超奇积分的外推法

献给林群教授 80 华诞

吕涛

四川大学数学学院, 成都 610064
E-mail: lutao1940@sina.com

收稿日期: 2014-10-10; 接受日期: 2015-04-01

摘要 使用中矩形求积法则计算奇点在区间的内部的超奇积分的 Hadamard 有限部分值, 其误差被证明具有推广 Euler-Maclaurin 展开式. 由于这个展开式包含有步长的负指数项, 这意味求积法则是发散的. 本文证明通过逐次 Richardson 外推不仅能够消去发散项, 而且能够得到高精度近似值.

关键词 超奇积分 外推 Hadamard 有限部分值

MSC (2010) 主题分类 65D30, 65B15, 65R10

1 引言

超奇积分的外推, 简而言之, 即是一类发散积分的数值方法与外推. 一个自然的问题是, 积分既然发散, 何谈数值方法? 为了解释这一点, 下面举例阐述: 考虑函数

$$f(z) = \sum_{j=1}^{\infty} z^j,$$

众所周知, 这个复函数在单位圆 $\{z: |z| < 1\}$ 内是解析的, 而另外一个函数

$$F(x) = \frac{1}{1-x},$$

则是除极点 $z=1$ 外, 在整个复平面是解析的, 并且 $f(z) = F(z), \forall |z| < 1$, 在复变函数理论中, 称函数 $F(z)$ 是 $f(z)$ 的解析延拓. 由于解析延拓是唯一的, 自然可以把 $f(z)$ 解析延拓后的函数 $F(x)$ 仍然使用 $f(z)$ 表达, 于是, $f(2)$ 不仅有意义, 而且 $f(2) = -1$. 换句话说, 发散级数可以在解析延拓意义下理解, 并且具有有限值.

再举例, 考虑使用积分表达的复变函数

$$g(\alpha) = \int_0^1 x^\alpha dx, \quad (1)$$

显然, 若 α 的实部 $\operatorname{Re} \alpha > -1$, (1) 有意义, 并且成立

$$g(\alpha) = \frac{1}{1+\alpha}, \quad \forall \operatorname{Re} \alpha > -1; \quad (2)$$

若 $\operatorname{Re} \alpha < -1$, 则 (1) 称为超奇积分. 显然, 超奇积分是发散的, (1) 没有意义. 但是, 若定义复变函数

$$G(\alpha) = \frac{1}{1+\alpha}, \quad \forall \alpha \neq -1, \quad (3)$$

于是, $G(\alpha)$ 便是 $g(\alpha)$ 的解析延拓, 并且定义超奇积分的值为

$$\int_0^1 x^{-2} dx = G(-2) = -1.$$

还可以从另外角度观察超奇积分, 假设 $\operatorname{Re} \alpha < -1$, 取 $\varepsilon > 0$, 那么, 在 $(\varepsilon, 1)$ 区间上是正常积分, 并且

$$\int_{\varepsilon}^1 x^{\alpha} dx = \frac{1}{1+\alpha} - \frac{\varepsilon^{1+\alpha}}{1+\alpha}, \quad (4)$$

其中第二项是发散部分 (当 $\varepsilon \rightarrow 0$), 第一项是有限部分. 所谓 Hadmard 意义下的发散积分的有限部分, 便是在 (4) 中弃去发散项, 这个结果与解析延拓的结果 (3) 相同. 因此, 两个定义是等价的.

发散积分的有限部分思想来源于理论物理. 早在 20 世纪 40 年代, 理论物理学家使用微扰理论计算量子电动力学的问题时, 得到的积分是发散的. 为了克服发散困难, 理论物理学家使用所谓重正化技术, 即剔除发散项, 只取有限部分值, 而得到的数据却与实验相符合. 正是理论物理方法催生了广义函数这门新的数学学科诞生, 使发散积分的有限部分值有严格的数学基础, 其代表专著参见文献 [1].

当今, 奇异、超奇积分和超奇积分方程已经广泛应用于数学物理、工程技术和边界元问题中, 相关的文献极为丰富, 其中文献 [2] 对奇异积分的计算有值得关注的新结果; 文献 [3] 对超奇积分的有限部分值的定义、性质和应用有完整的综述; 文献 [4] 则是全面阐述超奇积分方程的性质和应用的专著.

本文聚焦于使用中矩形求积法则计算一类奇点在积分区间内部点的超奇积分, 证明数值求积的值与 Hadmard 有限部分值的误差关于步长的渐近展开有负指数, 这表明, 这些求积法则是不收敛的, 但是, 通过逐步负指数的 Richardson 外推后消去发散项后, 再经过正指数的 Richardson 外推便得到高精度. 本文的方法表明, 一些发散的数值方法, 其实可以通过外推等特殊技巧得到高精度.

2 超奇积分的 Hadmard 有限部分定义及性质

若 $f(x)$ 是区间 $(0, b)$ 上的超奇积分, 定义其上超奇积分的 Hadmard 有限部分如下:

定义 1^[3] 若对于任意充分小的 $\varepsilon > 0$, 函数 $f(x)$ 在区间 (ε, b) 上可积, 并且存在单调序列 $\alpha_0 < \alpha_1 < \alpha_2 < \cdots$, 非负整数 J 和常系数 $\{I_{i,j}\}$ 使其上的积分关于 ε 有渐近展开式

$$\int_{\varepsilon}^b f(x) dx = \sum_{i=0}^{\infty} \sum_{j=0}^J I_{i,j} \varepsilon^{\alpha_i} \ln^j \varepsilon, \quad (5)$$

则定义积分的 Hadmard 有限部分积分为

$$\text{f.p.} \int_0^b f(x) dx = \begin{cases} I_{k,0}, & \text{当 } \alpha_k = 0, \\ 0, & \text{当 } \alpha_k \neq 0, \text{ 对所有 } i. \end{cases} \quad (6)$$

按照上面定义容易证明, 正常积分和 Cauchy 主值意义下的奇异积分都可以统一在定义 1 的框架下.

