具体来说，假设 $X_{m,i}, i = 0, \ldots, m$ 为 x 方向上关于节点 $x_0, x_1, \ldots, x_m$ 的 Lagrange 插值基函数，$Y_{n,j}, j = 0, \ldots, n$ 为 y 方向上关于节点 $y_0, y_1, \ldots, y_n$ 的 Lagrange 插值基函数，也就是

$$X_{m,i}(x_k) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{m} \frac{x - x_k}{x_i - x_k}, \quad i = 0, \ldots, m, \quad Y_{n,j}(y_k) = \prod_{\substack{k=0\\k\neq i}}^{n} \frac{y - y_k}{y_j - y_k}, \quad j = 0, \ldots, n.$$

那么在二维节点 $(x_i, y_j), i = 0, \ldots, m; j = 0, \ldots, n$ 处的插值基函数为

$$X_{m,i}(x)Y_{n,j}(y), \quad i = 0, \ldots, m, \quad j = 0, \ldots, n.$$

因此，函数 $f(x,y)$ 在这组节点下的二维 Lagrange 插值多项式为

$$p(x,y) = \sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{n} f(x_i, y_j) X_{m,i}(x) Y_{n,j}(y).$$

相应的数值积分公式为

$$\int\int_D f(x,y)\,dxdy \approx \sum_{i=0}^{m}\sum_{j=0}^{n} A_{i,j} f(x_i, y_j),$$

其中

$$A_{i,j} = \int\int_D X_{m,i}(x) Y_{n,j}(y)\,dxdy.$$

可以证明，上述积分公式具有至少 $\min\{m,n\}$ 次代数精度。特别地，当选取 $m = n$ 时，我们可以利用 $(n+1)^2$ 个节点构造具有至少 n 次代数精度的求积公式。

7.3 待定系数法

二维情形的求积公式的一般形式为

$$I_N(f) := \sum_{k=1}^{N} A_k f(x_k, y_k),$$

该公式具有 $3N$ 个参数. 要使上述积分公式具有至少 n 次代数精度，我们要求对所有次数不超过 n 的二元多项式精确成立，也就是

$$\sum_{k=1}^{N} A_k x_k^r y_k^q = \int\int_D x^r y^q \, dxdy \quad \text{对所有} \quad r \geq 0, q \geq 0, r+q \leq n.$$

可以看出，一共有 $\frac{1}{2}(n+1)(n+2)$ 个方程。为使方程组有解，需要满足条件

$$3N \geq \frac{1}{2}(n+1)(n+2).$$

粗略来说，通过 N 个节点构造的二维数值积分公式具有 $O(\sqrt{N})$ 次代数精度.

快速 Fourier 变换

黄　猛*

北京航空航天大学　数学科学学院

April 23, 2023

1 Fourier 级数

假设 f 是周期为 T 且在区间 $[0,T]$ 上可积的函数，那么 f 的 Fourier 级数定义为

$$f(x) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}(n) e^{2\pi inx/T},$$

此处，

$$\hat{f}(n) = \frac{1}{T}\int_{-T/2}^{T/2} f(x) e^{-2\pi inx/T}\, dx.$$

我们通常考虑周期为 2π 的情形，此时

$$f(\theta) \sim \sum_{n=-\infty}^{\infty} \hat{f}(n) e^{in\theta},$$

其中，

$$\hat{f}(n) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} f(\theta) e^{-in\theta}\, d\theta.$$

我们先看几个例子：

例 1. 假设 $f(\theta)=\theta, \theta\in[-\pi,\pi)$，那么

$$f(\theta) \sim 2\sum_{n=1}^{\infty}(-1)^{n+1}\frac{\sin n\theta}{n}.$$

接下来，我们考虑 Fourier 级数的唯一性和收敛性，包括逐点收敛和平方收敛。

*电子邮件: menghuang@buaa.edu.cn

1.1 Fourier 级数的唯一性

在 Fourier 级数的唯一性方面，人们关心如下问题:

如果 f 和 g 有同样的 Fourier 系数，那么 f 和 g 是否相等?

我们不加证明的给出如下唯一性结果:

定理 1.1. 假设 f 是周期为 2π 的可积函数，且对所有的 $n \in \mathbb{Z}$ 均有 $\hat{f}(n) = 0$. 那么，当 f 在点 θ_0 处连续时，有 $f(\theta_0) = 0$.

上述定理告诉我们，当 f 和 g 均为连续函数时，如果 f 和 g 有同样的 Fourier 系数，那么 $f \equiv g$.

