

求泛函值的外推法^{*}

刘诗俊

(基础课部)

摘 要 对于非线性问题(A)(见下文)所对应的泛函 $E(f) = \int_0^1 (\frac{1}{2} f'^2 + s(f)) dx$, 找到了它的渐近展开式 $E(f_h) = E(F) + hW_0(T) + O(h^2)$ ⁽¹³⁾由此得到外推式 $2E(f_{\frac{h}{2}}) - E(f_h) = E(F) + O(h^2)$, 这就找到了求泛函值 $E(F)$ 的一种“高效低耗”之法, 即外推法⁽¹³⁾

关键词 外推; 泛函

分类号 O 241.8

0 引 言

在文献[1]中, 我们在一组条件下, 利用泛函 $E(f) = \int_a^b L(x, f(x), f'(x)) dx$ 导出了估计式

$$|E(f) - E(F)| \leq \frac{2}{\lambda} (E(f) - E(F)) \quad (13)$$

于是, 用嵌入定理立得

$$\max_{x \in [a, b]} |f(x) - F(x)| \leq K \sqrt{\frac{2}{\lambda} (E(f) - E(F))} \quad (13)$$

又, 对泛函 $E(f) = \int_{\Omega} L(x, y, f(x, y), f_x(x, y), f_y(x, y)) d\Omega$ ($\Omega \subset R^2$) 在文献[1]中也得到类似的估计式

$$\max_{(x, y) \in \Omega} |f(x, y) - F(x, y)| \leq K \sqrt{\frac{2}{\lambda} (E(f) - E(F))} \quad (13)$$

在以上各式中, F 是“驻函”, $E(F)$ 是对应于 F 的泛函值⁽¹³⁾这些不等式可广泛地用来估计非线性常微分方程及非线性偏微分方程数值解的误差, 详见文献[1]⁽¹³⁾

由此就产生一个问题, 如何求出驻函 F 的泛函值 $E(F)$ 来呢?

在实际计算中, 我们发现用 Richardson 外推法来求 $E(F)$ 的值, 效率甚高⁽¹³⁾按此法对已求得的近似值用一个简单的步骤进行“精加工”, 立即将精度提高一个数量级⁽¹³⁾为解释这种现象,

我们建立了关于泛函的 Richardson 外推的一套理论框架^[13]

1 关于泛函 $E(F)$ 的外推算法及其理论根据

考虑如下 Cauchy 问题

$$(A) \quad \begin{cases} f''(x) = g(f(x)), & x \in [0, T] \\ f(0) = a_1, \quad f'(0) = a_2 \end{cases} \quad (13)$$

在此 $g(f(x))$ 是变量 $f(x)$ 的函数(已给定)^[13]这是非线性问题类中的一个半线性问题^[13]如果 $g \in C^2(R)$ (指 $g''(f)$ 对 $f \in R$ 连续), 取泛函

$$E(f) = \int_0^T \left(\frac{1}{2} f'^2 + s(f) \right) dx \quad (1)$$

在此 $s(f)$ 满足 $\frac{ds}{df} = g(f)$ (可取 $s(f) = \int_0^f g(z) dz$)^[13]显然与泛函(1)对应的 Euler 方程即(A)中的方程^[13]故若(A)有解 $f(x) = F(x)$, 则 F 即泛函(1)的“驻函”(参看文献[1])^[13]我们得到

引理 1 对于问题(A), 设 $g \in C^2(R)$, 且(A)有唯一解 $F(x) \in C^2[0, T]$ ^[13]又设 $f_h(x)$ 及 $r_h(x)$ 是(A)的 Euler 格式差分解(详见下文中的(A')及式(3)), 它们分别是 $F(x)$ 和 $F'(x)$ 的近似式^[13]则有如下渐近展开式

$$\begin{cases} f_h(x) = F(x) + hV_1(x) + h^2s_{1,h}(x), \\ r_h(x) = F'(x) + hV_2(x) + h^2s_{2,h}(x) \end{cases} \quad (2)$$

在此, 式(2)当 $x \in \omega = \{ih; i = 0, 1, \dots, n-1\}$ ($nh = T$) 时成立^[13] $f_i(x) \in C^2[0, T]$, 且 $V_i(x)$ 与 h 无关^[13]而 $|s_{i,h}(x)| \leq M$ (M 与 h 无关, $i = 1, 2$)^[13]