由定义 1 直接导出以下性质:

性质 1 对任意 $b > 0$, 有

$$\text{f.p.} \int_0^b x^\alpha dx = \begin{cases} \ln b, & \text{当 } \alpha = -1, \\ \frac{b^{\alpha+1}}{\alpha+1}, & \text{当 } \alpha \neq -1. \end{cases} \quad (7)$$

性质 2 若 $\alpha < -1$, $m > -\alpha - 2$ 和 $g(x) \in C^{m+1}[0, b]$, 则对任意 $b > 0$, 有

$$\text{f.p.} \int_0^b g(x) x^\alpha dx = \int_0^b x^\alpha \left[g(x) - \sum_{k=0}^m g^{(k)}(0) \frac{x^k}{k!} \right] dx + \sum_{k=0}^m \frac{g^{(k)}(0)}{k!} \text{f.p.} \int_0^b x^{\alpha+k} dx. \quad (8)$$

公式 (8) 表明, 除了 α 是负整数外, 积分与 α 解析相关.

3 端点奇异的超奇积分的 Euler-Maclaurin 展开式

使用梯形法则或偏矩形法则计算有限区间的光滑函数积分, 其误差有 Euler-Maclaurin 渐近展开式. 1955 年, Romberg 应用这个渐近展开式得到著名的 Romberg 算法; 1962 年 Navot^[5] 使用 Fourier 级数展开得到弱奇异积分的 Euler-Maclaurin 渐近展开; 其后 Ninham^[6] 沿此思路得到包含弱奇异内点的更新的结果, 但是, 这些结果仍然不能推广到奇异积分和超奇异积分上. Euler-Maclaurin 渐近展开的新证明是 Verlinden 和 Haegemans^[7] 基于 Mellin 变换方法在 1993 年得到的, 其后, Monegato 和 Lyness^[8-10] 发现应用 Mellin 变换和复变函数的解析延拓方法可以推广 Euler-Maclaurin 渐近展开式到有端点奇异的超奇积分上. 下面简述他们在有限区间的结果.

考虑积分

$$\text{f.p.} \int_0^1 f(x) dx, \quad (9)$$

其中

$$f(x) = x^\alpha (1-x)^\gamma g(x), \quad g(x) \in C^m[0, 1]. \quad (10)$$

熟知, 若 $\min(\alpha, \gamma) = -1$, 称积分 (9) 是奇异积分; 若 $\min(\alpha, \gamma) < -1$, 称积分 (9) 是超奇积分. 显然, 无论奇异积分或者超奇积分 (9) 都是发散的, 积分都必须按照 Hadamard 的有限部分的意义理解. 对于有限区间的超奇积分需要引入中立型函数, 称函数 $v(x; k_1, k_2)$, $k_1 < k_2$ 是中立型的, 若 $v(x; k_1, k_2) \in C^\infty(-\infty, \infty)$, 并且满足

$$v(x; k_1, k_2) = \begin{cases} 1, & x \leq k_1, \\ 0, & x \geq k_2. \end{cases}$$

如此的中立型函数存在, 例如,

$$v(x; k_1, k_2) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left[1 + \tanh \left(\frac{1}{k_2 - x} - \frac{1}{x - k_1} \right) \right], & \forall x \in (k_1, k_2), \\ 1, & \forall x \leq k_1, \\ 0, & \forall x \geq k_2. \end{cases}$$

在此定义下, 便有

$$f(x) = f(x) v\left(x; \frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right) + f(x) \left(1 - v\left(x; \frac{1}{3}, \frac{2}{3}\right)\right) = f_0(x) + f_1(x) = f_0(x) + f_2(1-x). \quad (11)$$

为了构造偏矩形求积法则, 取充分大的 N 和 β , $0 < \beta < 1$, 置

$$(S_N f)(\beta) = \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{\beta+k}{N}\right), \quad (12)$$

特别地, 若取 $\beta = 1/2$, (12) 成为中矩形法则.

(12) 和 (9) 的误差关系有下引理:

引理 1 ^[3] 若 $f(x) = x^\alpha(1-x)^\gamma g(x)$, $g(x) \in C^n[0, 1]$, 如果 $\omega = \min(\alpha, \gamma) < -1$, 并且 α 和 γ 皆不是负整数, 则对于给定的 $0 < \beta < 1$ 和正整数 N , 我们有偏矩形公式的 Euler-Maclaurin 展开式

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{\beta+k}{N}\right) &= \text{f.p.} \int_0^1 f(x) dx + \sum_{k=0}^n \frac{1}{N^{k+1+\alpha} k!} \zeta(-k-\alpha, \beta) g_0^{(k)}(0) \\ &\quad + \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{N^{k+1+\gamma} k!} \zeta(-k-\gamma, 1-\beta) g_1^{(k)}(1) \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} N^{p-1} (F_0(p) + F_2(p)) \zeta(p, \beta) dp, \end{aligned} \quad (13)$$

其中 $g_0(x) = (1-x)^\gamma g(x)$, $g_1(x) = x^\alpha g(x)$, $c' \in [-n-\omega-2, -n-\omega-1]$, $F_0(p)$ 和 $F_2(p)$ 分别是 (11) 定义的函数 $f_0(x)$ 和 $f_2(x)$ 的广义 Mellin 变换, $\zeta(s, \beta)$ 是推广 Riemann ζ 函数.