1.2 Fourier 级数的收敛性

定义函数 f 的 N 阶 Fourier 级数部分和为

$$S_N(f)(\theta) = \sum_{n=-N}^{N} \hat{f}(n) e^{in\theta}.$$

我们关心的问题是：对任意的 θ，是否成立

$$\lim_{N\to\infty} S_N(f)(\theta) = f(\theta)\ ?$$

事实上，即使 $f(\theta)$ 是一个连续的周期函数，上述结论也并不总是成立. 进一步，倘若我们假设 f 是可微的，那么我们可以证明 f 的 Fourier 级数一致收敛到 f. 一般地，我们有如下结果:

定理 1.2 (逐点收敛定理)**.** 假设 f 是一个周期为 2π 的连续函数. 对某个 $\theta \in \mathbb{R}$，若存在 $\delta > 0, M < \infty$，使得对所有 $h \in (-\delta, \delta)$ 均有 $|f(\theta + h) - f(\theta)| \le M\,|h|$，则

$$\lim_{N\to\infty} S_N(f)(\theta) = f(\theta).$$

我们接下来介绍平方收敛意义下，Fourier 级数的收敛性质. 回忆广义 Fourier 级数与最佳平方逼近的关系，我们有如下结果:

定理 1.3. 如果 f 是周期为 2π 且在 $[0, 2\pi]$ 上平方可积的函数，那么 f 的 *Fourier* 级数平方收敛到 f. 也就是

$$\lim_{N\to\infty} \|f - S_N(f)\|_2 = 0.$$

进一步，我们还有

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \left|\hat{f}(n)\right|^2 = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} |f(\theta)|^2\ d\theta.$$

2 Fourier 变换

2.1 从 Fourier 级数到 Fourier 变换

Fourier 级数处理的是周期函数，那么对于非周期函数呢？如果我们将非周期函数看成是周期为无穷的函数，这时候的 Fourier 级数就应该推广为 Fourier 变换.

回顾 Fourier 级数的定义，假设 f 是周期为 T 且在区间 $[0,T]$ 上可积的函数，那么 f 的 Fourier 级数为

$$f(x) \sim \frac{1}{T}\sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{2\pi inx/T},$$

此处，

$$f_n = \int_{-T/2}^{T/2} f(x)e^{-2\pi inx/T}\,dx.$$

特别地，如果 f 是周期为 $2\pi k$ 的可积函数，那么

$$f(x) \sim \frac{1}{2\pi k}\sum_{n=-\infty}^{\infty} f_n e^{inx/k}, \quad f_n = \int_{-k\pi}^{k\pi} f(x)e^{-inx/k}\,dx.$$

定义函数 $\widehat{f}(w)$ 如下：

$$\widehat{f}(w) := \int_{-k\pi}^{k\pi} f(x)e^{-iwx}\,dx.$$

由于 $\widehat{f}(n/k) = f_n$，那么 f 的 Fourier 级数可以写成

$$f(x) \sim \frac{1}{2\pi}\left(\frac{1}{k}\sum_{n=-\infty}^{\infty} \widehat{f}(n/k)e^{inx/k}\right).$$

令 $k \to \infty$. 由定积分的定义可知

$$\lim_{k\to\infty}\frac{1}{k}\sum_{n=-\infty}^{\infty}\widehat{f}(n/k)e^{inx/k} = \int_{-\infty}^{\infty}\widehat{f}(w)e^{iwx}\,dw.$$

因此，只要 $f \in L_1(\mathbb{R})$，就有

$$f(x) \sim \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\widehat{f}(w)e^{iwx}\,dw,$$

其中

$$\widehat{f}(w) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)e^{-iwx}\,dx, \quad w \in \mathbb{R}. \tag{1}$$

我们称按 (1) 式所定义的 $\widehat{f}(w)$ 为函数 f 的 Fourier 变换.

2.2 Fourier 变换的性质

为了描述方便，我们也用符号 $\mathcal{F}[f(x)](w)$ 表示关于函数 f 的 Fourier 变换. 容易验证如下性质:

线性: $\mathcal{F}[cf(x)+g(x)](w) = c\mathcal{F}[f(x)](w) + \mathcal{F}[g(x)](w)$.

卷积: $\mathcal{F}[f*g](w) = \widehat{f}(w)\widehat{g}(w)$.

平移: $\mathcal{F}[f(x-t)](w) = e^{-itw}\widehat{f}(w)$.

缩放: $\mathcal{F}[f(ax)](w) = \frac{1}{a}\widehat{f}(w/a)$.

导函数: 如果 $\lim_{x\to\infty} f(x) = 0$，那么 $\mathcal{F}[f'(x)](w) = iw\widehat{f}(w)$.

利用 Lebesgue 控制收敛定理，我们也容易验证: 如果 $f \in L_1(\mathbb{R})$，那么 $\widehat{f}$ 在 $\mathbb{R}$ 上一致连续.