此引理的证明见文献[2]^[13]

现在将问题(A)的 Euler 格式差分方程写出来^[13]令 $f_1 = f, f_2 = f'$; 得一阶微分方程组

$$(A') \quad \begin{cases} f_1'(x) = f_2(x), \\ f_2'(x) = g(f_1(x)), \\ f_k(0) = a_k \end{cases} \quad (k = 1, 2) \quad (13)$$

用差分方程将(A')离散化(取步长 $h = T/n$), 得 Euler 格式差分方程

$$(A'') \quad \begin{cases} f_{1,h}(x_{i+1}) - f_{1,h}(x_i) = hf_{2,h}(x_i), \\ f_{2,h}(x_{i+1}) - f_{2,h}(x_i) = hg(f_{1,h}(x_i)), \\ f_{k,h}(0) = a_k \end{cases} \quad (k = 1, 2) \quad (13)$$

注意

$$\begin{cases} f_h(x) = f_{1,h}(x), \\ r_h(x) = f_{2,h}(x) \end{cases} \quad (3)$$

现在观察式(2)^[13]注意此式中的函数 $F(x), F'(x), V_1(x)$ 和 $V_2(x)$ 均在 $[0, T]$ 上有定义(见文献[2]中 $P.9 \approx P.12$)^[13]我们现在将 $s_{i,h}(x)$ 从 ω 延拓到 $[0, T]$ 上, 办法是当 $x \in [0, T] \setminus \omega$ 时, 令 $s_{ih}(x) = 0$ ($i = 1, 2$)^[13]于是式(2)在 $[0, T]$ 上处处成立^[13]且当 $x \in [0, T] \setminus \omega$ 时, $f_h(x) \equiv F(x)$

$+hV_1(x)$ 而 $F(x), V_1(x) \in C^2[0, T]$, 故 $f_h(x)$ 在 $[0, T] \setminus \omega$ 中处处连续(且有连续的二阶导数)(13)但集合 ω 的测度为零, 于是 $f_h(x)$ 在 $[0, T]$ 上几乎处处连续, 又 $f_h(x)$ 显然有界, 故 $f_h(x)$ 在 $[0, T]$ 上可积(13)同理 $r_h(x)$ 也在 $[0, T]$ 上可积, 综上所述, 我们已经证明了

引理 2 在引理 1 的条件下, 式(2)可延拓到 $[0, T]$ 上, 使

$$\begin{cases} |s_{i,h}(x)| \leq M, & (i = 1, 2, x \in [0, T], M \text{ 为一正的常数}) \\ f_h(x) = F(x) + hV_1(x). & (x \in [0, T] \setminus \omega) \end{cases} \quad (4)$$

$$\text{又} \quad \begin{cases} f_h(x) \frac{(a \cdot e \cdot)}{F(x)} F(x) + hV_1(x), \\ r_h(x) \frac{(a \cdot e \cdot)}{F'(x)} F'(x) + hV_2(x), & (x \in [0, T]) \\ f'_h(x) \frac{(a \cdot e \cdot)}{F'(x)} F'(x) + hV'_1(x) \end{cases} \quad (5)$$

引理 3 设引理 1 的条件成立, 且问题(A)的 Euler 格式差分解 $f_h(x)$ 及 $r_h(x)$ 已按上述方式(见引理 2 的论证)延拓到 $[0, T]$ 上, 则当 $h > 0$ 充分小时, 有渐近展开式

$$E(f_h) = E(F) + hW_0(T) + O(h^2) \quad (6)$$

式中 F 是(A)的精确解, 而 $E(f_h)$ 及 $E(F)$ 各为 f_h 和 F 的泛函值(13)且 $W_0(T)$ 与 h 无关(13)

$$\text{证明} \quad \because f_h(x) \frac{(a \cdot e \cdot)}{F(x)} F(x) + hV_1(x),$$

$$\text{故} \quad s(f_h(x)) \frac{(a \cdot e \cdot)}{F(x)} s(F(x) + hV_1(x)) = s(F(x)) + s'(F(x))hV_1(x) + O(h^2).$$