引理 2 ^[3] 若 $f(x) = x^\alpha(1-x)^\gamma g(x)$, $g(x) \in C^n[0, 1]$, 如果 $\min(\alpha, \gamma) \leq -1$, 并且 $\alpha = -l-1$ 是负整数, 但是 γ 不是负整数, 则对于给定的 $0 < \beta < 1$ 和正整数 N , 成立偏矩形公式的 Euler-Maclaurin 展开式

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{\beta+k}{N}\right) &= \text{f.p.} \int_0^1 f(x) dx - \frac{g_0^{(l)}(0)}{l!} \psi(\beta) + \frac{g_0^{(l)}(0)}{l!} \ln N \\ &\quad + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq l}}^n \frac{1}{N^{k+1+\alpha} k!} \zeta(-k-\alpha, \beta) g_0^{(k)}(0) \\ &\quad + \sum_{k=0}^n \frac{(-1)^k}{N^{k+1+\gamma} k!} \zeta(-k-\gamma, 1-\beta) g_1^{(k)}(1) \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} N^{p-1} (F_0(p) + F_2(p)) \zeta(p, \beta) dp; \end{aligned} \quad (14)$$

若 $\gamma = -l-1$ 是负整数, 但是 α 不是负整数, 则成立偏矩形公式的 Euler-Maclaurin 展开式

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{\beta+k}{N}\right) &= \text{f.p.} \int_0^1 f(x) dx - (-1)^l \frac{g_1^{(l)}(1)}{l!} \psi(\beta) + (-1)^l \frac{g_1^{(l)}(1)}{l!} \ln N \\ &\quad + \sum_{k=0}^n \frac{1}{N^{k+1+\alpha} k!} \zeta(-k-\alpha, \beta) g_0^{(k)}(0) \\ &\quad + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq l}}^n \frac{(-1)^k}{N^{k+1+\gamma} k!} \zeta(-k-\gamma, 1-\beta) g_1^{(k)}(1) \\ &\quad + \frac{1}{2\pi i} \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} N^{p-1} (F_0(p) + F_2(p)) \zeta(p, \beta) dp; \end{aligned} \quad (15)$$

若 $\alpha = -l - 1, \gamma = -m - 1$ 皆是负整数, 则有偏矩形公式的 Euler-Maclaurin 展开式

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k=0}^{N-1} f\left(\frac{\beta+k}{N}\right) = & \text{f.p.} \int_0^1 f(x) dx - \frac{g_0^{(l)}(0)}{l!} \psi(\beta) + \frac{g_0^{(l)}(0)}{l!} \ln N \\ & - (-1)^m \frac{g_1^{(l)}(1)}{m!} \psi(\beta) + (-1)^m \frac{g_1^{(l)}(1)}{m!} \ln N \\ & + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq l}}^n \frac{1}{N^{k+1+\alpha} k!} \zeta(-k-\alpha, \beta) g_0^{(k)}(0) \\ & + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq m}}^n \frac{(-1)^k}{N^{k+1+\gamma} k!} \zeta(-k-\gamma, 1-\beta) g_1^{(k)}(1) \\ & + \frac{1}{2\pi i} \int_{c'-i\infty}^{c'+i\infty} N^{p-1} (F_0(p) + F_2(p)) \zeta(p, \beta) dp, \end{aligned} \quad (16)$$

其中 $F_0(p)$ 和 $F_2(p)$ 分别是由 (14) 定义的函数 $f_0(x)$ 和 $f_2(x)$ 的广义 Mellin 变换, $c' \in (-n - \omega - 2, -n - \omega - 1)$, $\omega = \min(\alpha, \gamma)$, 而 $\psi(z) = \Gamma'(z)/\Gamma(z)$ 是 Ψ 函数.

注 1 取区间 $[0, 1]$ 不是本质的, 上面引理完全可以推广到一般区间 $[a, b]$ 上.

注 2 渐近展开 (13)–(16) 表明, 偏矩形公式不能收敛到超奇积分的 Hadamard 的有限部分值, 除非把导致发散项, 如 (13)–(16) 右端关于 $g_0^{(k)}(a)$, $k = 0, \dots, l$ 和 $g_0^{(k)}(b)$, $k = 0, \dots, m$ 的这些项移到左端作为求积公式的一部分.

注 3 对于中矩形法则, 由于 $\zeta(-2k, 1/2) = 0$, $k = 0, 1, 2, \dots$, 故与之相应的渐近展开项将随之简化.

4 内点奇异的超奇积分的 Euler-Maclaurin 展开式

考虑带参数的超奇异积分

$$\text{f.p.} \int_a^b G(x) dx = \text{f.p.} \int_a^b \frac{g(x)}{(x-t)^s} dx, \quad s > 1, \quad (17)$$

或者更一般的超奇积分

$$\text{f.p.} \int_a^b G_1(x) dx = \text{f.p.} \int_a^b |x-t|^\alpha (\ln|x-t|)^p g(x) dx, \quad \alpha < -1, \quad (18)$$

其中 p 为非负整数, $g(x)$ 是 $[a, b]$ 上的光滑函数. 如此类型的超奇积分在计算超奇积分方程时经常遇到, 但是这一类型的超奇积分不能直接用前面引理得到, 需要按照不同类型加以区别对待.