2.3 Fourier 变换的反演

到目前为止，我们仅仅只知道 Fourier 变换的定义以及一些基本性质。一个自然的问题是：什么样的条件可以保证 $\widehat{f}(w)$ 存在？更重要的是，我们想知道下面的表达式

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(w)e^{iwx}\,dw \tag{2}$$

是否成立？此即 Fourier 变换的反演问题.

2.3.1 Fourier 变换的 L_1 理论

关于 $\widehat{f}(w)$ 的存在性问题，由定义，我们很容易知道

$$\left|\widehat{f}(w)\right| \le \int_{-\infty}^{\infty} \left|f(x)e^{-iwx}\right| dx = \int_{-\infty}^{\infty} |f(x)|\,dx.$$

因此，只要 $f(x) \in L_1(\mathbb{R})$，则 $\widehat{f}(w)$ 存在. 但是，$\widehat{f}(w)$ 可能不属于 $L_1(\mathbb{R})$，从而导致等式 (2) 的右边积分不存在. 例如：

$$f(x) = \begin{cases} e^{-x}, & x \ge 0, \\ 0, & x < 0. \end{cases}$$

容易验证，$f(x) \in L_1(\mathbb{R})$，但 $\widehat{f}(w) = \frac{1}{1+iw} \notin L_1(\mathbb{R})$.

接下来，我们介绍在什么条件下能从 f 的 Fourier 变换反演出 f.

定理 2.1. 如果 $f, \widehat{f} \in L_1(\mathbb{R})$，那么

$$f(x) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \widehat{f}(w)e^{iwx}\,dw, \quad \textit{a.e.} \quad x \in \mathbb{R}.$$

这里，*a.e.* 表示几乎处处. 特别地，上式在 f 的连续点处成立.

上述定理告诉我们，如果 $f, \widehat{f} \in L_1(\mathbb{R})$ 且 f 连续，那么等式 (2) 处处成立. 另外，我们还能得到 Fourier 变换唯一性的结论：

定理 2.2. 如果 $f_1, f_2 \in L_1(\mathbb{R})$，且对所有的 $w \in \mathbb{R}$ 均有 $\widehat{f_1}(w) = \widehat{f_2}(w)$. 那么

$$f_1(x) = f_2(x), \quad \textit{a.e.} \quad x \in \mathbb{R}.$$

证明. 令 $f = f_1 - f_2$. 那么 $\widehat{f}(w) = \widehat{f_1}(w) - \widehat{f_2}(w) \equiv 0$. 因此，由定理 2.1,

$$f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} \widehat{f}(w) e^{iwx}\, dw, \quad \text{a.e.} \quad x \in \mathbb{R}.$$

从而 $f_1(x) = f_2(x), \quad \text{a.e.} \quad x \in \mathbb{R}.$

□

2.3.2 Fourier 变换的 L_2 理论

注意到，有些 $L_2(\mathbb{R})$ 的函数并不在 $L_1(\mathbb{R})$ 内，同时也有些 $L_1(\mathbb{R})$ 的函数不在 $L_2(\mathbb{R})$ 内. 可见，$L_1(\mathbb{R})$ 与 $L_2(\mathbb{R})$ 不互相包含，但也不互相排斥. 例如，函数 $f(x) = e^{-x} \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$. 事实上，$L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$ 在 $L_2(\mathbb{R})$ 中是稠密的.

定理 2.3. 如果 $f \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$，那么 $\widehat{f} \in L_2(\mathbb{R})$，且 $\|f\|_2 = \frac{1}{2\pi}\|\widehat{f}\|_2$.

证明. 令 $g(x) = \overline{f(-x)}$，则 $\widehat{g} = \overline{\widehat{f}}$. 记 $h(x) = f * g$，则有

$$\widehat{h}(w) = \widehat{f}(w)\widehat{g}(w) = \widehat{f}(w)\overline{\widehat{f}(w)} = |\widehat{f}(w)|^2 \geq 0.$$

另一方面，由反演公式有

$$\|\widehat{f}\|_2^2 = \int_{\mathbb{R}} |\widehat{f}(w)|^2 dw = \int_{\mathbb{R}} \widehat{h}(w) dw = \frac{1}{2\pi} h(0) = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathbb{R}} f(x) g(-x) dx = \frac{1}{2\pi} \|f\|_2^2.$$

事实上，上式的第三个等式还需严格的说明，这里就不展开了. □

利用如下的极化恒等式

$$\langle f, g \rangle = \frac{1}{4} \left\{ \|f+g\|_2^2 - \|f-g\|_2^2 + i\|f+ig\|_2^2 - i\|f-ig\|_2^2 \right\},$$

我们很容易得到如下定理：

定理 2.4. 如果 $f, g \in L_1(\mathbb{R}) \cap L_2(\mathbb{R})$，那么

$$\langle f(x), g(x) \rangle = \frac{1}{2\pi} \langle \widehat{f}(w), \widehat{g}(w) \rangle.$$