(注意 $g \in C^2(R)$ 及 $\frac{ds}{df} = g(f)$, 于是对 $s(F(x) + hV_1(x))$ 在 $F(x)$ 处用 Taylor 公式展开到二阶)(13)

$$\text{从而} \quad \int_0^T s(f_h) dx = \int_0^T s(F(x)) dx + h \int_0^T g(F(x)) V_1(x) dx + O(h^2) \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \text{又} \quad \int_0^T \frac{1}{2} f_h^2(x) dx &= \frac{1}{2} \int_0^T (F'(x) + hV'_1(x))^2 dx \\ &= \int_0^T \frac{1}{2} F'^2(x) dx + h \int_0^T F'(x) V'_1(x) dx + h^2 \int_0^T \frac{1}{2} V_1'^2(x) dx, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \text{于是} \quad E(f_h(x)) &= \int_0^T \left(\frac{1}{2} f_h^2(x) + s(f_h) \right) dx = \int_0^T \left(\frac{1}{2} F'^2(x) + s(F(x)) \right) dx \\ &\quad + h \int_0^T (F'(x) V'_1(x) + g(F(x)) V_1(x)) dx + O(h^2) \quad (13) \end{aligned}$$

$$\text{记} \quad \int_0^T F'(x) V'_1(x) dx = W_0(T) \quad (\text{显然 } W_0(T) \text{ 与 } h \text{ 无关}) \quad (13)$$

$$\text{可见} \quad E(f_h) = E(F) + hW_0(T) + O(h^2) \quad (13) \quad \text{证毕(13)}$$

关于泛函 $E(f)$ 的外推, 我们得到

定理 1 对于问题(A), 若 $g \in C^2(R)$, 且(A)有唯一解 $F(x) \in C^2[0, T]$ (13)又 $f_h(x)$ 及 $r_h(x)$ 是(A)的 Euler 格式差分解, 则有如下“泛函外推式”

$$2E(f_{\frac{h}{2}}) - E(f_h) = E(F) + O(h^2) \quad (7)$$

证明 由引理 3 可见式(6)成立(13)于是

$$E(f_{\frac{h}{2}}) = E(F) + \frac{h}{2} W_0(T) + O(h^2) \quad (13)$$

$$\text{故} \quad 2E(f_{\frac{h}{2}}) - E(f_h) = E(F) + O(h^2) \quad (13) \quad \text{证毕(13)}$$

由此定理可见,对 $E(F)$ 来说,如用外推值 $2E(f_{\frac{h}{2}}) - E(f_h)$ 作为其近似值,则其精度比 $E(f_h)$ 高一个数量级(因为 $E(F) - E(f_h) = O(h)$, 但是 $E(F) - [2E(f_{\frac{h}{2}}) - E(f_h)] = O(h^2)$)(13)

在实际计算中,我们用梯形公式求定积分 $E(f_h(x)) = \int_0^T [\frac{1}{2}r_h^2(x) + s(f_h(x))]dx$ 的近似值,并且用此近似值来作外推(因 $r_h(x)$ 和 $f_h(x)$ 在 $[0, T]$ 上的具体表达式并没有找到),所以,还需要如下的引理(13)

引理 4 设定理 1 的条件成立(13)记

$$E^*(f_h(x)) = h \left[\sum_{i=1}^{n-1} \left(\frac{1}{2}r_h^2(ih) + s(f_h(ih)) \right) + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{2}r_h^2(0) + \frac{1}{2}r_h^2(T) \right) + s(f_h(0)) + s(f_h(T)) \right].$$

$$\text{则} \quad E(f_h(x)) = E^*(f_h(x)) + O(h^2). \quad (8)$$

证明 $\because r_h(x) = \frac{(a \cdot e)}{F'(x) + hV_2(x)}, \quad (\text{见式 } 5)$

$$\text{故} \quad \int_0^T \frac{1}{2}r_h^2(x) dx = \int_0^T \left(\frac{1}{2}F'(x) + hV_2(x) \right)^2 dx,$$