令 $x_j = a + jh$, $j = 0, 1, \dots, N$, $h = (b-a)/N$, N 是正整数, $t \in \{x_j : 1 \leq j \leq N-1\}$ 是固定参数, 为了简便起见, 取 $\beta = 1/2$, 并且由此构造中矩形求积公式

$$I_h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} h G\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right), \quad (19)$$

利用上节引理, 我们导出以下定理:

定理 1 若 $g(x) \in C^{2n+1}[a, b]$, 而 $G(x) = g(x)|x - t|^\alpha$, $\alpha < -1$, $t \in \{x_j : 1 \leq j \leq N-1\}$, 不妨置 $t = x_i$, 并且 α 不是负整数, 则成立渐近展开

$$I_h(G) = \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ + \sum_{k=0}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}), \quad (20)$$

其中 $B_{2k}(x)$ 是 $2k$ 阶 Bernoulli 多项式.

证明 令 $t = x_i$, 由

$$\text{f.p.} \int_a^b G(y) dy = \text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y) dy + \text{f.p.} \int_a^{x_i} G(y) dy, \quad (21)$$

应用 (13) 和 $\zeta(-2k, 1/2) = 0$, $k = 0, 1, 2, \dots$, 得到

$$\sum_{j=0}^{i-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) = \text{f.p.} \int_a^{x_i} G(y) dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k-1)!} \zeta \left(-2k + 1, \frac{1}{2} \right) G^{(2k-1)}(a) \\ + \sum_{k=0}^{2n} \frac{(-1)^k h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta \left(-k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (22)$$

类似又有

$$\sum_{j=i}^{N-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) = \text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y) dy - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k-1)!} \zeta \left(-2k + 1, \frac{1}{2} \right) G^{(2k-1)}(b) \\ + \sum_{k=0}^{2n} \frac{h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta \left(-k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (23)$$

组合 (22) 和 (23) 便得到

$$\sum_{j=0}^{N-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) = \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k-1)!} \zeta \left(-2k + 1, \frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ + \sum_{k=0}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+1}). \quad (24)$$

再应用 $\zeta(-2k + 1, 1/2) = -\frac{B_{2k}(1/2)}{2k}$, 代入 (24), 便得到 (20) 的证明. $\square$

推论 1 在定理 1 的假定下, 若 l 是满足不等式 $-\alpha < 2l + 1 < 2n$ 的最小正整数, 则成立超奇积分的求积公式

$$\sum_{j=0}^{N-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) - \sum_{k=0}^{l-1} 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) \\ = \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ + \sum_{k=l}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (25)$$

显然, 若令 $\eta = \min(2, 2l + 1 + \alpha)$, 则上面公式的收敛阶为 $O(h^\eta)$.

推论 2 在定理 1 的假定下, 如果 $G(x)$ 是以 $T = b - a$ 为周期的周期函数, 并且在 $(-\infty, \infty)/\{t + kT\}_{k=-\infty}^{\infty}$ 的点上至少 $2n$ 次可微, 则成立

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) - \sum_{k=0}^{l-1} 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta\left(-2k - \alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i) \\ = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=l}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta\left(-2k - \alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \end{aligned} \quad (26)$$

定理 2 若 $g(x) \in C^{2n+1}[a, b]$, 而 $G(x) = g(x)|x - t|^\alpha \ln|x - t|$, 并且 $\alpha < -1$, 但不是负整数, 并且 l 是满足不等式 $-\alpha < 2l + 1 < 2n$ 的最小正整数, $t = x_i$, 则

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) - \sum_{k=0}^{l-1} 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \left[\zeta\left(-2k - \alpha, \frac{1}{2}\right) \ln h - \zeta'\left(-2k - \alpha, \frac{1}{2}\right) \right] g^{(2k)}(x_i) \\ = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k-1)!} \zeta\left(-2k - 1, \frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ + \sum_{k=l}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \left[\zeta\left(-2k - \alpha, \frac{1}{2}\right) \ln h - \zeta'\left(-2k - \alpha, \frac{1}{2}\right) \right] g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \end{aligned} \quad (27)$$

证明 因为 α 不是负整数, 故 (26) 的两端关于 α 是解析相关的, 故对 α 微分, 便得到 (27). $\square$

当 α 是负整数情形, 超奇积分的中矩形公式有如下渐近展开式:

定理 3 若 $g(x) \in C^{2n+1}[a, b]$, 而 $G(x) = g(x)|x - t|^\alpha$, $t = x_i$, $1 \leq i \leq N - 1$, 并且 $\alpha = -2l - 1$ 是奇负整数, 则成立渐近展开

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\ - 2 \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!} \psi\left(\frac{1}{2}\right) + 2 \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!} \ln \frac{1}{h} \\ + 2 \sum_{k=l+1}^n \frac{h^{2(k-l)}}{(2k)!} \zeta\left(2(l-k) + 1, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}), \end{aligned} \quad (28)$$

其中 $\psi(1/2) = -0.577215 - 2 \ln 2 = -1.9635$. 若 $\alpha = -2l$, $l \geq 1$ 是偶整数, 则成立渐近展开

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\ + 2 \sum_{k=0}^{l-1} \frac{h^{2(k-l)+1}}{(2k)!} \zeta\left(2l - 2k, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \end{aligned} \quad (29)$$