3 离散 Fourier 变换

由于连续函数无法在计算机上进行计算，因此我们通常需要对其进行离散采样。给定 N 个离散值 $\{x(0), x(1), \ldots, x(N-1)\}$, 我们定义其离散 Fourier 变换（DFT）为

$$\hat{x}(n) = \sum_{k=0}^{N-1} x(k) e^{-2\pi i n k / N}, \quad n = 0, \ldots, N-1.$$

相应的离散 Fourier 逆变换为

$$x(k) = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} \hat{x}(n) e^{2\pi i n k / N}, \quad k = 0, \ldots, N-1.$$

3.1 快速 Fourier 变换

通过简单的观察可知，要想计算出所有的 $\hat{x}(0), \ldots, \hat{x}(N-1)$，其计算复杂度为 $O(N^2)$. 当 N 很大时，所需要的计算时间是相当长的。为此，Cooley 和 Tukey 提出了一个计算 DFT 的快速算法，其计算复杂度仅为 $O(N \log N)$. 为了介绍该快速算法。我们引入记号

$$\omega_N := e^{-2\pi i / N}$$

以及多项式

$$X(\omega) = x(0) + x(1)\omega + \cdots + x(N-1)\omega^{N-1}.$$

关于符号 ω_N，通过定义我们很容易验证如下性质：

（1）对任意的整数 n, k, d 均有 $\omega_{dn}^{dk} = \omega_n^k$.

（2）对任意的偶数 $n > 0$, 有 $\omega_n^{2k} = \omega_{n/2}^k$.

（3）对任意的正整数 n 以及整数 $n \nmid k$, 有 $\sum_{j=0}^{n-1} (\omega_n^k)^j = 0$.

利用上述记号，关于离散值 $\{x(0), x(1), \ldots, x(N-1)\}$ 的离散 Fourier 变换可以表示为

$$\hat{x}(n) = \sum_{k=0}^{N-1} x(k) \omega_N^{nk} = X(\omega_N^n), \quad n = 0, \ldots, N-1.$$

换句话说，要得到所有的 $\hat{x}(0), \ldots, \hat{x}(N-1)$，我们只需要计算多项式 $X(\omega)$ 在点 $\omega_N^0, \omega_N^1, \ldots, \omega_N^{N-1}$ 处点值.

不失一般性，我们假设 N 为 2 的指数次方，也就是 $N = 2^m$，其中 m 为某个正整数。(不然，我们可以在离散数据后面添零）

快速 Fourier 变换的思想为：

（1）由于 $X(\omega)=X_1(\omega^2)+\omega X_2(\omega^2)$，其中

$$\begin{cases} X_1(\omega)=x(0)+x(2)\omega+x(4)\omega^2+\cdots+x(N-2)\omega^{N/2-1} \\ X_2(\omega)=x(1)+x(3)\omega+x(5)\omega^2+\cdots+x(N-1)\omega^{N/2-1} \end{cases}.$$

（2）因此，估计 $N-1$ 次多项式 $X(\omega)$ 在点 $\omega_N^0,\omega_N^1,\ldots,\omega_N^{N-1}$ 处点值转化为估计两个 $\frac{N}{2}-1$ 次多项式 $X_1(\omega),X_2(\omega)$ 在点 $(\omega_N^0)^2,(\omega_N^1)^2,\ldots,(\omega_N^{N-1})^2$ 处点值.

（3）注意到，对任意的偶数 $N>0$, 有 $(\omega_N^k)^2=\omega_{N/2}^k$ 以及 $(\omega_N^{N/2+k})^2=\omega_{N/2}^k, k=0,\ldots,N/2-1$. 因此，这一过程可以下去递归。

我们可以得到如下快速 Fourier 变换的算法：

Algorithm 1 Recursive-FFT(x)

Input: A vector $x=(x(0),x(1),\ldots,x(N-1))$.

```
If N = 1 then return x
ω_N ← e^{-2πi/N},   ω ← 1.
x_1 ← (x(0), x(2), ..., x(N-2))
x_2 ← (x(1), x(3), ..., x(N-1))
x̂_1 ← Recursive-FFT(x_1)
x̂_2 ← Recursive-FFT(x_2)
for n = 0 to n = N/2 - 1
    do x̂(n) ← x̂_1(n) + ω x̂_2(n)
       x̂(n + N/2) ← x̂_1(n) - ω x̂_2(n)
       ω ← ω ω_N
```

Output: Return $\hat{x}$

利用分而治之的思想，我们可以看出快速 Fourier 变换的时间复杂度为

$$T(N)=2T(N/2)+O(n)=O(n\log n).$$

实习题：编写快速 Fourier 变换的程序，并作图比较 FFT 与按 DFT 定义直接求法的时间随规模 N 的变化图。