$$\text{但} \quad \Psi(x) = \frac{\Delta}{2} (F'(x) + hV_2(x))^2 \in C^2[0, T],$$

$$\text{于是} \quad \int_0^T \Psi(x) dx = h \left[\sum_{i=1}^{n-1} \Psi(ih) + \frac{1}{2}(\Psi(0) + \Psi(T)) \right] + O(h^2) \quad (13) \quad (h = T/n)$$

$$\text{由式(2)可见} \quad \Psi(ih) = \frac{1}{2}(r_h(ih) - h^2 s_{2,h}(ih))^2 \quad (13)$$

$$\begin{aligned} \text{故} \quad \int_0^T \Psi(x) dx &= h \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2}r_h^2(ih) + \frac{1}{4}(r_h^2(0) + r_h^2(T)) \right) - h^3 \left(\sum_{i=1}^{n-1} r_h(ih) s_{2,h}(ih) + \right. \\ &\quad \left. \frac{1}{2}(r_h(0) s_{2,h}(0) + r_h(T) s_{2,h}(T)) \right) + h^5 \left(\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2}s_{2,h}^2(ih) + \frac{1}{4}(s_{2,h}^2(0) + \right. \\ &\quad \left. s_{2,h}^2(T)) \right) + O(h^2). \end{aligned}$$

再利用 $|s_{2,h}(x)| \leq M \quad (x \in [0, T])$ 及 $h \cdot n = T$, 即得

$$\int_0^T \frac{1}{2}r_h^2(x) dx = h \left[\sum_{i=1}^{n-1} \frac{1}{2}r_h^2(ih) + \frac{1}{4}(r_h^2(0) + r_h^2(T)) \right] + O(h^2). \quad (a)$$

又利用 $\frac{ds}{df} = g(f) \in C^2$ 和式(5)以及 $f_h(x)$ 和 $s_{1,h}(x)$ 在 $[0, T]$ 上的有界性, 并且对 $s(F(x) + hV_1(x))$ 在 $x = ih$ 处作 Taylor 展开(13)采取与上述证明类似的步骤, 我们得到

$$\int_0^T s(F(x) + hV_1(x)) dx = h \left[\sum_{i=1}^{n-1} s(f_h(ih)) + \frac{1}{2}(s(f_h(0)) + s(f_h(T))) \right] + O(h^2), \quad (b)$$

故式(8)成立(13)证毕(13)

推论 当定理 1 的条件成立时, 有

$$E^*(f_h(x)) = E(F(x)) + hW_0(T) + O(h^2) \quad (9)$$

$$\text{及} \quad 2E^*(f_{\frac{h}{2}}) - E^*(f_h) = E(F) + O(h^2) \quad (10)$$

证明 由式(8)及式(6)立即式(9)(13)再用与定理 1 相同的证法, 由式(9)得到式(10)(13)

2 泛函值外推实例

对于如下的 Cauchy 问题

$$(B) \quad \begin{cases} f''(x) = \frac{1}{3}f^3(x), & x \in [0, 1] \\ f(0) = \frac{1}{6}, f'(0) = -\frac{1}{6}. \end{cases}$$

对应的泛函显然是

$$E(f) = \int_0^1 \left(\frac{1}{2} f'^2 + \frac{1}{12} f^4 \right) dx$$

令 $f_1 = f, f_2 = f'$, 则 (B) 化为一阶方程组

$$(B') \quad \begin{cases} f_1'(x) = f_2(x), \\ f_2'(x) = \frac{1}{3}f_1^3(x) \end{cases} \quad x \in [0, 1] \quad (13)$$

作相应的 Euler 格式差分方程⁽¹³⁾

$$(B'') \quad \begin{cases} f_1(ih) - f_1((i-1)h) = hf_2((i-1)h), \\ f_2(ih) - f_2((i-1)h) = \frac{1}{3}hf_1^3((i-1)h) \end{cases} \quad \begin{cases} Nh = 1 \\ i = 1, 2, \dots, N \end{cases} \quad (13)$$

解出 $f_1(x_i)$ 及 $f_2(x_i)$ ($x_i = ih, i = 1, 2, \dots, N$)⁽¹³⁾ 它们分别是上文中的 $f_h(ih)$ 和 $r_h(ih)$ ⁽¹³⁾ 用计