证明 设 $\alpha = -2l - 1$, 由

$$\text{f.p.} \int_a^b G(y)dy = \text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y)dy + \text{f.p.} \int_a^{x_i} G(y)dy,$$

应用 (16) 及其余项估计得到

$$\sum_{j=0}^{i-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) = \text{f.p.} \int_a^{x_i} G(y)dy - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) G^{(2k-1)}(a)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\
& + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l}}^{2n} \frac{(-1)^k h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (30)
\end{aligned}$$

类似又有

$$\begin{aligned}
\sum_{j=i}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) &= \text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) G^{(2k-1)}(b) \\
& - \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\
& + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l}}^{2n} \frac{h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (31)
\end{aligned}$$

组合 (30) 和 (31) 便得到

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) &= \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\
& - 2\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) + 2\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\
& + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l}}^{2n} [1 + (-1)^k] \frac{h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+1}) \\
& = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\
& - 2\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) + 2\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\
& + 2 \sum_{k=l+1}^n \frac{h^{2(k-l)+1}}{(2k)!} \zeta\left(2(l-k)+1, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}),
\end{aligned}$$

这里用到若 $k > 0$ 为奇数, 且 $-k - \alpha \leq 0$, 则 $\zeta(-k - \alpha, \frac{1}{2}) = 0$; 若 $k > 0$ 为偶数, 则 $[-1 + (-1)^k] = 0$. 于是, (28) 得证.

类似地, 若 $\alpha = -2l$, $l \geq 1$, 则由 (16) 和 $(-1)^{2l-1} = -1$, 导出

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) &= \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\
& + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l-1}}^{2n} [1 + (-1)^k] \frac{h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}) \\
& = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\
& + 2 \sum_{k=0}^{l-1} \frac{h^{2(k-l)+1}}{(2k)!} \zeta\left(2l-2k, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}),
\end{aligned}$$

这里用到 $\zeta(-2k, 1/2) = 0, k = 0, 1, 2, \dots$ 于是, (28) 得证. $\square$

推论 2 对于 $\alpha = -2l - 1$, 则超奇积分的求积公式

$$I^h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) + 2\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) - 2\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\ - 2\sum_{k=0}^{l-1} \frac{h^{2(k-l)}}{(2k)!}\zeta\left(2l+1-2k, \frac{1}{2}\right)g^{(2k)}(x_i) \quad (32)$$

的误差具有偶次幂渐近展开, 从而可以使用 Richardson 外推提高精度; 对于 $\alpha = -2l, l > 1$, 则超奇积分的求积公式

$$I^h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) - 2\sum_{k=0}^{l-1} \frac{h^{2(k-l)}}{(2k)!}\zeta\left(2l-2k, \frac{1}{2}\right)g^{(k)}(x_i) \quad (33)$$

的误差也具有偶次幂渐近展开, 故可以使用 Richardson 外推提高精度.

推论 3 若 $\alpha = -1$, $G(x)$ 是以 $T = b - a$ 为周期的周期函数, 并且在 $(-\infty, \infty)/\{t + kT\}_{k=-\infty}^{\infty}$ 的点上至少 $2n$ 次可微, 则成立

$$\sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) + 2\frac{g(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) - 2\frac{g(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\ = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + 2\sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!}\zeta\left(1-2k, \frac{1}{2}\right)g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}).$$

证明 在 (28) 中置 $l = 0$, 便得到证明. $\square$

定理 4 若 $g(x) \in C^{2n+1}[a, b]$, 而 $G(x) = g(x)(x - t)^\alpha, t = x_i, 1 \leq i \leq N - 1$, 并且 $\alpha = -2l - 1$ 是奇负整数, 则 $l = 0$, 成立渐近展开

$$\sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!}B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right)[G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\ + O(h^{2n+2+\alpha}); \quad (34)$$

而 $l \geq 1$, 成立渐近展开

$$\sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) + 2\sum_{k=0}^{l-1} \frac{h^{2(k-l)+1}}{(2k+1)!}\zeta\left(2l-2k, \frac{1}{2}\right)g^{(2k+1)}(x_i) \\ = \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!}B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right)[G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (35)$$

证明 由

$$\text{f.p.} \int_a^b G(y)dy = \text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y)dy + \text{f.p.} \int_a^{x_i} G(y)dy,$$

应用 (16) 得到

$$\sum_{j=0}^{i-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) = \text{f.p.} \int_a^{x_i} G(y)dy - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!}B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right)G^{(2k-1)}(a)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) + \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\
& + \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l}}^{2n} \frac{(-1)^k h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (36)
\end{aligned}$$

因为 $\text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y)dy = -\text{f.p.} \int_{x_i}^b (y-x_i)^\alpha g(y)dy$, 故

$$\begin{aligned}
\sum_{j=i}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) &= \text{f.p.} \int_{x_i}^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) G^{(2k-1)}(b) \\
&+ \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\psi\left(\frac{1}{2}\right) - \frac{g^{(2l)}(x_i)}{(2l)!}\ln\frac{1}{h} \\
&- \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l}}^{2n} \frac{h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (37)
\end{aligned}$$

组合 (36) 和 (37) 便得到

$$\begin{aligned}
\sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) &= \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\
&+ \sum_{\substack{k=0 \\ k \neq 2l}}^{2n} [-1 + (-1)^k] \frac{h^{k+1+\alpha}}{k!} \zeta\left(-k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+1}) \\
&= \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\
&- 2 \sum_{k=0}^{l-1} \frac{h^{2(k-l)+1}}{(2k+1)!} \zeta\left(2l-2k, \frac{1}{2}\right) g^{(2k+1)}(x_i) + O(h^{2n+2+\alpha}), \quad l \geq 1, \quad (38)
\end{aligned}$$