算机求泛函 $E(F)$ 的近似值⁽¹³⁾ 记 $R(N) = E^*(f_h)$ ($h = \frac{1}{N}$), 由引理 4 可见

$$R(N) = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^{N-1} f_2^2(ih) + \frac{1}{12N} \sum_{i=1}^{N-1} f_1^4(ih) + \frac{1}{N} \left(\frac{1}{4}(f_2^2(0) + f_2^2(1)) + \frac{1}{24}(f_1^4(0) + f_1^4(1)) \right) \quad (13)$$

计算结果如下:

$$\begin{aligned} R(2) &= 4.652344, & R(4) &= 2.970955, & R(8) &= 2.328262, & R(16) &= 2.03294, \\ R(32) &= 1.890081, & R(64) &= 1.819708, & R(128) &= 1.784773, \\ R(256) &= 1.767367, & R(512) &= 1.758677, & R(1024) &= 1.754338. \end{aligned}$$

对于初值问题 (B), 它的精确解显然是 $F(x) = \frac{6}{1+x}$, 故 $E(F) = \int_0^1 \left(\frac{1}{2} F'^2(x) + \frac{1}{12} F^4(x) \right) dx = 1.75$ ⁽¹³⁾ 从计算结果看出, 当 $N = 1024$ (这时步长 $h = 1/1024$) 时, $R(1024) =$

1.754338, 它只准确到小数两位⁽¹³⁾ 现在用式 (10) 作外推, 我们得到

$$2R(1024) - R(512) = 1.749999.$$

它精确到小数 5 位⁽¹³⁾ 由此显示了外推法是一种“高效低耗”的计算方法!

将计算结果中的各值逐个进行外推, 得

$$\begin{aligned} 2R(4) - R(2) &= 1.289566, & 2R(8) - R(4) &= 1.685569, & 2R(16) - R(8) &= 1.737616, \\ 2R(32) - R(16) &= 1.747222, & 2R(64) - R(32) &= 1.749335, \\ 2R(128) - R(64) &= 1.749838, & 2R(256) - R(128) &= 1.749961, \\ 2R(512) - R(256) &= 1.749987, & 2R(1024) - R(512) &= 1.749999 \end{aligned} \quad (13)$$

正如式 (8) 所示, 我们将计算结果作了极其简单的“外推处理”后, 得到了精确得多的泛函近似值¹⁹

参 考 文 献

- 1 刘诗俊¹⁹微分方程数值解的泛函估计¹⁹华东交通大学学报, 1995, 12(1): 68~75
- 2 刘诗俊¹⁹阶拟线性常微分方程的外推法及其在非线性振动力学中的某些应用¹⁹华东交通大学学报, 1985, 2(1): 8~20

The Extrapolated Method for Values of Functionals

Liu Shijun

(Department of Basic Courses)

Abstract For the functional $E(f) = \int_0^1 (\frac{1}{2} f'^2 + s(f)) dx$ which belongs to the nonlinear problem (A), its asymptotic expansion as $E(f_h) = E(F) + hW_0(T) + O(h^2)$ was discovered. Then a extrapolated formula as $2E(f_{\frac{h}{2}}) - E(f_h) = E(F) + O(h^2)$ was obtained. Thus, the high efficient algorithm to calculate the value of $E(F)$ was get.

Key words Extrapolated method; Value of functional

(上接第73页)

Synthesis of Novel Multifunctional Additives
for Lubricating Oil

Ren Tianhui Sha Guoping

Liu Weimin Xue Qunji

(Institute of Applied Chemistry)

(Lanzhou Institute of Chemical Physics, Chinese Academy of Sciences)

Abstract Some novel benzotriazole derivatives containing dithiocarbamate group $-S-(1H-benzotriazol-1-yl)methyl-N,N$ -dialkyl dithiocarbamates were synthesized. The molecular structures of these compounds were identified by the elemental analysis and some spectra analysis (such as FT-IR, 1H NMR, ^{13}C NMR, MS). These compounds are potential multifunctional lubricating oil additives.

Key words Organic synthesis; Benzotriazole derivatives; $S-(1H-benzotriazol-1-yl)methyl-N,N$ -dialkyl dithiocarbamates; Multifunctional lubricating oil additives