这里用到若 $k > 0$ 为奇数, 且 $-k-\alpha \leq 0$, 则 $\zeta(-k-\alpha, 1/2) = 0$; 若 $k > 0$ 为偶数, 则 $[-1 + (-1)^k] = 0$, 故仅当 $k := 2k+1$ 才有贡献, 于是, (35) 得证. 若 $l = 0$, 由 (38) 便得到 (34) 的证明. $\square$

注 4 若 $l > 0$, 求积公式必须把 (38) 的右端的第二个求和项移到左端作为求积公式的一部分, 才能够收敛.

注 5 从上面定理看出, 内点超奇异与端点超奇异渐近展开有很大不同, 例如, 对于 $|x-t|^\alpha$ 类型的超奇异点, α 是奇负整数与偶负整数的展开便不一样.

5 超奇积分的推广 Richardson 外推

使用中矩形求积方法 (19) 计算超奇积分 (17) 和 (18), 按照前节的定理与其推论, 不同的奇异性质有不同的渐近展开, 例如, 带参数的超奇异积分 (17), 若 l 是满足不等式 $-\alpha < 2(l+1) < 2n$ 的最小正整数, 则求积公式为

$$I_h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) - \sum_{k=0}^l 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta\left(-2k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i), \quad (39)$$

误差的渐近展开为

$$I_h(G) - \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy = - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ + \sum_{k=l+1}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+1}). \quad (40)$$

显然, 若 $l > 0$, 求积公式 (39) 中需要计算导数值 $g^{(2k)}(x_i)$, $k = 1, \dots, l$. 一般来讲, 计算较困难. 若不计算导数值, 使用公式

$$\tilde{I}_h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) - 2h^{1+\alpha} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g(x_i) \quad (41)$$

代替 (39), 则误差渐近展开为

$$\tilde{I}_h(G) - \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy = - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ + \sum_{k=1}^l 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) \\ + \sum_{k=l+1}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+1}), \quad (42)$$

其中展开项

$$\sum_{k=1}^l 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta \left(-2k - \alpha, \frac{1}{2} \right) g^{(2k)}(x_i) \quad (43)$$

中 h 的指数是负数, 蕴涵公式 $\tilde{I}_h(G)$ 不收敛, 并且 h 越小, 误差越大. 但是, (42) 表明, $\tilde{I}_h(G)$ 可以通过逐步的负指数 Richardson 外推消去发散项.

回顾, 若 u_h 和 u_{2h} 分别由步长 h 和 $2h$ 计算得到两个近似值, 则称

$$\frac{2^\beta u_{2h} - u_h}{2^\beta - 1}, \quad \beta \neq 0 \quad (44)$$

为 u_h 的 Richardson- h^β 外推, 或者简称 h^β 外推. 由于一个包含 h^β 项的渐近展开可以通过 h^β 外推消去此项, 包含 $h^\beta \ln h$ 项的渐近展开可以通过两次 h^β 外推消去此项 (参见文献 [11]), 因此逐步使用 $h^{2k+1+\alpha}$ 外推, $k = 1, \dots, l$, (43) 的各项被消去, 从而得到误差为 $O(h^{2l+3+\alpha})$ 阶, 然后再继续使用正指数的 Richardson 外推得到更高精度. 这便是推广 Romberg 外推, 实算表明这个方法很有效. 受此启示, 可以得到结论: 一个看似无用的发散方法, 依然可能借助外推法得到高精度. 对于定理 2-4 及其推论的渐近展开也有相同结论.

6 算例

例 1 考虑超奇积分

$$I(y) = \text{f.p.} \int_0^1 \frac{(2x-1)^3}{(x-y)^2} dx, \quad y \in (0, 1),$$

直接计算导出

$$I(y) = 16y - 8 + 6(2y - 1)^2 \ln \left(\frac{1-y}{y} \right) - \frac{(2y-1)^3}{y(1-y)}.$$

使用渐近展开 (25), 在 $l = 1$ 情形导出修改中矩形求积法则

$$I_h = \sum_{j=0}^{N-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) - 2 \frac{1}{h} \zeta \left(2l - 2k, \frac{1}{2} \right) g(x_i), \quad (45)$$

这里和以下算例 $G(x)$ 皆为被积函数, (a, b) 皆为积分区间, $y = x_i$ 是结点, 而误差有渐近展开

$$I_h - \text{f.p.} \int_a^b G(x) dx = \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)]. \quad (46)$$

按照 (46), 计算在 $y = x_i = 1/4$ 的逐步外推结果, 见表 1.

例 2 计算奇异积分

$$I(y) = \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{e^x}{|x-y|} dx, \quad y \in (-1, 1), \quad (47)$$

由于积分在 Cauchy 主值意义下是发散的, 因此求积分的 Hadamard 有穷部分. 已知精确积分值是

$$I(y) = \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{e^x}{|x-y|} dx = e^y \sum_{k=1}^{\infty} \frac{1}{k!k} [(-1-y)^k + (1-y)^k] + 2e^y (\ln |1+y| + \ln |1-y|).$$

应用 (25), 因本例 $l = 0$, 于是构造修改中矩形求积法则

$$I_h = \sum_{j=0}^{N-1} hG \left(a + \left(j + \frac{1}{2} \right) h \right) + 2 \frac{g(x_i)}{(2l)!} \psi \left(\frac{1}{2} \right) - 2 \frac{g(x_i)}{(2l)!} \ln \frac{1}{h}, \quad (48)$$

其中假设 $y = x_i$ 是结点, 而对应的误差有渐近展开

$$\begin{aligned} I_h - \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy &= \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k} \left(\frac{1}{2} \right) [G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\ &\quad + 2 \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} \zeta \left(1 - 2k, \frac{1}{2} \right) g^{(k)}(x_i) + O(h^{2n+1}). \end{aligned} \quad (49)$$

按照 (48) 计算近似值, 并按 (49) 执行外推, 结果见表 2.

例 3 计算超奇积分

$$I(y) = \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{g(x)}{(x-y)^3} dx, \quad y \in (-1, 1),$$

其中 $g(x) = e^x$, 容易导出精确值为

$$\begin{aligned} I(y) = e^y &\left[\frac{1}{2}(-1-y)^{-2} - \frac{1}{2}(1-y)^{-2} + \frac{1}{-1-y} - \frac{1}{1-y} + \frac{1}{2} \ln(1-y) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{2} \ln(1+y) + \frac{1}{3} + \sum_{k=4}^{\infty} \frac{1}{k!} \frac{1}{k-2} ((1-y)^{k-2} - (-1-y)^{k-2}) \right]. \end{aligned}$$

特别地, 有 $I(0.5) = -7.7388277630$.

表 1 例 1 中取 $y = 1/4$ 的近似误差与外推误差

h	2^{-8}	2^{-9}	2^{-10}	2^{-11}
I_h 误差	2.331×10^{-2}	6.077×10^{-3}	1.537×10^{-4}	3.854×10^{-4}
h^{-1} 外推		3.327×10^{-4}	2.364×10^{-5}	1.543×10^{-6}
h^2 外推			3.030×10^{-6}	7.013×10^{-8}
h^4 外推				2.316×10^{-8}

表 2 例 2 中取 $y = 0.984375$ 的近似误差与外推误差

h	2^{-8}	2^{-9}	2^{-10}	2^{-11}
I_h 误差	6.894×10^{-3}	1.737×10^{-3}	1.435×10^{-4}	1.089×10^{-4}
h^2 外推		1.832×10^{-5}	1.179×10^{-6}	7.430×10^{-8}
h^4 外推			3.612×10^{-8}	6.578×10^{-10}
h^6 外推				9.495×10^{-11}

在 (34) 中取 $l = 1$, 构造求积法则

$$I_h = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) + 2h^{-1}\zeta\left(2, \frac{1}{2}\right)g^{(1)}(x_i), \quad (50)$$

其中 $y = x_i$ 是剖分结点. 按照 (35), I_h 的误差有偶次幂渐近展开

$$I_h - \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy = \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right)[G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] + O(h^{2n+2+\alpha}). \quad (51)$$

但是公式 (51) 涉及 $g(x)$ 的导数计算, 为了回避导数计算, 直接使用中矩形法则

$$\hat{I}_h = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right), \quad (52)$$

那么, $\hat{I}_h$ 的误差随 h 越小而越大, 而误差的渐近展开为

$$\begin{aligned} \hat{I}_h - \text{f.p.} \int_a^b G(y)dy &= -2h^{-1}\zeta\left(2, \frac{1}{2}\right)g^{(1)}(x_i) + \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right)[G^{(2k-1)}(b) - G^{(2k-1)}(a)] \\ &\quad + O(h^{2n+2+\alpha}). \end{aligned} \quad (53)$$

但是, (53) 表明, 执行一次 Richardson- h^{-1} 外推

$$\tilde{I}_h = 2\hat{I}_{2h} - \hat{I}_h \quad (54)$$

后, 得到的 $\tilde{I}_h$ 的误差具有正的偶次幂的渐近展开, 若再执行 Richardson- h^2 外推,

$$Q_h = \frac{4}{3}\tilde{I}_h - \frac{1}{3}\tilde{I}_{2h}, \quad (55)$$

便有

$$I = Q_h + O(h^4). \quad (56)$$

在这个结果基础上当然还可以按照 Romberg 方法继续外推, 计算结果见表 3. 由表 3 可见 $\hat{I}_h$ 发散, $\hat{I}_h$ 的 h^{-1} 外推虽然收敛, 但收敛慢; 经过 h^2 外推和 h^4 外推后收敛显著加快.

例 4 计算分数阶的超奇积分

$$I(y) = \text{f.p.} \int_{-1}^1 \frac{e^x}{(x-y)^{\frac{4}{3}}} dx, \quad y \in (-1, 1). \quad (57)$$

经过精确计算得到 $I(0.25) = -7.7384952423$. 由 (35), 本例 $\alpha = -4/3$, 故 $l = 0$, 故相应的修改中矩形求积法则为

$$I_h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) - \sum_{k=0}^l 2h^{-1/3} \zeta\left(\frac{4}{3}, \frac{1}{2}\right) g(x_i), \quad (58)$$

其中 $y = 0.25 = x_i$ 是结点, 而误差的渐近展开为

$$\begin{aligned} e_h(G) &= I_h(G) - \text{f.p.} \int_a^b G(y) dy \\ &= - \sum_{k=1}^n \frac{h^{2k}}{(2k)!} B_{2k}\left(\frac{1}{2}\right) [G^{(2k-1)}(a) - G^{(2k-1)}(b)] \\ &\quad + \sum_{k=1}^n 2 \frac{h^{2k+1+\alpha}}{(2k)!} \zeta\left(-2k-\alpha, \frac{1}{2}\right) g^{(2k)}(x_i) + O(h^{2n+1}), \quad \alpha = -\frac{4}{3}, \end{aligned} \quad (59)$$

即误差阶仅为 $O(h^{5/3})$. 但是通过 $h^{5/3}$ - 外推后, 精度便达到 $O(h^2)$, 再经过 h^2 - 外推后, 结果达到 $O(h^{11/3})$, 详见表 4.

例 5 计算含对数奇异项的超奇积分

$$I(y) = \text{f.p.} \int_0^1 \frac{\ln|x-y|}{|x-y|^{3/2}} dx, \quad (57)$$

直接按定义 1 导出

$$I(y) = -2 \ln(1-y)(1-y)^{-1/2} - 4(1-y)^{-1/2} - 2y^{-1/2} \ln y + 4y^{-1/2}.$$

特别置 $y = 0.25$, 计算得 $I(0.25) = -6.7859426$. 按照 (27), 本例 $\alpha = -3/2$, $l = 0$, 若取修改中矩形求积法则

$$\hat{I}_h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right) - 2h^{-\frac{1}{2}} \left[\zeta\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \ln h - \zeta'\left(\frac{3}{2}, \frac{1}{2}\right) \right] g(y), \quad (58)$$

虽然可以收敛, 但是必须计算 $\zeta(3/2, 1/2)$ 和 $\zeta'(3/2, 1/2)$ 的值, 更简单的方法是直接使用中矩形求积法则

$$I_h(G) = \sum_{j=0}^{N-1} hG\left(a + \left(j + \frac{1}{2}\right)h\right), \quad (59)$$

然后通过两次 $h^{-1/2}$ - 外推, 消去 $h^{-1/2} \ln h$ 和 $h^{-1/2}$ 等发散项, 得到 $O(h^2)$ 精度, 其数值结果见表 5. 从表 5 中看出经过第二次 $h^{-1/2}$ - 外推后, 精度大为改善.

表 3 例 3 中取 $y = 0.5$ 的近似误差与外推误差

h	$1/2^2$	$1/2^3$	$1/2^4$	$1/2^5$
$\hat{I}_h$ 误差	57.603	122.507	252.634	512.977
h^{-1} 外推		0.437	0.119	0.031
h^2 外推			0.014	0.001
h^4 外推				1.899×10^{-4}

表 4 例 4 中取 $y = 0.25$ 的近似误差与外推误差

h	2^{-3}	2^{-4}	2^{-5}
I_h 误差	4.68×10^{-3}	1.32×10^{-3}	3.77×10^{-4}
$h^{5/3}$ 外推		-2.21×10^{-4}	-5.62×10^{-5}
h^2 外推			-1.46×10^{-6}

表 5 例 5 中取 $y = 0.25$ 的近似误差与外推误差

h	2^{-2}	2^{-3}	2^{-4}	2^{-5}	2^{-6}
I_h 误差	-18.046	-44.172	-89.041	-163.518	-284.374
$h^{-1/2}$ 外推		45.028	64.151	90.763	128.255
$h^{-1/2}$ 外推			-1.138	0.250	-0.0963

参考文献

- 1 Gelfand I M, Shilov G E. 广义函数 I. 林坚冰译. 北京: 科学出版社, 1965
- 2 Kaneko H, Xu Y. Gauss-type quadratures for weakly singular integrals and their application to Fredholm integral equations of the second kind. Math Comp, 1994, 62: 739-753
- 3 Monegato G, Lyness J N. The Euler-Maclaurin expansion and finite-part integrals. Numer Math, 1998, 81: 273-291
- 4 Lifanov I K, Poltavskii L N, Vainikko G M. Hypersingular Integral Equations and their Applications. New York: CRC Press, 2004
- 5 Navot I. An Extension of the Euler-Maclaurin summation formula to functions with a branch singularity. J Math Phys, 1961, 40: 271-278
- 6 Ninham B W. Generalised functions and divergent integrals. Numer Math, 1966, 8: 444-457
- 7 Verliden P, Haegemans A. An error expansion for cubature with an integrand with homogeneous boundary singularities. Numer Math, 1993, 65: 383-406
- 8 Monegato G. Definitions, properties and applications of finite-part integrals. J Comput Appl Math, 2009, 229: 425-439
- 9 Monegato G. Numerical evaluation of hypersingular integrals. J Comput Appl Math, 1994, 50: 9-31
- 10 Lyness J N, Monegato G. Asymptotic expansions for two-dimensional hypersingular integrals. Numer Math, 2005, 100: 293-329
- 11 吕涛, 石济民, 林振宝. 分裂外推与组合技巧. 北京: 科学出版社, 1998

Extrapolations for hypersingular integrals

LV Tao

Abstract By using the mildpoint trapezoidal rule a generalized Euler-Maclaurin expansion for computing

Hadamard finite part values of the hypersingular integrals with a singular point on the interval interior is shown, where there are some negative exponential terms of the step size in the expansion. It means that the rule is divergent. However, by means of successive Richardson extrapolations a high accuracy of Hadamard finite part values of the hypersingular integrals is obtained.

Keywords hypersingular integral, extrapolations, Hadamard finite

MSC(2010) 65D30, 65B15, 65R10

doi: 10.1360/N012014-00210